CBPF - CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

LAFEX - COORDENAÇÃO DE FÍSICA EXPERIMENTAL DE ALTAS ENERGIAS

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Supercondutividade numa abordagem de teoria quântica de campos em topologias toroidais: aplicações em sistemas confinados

Erick Ramon Castro Mora

Orientador

Adolfo Malbouisson

Rio de Janeiro - RJ

Julho de 2015

Aún aprendo.

Francisco de Goya y Lucientes

Agradecimentos

A mis Padres (Ramón y Luisa), hermanas (Yely y Yurima), sobrinos (Stefany, Naim, Anabella y Michell) por el apoyo continuo. A los amigos de siempre (especialmente a Grecia, Iskya, Richard y Vanessa; todos Venezolanos en Rio de Janeiro) y a los nuevos amigos (Breno, Erich, Ivana, Julian, Gabriel y Cesar). A Clarice, por un año fantástico repleto de buenas vivencias y nuevas experiencias (y por su apoyo a la hora de corregir el portuñol vernáculo en este trabajo). A los profesores Adolfo Malbouisson y Cesar Linhares, por la orientación y guia, por su paciencia y por sus enseñanzas. A Erich (nuevamente) compañero de Pesquisa, por las conversaciones e intercambio de ideas patentes en este trabajo y a Emerson cuyas notas son la base del Apendice B de esta disertación. Por último, al CBPF y a Capes por la oportunidad de cursar estudios superiores en Rio de Janeiro.

Resumo

Neste trabalho usamos sistematicamente métodos de teoria quântica de campos (em particular o formalismo em topologias toroidais) no estudo do comportamento crítico em sistemas confinados de uma geometria especifica (grãos, fios e filmes). A transição de fase em questão é de segunda ordem, sendo possível aplicar o método para qualquer sistema físico que apresenta este tipo de transição. O formalismo é um método consistente de introdução de efeitos de tamanho finito no estudo da criticalidade de um sistema com esta geometria. Oferecemos uma aplicação direta no estudo de filmes finos supercondutores em presença de um campo magnético externo fraco; obtendo o resultado de diminuição da temperatura crítica ao diminuir a espessura do filme supercondutor, concordando qualitativamente com resultados experimentais.

Palavras-chave: Supercondutividade, Ginzburg-Landau, teoria quântica de campos, topologias toroidais.

Áreas de conhecimento: Teoria quântica de campos, matéria condensada.

Conteúdo

Agradecimentos ii

Resumo iii

1 Introdução **1**

2 Supercondutividade e a teoria de Ginzburg-Landau **4**

2.1 O fenômeno da supercondutividade 4

2.2 O comprimento de coerência ξ e a classificação dos supercondutores . . 6

2.3 A teoria de Ginzburg-Landau 9

2.3.1 O modelo de Ising 10

2.3.2 Ferromagnetismo no contexto da teoria de Ginzburg-Landau . . 14

3 Métodos de teoria de campos aplicados na teoria de Ginzburg-Landau; efeitos de tamanhos finitos **18**

3.1 Correções da aproximação de Landau 19

3.2 O comprimento de coerência ξ no contexto da teoria de Ginzburg Landau 30

3.3 Correções da temperatura crítica por compactificações espaciais no modelo de Ginzburg-Landau 34

3.3.1 Ginzburg-Landau em topologias toroidais 36

4 Teoria quântica de campos em topologias toroidais **54**

4.1 Introdução da temperatura no formalismo de Matsubara 54

4.1.1 $d = 1$, Introdução da temperatura sem dimensões espaciais compactificadas 55

4.2 Aplicações na supercondutividade 61

4.2.1 Introdução da temperatura à Matsubara para o caso supercondutor a 1 loop e uma dimensão compactificada 61

5 Conclusões **78**

A Equação (3.83) implica (3.87) **83**

B O problema de Sturm-Liouville do operador (4.24) **91**

C Extensão analítica da função Zeta de Epstein-Hurwitz **94**

Capítulo 1

Introdução

A classificação de uma teoria física como "fundamental" é uma noção ligada à própria abrangência da teoria como descrição factível da "realidade". Em termos práticos, ela depende das escalas físicas, da quantidade de experiências envolvidas nessas escalas, do poder de predição e do grau de correspondência entre experimento e teoria. O modelo padrão da física de partículas, baseado no formalismo da teoria quântica de campos, é um bom candidato como modelo fundamental no limite de altas energias e pequenos comprimentos, dando conta de uma ampla variedade de fenômenos presentes nestas escalas. Em particular, tentativas especulativas em escalas ainda não exploradas, devem estar em intrínseca relação complementar com a descrição aceita como "fundamental", isto num sentido referencial. Porém, a relação com outras teorias em escalas físicas bem conhecidas dão ainda mais firmeza à base fundacional da própria teoria.

No contexto de teoria de campos, de grande importância é sua relação com o estudo da matéria em baixas energias, ramo da física conhecido como matéria condensada. Este geralmente estuda sistemas em ordens de comprimento maiores e energias menores que as escalas estudadas em física de partículas, e pode considerar-se inserida dentro dos domínios da mecânica estatística quântica. Em princípio, a necessária relação estaria bem estabelecida: teoria quântica de campos é, grosso modo, mecânica quântica de sistemas físicos com infinitos graus de liberdade.

Na realidade, os métodos de teoria de campos são amplamente utilizados em matéria condensada, sobretudo no que concerne aos estudos de sistemas físicos perto de uma transição de fase (fenômenos críticos). Alguns autores [1] veem nesta conexão um profundo significado (referente a questões não esclarecidas em relação ao limite termodinâmico, do próprio significado da teoria quântica de campos e à fenomenologia que esta teoria descreve) ainda não entendido, nem bem fundamentado em sua totalidade.

O presente trabalho não pretende inquirir sobre estas matérias fundamentais, e sim usa sistematicamente os métodos de teoria de campos no estudo das transições de fase: em particular, as chamadas de segunda ordem (dentro das quais está a transição ferromagnética e, como uma excelente aproximação, a supercondutora [2]). Teremos em mente, principalmente, a transição supercondutora e a possível aplicação do formalismo da teoria quântica de campos em topologias toroidais [3] neste fenômeno.

Os efeitos de extensão do sistema físico (ou equivalentemente efeitos do tamanho finito) sobre a criticalidade são comprovados experimentalmente em filmes supercondutores (a temperatura crítica do supercondutor diminui ao decrescer a espessura do filme), tal fenômeno é geralmente entendido assim: o comprimento que caracteriza a extensão finita do sistema é menor que o comprimento de coerência $\xi(T)$, afetando a configuração microscópica do material o que incide diretamente no comportamento crítico do sistema. A teoria fenomenológica de Ginzburg-Landau relaciona este comprimento $\xi(T)$ com o parâmetro $a(T)$ que governa a transição de fase de segunda ordem. O formalismo de teoria quântica de campos em topologias toroidais é um método consistente para inserir estes efeitos no parâmetro $a(T)$ como correções da teoria até primeiro ordem de perturbação, se verifica que o tratamento das correções deriva no conhecido procedimento de regularização que envolve funções zeta de Epstein-Hurwitz.

Outra possibilidade é a introdução da temperatura via este formalismo, concordando com a conhecida prescrição de Matsubara, a qual é, em essência, um método de inserção da temperatura diferente do usual conhecido como aproximação de Landau. O enfoque principal do trabalho, além de descrever o formalismo, consiste em aplicar o modelo no estudo de filmes supercondutores em presencia de um campo magnético externo constante. Os efeitos de tamanho finito são introduzidos efetivamente em função da espessura do filme, com a temperatura introduzida via a prescrição de Matsubara.

A estrutura do trabalho é a seguinte: o capítulo 2 começa com uma breve revisão da literatura referente à supercondutividade e da teoria geral de Landau de transições de segunda ordem, mencionando a conexão intrínseca. Em vista da universalidade das transições de segunda ordem, estudamos a transição ferromagnética desde o ponto de vista microscópico, derivando a aproximação de Landau. O capítulo 3 introduz correções da teoria de Ginzburg-Landau mediante cálculo perturbativo através do gerador funcional. Descrevemos como estas correções mudam as caraterísticas da teoria, e, dentro do mesmo contexto de Ginzburg-Landau, estudamos efeitos de tamanho finito no sistema. No capítulo 4, aplicamos os métodos de teoria quântica de campos em topologias toroidais no caso supercondutor. O capítulo 5 contém as conclusões do trabalho.

Capítulo 2

Supercondutividade e a teoria de Ginzburg-Landau

2.1 O fenômeno da supercondutividade

No início do século XX, a descoberta de novos e intrigantes fenômenos físicos abriria o caminho na fundamentação de revolucionárias teorias que mudariam o edificio da ciência física em seus fundamentos. Tais descobertas foram a princípio consideradas como anomalias que, mais cedo ou mais tarde, seriam absorvidas pelo corpo teórico hoje considerado como "clássico". A supercondutividade descoberta por Kammerlingh-Onnes em 1911 é um notório exemplo: certos materiais com temperaturas menores que uma temperatura critica T_c (que depende do material e próxima ao zero absoluto) perdem toda sua resistência elétrica, o que no começo foi considerado como sinônimo de condutividade infinita (ou muito grande). Essa afirmação implica que o campo eléctrico $\vec{\mathbf{E}} = 0$ dentro do material, e (pela lei de Faraday) que

$$\frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} = 0. \tag{2.1}$$

Isto significa que o campo $\vec{\mathbf{B}}$ somente depende da posição dentro do material; assim, se um campo magnético externo $\vec{\mathbf{H}}$ é aplicado, o estado final do material dependerá de como nos aproximamos a ele desde o estado de condutividade normal (o qual poderia alcançar-se aplicando primeiro o campo externo e depois descendo a temperatura ou vice-versa).

Particularmente, este não era o caso, já que o estado final, nas pesquisas experimentais, sempre levava a uma ausência do campo $\vec{\mathbf{B}}$ dentro do material. Esta propriedade de repulsão do campo $\vec{\mathbf{B}}$ levou a considerar os supercondutores como diamagnetos perfeitos e foi chamado de efeito Meissner devido ao seu descobridor. Para campos magnéticos $||\vec{\mathbf{H}}|| = H$ externos maiores que um certo valor critico H_c, o efeito Meissner é destruído totalmente e, portanto, o material perde sua supercondutividade. Porém, o fato de que o campo $\vec{\mathbf{B}}$ é zero dentro do supercondutor em presença de campo externo leva a uma descontinuidade do campo $\vec{\mathbf{B}}$ na superfície do material. Mas, da equação $\nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = 0$, pode-se ver que só a componente tangencial do campo à superfície pode ser descontínua. Isso é um verdadeiro problema no caso de filmes finos com campo externo paralelo à normal da superfície do filme, já que a componente normal não pode ser descontínua na passagem do material ao vácuo. Na realidade, o que acontece é que, em presença do campo externo $\vec{\mathbf{H}}$, o campo $\vec{\mathbf{B}}$ dentro do filme não é zero na vizinhança interna, e sim, decresce rapidamente, “penetrando”o material, e sendo caracterizado por um parâmetro chamado profundidade de penetração $\lambda(T)$, o qual depende do material do filme. Assumindo uma lei de decaimento exponencial para o campo, então, as equações de London caracterizam este comportamento. Estas equações foram uma primeira tentativa no contexto da eletrodinâmica clássica para descrever a supercondutividade e especifica qualitativamente algumas de suas características [4].

2.2 O comprimento de coerência ξ e a classificação dos supercondutores

É claro que a supercondutividade é um estado termodinâmico; assim, tomando em conta o campo externo $\vec{\mathbf{H}}$ e a temperatura T como variáveis de estado é possível, em principio, caracterizar os estados de condução normal e de supercondutividade no diagrama de fase. Como a mudança nas propriedades físicas do material ao passar de um estado a outro são verdadeiramente radicais, aqui estamos em presença de uma *transição de fase.*

Em principio, se os detalhes microscópicos do sistema físico em questão forem conhecidos, podendo ser representados com algum modelo simples que os caracterize bem, é possível obter o comportamento macroscópico do sistema no limite de número de constituintes tendendo a infinito, no pior dos casos, qualitativamente, visto que as interações dos constituintes podem ser muito complexas para ser levadas em consideração completamente no modelo microscópico. Matematicamente, esta é uma questão delicada, mas, se o modelo microscópico satisfizer condições matemáticas bem precisas [5], então o procedimento é padrão: O cálculo da função de partição fornece o vínculo do ponto de vista macroscópico do microscópico. Uma vez conhecida esta função, ela permite obter a energia livre de Helmholtz do sistema e, portanto, as quantidades termodinâmicas relevantes. A função de partição também fornece quantidades estatísticas importantes, como funções de correlação entre duas variáveis (por exemplo, uma quantidade física em duas posições diferentes).

Essas correlações refletem as flutuações estatísticas e quânticas em relação aos valores físicos médios. Em particular, em fases não críticas (longe da transição de fase), a flutuação têm um carácter *local* para o caso de correlações de uma mesma quantidade física em pontos diferentes, o que significa que um ponto do material terá um raio efetivo de correlação (príncipio da decomposição em clusters). Assim, se define o comprimento de coerência ξ como aquele comprimento até onde as flutuações são relevantes (é uma definição semelhante àquela do tempo de descarregamento τ de um condensador, por exemplo), e descreve a extensão espacial das flutuações. Para o caso em que o sistema está na vizinhança da curva crítica (aquela que define a "fronteira"entre as duas fases), ξ tende a infinito, o que é um traço comum e universal das transições de fase ditas de segunda ordem [6].

Os parâmetros ou comprimentos característicos λ (profundidade de penetração) e ξ em supercondutores divergem quando $T \to T_c$ da mesma maneira, sendo então proporcionais entre si [4]. Isto não é de nenhum modo trivial: dois parâmetros com diferentes interpretações físicas são proporcionais perto da temperatura critica, onde o carácter universal da transição se manifesta. Assim, não é absurdo pensar em algum tipo de classificação do supercondutor por meio do valor da constante de proporcionalidade κ. A classificação existe e resulta em dois grupos de supercondutores com propriedades bem diferenciadas:

1) Supercondutor tipo I:

$$0 < \kappa < \frac{1}{2}. \tag{2.2}$$

2) Supercondutor tipo II:

$$\kappa > \frac{1}{2}. \tag{2.3}$$

A classificação em questão se encontra associada a uma quantidade termodinâmica bem definida, chamada energia superficial na fronteira das fases normal e supercondutora, σ_{sn}. Para supercondutores tipo I (tipo II) σ_{sn} é positiva (negativa) e seu sinal descreve diferenças na transição de fase em cada supercondutor: só uma fronteira nítida entre as duas fases pode ser definida para $\sigma_{sn} > 0$ (supercondutores tipo I) [7]. No caso de supercondutores tipo II perto do campo externo crítico H_c, temos regiões em que não existe um limite bem definido entre a fase normal e a supercondutora. Tal estado é chamado de misto e sua principal característica é a formação de vórtices de supercorrentes que geram fluxos magnéticos quantizados, estes vórtices são conhecidos como vórtices de Abrikosov.

Será que este tipo de classificação fornece algum vínculo com o tipo de configuração microscópica de nosso sistema?. Aqui parece ser o caso: para supercondutores tipo I, o modelo de pares de Cooper ou teoria BCS é o mais exitoso modelo microscópico da supercondutividade. Não entraremos nos detalhes do modelo, basta dizer que é um modelo perturbativo no marco da mecânica quântica não relativista de muitos corpos em estruturas periódicas (física do estado sólido) com uma interação fônon-eléctron mediadora de uma atração entre dois eletróns chamados pares de Cooper. O estado supercondutor é atingido na formação de um condensado de tais pares e pode ser interpretado como o estado fundamental do sistema (daí o fato de que supercondutores tipo I sejam supercondutores em baixas temperaturas). Para supercondutores tipo II, existe uma subclasse de materiais supercondutores com uma temperatura crítica alta (em certos casos, centenas de graus Kelvin) para os quais o modelo BCS não é adequado. Até o dia de hoje não existe um modelo microscópico satisfatório que dê conta da supercondutividade de tipo II. Porém, se estiveremos só interessados no ponto de vista macroscópico e no comportamento do sistema perto da fase crítica, o caráter universal da transição deveria ser independente do suposto modelo microscópico. Tal estudo é possível por meio da teoria de Ginzburg-Landau, a qual foi usada por Abrikosov para predizer as características do estado misto antes citado.

2.3 A teoria de Ginzburg-Landau

A palavra *universalidade* aplicada aos fenômenos de transição de fase implica um comportamento *comum* de uma multiplicidade de sistemas físicos essencialmente diferentes. A teoria de Landau das transições de fase foi o primeiro intento de construção de uma teoria geral para descrever este fenômeno universal. Nosso interesse principal consiste no estudo das transições de segunda ordem ou contínuas, as quais envolvem sistemas com uma fase desordenada (simétrica) em temperaturas altas $T > T_c$; e uma fase ordenada (simetria quebrada) para $T < T_c$, com a única condição de que as primeiras derivadas parciais do potencial termodinâmico na representação apropriada (energia livre de Helmholtz ou energia livre de Gibbs por exemplo), sejam contínuas nas regiões de criticalidade (T_c se relaciona com as outras n variáveis termodinâmicas $\{X_n\}$ do sistema e esta relação determina a região de criticalidade). Geralmente, um parâmetro físico do sistema é escolhido para caracterizar as duas fases, o chamado parâmetro de ordem φ_c, e basicamente apresenta a seguinte propriedade: Na fase de simetria, $\varphi_c = 0$, enquanto que na fase não simétrica, $\varphi_c \neq 0$. Landau postulou a existência de uma função $\mathcal{L}$ analítica num parâmetro geral φ e com coeficientes em função de uma série de constantes $[K]$, que fornece o comportamento geral de qualquer transição de fase:

$$\mathcal{L} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n([K], T)\varphi^n. \tag{2.4}$$

sendo o valor $\varphi = \varphi_c$ aquele que minimiza à função $\mathcal{L}$.

Se o parâmetro de ordem depende da posição, $\mathcal{L}$ pode depender também de $\nabla\varphi$. Assim, $\varphi(\vec{\mathbf{r}})$ é um campo e a equação (com a inserção de $\nabla\varphi$) (2.4) deve ser entendida em sentido funcional. Na referência [6], se relaciona a função $\mathcal{L}$ com a termodinâmica do sistema. Um caso dentro da teoria geral de Landau é a teoria de Ginzburg-Landau, especificamente usada para transições de segunda ordem, em que a função $\mathcal{L}$ tem conexão direta com a função densidade da energia livre:

$$\mathcal{F}(\varphi(\vec{\mathbf{r}}), \nabla\varphi(\vec{\mathbf{r}})) = |\nabla\varphi(\vec{\mathbf{r}})|^2 + a(T)|\varphi(\vec{\mathbf{r}})|^2 + \frac{b}{2}|\varphi(\vec{\mathbf{r}})|^4. \tag{2.5}$$

A parte potencial desta equação garante uma transição de fase de segunda ordem (ver secção 2.3.2) e é usada em diversos fenômenos físicos que apresentam comportamento crítico: Ferromagnetismo e supercondutividade. No caso da supercondutividade, pode-se demonstrar [8] uma conexão direta com a teoria microscópica BCS (Ginzburg-Landau também descreve os supercondutores tipo II perto da fase crítica, ainda não tendo neste caso uma teoria microscópica). No caso ferromagnético [9], uma conexão com o modelo de Ising , através da aproximação de campo médio, é possível. Tal estudo é interessante, já que, além de ser simples, fornece informações sobre:

1. A forma funcional da energia livre.

2. Uma *primeira* aproximação do parâmetro $a(T)$

O interesse consiste em que as duas questões também podem ser encaixadas dentro da teoria de Ginzburg-Landau da supercondutividade.

2.3.1 O modelo de Ising

Ferromagnetismo inclui uma diversa gama de materiais (metais) que podem ser magnetizados ante a presença de campos magnéticos externos e continuar magnetizado depois de se retirar o campo externo. A grosso modo, podemos dizer que microscopicamente é um fenômeno coletivo de dipolos magnéticos (spins), os quais apresentam uma interação spin-spin conhecida como interação de intercâmbio. O modelo de Ising é a aproximação mais simples deste fenômeno, e basicamente para um sistema de $N = a^D$ dipolos magnéticos dispostos numa rede cúbica D dimensional (cada spin só tem dois possíveis estados), tem o seguinte hamiltoniano para uma dada configuração do sistema:

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\in\langle i,j\rangle} S_iS_j - \mu B\sum_{i=1}^{N} S_i, \tag{2.6}$$

com $S_i = \pm 1$ o spin do i-ésimo dipolo, $\langle i,j\rangle$ os dipolos que interagem com o i-ésimo dipolo, J a constante de acoplamento da interação, μ o momento dipolar intrínseco e B o campo magnético externo.

Por convenção, um dipolo i pode interagir só com seus primeiros vizinhos contidos nas D retas paralelas às arestas do D-cubo e que se intersectam no dipolo i. Assim, o número de elementos do conjunto $\langle i,j\rangle$ é $2D$; o fator $1/2$ em (2.6) evita dupla contagem nas interações. É óbvio então que o carácter do nosso modelo é claramente periódico e, portanto, uma última condição deve exigir-se sobre os dipolos contidos nas faces do D-cubo: ao desenhar as D retas paralelas às arestas, e que se intersectam no dipolo i, se qualquer das retas contiverem só um dipolo vizinho, então i deve interagir também com o dipolo mais afastado contido na mesma reta. Esta condição é claramente não física e é usada para desprezar os efeitos de borda. Mas, no limite $N \to \infty$, os efeitos de borda são certamente desprezíveis. Assim, com nosso modelo microscópico bem formulado, seguimos o procedimento padrão [10], a função de partição é, então,

$$Z = \sum_{S_1}\sum_{S_2}\cdots\sum_{S_N} e^{-\frac{H}{kT}}. \tag{2.7}$$

No caso unidimensional (isto é, todos os dipolos estão numa reta e intaragem só com dois dipolos vizinhos) um cálculo fechado de Z é possível, como também para o caso bidimensional (ver [9]). Mas, no caso geral D-dimensional, precisamos de aproximações para obter resultados físicos concretos. Uma das mais simples é a aproximação de campo médio e, para nosso modelo particular, substitui os valores S_j dos dipolos j-ésimos (que interagem com o dipolo i-ésimo) por seu valor médio $\langle S_j\rangle$. Assim, de acordo com esta aproximação, temos que (2.6) se escerve:

$$H = \sum_{i=1}^{N} E_i, \tag{2.8}$$

com E_i sendo

$$E_i = -\frac{J}{2} S_i \sum_{j \in \langle i,j \rangle} \langle S_j \rangle - \mu B S_i. \tag{2.9}$$

Chamando $M = \langle S_j \rangle$ a magnetização por dipolo, devido à homogeneidade de nosso modelo, a média $\forall\ j$ deve ser a mesma. O número de elementos do conjunto $\langle i, j \rangle$ é $2D$; então,

$$E_i = -DJMS_i - \mu B S_i. \tag{2.10}$$

A nova função de partição é:

$$Z = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \cdots \sum_{S_N} \prod_{i=1}^{N} e^{-\frac{E_i}{kT}} = \sum_{S_1} e^{-\frac{E_1}{kT}} \sum_{S_2} e^{-\frac{E_2}{kT}} \cdots \sum_{S_N} e^{-\frac{E_N}{kT}}. \tag{2.11}$$

Sendo $S_i = \pm 1$ os dois valores possíveis para cada i, obtemos:

$$Z = \left(e^{\frac{DJM + \mu B}{kT}} + e^{-\frac{DJM + \mu B}{kT}} \right)^N. \tag{2.12}$$

Com a função de partição podemos calcular o valor $M = \langle S_j \rangle$ por definição:

$$M = \langle S_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{S_1} \cdots \sum_{S_j} \cdots \sum_{S_N} S_j \prod_{i=1}^{N} e^{-\frac{E_i}{kT}} = \frac{1}{Z} \sum_{S_1} e^{-\frac{E_1}{kT}} \cdots \sum_{S_j} S_j e^{-\frac{E_j}{kT}} \cdots \sum_{S_N} e^{-\frac{E_N}{kT}}. \tag{2.13}$$

Usando (2.12) e substituindo cada valor de spin, obtemos (só sobrevivem os termos em j):

$$M = \frac{e^{\frac{DJM + \mu B}{kT}} - e^{-\frac{DJM + \mu B}{kT}}}{e^{\frac{DJM + \mu B}{kT}} + e^{-\frac{DJM + \mu B}{kT}}} = \tanh\left(\frac{DJM + \mu B}{kT} \right), \tag{2.14}$$

o que é o mesmo que

$$\tanh^{-1} M = \frac{DJM + \mu B}{kT}. \tag{2.15}$$

Seguindo a análise feita em [9] vemos que, para $B = 0$, as soluções da equação se encontram na interseção das funções $f_1(M) = \tanh^{-1}(M)$ e $f_2(M) = \frac{DJM}{kT}$ para os seguintes valores de T: se $\frac{DJ}{kT} < 1$ ou $T > \frac{DJ}{k}$, a única solução possível é $M = 0$. Em contrapartida, se $\frac{DJ}{kT} > 1$ ou $T < \frac{DJ}{k}$, então temos três soluções, $M = \pm M_0(T)$ e $M = 0$, das quais tomamos só a solução positiva (a solução nula pertence ao outro regime). $M_0(T)$ tem a interpretação física de ser a magnetização espontânea do ferromagneto na ausência de campo magnético B. Não temos a forma funcional exata de $M_0(T)$, mas quando $T \to \left(\frac{DJ}{k}\right)^-$ temos que $\frac{DJ}{kT} \to 1^+$ e, portanto, $\tanh^{-1}(M) = (1+\epsilon)M$ com $\epsilon \to 0$. Assim, a única possibilidade é $M_0(T \to \left(\frac{DJ}{k}\right)^-) = 0$. Se, em nossa aproximação, tomarmos $T_c = \frac{DJ}{k}$ como a temperatura crítica, temos todas as características de uma transição de segunda ordem: Um parâmetro de ordem M que também varia continuamente na transição, sendo M a primeira derivada da energia livre de Helmholtz F com relação ao campo magnético B (salvo constantes multiplicativas). Lembremos que a magnetização total é, por definição, $\mathcal{M} = \mu \sum_{i=1}^{N} \langle S_i \rangle = N\mu M$ na aproximação de campo médio, e, portanto,

$$dF = -SdT - \mathcal{M}dB = -SdT - \mu NMdB \tag{2.16}$$

e então:

$$M = -\frac{1}{\mu N}\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_T. \tag{2.17}$$

Se agora aplicarmos um campo magnético B suficientemente fraco, de modo a não destruir a magnetização espontânea $M_0(T)$ em $T < T_c$, então, perto da fase critica (sendo $\frac{\mu B}{DJ} \ll 1$) teremos, devido à continuidade da transição, que $M \ll 1$ e podemos usar o seguinte desenvolvimento em série de potências da função $\tanh^{-1}$ até terceira ordem em M, para qualquer temperatura:

$$\tanh^{-1} M = M + \frac{1}{3}M^3 = \frac{DJM + \mu B}{kT}. \tag{2.18}$$

Isto nos permite encontrar B em função da magnetização:

$$B = \frac{k}{3\mu}M^3 + \frac{k}{\mu}\left(T - \frac{DJ}{k}\right)M. \tag{2.19}$$

O termo que acompanha M tem um comportamento linear, sendo negativo em $T < T_c$ (com $T_c = \frac{DJ}{k}$) e positivo no outro caso. A linearidade é uma consequência da aproximação de campo médio, mas sua positividade ou negatividade caracteriza o trânsito da fase simétrica à não simétrica, respectivamente. Conhecendo a seguinte relação da energia livre de Gibbs Γ:

$$d\Gamma = -SdT + \mu NBdM \tag{2.20}$$

(onde S é a entropia), vemos que o campo B tem relação direta com a energia livre Γ e, conhecendo S, então, em principio Γ está determinado:

$$B = \frac{1}{\mu N}\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial M}\right)_T. \tag{2.21}$$

A expressão anterior é valida na aproximação de campo médio. Vejamos agora como se relacionam estes resultados com a teoria de Ginzburg-Landau.

2.3.2 Ferromagnetismo no contexto da teoria de Ginzburg-Landau

A equação (2.5) expressa a forma funcional mais simples que deve ter a energia livre para representar uma transição de segunda ordem (se é a energia livre de Gibbs ou de Helmholtz é uma questão que dependerá do sistema físico concreto). De acordo com o exposto na seção anterior (modelo de Ising com a aproximação de campo médio), vimos que o parâmetro de ordem é $\varphi_c = M$, sendo o mesmo para todos os dipolos, o que implica independência da posição em φ. Em geral a teoria de Ginzburg-Landau se formula através de um formalismo hamiltoniano em função do parâmetro φ em (2.5). Em nosso exemplo ferromagnético, temos [9]:

$$H_{GL}(\varphi) = \frac{1}{2!}a_0\varphi^2 + \frac{1}{4!}b_0\varphi^4. \tag{2.22}$$

A "dinâmica" de tal sistema resulta da resolução da seguinte equação:

$$\frac{dH_{GL}}{d\varphi}(\varphi) = 0. \tag{2.23}$$

Se $a_0 > 0$, a única solução possível é $\varphi = 0$; enquanto que se $a_0 < 0$ temos três possíveis soluções, $\varphi = 0, \pm\varphi_0$, onde φ_0 depende das constantes a_0 e b_0. Em total correspondência com a seção 2.3.1, vemos que estas soluções parecem ao menos reproduzir qualitativamente aqueles resultados. Porém, vamos ainda mais longe. Se quicermos acoplar nosso hamiltoniano com um campo magnético externo B, simplesmente modificamos H_{GL}:

$$H_1(\varphi, B) = \frac{1}{2!}a_0\varphi^2 + \frac{1}{4!}b_0\varphi^4 - \mu N\varphi B, \tag{2.24}$$

onde a constante μN é colocada por conveniência.

Como antes, aqui suporemos que o campo B é pequeno. Dados os possíveis valores de φ (o espaço de configurações) poderíamos tentar uma formulação tipo integral de trajetória, com a respectiva rotação de Wick para obter a função de partição deste sistema:

$$Z = \int d\varphi \exp\left(\frac{-H_{GL}(\varphi) + \mu N\varphi B}{kT}\right). \tag{2.25}$$

A introdução do termo kT na equação anterior é uma questão polêmica (para não dizer errada), como veremos no próximo capítulo, mas dentro da aproximação que efetuaremos não apresenta nenhuma consequência. Tenhamos em conta que, com a introdução do campo B, (2.23) é modificada:

$$\frac{dH_1}{d\varphi}(\varphi, B) = 0. \tag{2.26}$$

As soluções da equação anterior são os mínimos locais de H_1, obtendo diferentes soluções dependendo da positividade ou negatividade de a_0 e que diferem do primeiro caso. Tomando o mínimo principal φ_1 e considerando na integral (2.25) só os valores de φ ao redor de φ_1 (não necessariamente próximos) podemos *aproximar* a integral usando o método do descenso mais rápido em ordem 0 [11], assim:

$$Z \backsimeq \exp\left(\frac{-H_{GL}(\varphi_1) + \mu N \varphi_1 B}{kT}\right). \tag{2.27}$$

Esta aproximação é conhecida também como aproximação de Landau. A energia livre de Helmholtz é, então,

$$F = -kT \ln(Z) = H_{GL}(\varphi_1) - \mu N \varphi_1 B. \tag{2.28}$$

Em correspondência com (2.17) (lembre-se que se procura por una conexão entre Ginzburg-Landau e a aproximação de campo médio no modelo de Ising), temos:

$$M = -\frac{1}{\mu N}\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_T = \varphi_1, \tag{2.29}$$

resultado totalmente esperado, já que φ_1 é o parâmetro de ordem. Transformando agora para a representação da energia livre de Gibbs:

$$\Gamma(M) = F + \mu N \varphi_1 B = H_{GL}(\varphi_1) = H_{GL}(M) = \frac{1}{2!}a_0 M^2 + \frac{1}{4!}b_0 M^4 \tag{2.30}$$

e usando (2.21), obtemos:

$$B = \frac{1}{\mu N}\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial M}\right)_T = \frac{a_0}{\mu N}M + \frac{b_0}{3!\mu N}M^3. \tag{2.31}$$

Vemos que esta equação tem a mesma forma funcional em M que (2.19), a qual foi encontrada por meio de duas considerações: A aproximação de campo médio no modelo de Ising e o comportamento desta aproximação *perto da fase critica* com campo magnético fraco. Então, se em (2.31) consideramos $\frac{a_0}{\mu N} = \frac{k}{\mu}(T - T_c)$ e $\frac{b_0}{3!\mu N} = \frac{k}{3\mu}$, a teoria de Ginzburg-Landau (dentro da aproximação (2.27)) descreve o modelo de Ising perto da fase crítica e na aproximação de campo médio, a qual ignora as correlações entre os dipolos, e portanto, as flutuações estatísticas microscópicas do sistema.

Na teoria geral de Ginzburg-Landau das transições de fase de segunda ordem (2.5), normalmente a escolha do fator $a_0(T)$ que descreve a transição perto da fase critica toma-se como:

$$a_0(T) = a_0[T - T_c], \tag{2.32}$$

afirmação válida inclusive para supercondutores (a notação aqui é $a_0(T)$ função de T, e $a_0[T - T_c]$ constante a_0 multiplicada por $[T - T_c]$). Em particular, será possível uma melhor aproximação do parâmetro $a_0(T)$ que considere as flutuações estatísticas?

A aproximação de Landau em (2.27) de fato é a primeira que pode-se fazer e, neste sentido, admite um cálculo mais exato, como se pode inferir do método do descenso mais rápido, questão que abordaremos no próximo capítulo.

Capítulo 3

Métodos de teoria de campos aplicados na teoria de Ginzburg-Landau; efeitos de tamanhos finitos

Como vimos no capitulo anterior, a aproximação de campo médio é a primeira que pode realizar-se com a finalidade de reproduzir o fenômeno de transição de fase de segunda ordem, mostrando-se evidente que uma melhor aproximação é possível em função de método de descenso mais rápido. Este capítulo introduz tais correções via um tratamento perturbativo: na secção 3.1 fornecemos o cálculo explicito das correções ate segunda ordem da teoria, o que corresponde a um cálculo num loop do conhecido potencial efetivo. A secção 3.2 mostra a relação entre o comprimento de coerência ξ e o parâmetro $a(T)$ que governa a transição de fase, as correções da teoria poderiam mudar o caráter da função $a(T)$ e influir nos expoentes críticos da teoria. A secção 3.3 introduz o procedimento de compactificação de coordenadas espaciais, inserindo os efeitos de tamanho finito diretamente nas correções da teoria, logo analisamos diretamente os casos de uma, duas e três dimensões espaciais compactificadas com a temperatura introduzida via a aproximação linear de Ginzburg-Landau

3.1 Correções da aproximação de Landau

Nesta secção, consideraremos como um fato (sem prévia demonstração, se é que tal prova pode existir, a seção anterior foi só uma motivação) que a teoria de Ginzburg-Landau na forma (2.5) descreve uma transição de segunda ordem perto da fase crítica. Assim, esquecendo voluntariamente a interpretação física do parâmetro de ordem (a única conexão com alguma teoria microscópica), consideraremos as correções necessárias em nosso cálculo além da aproximação de Landau. Aqui permitiremos que o parâmetro de ordem possa depender da posição $\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})$, sendo um escalar real ou complexo (aqui suporemos real por simplicidade) e $\vec{\mathbf{r}} \in \mathbb{R}^D$. Com isto, supondo que a forma de (2.5) é sempre determinada por uma densidade hamiltoniana da mesma forma funcional (questão que comprovaremos; na aproximação de Landau são exatamente iguais), temos:

$$\mathcal{H}_{GL}(\nabla\varphi(\vec{\mathbf{r}}), \varphi(\vec{\mathbf{r}})) = \frac{1}{2}\nabla\varphi(\vec{\mathbf{r}}) \cdot \nabla\varphi(\vec{\mathbf{r}}) + \frac{1}{2!}a(T)\varphi^2(\vec{\mathbf{r}}) + \frac{1}{4!}b\varphi^4(\vec{\mathbf{r}}). \tag{3.1}$$

Esta é uma teoria clássica de campos euclidianizada. De fato, se considerarmos $\vec{\mathbf{r}} \in \mathbb{M}^4$ (espaço de Minkowski), $a(T) = m^2$, $b = \lambda$ e $\nabla \to \Box$, obtemos a teoria de campos real de Klein-Gordon com um termo de autointeração [12]. Nesta teoria de campos dinâmica, o gerador funcional das funções de Green fornece todas as correções que o termo de autointeração proporciona ao trata-lo como uma perturbação na teoria de campos livre de Klein-Gordon. O gerador funcional se obtém por meio de uma integral de trajetória sobre todas as "possíveis" configurações do campo de Klein-Gordon. É uma questão de consenso que, se na formulação dinâmica-quântica fazemos uma rotação de Wick, obtemos a formulação estatística-quântica do sistema, sendo neste caso o gerador funcional a função de partição (ao menos para sistemas com finitos graus de liberdade nenhuma exceção à regra foi encontrada). Para o caso de campos (infinitos graus de liberdade), não é possivel fazer esta afirmação, já que não existe algo como uma mecânica estatística de teoria de campos (se bem que existem maneiras diferentes de se introduzir temperatura em teorias de campos quânticas [13]).

A equação (3.1) é o hamiltoniano de uma teoria de campos euclidiana (as coordenadas do campo são só espaciais) e, como tal, admite uma generalização da equação (2.25) sem o termo kT, já que não se pode introduzir temperatura desta forma (ver o parágrafo anterior). Portanto,

$$\mathcal{Z}[J] = \mathcal{N} \int [d\varphi] \exp\left(\int \frac{d^D\vec{\mathbf{r}}}{h} \left(-\mathcal{H}_{GL}(\varphi(\vec{\mathbf{r}})) + \varphi(\vec{\mathbf{r}}) J(\vec{\mathbf{r}}) \right) \right) = \mathcal{N} \int [d\varphi] \exp\left(\int \frac{d^D\vec{\mathbf{r}}}{h} \left(-\mathcal{H}(\varphi(\vec{\mathbf{r}})) \right) \right) \tag{3.2}$$

sendo $\mathcal{N}$ uma "constante"arbitrária; $J(\vec{\mathbf{r}})$, um campo externo ou fonte acoplada ao parâmetro de ordem e que não necesariamente tem interpretação física (no caso ferromagnético, é o campo magnético externo, sendo por hipótese fraco).

A introdução de $J(\vec{\mathbf{r}})$ é um método usual em teoria de campos [13], [14] e [15]; e h é uma constante característica do sistema que deve ser pequena $h \to 0$ (em mecânica estatística usual corresponde à constante $\hbar$). Supondo que o método do descenso mais rápido possa ser usado nesta integral ao redor da solução "clássica" $\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})$ da equação

$$\frac{\delta H_{GL}(\varphi(\vec{\mathbf{r}}))}{\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}})} = J(\vec{\mathbf{r}}), \tag{3.3}$$

temos como primeira aproximação (termo de ordem zero):

$$\mathcal{Z}[J] \approx \exp\left(\int \frac{d^D\vec{\mathbf{r}}}{h} \left(-\mathcal{H}_{GL}(\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})) + \varphi_c(\vec{\mathbf{r}}) J(\vec{\mathbf{r}}) \right) \right) = \mathcal{Z}_0[J]; \tag{3.4}$$

tomando o logaritmo neperiano, definimos o gerador das funções de Green conexas [14] em ordem 0:

$$\mathcal{W}[J] = h \ln \mathcal{Z}[J] \approx \int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(-\mathcal{H}_{GL}(\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})) + \varphi_c(\vec{\mathbf{r}})J(\vec{\mathbf{r}})) = \mathcal{W}_0[J]. \tag{3.5}$$

Definindo a transformada de Legendre $\Gamma[\varphi] = \int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(\varphi(\vec{\mathbf{r}})J(\vec{\mathbf{r}})) - \mathcal{W}[J]$, temos em ordem 0:

$$\Gamma_0[\varphi_c] = \int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})J(\vec{\mathbf{r}})) - \mathcal{W}_0[J] = \int d^D\vec{\mathbf{r}}\,\mathcal{H}_{GL}(\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})), \tag{3.6}$$

em correspondência com (2.30), aqui o indice 0 significa a função tomada em ordem 0.

Neste sentido, a equação anterior seria a aproximação de Landau para nosso sistema. É claro que uma melhor aproximação da equação (3.2) pode ser obtida: se considerarmos ate primeira ordem a expansão do campo ao redor de seu valor clássico, $\varphi(\vec{\mathbf{r}}) = \varphi_c(\vec{\mathbf{r}}) + \sqrt{h}\chi(\vec{\mathbf{r}})$, então temos:

$$\begin{aligned}
-\int d^D\mathcal{H}(\varphi(\vec{\mathbf{r}})) &= \int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(-\mathcal{H}_{GL}(\varphi(\vec{\mathbf{r}})) + \varphi(\vec{\mathbf{r}})J(\vec{\mathbf{r}})) \\
&= \int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(-\mathcal{H}_{GL}(\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})) + \varphi_c(\vec{\mathbf{r}})J(\vec{\mathbf{r}})) \\
&+ \int d^D\vec{\mathbf{r}}_1 \frac{\delta}{\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_1)} \left[\int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(-\mathcal{H}_{GL}(\varphi(\vec{\mathbf{r}})) + \varphi(\vec{\mathbf{r}})J(\vec{\mathbf{r}}))\right]_{\varphi=\varphi_c} \sqrt{h}\chi(\vec{\mathbf{r}}_1) \\
&+ \frac{1}{2}\int d^D\vec{\mathbf{r}}_1 d^D\vec{\mathbf{r}}_2 \frac{\delta^2}{\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_1)\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_2)} \left[\int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(-\mathcal{H}_{GL}(\varphi(\vec{\mathbf{r}})) + \varphi(\vec{\mathbf{r}})J(\vec{\mathbf{r}}))\right]_{\varphi=\varphi_c} h\chi(\vec{\mathbf{r}}_1)\chi(\vec{\mathbf{r}}_2) \\
&+ O(h^{\frac{3}{2}})
\end{aligned} \tag{3.7}$$

.

A derivada funcional pode atuar no integrando, sendo válida a regra da cadeia e também $\frac{\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_i)}{\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_j)} = \delta(\vec{\mathbf{r}}_i - \vec{\mathbf{r}}_j)$. O segundo termo da equação anterior é zero, devido a (3.3), e levando em consideração que

$$\frac{\delta^2}{\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_1)\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_2)} \left[\int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(\varphi(\vec{\mathbf{r}})J(\vec{\mathbf{r}}))\right]_{\varphi=\varphi_c} = 0, \tag{3.8}$$

obtemos:

$$\mathcal{Z}[J] = \exp\left(\frac{1}{h}\mathcal{W}[J]\right) = \mathcal{N}\int[d\varphi]\exp\left(\int\frac{d^D\vec{\mathbf{r}}}{h}\left(-\mathcal{H}(\varphi(\vec{\mathbf{r}}))\right)\right)$$
$$\simeq \mathcal{Z}_0[J]\int d[\chi]\exp\left(-\frac{1}{2}\int d^D\vec{\mathbf{r}}_a d^D\vec{\mathbf{r}}_2\frac{\delta^2}{\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_1)\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_2)}\left[\int d^D\vec{\mathbf{r}}\left(\mathcal{H}_{GL}(\varphi(\vec{\mathbf{r}}))\right)\right]_{\varphi=\varphi_c}\chi(\vec{\mathbf{r}}_1)\chi(\vec{\mathbf{r}}_2)\right), \tag{3.9}$$

já que, em princípio, $[d\varphi] = [d\chi]$.

Introduzindo (3.1) na ultima equação, temos que resolver então:

$$\left[\frac{\delta^2\int d^D\vec{\mathbf{r}}\mathcal{H}_{GL}(\varphi(\vec{\mathbf{r}}))}{\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_1)\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_2)}\right]_{\varphi=\varphi_c} \equiv S^{(2)}(\vec{\mathbf{r}}_1,\vec{\mathbf{r}}_2,\varphi_c). \tag{3.10}$$

Para isto, reescrevamos o argumento dentro da derivada funcional (fazendo uma integração por partes no termo com ∇ e, como sempre, desprezando o termo de borda):

$$\int d^D\vec{\mathbf{r}}\mathcal{H}_{GL}(\varphi(\vec{\mathbf{r}})) = \frac{1}{2}\int d^D\vec{\mathbf{r}}_a d^D\vec{\mathbf{r}}\varphi(\vec{\mathbf{r}})(-\nabla^2_{\vec{\mathbf{r}}_a} + a(T))[\delta(\vec{\mathbf{r}}_a - \vec{\mathbf{r}})]\varphi(\vec{\mathbf{r}}_a)$$
$$+\frac{b}{4!}\int d^D\vec{\mathbf{r}}d^D\vec{\mathbf{r}}_a d^D\vec{\mathbf{r}}_b d^D\vec{\mathbf{r}}_c\delta(\vec{\mathbf{r}}-\vec{\mathbf{r}}_a)\delta(\vec{\mathbf{r}}_a-\vec{\mathbf{r}}_b)\delta(\vec{\mathbf{r}}_b-\vec{\mathbf{r}}_c)\varphi(\vec{\mathbf{r}})\varphi(\vec{\mathbf{r}}_a)\varphi(\vec{\mathbf{r}}_b)\varphi(\vec{\mathbf{r}}_c). \tag{3.11}$$

Depois de um calculo extenso, obtemos:

$$\left[\frac{\delta^2\int d^D\vec{\mathbf{r}}\mathcal{H}_{GL}(\varphi(\vec{\mathbf{r}}))}{\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_1)\delta\varphi(\vec{\mathbf{r}}_2)}\right]_{\varphi=\varphi_c} = [-\nabla^2 + a(T)]\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2) + \frac{b}{2}\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_1)\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_2)\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2). \tag{3.12}$$

Assim:

$$\mathcal{Z}[J] \simeq \mathcal{Z}_0[J]\int d[\chi]\exp\left(-\frac{1}{2}\int d^D\vec{\mathbf{r}}_a d^D\vec{\mathbf{r}}_2 S^{(2)}(\vec{\mathbf{r}}_1,\vec{\mathbf{r}}_2,\varphi_c)\chi(\vec{\mathbf{r}}_1)\chi(\vec{\mathbf{r}}_2)\right). \tag{3.13}$$

A última integral é uma generalização em sentido funcional de um tipo de integral gaussiana:

$$Z(A) = \int d^n\vec{\mathbf{x}} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} x_i A_{ij} x_j\right) = (2\pi)^{\frac{n}{2}}(\det A)^{-\frac{1}{2}}, \tag{3.14}$$

sendo A_{ij} os elementos da matriz A. Supondo que tal recurso é válido na integral funcional, obtemos uma expressão em função do determinante funcional:

$$\mathcal{Z}[J] \simeq \mathcal{Z}_0[J]\left[\frac{\det S^{(2)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2, \varphi_c)}{\det S^{(2)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2, 0)}\right]^{-\frac{1}{2}}. \tag{3.15}$$

Já que $\mathcal{Z}$ é única, a menos de uma constante multiplicativa, introduzimos o termo $(\det S^{(2)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2, 0))^{\frac{1}{2}}$ na equação acima, onde este termo corresponde ao caso da teoria livre (sem termo de auto-interação). Isto é feito com o objetivo de se encontrar uma expressão perturbativa. Considerando o logaritmo da expressão anterior, temos:

$$\mathcal{W}[J] = \ln \mathcal{Z}_0[J] - \frac{1}{2}\left(\ln\frac{\det S^{(2)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2, \varphi_c)}{\det S^{(2)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2, 0)}\right) \tag{3.16}$$

$$\mathcal{W}[J] = \int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(-\mathcal{H}(\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}))) - \frac{1}{2}\left[\ln\det S^{(2)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2, \varphi_c) - \ln\det S^{(2)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2, 0)\right]. \tag{3.17}$$

Supondo que o determinante funcional generaliza todas as propriedades do determinante matricial, temos que $\ln\det = \mathrm{Tr}\ln$ com Tr sendo o traço da "matriz" em questão; assim:

$$\mathcal{W}[J] = \int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(-\mathcal{H}(\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}))) - \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\left[\ln\left(\frac{[-\nabla^2 + a(T)]\delta(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2) + \frac{b}{2}\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_1)\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_2)\delta(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2)}{[-\nabla^2 + a(T)]\delta(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2)}\right)\right]. \tag{3.18}$$

Aqui, a "divisão" de matrizes deve ser compreendida como a multiplicação por sua inversa. De forma esquemática temos:

$$\frac{[-\nabla^2+a(T)]\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)}{[-\nabla^2+a(T)]\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)}=\int d^D\vec{\mathbf{r}}_1[-\nabla^2+a(T)]\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)\left[[-\nabla^2+a(T)]\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)\right]^{-1}=\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2) \tag{3.19}$$

$$\frac{b}{2}\frac{\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_1)\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_2)\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)}{[-\nabla^2+a(T)]\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)}=\frac{b}{2}\varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_1)[-\nabla^2+a(T)]^{-1}\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2); \tag{3.20}$$

portanto:

$$\mathcal{W}[J]=\int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(-\mathcal{H}(\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})))-\frac{1}{2}\operatorname{Tr}\left[\ln\left(\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)+\frac{b}{2}\varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_1)[-\nabla^2+a(T)]^{-1}\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)\right)\right]. \tag{3.21}$$

Tomando em conta $\Gamma[\varphi_c]=\int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})J(\vec{\mathbf{r}}))-\mathcal{W}[J]$, temos:

$$\Gamma[\varphi_c]=\int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(\mathcal{H}_{GL}(\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})))+\frac{1}{2}\operatorname{Tr}\left[\ln\left(\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)+\frac{b}{2}\varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_1)[-\nabla^2+a(T)]^{-1}\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)\right)\right]. \tag{3.22}$$

Já que $\int d^D\vec{\mathbf{r}}\,(\mathcal{H}_{GL}(\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})))$ é conhecida como a ação da teoria clássica, quando calculamos $\Gamma[\varphi_c]$ vemos que corresponde à ação e suas correções a um loop (na linguagem de diagramas de Feynman [12]). O nome de $\Gamma[\varphi_c]$ é ação efetiva, e definimos as correções a 1 loop da ação como

$$\Gamma_1[\varphi_c]=\frac{1}{2}\operatorname{Tr}\left[\ln\left(\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)+\frac{b}{2}\varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_1)[-\nabla^2+a(T)]^{-1}\delta(\vec{\mathbf{r}}_1-\vec{\mathbf{r}}_2)\right)\right]. \tag{3.23}$$

A utilidade na escolha da normalização $\mathcal{Z}$ é que encontramos uma expressão funcional em logaritmo, cuja forma é a generalização da expressão $\ln(1+x)$, a qual tem uma expressão em série de potências, que suporemos que se generaliza no caso funcional:

$$\ln(1+x)=\sum_{s=1}^{\infty}\frac{(-1)^{s+1}}{s}x^s \qquad |x|\leq 1, \tag{3.24}$$

tomando em consideração a seguinte propriedade do traço:

$$\operatorname{Tr}(AA)=\sum_{i=1}^{n}(AA)_{ii}=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}A_{ij}A_{ji}$$

e considerando a delta de Dirac como um representação da "matriz identidade", temos:

$$\Gamma_1[\varphi_c] = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(-1)^{s+1} b^s}{2s} \int d^D \vec{\mathbf{r}}_1 \cdots d^D \vec{\mathbf{r}}_s \varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_1)[-\nabla^2 + a(T)]^{-1}_{(\vec{\mathbf{r}}_1,\vec{\mathbf{r}}_2)} \varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_2)[-\nabla^2 + a(T)]^{-1}_{(\vec{\mathbf{r}}_2,\vec{\mathbf{r}}_3)} \cdots \varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_s) \times [-\nabla^2 + a(T)]^{-1}_{(\vec{\mathbf{r}}_s,\vec{\mathbf{r}}_1)}, \tag{3.25}$$

onde se considera a constante de acoplamento b_0 suficientemente pequena para que a expansão anterior tenha algum significado. Por definição, temos

$$\Gamma_1[\varphi_c] = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \int d^D \vec{\mathbf{r}}_1 \cdots d^D \vec{\mathbf{r}}_s \Gamma_1^{(s)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2, \cdots, \vec{\mathbf{r}}_s) \varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_1) \varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_2) \cdots \varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_s); \tag{3.26}$$

comparando as duas últimas equações:

$$\Gamma_1^{(s)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2, \cdots, \vec{\mathbf{r}}_s) = (-1)^{s+1} \frac{(s-1)!}{2} b^s \prod_{i=1}^{s} \varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_i) \left(-\nabla^2 + a(T)\right)^{-1}_{(\vec{\mathbf{r}}_i,\vec{\mathbf{r}}_{i+1})} \tag{3.27}$$

com $\vec{\mathbf{r}}_{s+1} = \vec{\mathbf{r}}_1$.

Em princípio, as correções da ação efetiva podem ser obtidas conhecida $\Gamma_1^{(s)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2, ..., \vec{\mathbf{r}}_s)$, denominada "one-particle-irreducible Green function". A integral (3.26) admite outra aproximação que contém os principios fundamentais do fenômeno de quebra espontânea de simetria em física de partículas e, portanto, de maior utilidade em nosso estudo de transições de fase [16] (a quebra espontânea acontece de maneira semelhante na transição de fase de segunda ordem). Sabemos que:

$$[-\nabla^2 + a(T)]^{-1}_{(\vec{\mathbf{r}}_1,\vec{\mathbf{r}}_2)} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}} \int d^D \vec{\mathbf{q}} \, \frac{\exp\left(i\vec{\mathbf{q}} \cdot (\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2)\right)}{\vec{\mathbf{q}}^2 + a(T)} = \Delta(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2). \tag{3.28}$$

Assim, (3.26) reescreve-se:

$$\Gamma_1[\varphi_c] = \frac{1}{2}\sum_{s=1}^{\infty}\frac{(-1)^{s+1}b^s}{s}\int\prod_{i=1}^{s} d^D\vec{\mathbf{r}}_i\left[\varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_i)\Delta(\vec{\mathbf{r}}_i-\vec{\mathbf{r}}_{i+1})\right]. \tag{3.29}$$

Cada integral anterior pode ser escrita assim:

$$\Gamma_1[\varphi_c] = \frac{1}{2}\sum_{s=1}^{\infty}\frac{(-1)^{s+1}b^s}{s}\prod_{i=1}^{s} f(\vec{\mathbf{r}}_{i+1}), \tag{3.30}$$

onde:

$$f(\vec{\mathbf{r}}_{i+1}) = \int d^D\vec{\mathbf{r}}_i\left[\varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_i)\Delta(\vec{\mathbf{r}}_i-\vec{\mathbf{r}}_{i+1})\right] = \int d^D\vec{\mathbf{r}}_i\varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_i)\int\frac{d^D\vec{\mathbf{q}}_i}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\frac{e^{i\vec{\mathbf{q}}_i\cdot(\vec{\mathbf{r}}_i-\vec{\mathbf{r}}_{i+1})}}{\vec{\mathbf{q}}_i^2+a(T)}. \tag{3.31}$$

Supondo que o campo $\varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_i)$ varie pouco e que, portanto, pode sair da integral numa primeira aproximação (quanto mais exata tal aproximação, implica que o comportamento da transformada de Fourier do campo é mais próxima a uma delta de Dirac em torno algum valor do "momentum", o qual escolhemos como $\vec{\mathbf{k}}_i = 0$), temos que:

$$f(\vec{\mathbf{r}}_{i+1}) = \varphi_c^2\int d^D\vec{\mathbf{r}}_i\int\frac{d^D\vec{\mathbf{q}}_i}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\frac{e^{i\vec{\mathbf{q}}_i\cdot(\vec{\mathbf{r}}_i-\vec{\mathbf{r}}_{i+1})}}{\vec{\mathbf{q}}_i^2+a(T)}; \tag{3.32}$$

com esta aproximação chegamos a

$$\Gamma_1[\varphi_c] = \sum_{s=1}^{\infty}\frac{(-1)^{s+1}b^s\varphi_c^{2s}}{2s}\prod_{i=1}^{s}\int d^D\vec{\mathbf{r}}_i\int\frac{d^D\vec{\mathbf{q}}_i}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\frac{e^{i\vec{\mathbf{q}}_i\cdot(\vec{\mathbf{r}}_i-\vec{\mathbf{r}}_{i+1})}}{\vec{\mathbf{q}}_i^2+a(T)}. \tag{3.33}$$

Consideremos agora a seguinte função definida como

$$\mathcal{P}^s(\vec{\mathbf{p}}_1,\vec{\mathbf{p}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{p}}_s) = \prod_{i=1}^{s}\int d^D\vec{\mathbf{r}}_i\int\frac{d^D\vec{\mathbf{q}}_i}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\,e^{-i\vec{\mathbf{p}}_i\cdot\vec{\mathbf{r}}_i}\frac{e^{i\vec{\mathbf{q}}_i\cdot(\vec{\mathbf{r}}_i-\vec{\mathbf{r}}_{i+1})}}{\vec{\mathbf{q}}_i^2+a(T)}, \tag{3.34}$$

é obvio que, fazendo todos os $\vec{\mathbf{p}}_i = 0$, temos:

$$\Gamma_1[\varphi_c] = \sum_{s=1}^{\infty}\frac{(-1)^{s+1}b^s\varphi_c^{2s}}{2s}\mathcal{P}^s(0,0,\cdots,0). \tag{3.35}$$

Reordenemos a penúltima equação:

$$\mathcal{P}^s(\vec{\mathbf{p}}_1, \vec{\mathbf{p}}_2, \cdots, \vec{\mathbf{p}}_s) = \prod_{i=1}^{s} \int \frac{d^D\vec{\mathbf{q}}_i}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}} \int d^D\vec{\mathbf{r}}_i \, e^{i\vec{\mathbf{r}}_i\cdot(\vec{\mathbf{q}}_i - \vec{\mathbf{p}}_i)} \frac{e^{-i\vec{\mathbf{q}}_i\cdot\vec{\mathbf{r}}_{i+1}}}{\vec{\mathbf{q}}_i^2 + a(T)}, \tag{3.36}$$

e resolvamos a última integral no caso $s = 3$ ($\vec{\mathbf{r}}_4 = \vec{\mathbf{r}}_1$)

$$\begin{aligned}\mathcal{P}^3(\vec{\mathbf{p}}_1, \vec{\mathbf{p}}_2, \vec{\mathbf{p}}_3) =& \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^D\vec{\mathbf{q}}_1 d^D\vec{\mathbf{q}}_2 d^D\vec{\mathbf{q}}_3 d^D\vec{\mathbf{r}}_1 d^D\vec{\mathbf{r}}_2 d^D\vec{\mathbf{r}}_3 \, e^{i\vec{\mathbf{r}}_1\cdot(\vec{\mathbf{q}}_1-\vec{\mathbf{p}}_1)} e^{i\vec{\mathbf{r}}_2\cdot(\vec{\mathbf{q}}_2-\vec{\mathbf{p}}_2)} e^{i\vec{\mathbf{r}}_3\cdot(\vec{\mathbf{q}}_3-\vec{\mathbf{p}}_3)} \\ &\times \left[\left(\frac{e^{-i\vec{\mathbf{q}}_1\cdot\vec{\mathbf{r}}_2}}{\vec{\mathbf{q}}_1^2 + a(T)}\right)\left(\frac{e^{-i\vec{\mathbf{q}}_2\cdot\vec{\mathbf{r}}_3}}{\vec{\mathbf{q}}_2^2 + a(T)}\right)\left(\frac{e^{-i\vec{\mathbf{q}}_3\cdot\vec{\mathbf{r}}_1}}{\vec{\mathbf{q}}_3^2 + a(T)}\right)\right],\end{aligned} \tag{3.37}$$

ou

$$\begin{aligned}\mathcal{P}^3(\vec{\mathbf{p}}_1, \vec{\mathbf{p}}_2, \vec{\mathbf{p}}_3) =& \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^D\vec{\mathbf{q}}_1 d^D\vec{\mathbf{q}}_2 d^D\vec{\mathbf{q}}_3 d^D\vec{\mathbf{r}}_1 d^D\vec{\mathbf{r}}_2 d^D\vec{\mathbf{r}}_3 \, e^{i\vec{\mathbf{r}}_1\cdot(\vec{\mathbf{q}}_1-\vec{\mathbf{p}}_1-\vec{\mathbf{q}}_3)} e^{i\vec{\mathbf{r}}_2\cdot(\vec{\mathbf{q}}_2-\vec{\mathbf{p}}_2-\vec{\mathbf{q}}_1)} e^{i\vec{\mathbf{r}}_3\cdot(\vec{\mathbf{q}}_3-\vec{\mathbf{p}}_3-\vec{\mathbf{q}}_2)} \\ &\times \left[\left(\frac{1}{\vec{\mathbf{q}}_1^2 + a(T)}\right)\left(\frac{1}{\vec{\mathbf{q}}_2^2 + a(T)}\right)\left(\frac{1}{\vec{\mathbf{q}}_3^2 + a(T)}\right)\right] \\ =& \int d^D\vec{\mathbf{q}}_1 d^D\vec{\mathbf{q}}_2 d^D\vec{\mathbf{q}}_3 \delta(\vec{\mathbf{q}}_1 - \vec{\mathbf{p}}_1 - \vec{\mathbf{q}}_3)\delta(\vec{\mathbf{q}}_2 - \vec{\mathbf{p}}_2 - \vec{\mathbf{q}}_1)\delta(\vec{\mathbf{q}}_3 - \vec{\mathbf{p}}_3 - \vec{\mathbf{q}}_2) \\ &\times \left[\left(\frac{1}{\vec{\mathbf{q}}_1^2 + a(T)}\right)\left(\frac{1}{\vec{\mathbf{q}}_2^2 + a(T)}\right)\left(\frac{1}{\vec{\mathbf{q}}_3^2 + a(T)}\right)\right] \\ =& \int d^D\vec{\mathbf{q}}_2 d^D\vec{\mathbf{q}}_3 \delta(\vec{\mathbf{q}}_2 - \vec{\mathbf{p}}_2 - \vec{\mathbf{p}}_1 - \vec{\mathbf{q}}_3)\delta(\vec{\mathbf{q}}_3 - \vec{\mathbf{p}}_3 - \vec{\mathbf{q}}_2) \\ &\times \left[\left(\frac{1}{(\vec{\mathbf{p}}_1 + \vec{\mathbf{q}}_3)^2 + a(T)}\right)\left(\frac{1}{\vec{\mathbf{q}}_2^2 + a(T)}\right)\left(\frac{1}{\vec{\mathbf{q}}_3^2 + a(T)}\right)\right].\end{aligned} \tag{3.38}$$

A última integral nos diz que $\vec{\mathbf{q}}_2 = \vec{\mathbf{q}}_3 + \vec{\mathbf{p}}_1 + \vec{\mathbf{p}}_2$; assim,

$$\mathcal{P}^3(\vec{\mathbf{p}}_1, \vec{\mathbf{p}}_2, \vec{\mathbf{p}}_3) = \delta(\vec{\mathbf{p}}_1+\vec{\mathbf{p}}_2+\vec{\mathbf{p}}_3) \int d^D\vec{\mathbf{q}}_3 \frac{1}{[(\vec{\mathbf{q}}_3)^2 + a(T)][(\vec{\mathbf{q}}_3 + \vec{\mathbf{p}}_1)^2 + a(T)][(\vec{\mathbf{q}}_3 + \vec{\mathbf{p}}_1 + \vec{\mathbf{p}}_2)^2 + a(T)]}. \tag{3.39}$$

O caso geral pode determinar-se por indução, então:

$$\mathcal{P}^s(\vec{\mathbf{p}}_1, \cdots, \vec{\mathbf{p}}_s) = \delta(\vec{\mathbf{p}}_1 + \cdots + \vec{\mathbf{p}}_s) \int d^D\vec{\mathbf{q}}_s \frac{1}{[(\vec{\mathbf{q}}_s)^2 + a(T)]} \frac{1}{[(\vec{\mathbf{q}}_s + \vec{\mathbf{p}}_1)^2 + a(T)]} \cdots \times \frac{1}{[(\vec{\mathbf{q}}_s + \vec{\mathbf{p}}_1 + \cdots + \vec{\mathbf{p}}_{s-1})^2 + a(T)]}. \tag{3.40}$$

Por (3.35), vemos que só nos interessa conhecer $\mathcal{P}^s(0, \cdots, 0)$ a qual é:

$$\mathcal{P}^s(0, \cdots, 0) = \delta(0) \int d^D\vec{\mathbf{q}} \frac{1}{(\vec{\mathbf{q}}^2 + a(T))^s}, \tag{3.41}$$

o que nos dá as correções a um loop da ação efetiva. Se definirmos

$$\Gamma_1[\varphi_c] = (2\pi)^D \delta(0) U_1(\varphi_c), \tag{3.42}$$

com $U_1(\varphi_c)$o potencial efetivo que, em principio, contém toda a informação das correções da ação efetiva (nesta aproximação as duas diferem salvo uma "constante infinita" $\delta(0)$), sua expressão é:

$$U_1(\varphi_c) = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(-1)^{s+1} b^s \varphi_c^{2s}}{2s} \int \frac{d^D\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^D} \frac{1}{(\vec{\mathbf{q}}^2 + a(T))^s}. \tag{3.43}$$

Como interpretamos estes resultados? Lembremos que em nosso cálculo consideramos φ_c como uma constante, e dentro desta aproximação, uma melhor forma de ver a relação das correções da ação efetiva e do potencial efetivo seria

$$\Gamma_1[\varphi_c] = (2\pi)^D \int \frac{d^D\vec{\mathbf{r}}}{(2\pi)^D} U_1(\varphi_c) = (2\pi)^D U_1(\varphi_c) \int \frac{d^D\vec{\mathbf{r}}}{(2\pi)^D} = (2\pi)^D U_1(\varphi_c)\delta(0). \tag{3.44}$$

já que $\int \frac{d^D\vec{\mathbf{r}}}{(2\pi)^D} \exp(i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}}) = \delta(\vec{\mathbf{k}})$.

Se tomarmos literalmente a equação anterior, então $U_1(\varphi_c)$ representa as correções da densidade hamiltoniana de Ginzburg-Landau:

$$\mathcal{H}_{GL}(\nabla\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}),\varphi_c(\vec{\mathbf{r}})) = \frac{1}{2}\nabla\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}).\nabla\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}) + \frac{1}{2!}a_0[T-T_c]\varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}) + \frac{1}{4!}b_0\varphi_c^4(\vec{\mathbf{r}}) + U_1(\varphi_c); \quad (3.45)$$

φ_c é o parâmetro de ordem e, como tal para $T > T_c$ temos que é zero, enquanto para $T \to T_c^-$, temos $\varphi_c \to 0$ quando $J(\vec{\mathbf{r}}) = 0$ (transição de segunda ordem em ferromagnetismo), e assim, perto da fase critica, podemos introduzir as correções propriamente dentro das constantes $a_0[T - T_c]$ e b_0 (os métodos com caráter perturbativo geralmente sempre fornecem resultados como correções dos parâmetros do modelo em primeira ordem):

$$a(T) = \left.\frac{\partial^2\mathcal{H}_{GL}}{\partial\varphi_c^2}\right|_{\varphi_c=0} = a_0[T - T_c] + \left.\frac{\partial^2 U_1}{\partial\varphi_c^2}\right|_{\varphi_c=0} \quad (3.46)$$

$$b = \left.\frac{\partial^4\mathcal{H}_{GL}}{\partial\varphi_c^4}\right|_{\varphi_c=0} = b_0 + \left.\frac{\partial^4 U_1}{\partial\varphi_c^4}\right|_{\varphi_c=0}. \quad (3.47)$$

Se as correções dadas pelo potencial efetivo não dependerem da temperatura, vemos que o parâmetro $a(T)$ só pode mudar o valor de T_c:

$$a(T) = a_0[T-T_c] + a_0\left[\frac{1}{a_0}\left.\frac{\partial^2 U_1}{\partial\varphi_c^2}\right|_{\varphi_c=0}\right] = a_0\left[T - \left(T_c - \frac{1}{a_0}\left.\frac{\partial^2 U_1}{\partial\varphi_c^2}\right|_{\varphi_c=0}\right)\right] = a_0[T - T_c'], \quad (3.48)$$

onde T_c' é a nova temperatura critica e $T_c' < T_c$.

Sendo este o caso, vemos que as correções continuam conservando o caráter linear do termo $a(T)$ e neste sentido não fornecem um comportamento diferente daquele descrito pela aproximação de Landau: em essência, são idênticos qualitativamente.

Na realidade, vemos que a forma integral das correções $U_1(\varphi)$ tem uma dependência explicita $a(T)$, o que poderia mudar a forma funcional de $a(T)$ (supondo ser possível encontrar uma solução de $a(T)$ a partir de (3.46), a equação é auto-constitutiva para $a(T)$ que é obtido como solução). Seja este ou não o caso, as correções em questão partem da aproximação de Landau, a qual, além de estar indissoluvelmente ligada à aproximação de campo médio, é uma introdução ad-hoc da temperatura com o fim de reproduzir o fenômeno de transição de fase. Mas nada previne outras formas de se introduzir temperatura que, além de reproduzir o fenômeno de transição de fase, dê uma melhor aproximação deste.

3.2 O comprimento de coerência ξ no contexto da teoria de Ginzburg Landau

Não é por capricho que se deseja encontrar outra expressão de $a(T)$ com comportamento diferente daquele linear. Um modo eficaz de comparar teoria e experimento é por meio do comprimento de coerência ξ, que está diretamente relacionado com o parâmetro $a(T)$. Precisamos da função de correlação que corresponde, neste caso, à função de Green $\mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2)$ da teoria. Conhecido o gerador funcional das funções de Green conexas $\mathcal{W}$, então

$$\mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2) = \left.\frac{\delta^2 \mathcal{W}}{\delta J(\vec{\mathbf{r}}_1)\delta J(\vec{\mathbf{r}}_2)}\right|_{J=0} = \frac{\delta \varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_1)}{\delta J(\vec{\mathbf{r}}_2)}; \tag{3.49}$$

sendo a equação do campo (ver 3.3)

$$J(\vec{\mathbf{r}}_1) = \nabla^2 \varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_1) + a(T)\varphi_c(\vec{\mathbf{r}}_1) + \frac{1}{3!} b \varphi_c^3(\vec{\mathbf{r}}_1) \tag{3.50}$$

e, derivando a última equação em relação a $J(\vec{\mathbf{r}}_2)$, obtemos:

$$\left(\nabla^2 + a(T) + \frac{b}{2}\varphi_c^2(\vec{\mathbf{r}}_1)\right) \mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2) = \delta(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2). \tag{3.51}$$

Se tomarmos $T > T_c$, vemos que $\varphi_c = 0$ e, portanto

$$\left(\nabla^2 + a(T)\right) \mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2) = \delta(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2). \tag{3.52}$$

Consideremos agora $\vec{\mathbf{r}}_2 = 0$ (como partimos do pressuposto de que nosso sistema físico é homogêneo, basta considerar a correlação entre a origem e qualquer ponto do espaço $\mathbb{R}^D$), temos a seguinte expressão para $\mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}})$:

$$\mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}}) = \int \frac{d^D\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^n} \frac{\exp(i\vec{\mathbf{r}} \cdot \vec{\mathbf{q}})}{\vec{\mathbf{q}}^2 + a(T)}. \tag{3.53}$$

A integral abarca todo o espaço euclidiano D-dimensional; convém resolvê-la em coordenadas hiperesféricas:

$$\mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{2\pi^{\frac{D-1}{2}}}{(2\pi)^D \Gamma\left(\frac{D-1}{2}\right)} \int_0^\infty dq \frac{q^{D-1}}{q^2 + a(T)} \int_0^\pi d\theta \sin^{D-2}\theta \, e^{irq\cos\theta}, \tag{3.54}$$

com $q = \|\vec{\mathbf{q}}\|$ e $r = \|\vec{\mathbf{r}}\|$, a integral no ângulo θ é conhecida (ver [17]) e no caso $D > 1$ resulta:

$$\int_0^\pi d\theta \sin^{D-2}\theta \, e^{irq\cos\theta} = \sqrt{\pi} \left(\frac{2}{qr}\right)^{\frac{D}{2}-1} \Gamma\left(\frac{D-1}{2}\right) \mathrm{J}_{\frac{D}{2}-1}(qr), \tag{3.55}$$

onde J é a função de Bessel de primeiro tipo. Ordenando termos, obtemos

$$\mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}} r^{\frac{D}{2}-1}} \int_0^\infty dq \frac{q^{D-1}}{(qr)^{\frac{D}{2}-1}} \frac{1}{q^2 + a} \mathrm{J}_{\frac{D}{2}-1}(qr). \tag{3.56}$$

Esta integral também é de tabela [17], e pode ser exatamente resolvida para o caso $0 < D < 5$ com $a^{\frac{1}{2}}(T) > 0$ (quer dizer, a expressão só seria válida na fase simétrica). Calculemos com estas restrições a função de correlação a partir de (3.56):

$$\mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}} \left(\frac{\sqrt{a(T)}}{r}\right)^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}(\sqrt{a(T)}\, r), \tag{3.57}$$

onde K é a função de Bessel modificada de segundo tipo.

A função de correlação tem o mesmo comportamento de uma função rapidamente decrescente para $a(T)$ finito; de fato, assintoticamente para $r \to \infty$, temos que

$$K_{\frac{D}{2}-1}(\sqrt{a(T)}\, r) \sim \frac{\exp(-\sqrt{a(T)}\, r)}{(\sqrt{a(T)}\, r)^{\frac{1}{2}}}.$$

Este comportamento é o esperado (secção 2.2) e, de fato,o comprimento de coerência ξ se define a partir de funções de correlação do tipo

$$\mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{g(\frac{r}{\xi})}{r^{D+\eta-2}}, \tag{3.58}$$

com g uma função rapidamente decrescente em r, e η um expoente crítico. Comparando as duas expressões de $\mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}})$, vemos que o comprimento de coerência associado à função g é

$$\xi^2 = \frac{1}{a(T)}. \tag{3.59}$$

Vemos aqui uma relação direta entre o comprimento de coerência e o parâmetro $a(T)$, que governa a transição e, como se viu, deve ser um comportamento universal para qualquer sistema físico que apresente uma transição de segunda ordem. Nosso cálculo é válido somente para $a(T) > 0$; no entanto, uma relação do mesmo tipo pode-se encontrar para o caso $a(T) < 0$ com a condição de que o campo externo $J(\vec{\mathbf{r}}) = 0$, o que implica (considerando que o parâmetro de ordem varia pouco) que (3.50) se torna

$$\varphi_c^2 = -6\frac{a(T)}{b}. \tag{3.60}$$

E, portanto, a equação (3.51) seria modificada da seguinte maneira:

$$\left(\nabla^2 - 2a(T)\right) \mathrm{G}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2) = \delta(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2). \tag{3.61}$$

Fazendo o mesmo procedimento anterior, chegamos ao seguinte resultado:

$$\xi^2 = -\frac{1}{2a(T)}. \tag{3.62}$$

Assim, de forma geral, o comprimento de coerência ξ perto da fase critica é descrito por

$$\xi \sim |T - T_c|^{-1/2} = |T - T_c|^{-\nu}. \tag{3.63}$$

onde $\nu = 0,5$ é o valor *clássico* do expoente critico.

Vemos que ν não depende da dimensão D do sistema, sendo uma consequência direta de nossa aproximação de campo médio ou aproximação de Landau. Na realidade, a resolução exata ($n = 2$) e numérica ($n > 2$) do modelo de Ising proporciona o valor exato do expoente crítico, tendo uma marcada dependência na dimensionalidade D, só encontramos uma coincidência das duas abordagens no limite $n \to \infty$. Será que as correções do parâmetro $a(T)$ fornecem uma melhor aproximação do expoente critico? Como pode-se inferir da análise feita na seção final do capítulo 2 de [9] (ao menos no caso $n > 4$), as correções não alteram a forma funcional de $a(T)$ perto da temperatura crítica e, portanto, não mudam a principio o expoente crítico associado com o parâmetro ξ.

A consideração $a(T) = a_0[T - T_c]$ sempre foi imposta externamente ou "com a mão", sendo sua finalidade obter uma coincidência com o modelo de Ising. O formalismo da teoria quântica de campos a temperatura finita é um meio de introduzir temperatura diretamente nas correções do parâmetro a, pode fornecer um comportamento $a(T)$ não imposto externamente e, possivelmente, uma melhor aproximação. As correções podem também incluir efeitos de tamanho finito do sistema, o que corresponderia a compactificações espaciais. Vamos por partes: primeiro analisaremos os efeitos de uma compactificação espacial (de uma ou várias subdimensões) na teoria de Ginzburg-

Landau.

3.3 Correções da temperatura crítica por compactificações espaciais no modelo de Ginzburg-Landau

A formulação matemática de sistemas físicos gerais em outras "geometrias" diferentes da euclidiana (ou minkowskiana) é um trabalho recorrente por parte dos físicos. Um exemplo disto foi a obtenção do espectro de energia do átomo de hidrogênio em $\mathbb{S}^3$ (espaço esférico tridimensional) estudado em [18], obtendo que o espectro de energia associado aos estados ligados era discreto e finito (em espaço euclidiano é discreto infinito), enquanto que o espectro positivo era discreto e infinito (em espaço euclidiano é continuo). Em particular, o espectro total do átomo de hidrogênio em $\mathbb{S}^3$ é discreto, consequência direta da topologia do espaço $\mathbb{S}^3$, que é compacto. Aqui, praticamente mudam-se as propriedades *globais* do espaço, e se a teoria física está globalmente definida, então é possível encontrar as consequências de se mudar uma estrutura fundamental como a topologia do espaço.

Em teoria quântica de campos, levando em consideração o parágrafo anterior, um exemplo seria a formulação desta teoria em espaços curvos, o que frequentemente implica diferentes topologias. As consequências são profundas e diferem em essência da formulação em espaço euclidiano [19]. Em nosso trabalho, explicitamos os problemas para introduzir temperatura numa teoria de campos; porém, um método consistente e paralelo aos posteriores desenvolvimentos em TFD (thermo-field dynamics) foi o formalismo de tempo imaginário de Matsubara o qual, além de complexificar o tempo via a rotação de Wick $\beta = -it$ (em vista da relação entre a integral de trajetória e mecânica estatística), impõe condições periódicas sobre ele, o que se traduz numa compactificação $[0, \beta]$ da nova coordenada temporal associada com uma temperatura finita do sistema (As condições de borda periódicas são associadas ao caso bosônico, enquanto condições de borde antiperiódicas correspondem ao caso fermiônico. A equação (3.1), a partir da qual surge nosso estudo, é do tipo bosônico, independentemente de que nada tenha a ver com o ponto de vista de física de partículas).

A consequência direta é a de uma discretização do momentum associado ao tempo imaginario no antigo espaço de Fourier. O método explicita-se detalhadamente em [13] e numa generalização deste, que envolve compactificações de coordenadas espaciais, foi realizada em [20]. Nesta refêrencia, demonstra-se que o formalismo generalizado de Matsubara implica formular nossa teoria original em topologias do tipo $(\mathbb{S}^1)^d \times \mathbb{R}^{D-d}$, sendo D a dimensão do espaço e d correspondendo ao número de coordenadas compactificadas [3].

As correções do potencial efetivo em geral são divergentes e requerem ser regularizadas e renormalizadas. O método de regularização é o dimensional e tem-se demonstrado que, geralmente, em espaços diferentes do euclidiano fornece resultados ambíguos, salvo no caso de topologias tipo $(\mathbb{S}^1)^d \times \mathbb{R}^{D-d}$, na qual o método de regularização dimensional é associado a funções zeta generalizadas de Epstein-Hurwitz [21].

Uma das possíveis interpretações físicas que tem este procedimento é a de testar efeitos de tamanho finito nos materiais estudados pelo modelo de Ginzburg-Landau; em particular, grãos, fios e filmes. Tentemos dar uma justificação física dessa associação: no caso da supercondutividade o parâmetro de ordem tem a interpretação de uma função de onda dos pares de Cooper e, como tal, deve ter um valor diferente de zero somente dentro do material (caso contrário, existiria uma probabilidade de encontrar pares de Cooper fora do material). Assim, a região de interesse seria um subconjunto de $\mathbb{R}^D$. Se, além disto, fizermos a suposição de que o parâmetro de ordem satisfaz condições de contorno periódicas na fronteira (em geral, condições de contorno auto-adjuntas, necessárias para qualquer função de onda), então a região de interesse pode ser considerada como $(\mathbb{S}^1)^d \times \mathbb{R}^{D-d}$.

Agora, nos limitaremos somente em ver as consequências de aplicar este procedimento de compactificação espacial na teoria de Ginzburg-Landau de forma geral, com a temperatura introduzida a partir da aproximação de Landau. Depois, aplicaremos o método (com as correspondentes modificações) no caso da supercondutividade e, por último, tentaremos introduzir a temperatura via formalismo de Matsubara e reproduzir o fenômeno de transição de fase para supercondutores.

3.3.1 Ginzburg-Landau em topologias toroidais

Por generalidade, pode-se considerar um parâmetro de ordem φ de N componentes num espaço euclidiano D-dimensional, o qual está descrito pelo seguinte hamiltoniano de Ginzburg-Landau:

$$\mathcal{H}_{GL}(\nabla\varphi(\vec{\mathbf{r}}), \varphi(\vec{\mathbf{r}})) = \frac{1}{2}\nabla\varphi(\vec{\mathbf{r}}) \cdot \nabla\varphi(\vec{\mathbf{r}}) + \frac{1}{2!}a(T)\varphi^2(\vec{\mathbf{r}}) + \frac{1}{4!}b\varphi^4(\vec{\mathbf{r}}). \tag{3.64}$$

Supondo d dimensões espaciais compactificadas, cada uma com um comprimento L_i com

$i = 1, 2, ..., d$, então, no limite sem compactificação $\lim_{[L_i\to\infty]} a(T) = a_0[T - T_{c0}]$ (sendo a_0 uma constante e T_{c0} a temperatura crítica sem compactificação); o potencial efetivo é:

$$U_1(\varphi_c) = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(-1)^{s+1} b^s \varphi_c^{2s}}{2s} \int \frac{d^D\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^D} \frac{1}{(\vec{\mathbf{q}}^2 + a(T))^s}. \tag{3.65}$$

Apliquemos o procedimento generalizado de Matsurbara para d dimensões espaciais compactificadas . O formalismo simplesmente exige que:

$$\int \frac{dq_i}{2\pi} \to \frac{1}{L_i} \sum_{n_i=-\infty}^{\infty} \tag{3.66}$$

$$q_i \to \frac{2\pi n_i}{L_i}, \tag{3.67}$$

com $i = 1, 2, ..., d$, a modificação do potencial efetivo é

$$U_1(\varphi_c) = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(-1)^{s+1} b^s \varphi_c^{2s}}{2s} \frac{1}{L_1 L_2 \cdots L_d} \sum_{n_1,\cdots,n_d=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^{D-d}\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^{D-d}} \frac{1}{\left(\vec{\mathbf{q}}^2 + \frac{4\pi^2 n_1^2}{L_1^2} + \cdots + \frac{4\pi^2 n_d^2}{L_d^2} + a(T)\right)^s}. \tag{3.68}$$

Pode-se verificar que só um número finito das integrais anteriores divergem. Assim, precisa-se de algum método de renormalização, que será atingido usando em primeiro lugar uma regularização dimensional. Para isso redefinimos os parâmetros de modo que a constante de acoplamento b (exceto em dimensão 4, ja que nesse caso não possivel redefinir a constante de acoplamento) e a variável de integração sejam adimensionais em unidades naturais:

$$a(T) = 4\pi^2 \mu^2 c^2, \qquad L_i = \frac{1}{\mu \alpha_i}, \qquad b = 4\pi^2 g \mu^{4-D}, \qquad \varphi_c^2 = \mu^{D-2} \phi^2, \qquad q_i = 2\pi \mu\, q_i'. \tag{3.69}$$

Fazendo as modificações necessárias, o potencial efetivo com compactificação espacial se escreve:

$$U_1(\phi, \alpha_1, \cdots, \alpha_d) = \mu^D \alpha_1 \cdots \alpha_d \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^{s+1} \frac{[g\phi^2]^s}{2s} \tag{3.70}$$

$$\times \sum_{n_1,\cdots,n_d=-\infty}^{\infty} \int d^{D-d}\vec{\mathbf{q}}' \frac{1}{(\vec{\mathbf{q}}'^2 + n_1^2\alpha_1^2 + \cdots + n_d^2\alpha_d^2 + c^2)^s}. \tag{3.71}$$

Resolvamos a integral para um s particular. Convém resolvê-la em coordenadas hiperesféricas. As integrais são do tipo:

$$I(s) = \int \frac{d^{D-d}\vec{\mathbf{q}}'}{(p^2 + \vec{\mathbf{q}}'^2)^s} = \int d\Omega_{D-d} \int_0^\infty dq \frac{q^{D-d-1}}{(q^2 + p^2)^s}, \tag{3.72}$$

sendo $\|\vec{\mathbf{q}}'\| = q$.

Fazendo a mudança de variável $k = q^{D-d}$ e conhecendo o ângulo sólido em D dimensões $\Omega_D = \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)}$, obtemos:

$$I(s) = \frac{2\pi^{\frac{D-d}{2}}}{(D-d)\Gamma\left(\frac{D-d}{2}\right)} \int_0^\infty \frac{dk}{(p^2 + k^{\frac{2}{D-d}})^s}. \tag{3.73}$$

Usando a seguinte integral de tabela:

$$\int_0^\infty \frac{dx\, x^{\mu-1}}{(h + qx^\nu)^{n+1}} = \frac{1}{\nu h^{n+1}} \left(\frac{h}{q}\right)^{\frac{\mu}{\nu}} \frac{\Gamma\left(\frac{\mu}{\nu}\right)\Gamma\left(1 + n - \frac{\mu}{\nu}\right)}{\Gamma(1+n)}, \qquad 0 < \frac{\mu}{\nu} < n+1, \tag{3.74}$$

nossa integral original reduz-se a

$$I(s) = \pi^{\frac{D-d}{2}} (\alpha_1^2 n_1^2 + \cdots + \alpha_d^2 n_d^2 + c^2)^{\frac{D-d}{2} - s} \frac{\Gamma\left(s - \frac{D-d}{2}\right)}{\Gamma(s)}, \qquad 0 < \frac{D-d}{2} < s. \tag{3.75}$$

Fora do limite $0 < \frac{D-d}{2} < s$, as integrais $I(s)$ divergem, a regularização dimensional estende o valor s ao plano complexo e pode-se demostrar que uma continuação analítica da função $I(s)$ é possível para s no domínio divergente; o método de regularização dimensional só considera os valores fornecidos pela dita continuação como os únicos de interesse. Neste sentido, Zinn-Justin afirma que a regularização dimensional é também uma renormalização parcial [14]. Assim, o potencial efetivo é:

$$U_1(\phi) = \pi^{\frac{D-d}{2}} \mu^D \alpha_1 \cdots \alpha_d \sum_{s=1}^\infty \frac{(-1)^{s+1} g^s \phi^{2s} \Gamma\left(s - \frac{D-d}{2}\right)}{2s\Gamma(s)} A_d^{c^2}\left(s - \frac{D-d}{2}; \alpha_1 \cdots \alpha_d\right), \tag{3.76}$$

onde

$$A_d^{c^2}(\nu;\alpha_1\cdots\alpha_d) = \sum_{n_1,\cdots,n_d=-\infty}^{\infty} (\alpha_1^2 n_1^2 + \cdots + \alpha_d^2 n_d^2 + c^2)^{-\nu} = A_d^{c^2}(\nu;\alpha_i). \qquad (3.77)$$

Levando em conta que as somas são simétricas em n_i, e reagrupando a série anterior de acordo com o numero de termos n_i que são zero, obtemos [22]

$$\begin{aligned} A_d^{c^2}(\nu;\alpha_i) =& \frac{1}{c^{2\nu}} + 2\sum_{i=1}^{d}\sum_{n_i=1}^{\infty}\frac{1}{(\alpha_i^2 n_i^2 + c^2)^{\nu}} + \cdots \\ &+ 2^m \sum_{i_1=1}^{d-m+1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d-m+m=d}\sum_{n_{i_1},\cdots,n_{i_m}=1}^{\infty}\frac{1}{(\alpha_{i_1}^2 n_{i_1}^2 + \cdots + \alpha_{i_m}^2 n_{i_m}^2 + c^2)^{\nu}} + \cdots \\ &+ 2^d \sum_{n_1,\cdots,n_d=1}^{\infty}\frac{1}{(\alpha_1^2 n_1^2 + \cdots + \alpha_d^2 n_d^2 + c^2)^{\nu}}, \end{aligned} \qquad (3.78)$$

com $2 \leq m \leq d$.

Seja a seguinte representação integral da função gama:

$$\Gamma(z) = a^z \int_0^{\infty} dt e^{-at} t^{z-1}, \qquad a > 0, Re(z) > 0. \qquad (3.79)$$

Como a função gama admite uma continuação analítica em todo o plano complexo, a integral anterior permite encontrar uma expressão para $1/a^z$ em qualquer valor de z. Assim,

$$\frac{1}{a^z} = \frac{1}{\Gamma(z)}\int_0^{\infty} dt e^{-at} t^{z-1}. \qquad (3.80)$$

Utilizemos este resultado como uma regularização de cada termo da expressão (3.78):

$$
\begin{aligned}
A_d^{c^2}(\nu,\alpha_i) =& \frac{1}{\Gamma(\nu)}\int_0^\infty dt e^{-tc^2} t^{\nu-1}\Bigg[1 + 2\sum_{i=1}^{d}\sum_{n_i=1}^{\infty} e^{-t\alpha_i^2 n_i^2} + \cdots \\
&+ 2^m \sum_{i_1=1}^{d-m+1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}\sum_{n_{i_1},\cdots,n_{i_m}=1}^{\infty} e^{-t(\alpha_{i_1}^2 n_{i_1}^2+\cdots+\alpha_{i_m}^2 n_{i_m}^2)} + \cdots \\
&+ 2^d \sum_{n_1,\cdots,n_d=1}^{\infty} e^{-t(\alpha_1^2 n_1^2+\cdots+\alpha_d^2 n_d^2)}\Bigg]. \qquad (3.81)
\end{aligned}
$$

Definindo

$$
\begin{aligned}
T_1(t;\alpha_i) &= \sum_{n_i=1}^{\infty} e^{-\alpha_i^2 n_i^2 t} \\
T_m(t;\alpha_{i_1},\cdots,\alpha_{i_m}) &= \sum_{n_{i_1},\cdots,n_{i_m}=1}^{\infty} e^{-(\alpha_{i_1}^2 n_{i_1}^2+\cdots+\alpha_{i_m}^2 n_{i_m}^2)t}, \qquad (3.82)
\end{aligned}
$$

é obvio que $T_m(t;\alpha_{i_1},\cdots,\alpha_{i_m}) = T_1(t;\alpha_{i_1})\cdots T_1(t;\alpha_{i_m})$, assim:

$$
\begin{aligned}
A_d^{c^2}(\nu,\alpha_i) =& \frac{1}{\Gamma(\nu)}\int_0^\infty dt e^{-tc^2} t^{\nu-1}\Bigg[1 + 2\sum_{i=1}^{d} T_1(t;\alpha_i) + \cdots \\
&+ 2^m \sum_{i_1=1}^{d-m+1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d} T_m(t;\alpha_{i_1},\cdots,\alpha_{i_m}) + \cdots \\
&+ 2^d T_d(t;\alpha_1,\cdots,\alpha_d)]. \qquad (3.83)
\end{aligned}
$$

Usando a seguinte identidade [21]

$$
\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-tn^2+2\pi i z n} = \left(\frac{\pi}{t}\right)^{1/2}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2}{t}(n-z)^2}, \qquad t\in\mathbb{R},\ z\in\mathbb{C}; \qquad (3.84)
$$

para o caso $z = 0$, é obvio que $T_1(t;\alpha_i)$ pode ser escrito como

$$
T_1(t;\alpha_i) = -\frac{1}{2} + \left(\frac{\pi}{\alpha_i^2 t}\right)^{1/2}\left[\frac{1}{2} + S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2 t}\right)\right], \qquad (3.85)
$$

onde:

$$S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2 t}\right) = \sum_{n_i=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n_i^2}{\alpha_i^2 t}}. \tag{3.86}$$

Podemos demonstrar (ver apêndice A) que a expressão (3.83) é idêntica a

$$\begin{aligned} A_d^{c^2}(\nu,\alpha_i) =& \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\nu)}\frac{1}{\alpha_1\cdots\alpha_d}\int_0^{\infty} dt e^{-tc^2} t^{\left(\nu-\frac{d}{2}\right)-1}\left[1+2\sum_{i=1}^{d} S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2 t}\right)+\cdots\right.\\ &+2^m \sum_{i_1=1}^{d-m+1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d} S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_{i_1}^2 t}\right)\cdots S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_{i_m}^2 t}\right)+\cdots\\ &\left.+2^d\prod_{i=1}^{d} S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2 t}\right)\right]. \end{aligned} \tag{3.87}$$

Cada termo tem uma integral que é facilmente resolvida. Usando (3.79), temos a integral do primeiro termo:

$$\int_0^{\infty} dt\, t^{(\nu-\frac{d}{2})-1} e^{-tc^2} = \frac{1}{c^{2\nu-d}}\Gamma\left(\nu-\frac{d}{2}\right). \tag{3.88}$$

As outras integrais são todas do mesmo tipo e não é difícil perceber que geram funções de Bessel modificadas de segundo tipo. De fato temos:

$$2\left(\frac{a}{b}\right)^{\xi/2} K_{\xi}(2\sqrt{ab}) = \int_0^{\infty} dx\, x^{\xi-1} e^{-\frac{a}{x}-bx}, \qquad Re(a)>0,\ Re(b)>0. \tag{3.89}$$

Portanto:

$$\int_0^{\infty} dt\, t^{(\nu-\frac{d}{2})-1} e^{-tc^2-\frac{\pi^2}{t}\left(\frac{n_{i_1}^2}{\alpha_{i_1}^2}+\cdots+\frac{n_{i_m}^2}{\alpha_{i_m}^2}\right)} = 2\left[\frac{\pi}{c}\left(\frac{n_{i_1}^2}{\alpha_{i_1}^2}+\cdots+\frac{n_{i_m}^2}{\alpha_{i_m}^2}\right)^{1/2}\right]^{\nu-\frac{d}{2}} \tag{3.90}$$

$$\times K_{\nu-\frac{d}{2}}\left[2\pi c\left(\frac{n_{i_1}^2}{\alpha_{i_1}^2}+\cdots+\frac{n_{i_m}^2}{\alpha_{i_m}^2}\right)^{1/2}\right]. \tag{3.91}$$

Como podemos inferir de (3.89), as integrais são sempre bem definidas. Usando agora $c^2 = \frac{a(T)}{4\pi^2\mu^2}$ e $L_i = \frac{1}{\mu\alpha_i}$ podemos obter $A_d^{c^2}(\nu,\alpha_i)$:

$$A_d^{c^2}(\nu,\alpha_i) = \frac{2^{\nu-\frac{d}{2}+1}\pi^{2\nu-\frac{d}{2}}}{\Gamma(\nu)}\frac{\mu^{2\nu-d}}{\alpha_1\cdots\alpha_d}\left[\frac{2^{\nu-\frac{d}{2}-1}}{a^{\nu-\frac{d}{2}}(T)}\Gamma\left(\nu-\frac{d}{2}\right)\right.$$
$$+ 2\sum_{i=1}^{d}\sum_{n_i=1}^{\infty}\left(\frac{n_iL_i}{a^{1/2}(T)}\right)^{\nu-\frac{d}{2}}K_{\nu-\frac{d}{2}}\left(a^{\frac{1}{2}}(T)n_iL_i\right)+\cdots$$
$$+ 2^m\sum_{i_1=1}^{d-m+1}\cdots\sum_{n_{i_1},\cdots,n_{i_m}=1}^{\infty}\left[\left(\frac{n_{i_1}^2L_{i_1}^2+\cdots+n_{i_m}^2L_{i_m}^2}{a(T)}\right)^{1/2}\right]^{\nu-\frac{d}{2}}K_{\nu-\frac{d}{2}}\left[\left(a(T)[n_{i_1}^2L_{i_1}^2+\cdots+n_{i_m}^2L_{i_m}^2]\right)^{\frac{1}{2}}\right]$$
$$\left.+\cdots+2^d\sum_{n_{i_1},\cdots,n_{i_m}=1}^{\infty}\left[\left(\frac{n_1^2L_1^2+\cdots+n_d^2L_d^2}{a(T)}\right)^{1/2}\right]^{\nu-\frac{d}{2}}K_{\nu-\frac{d}{2}}\left[\left(a(T)[n_1^2L_1^2+\cdots+n_d^2L_d^2]\right)^{\frac{1}{2}}\right]\right]. \tag{3.92}$$

Resultado que podemos inserir em (3.76) e, fazendo as correções necessárias ($\nu = s - \frac{D-d}{2}$), obtemos uma expressão para o potencial efetivo a um loop

$$U_1(\varphi) = \sum_{s=1}^{\infty}\frac{(-1)^{s+1}[b\varphi^2]^s}{2^{\frac{D}{2}+s-1}\pi^{\frac{D}{2}}}\frac{1}{s\Gamma(s)}\left[\frac{2^{s-\frac{D}{2}-2}}{a^{s-\frac{D}{2}}(T)}\Gamma\left(s-\frac{D}{2}\right)+\sum_{i=1}^{d}\sum_{n_i=1}^{\infty}\left(\frac{n_iL_i}{a^{1/2}(T)}\right)^{s-\frac{D}{2}}K_{s-\frac{D}{2}}\left(a^{\frac{1}{2}}(T)n_iL_i\right)\right.$$
$$+ 2^{m-1}\sum_{i_1=1}^{d-m+1}\cdots\sum_{n_{i_1},\cdots,n_{i_m}=1}^{\infty}\left[\left(\frac{n_{i_1}^2L_{i_1}^2+\cdots+n_{i_m}^2L_{i_m}^2}{a(T)}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^{s-\frac{D}{2}}K_{s-\frac{D}{2}}\left[\left(a(T)[n_{i_1}^2L_{i_1}^2+\cdots+n_{i_m}^2L_{i_m}^2]\right)^{\frac{1}{2}}\right]$$
$$\left.+\cdots+2^{d-1}\sum_{n_{i_1},\cdots,n_{i_m}=1}^{\infty}\left[\left(\frac{n_1^2L_1^2+\cdots+n_d^2L_d^2}{a(T)}\right)^{1/2}\right]^{s-\frac{D}{2}}K_{s-\frac{D}{2}}\left[\left(a(T)[n_1^2L_1^2+\cdots+n_d^2L_d^2]\right)^{\frac{1}{2}}\right]\right]. \tag{3.93}$$

Suponhamos que estamos na fase simétrica, de acordo com (3.46), vemos que só o termo $s = 1$ de $U_1(\varphi)$ sobrevive ao se derivar em relação a φ duas vezes e tomando $\varphi = 0$. Assim, as correções do fator $a(T)$ são

$$
\begin{aligned}
a(T) = a_0[T - T_{c0}] + \frac{b}{(2\pi)^{D/2}} &\left[\sum_{i=1}^{d} \sum_{n_i=1}^{\infty} \left(\frac{a^{1/2}(T)}{n_i L_i} \right)^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}\left(a^{\frac{1}{2}}(T) n_i L_i \right) + \cdots \right. \\
&+ 2^{m-1} \sum_{i_1=1}^{d-m+1} \cdots \sum_{n_{i_1},\cdots,n_{i_m}=1}^{\infty} \left[\left(\frac{a(T)}{n_{i_1}^2 L_{i_1}^2 + \cdots + n_{i_m}^2 L_{i_m}^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}\left[\left(a(T)[n_{i_1}^2 L_{i_1}^2 + \cdots + n_{i_m}^2 L_{i_m}^2] \right)^{\frac{1}{2}} \right] \\
&\left. + \cdots + 2^{d-1} \sum_{n_1,\cdots,n_d=1}^{\infty} \left[\left(\frac{a(T)}{n_1^2 L_1^2 + \cdots + n_d^2 L_d^2} \right)^{1/2} \right]^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}\left[\left(a(T)[n_1^2 L_1^2 + \cdots + n_d^2 L_d^2] \right)^{\frac{1}{2}} \right] \right],
\end{aligned}
\tag{3.94}
$$

onde T_{c0} é a temeperatura crítica sem compactificação. Na equação anterior usamos $K_\nu(z) = K_{-\nu}(z)$ e uma renormalização por subtração do termo que contém o fator $\Gamma\left(1 - \frac{D}{2}\right)$ (lembremos $s = 1$) já que este termo diverge para todo D par. (No caso D ímpar, embora o termo seja finito, será subtraído por consistência [23]). O termo $a(T)$ depois de compactificar deveria escrever-se como $a(T; L_1, \cdots, L_d)$, por simplicidade escreveremos ele como $a(T)$.

A equação anterior não é uma expressão fechada de $a(T)$; de fato, vemos no lado direito uma infinidade de termos que contém $a(T)$, e uma resolução fechada é praticamente impossível. Aproveitando o fato que o termo $a(T) \to 0$ para $T \to T_c$ (na fronteira crítica) um tratamento da equação se possibilita, em principio, para cada caso particular ($d = 1$, $d = 2$ e $d = 3$).

Caso $d = 1$

Este caso corresponde a filmes; a equação (3.94) é agora ($n_1 = n$ e $L_1 = L$):

$$
a(T) = a_0[T - T_{c0}] + \frac{b}{(2\pi)^{D/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T)}{nL} \right)^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}\left(a^{\frac{1}{2}}(T) nL \right). \tag{3.95}
$$

Como nosso interesse está no comportamento crítico do sistema, temos que tomar o limite $a(T) \to 0^+$, que permite usar o comportamento assintótico da função de Bessel de segundo tipo:

$$K_{\frac{D}{2}-1}\left(a^{\frac{1}{2}}(T)nl\right) \approx \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{D}{2}-1\right)\left(\frac{a^{1/2}(T)nl}{2}\right)^{1-\frac{D}{2}} \qquad ; a(T) \to 0^+, \tag{3.96}$$

levando a

$$a(T) = a_0[T - T_{c0}] + \frac{b}{(2\pi)^{D/2}}\Gamma\left(\frac{D}{2}-1\right)\frac{2^{\frac{D}{2}-1}}{2L^{D-2}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^{D-2}}, \tag{3.97}$$

onde $\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^z}$ é a função zeta de Riemann, a qual é convergente para $\mathrm{Re}(z) > 1$, e admite uma continuação analítica em todo o plano complexo com um desenvolvimento em serie de Laurent ao redor do único polo simples, $z = 1$,

$$\zeta(z) = \frac{1}{z-1} + \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m}{m!}\gamma_m(s-1)^m, \tag{3.98}$$

com γ_m um conjunto de constantes chamadas constantes de Stieltjes, incluindo a conhecida constante de Euler-Macheroni $\gamma_0 \approx 0.5772$. No caso $z \to 1$, temos:

$$\lim_{z\to 1}\zeta(z) = \frac{1}{z-1} + \gamma_0. \tag{3.99}$$

O caso $z = 1$ corresponde a $D = 3$, implicando que as correções do parâmetro $a(T)$ sejam divergentes; assim, um processo de renormalização é necessário sendo alcançado com a subtração da singularidade (termo $\frac{1}{z-1}$ na equação anterior). Considerando $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$, para $D = 3$ (caso físico), obtemos:

$$a(T) = a_0[T - T_c], \tag{3.100}$$

com

$$T_c = T_{c0} - \frac{1}{4\pi}\frac{b\gamma_0}{La_0}. \tag{3.101}$$

Vemos que a temperatura crítica diminui enquanto L decresce, mas não pode diminuir indefinidamente. Assim, vemos que $T_c = 0$ implica uma espessura minima $L_{\mathtt{min}}$ do filme, abaixo do qual não acontece nenhuma transição de fase:

$$L_{\mathtt{min}} = \frac{1}{4\pi}\frac{b\gamma_0}{T_{c0}a_0}. \tag{3.102}$$

Caso $d = 2$

Este caso corresponde a fios infinitamente longos com secção transversa $L_1 \times L_2$: a equação (3.94) se traduz como

$$\begin{aligned} a(T) = a_0[T - T_{c0}] + \frac{b}{(2\pi)^{D/2}} \Bigg[\sum_{n_1=1}^{\infty} \left(\frac{a^{1/2}(T)}{n_1 L_1}\right)^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}\left(a^{1/2}(T) n_1 L_1\right) \\ + \sum_{n_2=1}^{\infty} \left(\frac{a^{1/2}(T)}{n_2 L_2}\right)^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}\left(a^{1/2}(T) n_2 L_2\right) \\ + 2\sum_{n_1=1}^{\infty}\sum_{n_2=1}^{\infty} \left(\left(\frac{a(T)}{n_1^2 L_1^2 + n_2^2 L_2^2}\right)^{1/2}\right)^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}\left(\left(a(T)[n_1^2 L_1^2 + n_2^2 L_2^2]\right)^{1/2}\right)\Bigg]. \end{aligned} \tag{3.103}$$

Repetindo o procedimento anterior, já que perto da temperatura critica $a(T) \to 0$, e usando:

$$K_\nu(z) \approx \frac{1}{2}\Gamma(|\nu|)\left(\frac{z}{2}\right)^{-|\nu|}, \qquad z \to 0, \tag{3.104}$$

obtemos:

$$a(T) = a_0[T - T_{c0}] + \frac{b}{4\pi^{\frac{D}{2}}}\Gamma\left(\frac{D}{2} - 1\right)\left\{\left[\frac{1}{L_1^{D-2}} + \frac{1}{L_2^{D-2}}\right]\zeta(D-2) + 2E_2\left(\frac{D-2}{2}; L_1, L_2\right)\right\}, \tag{3.105}$$

com

$$\zeta(D-2)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^{D-2}}, \qquad E_2\left(\frac{D-2}{2};L_1,L_2\right)=\sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}\frac{1}{[n_1^2L_1^2+n_2^2L_2^2]^{\frac{D-2}{2}}}, \tag{3.106}$$

respectivamente, as funções zeta de Riemann e zeta de Epstein.

No caso da função $\zeta(D-2)$, seguimos o mesmo procedimento do caso $d=1$; em contrapartida, requeremos uma continuação analítica da função de Epstein, já que esta somente converge para $\mathrm{Re}(D)>3$. Uma continuação analítica é conhecida para a função zeta de Hurwitz [24]:

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n^2+q^2)^{\nu}}=-\frac{1}{2q^{2\nu}}+\frac{\sqrt{\pi}}{2q^{2\nu-1}\Gamma(\nu)}\left[\Gamma\left(\nu-\frac{1}{2}\right)+4\sum_{n=1}^{\infty}(\pi q n)^{\nu-\frac{1}{2}}K_{\nu-\frac{1}{2}}(2\pi q n)\right]. \tag{3.107}$$

Vemos que, considerando só uma soma, a função zeta de Epstein contém uma função zeta de Hurwitz. Porém, como temos duas somas (as quais, em princípio, comutam para todo D, incluindo aqueles fornecidos pela continuação analítica), temos duas formas de utilizar a continuação da função zeta de Hurwitz. Para evitar possíveis ambiguidades, consideramos uma expressão simetrizada da função zeta de Epstein (um método usual utilizado em mecânica quântica):

$$\begin{aligned}2E_2\left(\frac{D-2}{2};L_1,L_2\right)&=\sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}\frac{1}{[n_1^2L_1^2+n_2^2L_2^2]^{\frac{D-2}{2}}}+\sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}\frac{1}{[n_2^2L_1^2+n_1^2L_2^2]^{\frac{D-2}{2}}}\\&=\frac{1}{L_2^{D-2}}\sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}\frac{1}{[n_2^2+n_1^2\frac{L_1^2}{L_2^2}]^{\frac{D-2}{2}}}+\frac{1}{L_1^{D-2}}\sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}\frac{1}{[n_2^2+n_1^2\frac{L_2^2}{L_1^2}]^{\frac{D-2}{2}}}.\end{aligned} \tag{3.108}$$

Usando (3.107) nas somas n_2 dos dois termos da expressão anterior, e calculando cuidadosamente, temos:

$$2E_2\left(\frac{D-2}{2};L_1,L_2\right) = -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{L_1^{D-2}}+\frac{1}{L_2^{D-2}}\right]\zeta(D-2)$$
$$+\frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{\Gamma\left(\frac{D-3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{D-2}{2}\right)}\left[\frac{1}{L_1L_2^{D-3}}+\frac{1}{L_2L_1^{D-3}}\right]\zeta(D-3)$$
$$+\frac{2\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{D-2}{2}\right)}W_2\left(\frac{D-3}{2};L_1,L_2\right), \qquad (3.109)$$

com

$$W_2\left(\frac{D-3}{2};L_1,L_2\right) = \sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}\sum_{i=1}^{2}\frac{1}{L_i}\left(\frac{\pi n_i}{L_i\left[\left(\sum_{j=1}^{2}L_j^2n_j^2\right)-L_i^2n_i^2\right]^{1/2}}\right)^{\frac{D-3}{2}}$$
$$\times K_{\frac{D-3}{2}}\left(\frac{2\pi n_i}{L_i}\left[\left(\sum_{j=1}^{2}L_j^2n_j^2\right)-L_i^2n_i^2\right]^{1/2}\right). \qquad (3.110)$$

Introduzindo (3.109) em (3.105) e considerando que os termos com $\zeta(D-2)$ se somam, chegamos a:

$$a(T) = a_0[T-T_{c0}] + \frac{b}{4\pi^{D/2}}\Gamma\left(\frac{D-2}{2}\right)\left\{\frac{1}{2}\left[\frac{1}{L_1^{D-2}}+\frac{1}{L_2^{D-2}}\right]\zeta(D-2)\right.$$
$$\left.+\frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{\Gamma\left(\frac{D-3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{D-2}{2}\right)}\left[\frac{1}{L_1L_2^{D-3}}+\frac{1}{L_2L_1^{D-3}}\right]\zeta(D-3)+\frac{2\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{D-2}{2}\right)}W_2\left(\frac{D-3}{2};L_1,L_2\right)\right\}. \qquad (3.111)$$

Estudemos o caso de interesse $D=3$: aqui vemos duas divergências do tipo $\frac{1}{z}$ para $z\to 0$, as quais subtraem-se mutuamente. Para ver isso em $D\to 3$, usamos:

$$\Gamma\left(\frac{D-3}{2}\right)\to -\gamma_0+\frac{2}{D-3}, \qquad \zeta(D-2)\to \gamma_0+\frac{1}{D-3}, \qquad (3.112)$$

considerando $\Gamma(1/2)=\sqrt{\pi}$ e $\zeta(0)=-1/2$, obtemos no caso $D=3$,

$$a(T) = a_0[T - T_{c0}] + \frac{3\gamma_0 b}{16\pi}\left(\frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2}\right) + \frac{b}{2\pi}W_2(0; L_1, L_2), \tag{3.113}$$

e, portanto, a nova temperatura crítica é

$$T_c = T_{c0} - \frac{3\gamma_0 b}{16\pi a_0}\left(\frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2}\right) - \frac{b}{2\pi a_0}W_2(0; L_1, L_2), \tag{3.114}$$

com

$$W_2(0; L_1, L_2) = \sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}\left[\frac{1}{L_1}K_0\left(\frac{2\pi n_1}{L_1}L_2 n_2\right) + \frac{1}{L_2}K_0\left(\frac{2\pi n_2}{L_2}L_1 n_1\right)\right]. \tag{3.115}$$

É possível encontrar uma expressão para a minima área da secção transversal de fio na qual acontece uma transição de fase. Para isso, simplesmente suponhamos que $L_1 = L_2 = \sqrt{A}$, então, a expressão da temperatura crítica é modificada:

$$T_c = T_{c0} - \frac{b}{\pi a_0\sqrt{A}}\left[\frac{3\gamma_0}{8} + \sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}K_0(2\pi n_1 n_2)\right] = T_{c0} - \frac{b}{\pi a_0\sqrt{A}}C_2. \tag{3.116}$$

com

$$C_2 = \frac{3\gamma_0}{8} + \sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}K_0(2\pi n_1 n_2). \tag{3.117}$$

Para $T_c = 0$, a área mínima é

$$A_{\mathtt{min}} = \left(\frac{bC_2}{\pi a_0 T_{c0}}\right)^2. \tag{3.118}$$

Caso $d = 3$

Este caso corresponde a grãos: usando (3.94) com a aproximação (3.104), temos

$$a(T) = a_0[T - T_{c0}] + \frac{b}{4\pi^{\frac{D}{2}}}\Gamma\left(\frac{D-2}{2}\right)\left\{\sum_{i=1}^{3}\frac{\zeta(D-2)}{L_i^{D-2}} + 2\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=i+1}^{3}E_2\left(\frac{D-2}{2};L_i,L_j\right)\right.$$
$$\left.+4E_3\left(\frac{D-2}{2};L_1,L_2,L_3\right)\right\}, \tag{3.119}$$

onde

$$E_3\left(\frac{D-2}{2};L_1,L_2,L_3\right) = \sum_{n_1,n_2,n_3=1}^{\infty}\frac{1}{[n_1^2L_1^2+n_2^2L_2^2+n_3^2L_3^2]^{\frac{D-2}{2}}}. \tag{3.120}$$

O mesmo procedimento usado no caso $d = 2$ é utilizado. Conhecidas as continuações analíticas das funções $\zeta(D-2)$ e $E_2\left(\frac{D-2}{2};L_i,L_j\right)$, somente precisamos de uma continuação da função $E_3\left(\frac{D-2}{2};L_1,L_2,L_3\right)$ a qual é uma função de Epstein. Assim, uma expressão simetrizada é:

$$\begin{aligned}6E_3\left(\frac{D-2}{2};L_1,L_2,L_3\right) = &\sum_{n_1,n_2,n_3=1}^{\infty}\frac{1}{[n_1^2L_1^2+n_2^2L_2^2+n_3^2L_3^2]^{\frac{D-2}{2}}} + \sum_{n_1,n_2,n_3=1}^{\infty}\frac{1}{[n_1^2L_1^2+n_3^2L_2^2+n_2^2L_3^2]^{\frac{D-2}{2}}}\\ &+\sum_{n_1,n_2,n_3=1}^{\infty}\frac{1}{[n_2^2L_1^2+n_3^2L_2^2+n_1^2L_3^2]^{\frac{D-2}{2}}} + \sum_{n_1,n_2,n_3=1}^{\infty}\frac{1}{[n_2^2L_1^2+n_1^2L_2^2+n_3^2L_3^2]^{\frac{D-2}{2}}}\\ &+\sum_{n_1,n_2,n_3=1}^{\infty}\frac{1}{[n_3^2L_1^2+n_1^2L_2^2+n_2^2L_3^2]^{\frac{D-2}{2}}} + \sum_{n_1,n_2,n_3=1}^{\infty}\frac{1}{[n_3^2L_1^2+n_2^2L_2^2+n_1^2L_3^2]^{\frac{D-2}{2}}},\end{aligned} \tag{3.121}$$

ou, resumidamente

$$6E_3\left(\frac{D-2}{2};L_1,L_2,L_3\right) = \sum_{i,j,k=1}^{3}\sum_{n_1,n_2,n_3=1}^{\infty}\frac{|\epsilon_{ijk}|}{[n_1^2L_i^2+n_2^2L_j^2+n_3^2L_k^2]^{\frac{D-2}{2}}}, \tag{3.122}$$

com ϵ_{ijk} o simbolo de Levi-Civita. Usando a equação (3.107) e calculando detalhadamente, chegamos a uma expressão que pode ser reescrita da seguinte forma:

$$
\begin{aligned}
6E_3\left(\frac{D-2}{2};L_1,L_2,L_3\right) &= -\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=i+1}^{3}E_2\left(\frac{D-2}{2};L_i,L_j\right)\\
&+\sqrt{\pi}\frac{\Gamma\left(\frac{D-3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{D-2}{2}\right)}\frac{|\epsilon_{ijk}|}{L_k}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=i+1}^{3}E_2\left(\frac{D-3}{2};L_i,L_j\right)+\frac{4\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{D-2}{2}\right)}W_3\left(\frac{D-3}{2};L_1,L_2,L_3\right),
\end{aligned}
\tag{3.123}
$$

com

$$
\begin{aligned}
W_3\left(\frac{D-3}{2};L_1,L_2,L_3\right) = \sum_{n_1,n_2,n_3=1}^{\infty}\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{L_i}\left(\frac{\pi n_i}{L_i\left[\left(\sum_{j=1}^{3}L_j^2n_j^2\right)-L_i^2n_i^2\right]^{1/2}}\right)^{\frac{D-3}{2}}\\
\times K_{\frac{D-3}{2}}\left(\frac{2\pi n_i}{L_i}\left[\left(\sum_{j=1}^{3}L_j^2n_j^2\right)-L_i^2n_i^2\right]^{1/2}\right).
\end{aligned}
\tag{3.124}
$$

A função E_2 é conhecida:

$$
\begin{aligned}
E_2\left(\frac{D-m}{2};L_1,L_2\right) &= -\frac{1}{4}\left[\frac{1}{L_1^{D-m}}+\frac{1}{L_2^{D-m}}\right]\zeta(D-m)\\
&+\frac{\sqrt{\pi}}{4}\frac{\Gamma\left(\frac{D-m-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{D-m}{2}\right)}\left[\frac{1}{L_1L_2^{D-m-1}}+\frac{1}{L_2L_1^{D-m-1}}\right]\zeta(D-m-1)\\
&+\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{D-m}{2}\right)}W_2\left(\frac{D-m-1}{2};L_1,L_2\right);
\end{aligned}
\tag{3.125}
$$

em nosso caso com $m=2,3$ e W_2 dado por (3.110). Introduzindo (3.123) em (3.119) e usando (3.125), obtemos as correções do parâmetro $a(T)$:

$$a(T) = a_0[T - T_{c0}] + \frac{b}{4\pi^{\frac{D}{2}}} \left[\frac{1}{3}\Gamma\left(\frac{D-2}{2}\right)\zeta(D-2)\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{L_i^{D-2}} + \frac{4\sqrt{\pi}}{3}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=i+1}^{3} W_2\left(\frac{D-3}{2}; L_i, L_j\right) \right.$$
$$+ \frac{\sqrt{\pi}}{6}\Gamma\left(\frac{D-3}{2}\right)\zeta(D-3)\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=i+1}^{3}\left(\frac{1}{L_iL_j^{D-3}} + \frac{1}{L_jL_i^{D-3}}\right) + \frac{2\pi}{3}\frac{|\epsilon_{ijk}|}{L_k}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=i+1}^{3} W_2\left(\frac{D-4}{2}; L_i, L_j\right)$$
$$\left. + \frac{\pi}{6}\Gamma\left(\frac{D-4}{2}\right)\zeta(D-4)\frac{|\epsilon_{ijk}|}{L_k}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=i+1}^{3}\left(\frac{1}{L_iL_j^{D-4}} + \frac{1}{L_jL_i^{D-4}}\right) + \frac{8\sqrt{\pi}}{3}W_3\left(\frac{D-3}{2}; L_1, L_2, L_3\right)\right]. \tag{3.126}$$

Estudemos o caso $D = 3$, como antes temos duas singularidades do tipo $\frac{1}{z}$, mas elas se cancelam. Para ver isto, usamos (3.112) e $\zeta(0) = 1/2$, $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$, $\Gamma(-1/2) = -2\sqrt{\pi}$, $\zeta(-1) = -1/12$. Fazendo as simplificações correspondentes, obtemos:

$$a(T) = a_0[T - T_{c0}] + \frac{b\gamma_0}{8\pi}\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{L_i} + \frac{b}{144}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=i+1}^{3}|\epsilon_{ijk}|\left(\frac{L_j}{L_iL_k} + \frac{L_i}{L_jL_k}\right)$$
$$+ \frac{b}{3\pi}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=i+1}^{3} W_2\left(0; L_i, L_j\right) + \frac{b}{6\sqrt{\pi}}\frac{|\epsilon_{ijk}|}{L_k}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=i+1}^{3} W_2\left(-1/2; L_i, L_j\right)$$
$$+ \frac{2b}{3\pi}W_3(0; L_1, L_2, L_3). \tag{3.127}$$

É possível encontrar uma expressão em função do volume dos grãos, sempre que sejam cubos. Assim, $L_1 = L_2 = L_3 = L = V^{1/3}$, com V o volume. Portanto, fazendo as mudanças necessárias, a nova temperatura crítica T_c é:

$$T_c = T_{c0} - \frac{b}{24V^{\frac{1}{3}}a_0}\left[1 + \frac{9\gamma_0}{\pi} + \frac{48}{\pi}\left(\sum_{n_1,n_2=1}^{\infty} K_0(2\pi n_1 n_2) + \sum_{n_1,n_2,n_3=1}^{\infty} K_0\left(2\pi n_3(n_1^2 + n_2^2)^{\frac{1}{2}}\right)\right)\right.$$
$$\left. + \frac{12}{\pi}\sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}\frac{e^{-2\pi n_1 n_2}}{n_2}\right] = T_{c0} - \frac{bC_3}{24V^{\frac{1}{3}}a_0} \tag{3.128}$$

com

$$C_3 = 1 + \frac{9\gamma_0}{\pi} + \frac{48}{\pi}\left(\sum_{n_1,n_2=1}^{\infty} K_0(2\pi n_1 n_2) + \sum_{n_1,n_2,n_3=1}^{\infty} K_0\left(2\pi n_3(n_1^2 + n_2^2)^{\frac{1}{2}}\right)\right) + \frac{12}{\pi}\sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}\frac{e^{-2\pi n_1 n_2}}{n_2} \tag{3.129}$$

e, portanto, o volume mínimo na qual a transição acontece é:

$$V_{\mathtt{min}} = \left(\frac{bC_3}{24T_{c0}a_0}\right)^3. \tag{3.130}$$

Os efeitos de tamanho finito na criticalidade são obtidos nos três casos ao obter a curva crítica $T_c(\lambda)$, onde $\lambda = L$ no caso de filmes, $\lambda = \sqrt{A}$ no caso de fios e $\lambda = V^{1/3}$ no caso de grãos. No caso $d = 1$ obtemos que $T_c(1/L)$ é:

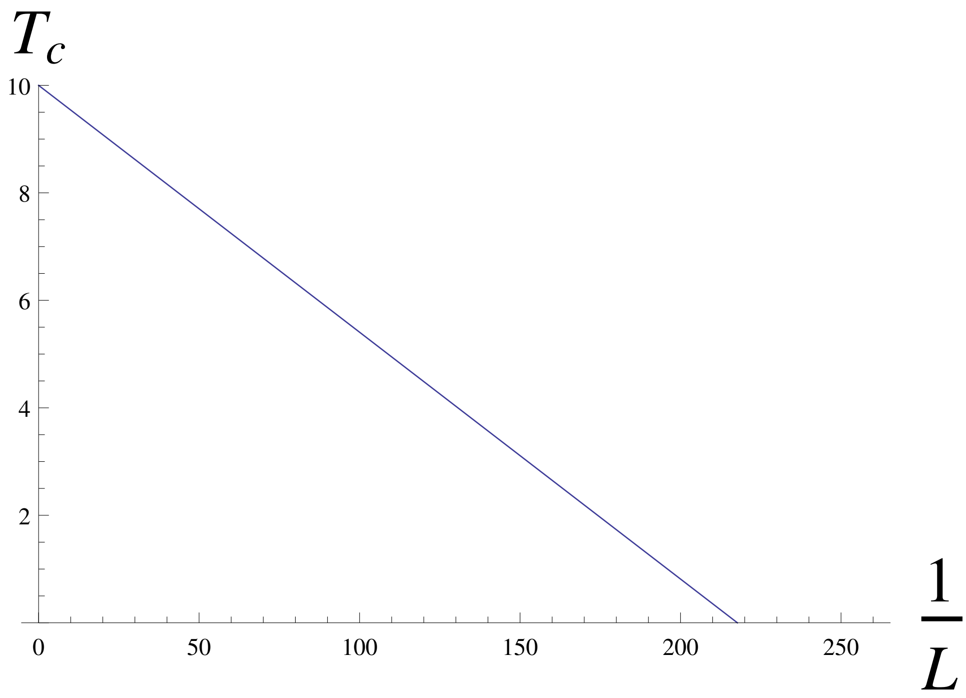

Figura 3.1: Gráfico T_c em função de $1/L$ para $b = 1$ e $T_{c0} = 10$

os gráficos $T_c(1/\sqrt{A})$ e $T_c(1/V^{1/3})$ tem o mesmo comportamento linear. Vemos em todos a existência de um tamnho mínimo abaixo do qual não acontece transição de fase. Os efeitos de tamanho finito deixam de ser relevantes no limite $\lambda \to \infty$, o que corresponde ao limite sem compactificação espacial. Sendo rigurosos o limite sem compactificação deveria obter-se como uma inversão da prescrição de topologias toroidais, por simplicidade e questões de tempo somemente consideraremos o limite $L_i \to \infty$ nas equações, permanecendo em abertos se os dois limites coincidem.

Este capítulo consideró sistematicamente as correções num loop da teoria por um tratamento perturbativo via o potencial efetivo. Em particular, os efeitos de tamanho finito foram introduzidos nas correções do parâmetro $a(T)$, entanto que a temperatura foi introduzida no termo “nu” via a aproximação linear de Ginzburg-Landau no limite sem compactificação. As correções nesse caso não mudam o caráter linear do termo $a(T)$, mas diminuem a temperatura crítica. A aproximação de Landau não é a única forma de introduzir temperatura, tendo em conta que o formalismo em topologias toroidais é uma generalização da prescrição de Matsubara, no seguinte capítulo introduziremos temperatura atraves desta prescrição.

Capítulo 4

Teoria quântica de campos em topologias toroidais

Estudamos na secção 4.1 o caso sem dimensões espaciais compactificadas; entretanto, a secção 4.2 aplica o método no caso de um supercondutor em presença de campo magnético externo constante para o caso de comapactificação da temperatura e de uma coordenada espacial, obtendo o diagrama de fase que caracteriza a criticalidade do sistema.

4.1 Introdução da temperatura no formalismo de Matsubara

Até aqui, somente consideramos a temperatura como um parâmetro externo de nosso modelo, introduzido em conexão daquela aproximação de campo médio, sendo esta a mais simples que fornece uma descrição qualitativa do fenômeno de transição de fase de segunda ordem. Temperatura é, em realidade, um parâmetro bem definido relacionado com a designação de probabilidades aos microestados possíveis de uma multitude de estados equivalentes que conformam o sistema macroscópico em questão. A designação de probabilidades iguais aos estados acessíveis do sistema garante a prevalência do equilíbrio termodinâmico. Só tem sentido falar de temperatura do sistema no equilíbrio ou em relação a este; formulação que, em geral, exclui a consideração do tempo.

Tempo e espaço são duas quantidades relacionadas (embora independentes) na conformação de uma única estrutura a qual pode referir-se como espaço-tempo. O formalismo de Matsubara de tempo imaginario é uma forma consistente de introdução de temperatura em teoria de campos (ver início de secção 1.4), e sua generalização coloca temperatura e coordenadas espaciais compactificadas ao mesmo nível, de fato, o parâmetro $\beta = 1/T$ (com T a temperatura) pode ser considerado como o comprimento de uma das coordenadas compactificadas em (3.93), o que significa que em (3.66) e (3.67) consideramos $L_1 = \beta$. Isto não significa que a equivalência entre tempo imaginário e inverso da temperatura tenha um sentido profundo: a ação na integral de caminho e a função de partição "sumam" sobre todas as possíveis configurações da mesma forma, salvo uma rotação de Wick no argumento da exponencial.

4.1.1 $d = 1$, Introdução da temperatura sem dimensões espaciais compactificadas

A fórmula (3.95) é uma generalização do método de Matsubara de introdução de temperatura, aplicado à compactificação de coordenadas espaciais. Para o caso de Matsubara, de acordo com a interpretação de que temperatura e coordenadas estejam no mesmo marco, suporemos que são idênticas, com a diferença de que o comprimento L da dimensão espacial compactificada corresponderia ao parâmetro $\beta = 1/T$, e sem o termo linear correspondente ao termo de Ginzburg-Landau. Assim, temos:

$$a(T) = a_0 + \frac{b}{(2\pi)^{D/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T)}{n\beta} \right)^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}\left(a^{\frac{1}{2}}(T) n\beta \right). \tag{4.1}$$

Aqui, a_0 é um parâmetro sem aparente significação física; porém, sua forma será vital para tentar reproduzir as características essenciais do parâmetro $a(T)$ envolvido na fórmula (2.5), que distingue a fase na qual se encontra o sistema em questão. Nossa primeira tentativa será considerá-lo como uma constante, com a temperatura introduzida dentro das "correções". Na temperatura crítica, o valor de a_0 deve ser tal que $a(T_c) = 0$. É obvio que nossas considerações só terão significância na fase simétrica $T \to T_c^+$ (na fase antissimétrica o argumento da função de Bessel em (4.1) é imaginario puro). No caso $D = 4$, usando (3.104), para $T \to T_c^+$, obtemos:

$$a_0 = -\frac{b}{(2\pi)^{D/2}} \Gamma\left(\frac{D}{2} - 1\right) \frac{1}{\beta_c^{D-2}} \zeta(D-2) = -\frac{b}{4!} T_c^2. \tag{4.2}$$

Portanto, $a(T)$ satisfaz a seguinte equação:

$$a(T) = -\frac{b}{4!} T_c^2 + \frac{b}{(2\pi)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T)}{n\beta}\right) K_1\left(a^{\frac{1}{2}}(T) n\beta\right). \tag{4.3}$$

Esta é um tipo de equação de gap cuja solução dificilmente pode ser encontrada usando métodos analíticos, mas um estudo de seu comportamento é possível perto da temperatura crítica. Para ver isto, consideremos a derivada de (4.3):

$$\frac{da(T)}{dT} = \frac{b}{4\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{d}{dT}\left(\frac{T a^{\frac{1}{2}}(T)}{n}\right) K_1\left(\frac{a(T)^{\frac{1}{2}} n}{T}\right) + \frac{T a(T)^{\frac{1}{2}}}{n} \frac{d}{dT}\left(K_1\left(\frac{a(T)^{\frac{1}{2}} n}{T}\right)\right)\right\}. \tag{4.4}$$

Utilizando a regra da cadeia e a propriedade

$$\frac{d}{dz} K_1(z) = \frac{1}{z} K_1(z) - K_2(z), \tag{4.5}$$

obtemos:

$$\frac{da(T)}{dT} = \frac{b}{(2\pi)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{da(T)}{dT} \frac{T}{n a^{\frac{1}{2}}(T)} K_1\left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T) n}{T}\right) + \frac{a(T)}{T} K_2\left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T) n}{T}\right) - \frac{1}{2} \frac{da}{dT} K_2\left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T) n}{T}\right)\right\}. \tag{4.6}$$

Analisemos o comportamento desta expressão para $T \to T_c^+$, o que implica um estudo das funções $K_\nu(z)$ para $z \to 0$. Aquela expressão assintótica (3.104) não será de utilidade neste caso, já que não se pode desprezar a contribuição dos outros termos. Para ver isso, usemos uma expressão mais exata em $z \to 0$:

$$\begin{aligned} K_\nu(z) =& \frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\nu-1} \frac{(-1)^l(\nu-l-1)!}{l!}\left(\frac{z}{2}\right)^{2l-\nu} + (-1)^{\nu+1}\left(\ln\frac{z}{2}+\gamma_0\right)\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!(\nu+k)!}\left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2k} \\ &+ \frac{(-1)^n}{2}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!(\nu+k)!}\left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2k}\left(\sum_{m=1}^{k}\frac{1}{m}+\sum_{m=1}^{k+\nu}\frac{1}{m}\right). \end{aligned} \tag{4.7}$$

Nos casos de interesse, os únicos termos com contribuição diferente de zero serão:

$$K_1(z) \approx \frac{1}{z} + \frac{z}{2}\left[\ln\frac{z}{2}+\gamma_0\right] - \frac{z}{4} \tag{4.8}$$

$$K_2(z) \approx \frac{2}{z^2} - \frac{1}{2}. \tag{4.9}$$

Fazendo $z = na^{\frac{1}{2}}(T)/T$, e usando as expressões anteriores em (4.6) chegamos à seguinte equação:

$$\frac{da}{dT}\left[1 - \frac{b}{(8\pi^2)}\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\ln\left(\frac{na^{\frac{1}{2}}(T)}{2T}\right)+\gamma_0\right\}\right] = \frac{bT_c}{12}. \tag{4.10}$$

Tendo em conta que

$$\lim_{T\to T_c^+} \ln\left(\frac{na^{\frac{1}{2}}(T)}{2T}\right) = -\infty, \tag{4.11}$$

obtemos

$$\lim_{T\to T_c^+} \frac{da(T)}{dT} = 0. \tag{4.12}$$

Tentemos ir ainda mais longe, calculemos a segunda derivada de $a(T)$ a partir de (4.6), e usando:

$$\frac{d}{dz}K_2(z) = -\frac{2}{z}K_2(z) - K_1(z), \tag{4.13}$$

obtemos, depois de um longo cálculo:

$$\begin{aligned}\frac{d^2a(T)}{dT^2} = \frac{b}{4\pi^2}\sum_{n=1}^{\infty}\Bigg\{ & \frac{d^2a}{dT^2}\frac{T}{na^{\frac{1}{2}}(T)}K_1\left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T)n}{T}\right) + \frac{a(T)}{T^2}K_2\left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T)n}{T}\right) \\ & + \frac{na^{\frac{3}{2}}(T)}{T^3}K_1\left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T)n}{T}\right) - \frac{na^{\frac{1}{2}}(T)}{(T)^2}\frac{da(T)}{dT}K_1\left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T)n}{T}\right) \\ & - \frac{1}{2}\frac{d^2a(T)}{dT^2}K_2\left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T)n}{T}\right) + \frac{n}{4T}\frac{1}{a^{\frac{1}{2}}(T)}\left(\frac{da(T)}{dT}\right)^2K_1\left(\frac{a^{\frac{1}{2}}(T)n}{T}\right)\Bigg\}. \end{aligned} \tag{4.14}$$

Usando o par de equações (4.8), para calcular o limite $T \to T_c^+$ e (4.12), depois de simplificar, obtemos:

$$\frac{d^2a(T)}{dT^2}\left[-\frac{b}{(8\pi^2)}\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\ln\left(\frac{na^{\frac{1}{2}}(T)}{2T}\right) + \gamma_0\right\}\right] = \frac{b}{4\pi^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{4a(T)}\left(\frac{da(T)}{dT}\right)^2. \tag{4.15}$$

Considerando (4.10), podemos reescrever a equação anterior da seguinte maneira:

$$\frac{d^2a(T)}{dT^2} = \frac{b}{(4\pi)^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{-\left(\frac{bT}{12}\right)^2}{\frac{b^3}{(8\pi)^3}\left(\sum_{n=1}^{\infty}a^{\frac{1}{3}}(T)\left\{\ln\left(\frac{na^{\frac{1}{2}}(T)}{2T}\right)+\gamma_0\right\}\right)^3}, \tag{4.16}$$

já que

$$\lim_{T\to T_c^+} a^{\frac{1}{3}}(T)\ln\left(\frac{na^{\frac{1}{2}}(T)}{2T}\right) = 0^- \tag{4.17}$$

encontramos que

$$\lim_{T\to T_c^+}\frac{d^2a(T)}{dT^2} = \infty. \tag{4.18}$$

A solução $a(T)$ da equação (4.3) não pode ser aproximada linearmente para $T \to T_c$ (como se demonstra, a primeira derivada de $a(T)$ em T_c é nula), sendo assim que ela não recupera a aproximação de Landau neste limite. Isto é razoável no caso que desejemos uma solução de $a(T)$ mais realista; de fato, a aproximação de Landau fornece só uma descrição qualitativa do fenômeno de transição de fase, o que significa que a solução real de $a(T)$ não tem porque corresponder em algum limite com a aproximação de Landau. A causa disto é que a expressão (4.3) é recorrente em $a(T)$; implicando que, se existir sua solução, esta vai além de um cálculo a um loop (aqui implicitamente estamos fazendo a suposição de que a aproximação a um loop está ligada com a aproximação de Landau).

Um parâmetro $a(T)$ linear implica que o expoente crítico associado com o comprimento de côerencia ν seja $1/2$, o qual não é o valor real. De acordo com as propriedades que a solução $a(T)$ (inferidas a partir de (4.3) e que devem ser satisfeitas perto de T_c) deve ter, uma possível forma funcional seria:

$$a(T \to T_c) \propto |T - T_c|^{\mu}, \qquad 1 < \mu < 2, \tag{4.19}$$

com a primeira derivada tendendo a 0 em T_c e a segunda derivada tendendo a infinito.

Teríamos que encontrar uma relação entre o expoente μ e o expoente crítico ν, que depende da dimensionalidade do sistema e do número de componentes que o campo tenha. Não tentaremos esta comparação e sim um possível cálculo numérico do parâmetro μ usando o programa MATHEMATICA para calcular $a(T)$ a partir da fórmula (4.3) até $n = 10000$, $T_c = 10$ e $b = 1$ (figura 4.1). De acordo com estes valores, a melhor função que os aproxima é:

$$a(T) = 3,53677(T - 10)^{1,96818} \tag{4.20}$$

Embora o comportamento obtido não tenha nenhuma ligação aparente com a aproximação de Landau (característica desejável), nossa teoria deveria conter tal aproxi-

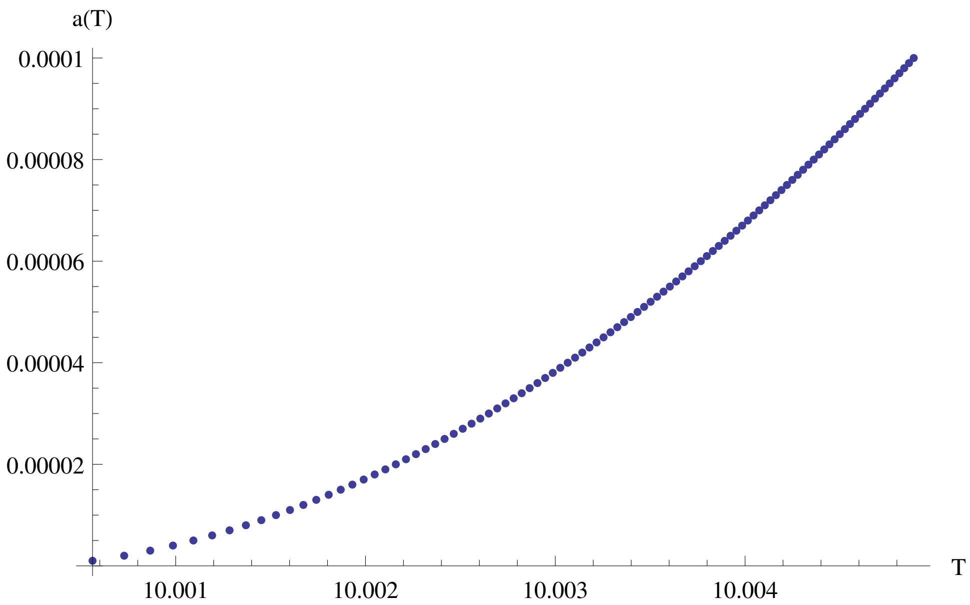

Figura 4.1: Cálculo numérico de $a(T)$ para 100 valores de temperatura $T \in (10,0005; 10,0049)$

mação para o caso de um cálculo só a 1 loop. Porém, tal cálculo presenta complicações neste caso. Para ver isto, a um loop a equação (4.1) modifica-se da seguinte forma:

$$a(T) = a_0 + \frac{b}{(2\pi)^{D/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{a_0^{1/2}}{n\beta} \right)^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1} \left(a_0^{1/2} n\beta \right). \tag{4.21}$$

Se $a_0 > 0$, então, já que $K_\nu(z) > 0$ para $z > 0$, vemos que $a(T)$ não se anula para nenhum valor de T. Em contrapartida, se $a_0 < 0$, o argumento da função K_ν seria imaginário puro e a mesma função $a(T)$ seria uma função a valores complexos: uma hipótese não contida nas formulações convencionais. Como veremos adiante, sob certas condições especificas, este cálculo é possível para o caso supercondutor.

4.2 Aplicações na supercondutividade

4.2.1 Introdução da temperatura à Matsubara para o caso supercondutor a 1 loop e uma dimensão compactificada

As descrições feitas anteriormente são, em princípio, também válidas quando aplicadas a supercondutores perto da fase crítica. Porém, algumas mudanças devem ser efetuadas, tanto no significado físico dos conceitos usados nesta teoria de transição de segunda ordem, como na estrutura mesma de nossas equações: por exemplo, pensando na significação física, o parâmetro de ordem interpreta-se como uma função em intrínseca conexão com a função de onda dos pares de Cooper, caracterizando o estado supercondutor. Do ponto de vista da forma estrutural, o campo magnético não é, neste caso, um campo externo acoplado simplesmente ao parâmetro de ordem, na realidade passa a formar parte dos graus de liberdade de nosso sistema e, em termos exatos, sua flutuações devem ser consideradas dentro da teoria. Numa primeira aproximação, poderíamos ignorar tais flutuações e encarar o campo magnético como um ente externo do sistema, mas, ainda assim, tem como principal consequência a mudança das propriedades do espaço. Neste contexto, pode-se verificar que a densidade hamiltoniana do supercondutor num campo magnético externo constante descrito pelo potencial vetor $\vec{A}(\vec{\mathbf{r}})$ é dada por [25]

$$\int d^D\vec{\mathbf{r}}\,\mathcal{H} = \int d^D\vec{\mathbf{r}}\,\left(D_\mu^\dagger\varphi^* D^\mu\varphi + a_0\varphi^*\varphi + \frac{b}{4}(\varphi^*\varphi)^2\right), \tag{4.22}$$

onde φ é agora um campo escalar complexo, $D_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} - ieA_\mu$, e a carga do eléctron, e $\vec{\mathbf{r}} = (x_1, x_2, \cdots, x_D)$. O termo que corresponde à teoria livre pode ser escrito da seguinte forma:

$$\int d^D\vec{\mathbf{r}}\,\left(D_\mu^\dagger\varphi^* D^\mu\varphi + a_0\varphi^*\varphi\right) \equiv -\int d^D\vec{\mathbf{r}}\,\varphi^*\mathcal{D}\varphi. \tag{4.23}$$

Isto pode comprovar-se facilmente integrando por partes os termos φ^* que são derivados e, como sempre, desprezando os termos de fronteira. Supondo $D = 3$, a seguinte escolha do calibre $\vec{A}(\vec{\mathbf{r}}) = xB\hat{\jmath}$ faz com que o campo magnético seja $\vec{B} = B\hat{z}$. Definindo $\omega = eB$ e generalizando ao caso D-dimensional, obtemos:

$$\mathcal{D} = \nabla^2 - 2i\omega x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - \omega^2 x_1^2 - a_0. \tag{4.24}$$

O operador $\mathcal{D}$ com condições de contorno adequadas sobre os elementos de seu domínio definem um problema de Sturm-Liouville $\mathcal{D}\psi = -E\psi$, o qual, de ter associado como solução um conjunto ortonormal completo de autofunções, define o propagador da teoria livre ou função de Green do sistema:

$$G(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{r}}') = \sum_E \frac{\psi_E^*(\vec{\mathbf{r}})\psi_E(\vec{\mathbf{r}}')}{E}, \tag{4.25}$$

a qual satisfaz:

$$\mathcal{D}G(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{r}}') = -\delta(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}'). \tag{4.26}$$

Formalmente, pode-se verificar (ver apêndice B) que tal conjunto ortonormal completo existe, e é dado por

$$\psi_{l,k,\vec{\mathbf{q}}}(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{\omega^{1/4}}{(2^l l! \sqrt{\pi})^{1/2}} e^{i\vec{\mathbf{q}}.\vec{\mathbf{z}}} e^{i\omega k x_2} e^{-\frac{\omega(x_1-k)^2}{2}} H_l\left(\sqrt{\omega}(x_1 - k)\right), \tag{4.27}$$

com $l = 0, 1, 2, \cdots$, $\vec{\mathbf{q}} \in \mathbb{R}^{D-2}$, $k \in \mathbb{R}$, $\vec{\mathbf{z}} = (x_3, \cdots, x_D)$ e $H_l(z)$ os polinômios de Hermite. Os autovalores associados a este conjunto ortonormal completo são

$$E_{l,\vec{\mathbf{q}}} = \omega(2l + 1) + \vec{\mathbf{q}}^2 + a_0, \tag{4.28}$$

onde os “estados”caraterizados pelo número l são os conhecidos níveis de Landau. Assim, de acordo com (4.25), o propagador do sistema seria

$$G(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}') = \sum_{l=0}^{\infty}\int \frac{d^{D-2}\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^{D-2}}\frac{\omega dk}{2\pi}\frac{\psi^*_{l,k,\vec{\mathbf{q}}}(\vec{\mathbf{r}}')\psi_{l,k,\vec{\mathbf{q}}}(\vec{\mathbf{r}})}{(2l+1)\omega+\vec{\mathbf{q}}^2+a_0}, \tag{4.29}$$

que se pode reescrever como

$$G(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}') = \sum_{l=0}^{\infty}\int \frac{d^{D-2}\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^{D-2}}\frac{\omega dk}{2\pi}\left[\frac{\omega^{1/2}}{(2^l l!\sqrt{\pi})}e^{i\vec{\mathbf{q}}\cdot(\vec{\mathbf{z}}-\vec{\mathbf{z}}')}e^{i\omega k(x_2-x_2')}e^{-\frac{\omega}{2}\left[(x_1-k)^2-(x_1'-k)^2\right]}\right.$$
$$\left.\times\frac{H_l\left(\sqrt{\omega}(x_1-k)\right)H_l\left(\sqrt{\omega}(x_1'-k)\right)}{(2l+1)\omega+\vec{\mathbf{q}}^2+a_0}\right]. \tag{4.30}$$

Nosso interesse no propagador está em que este, no espaço dos momenta, fornece as correções ao parâmetro $a(T)$. Porém, trabalhar com esta expressão é difícil, já que não é invariante translacional, dificultando a procura do propagador no espaço dos momenta. Na realidade, a função de Green associada a $\mathcal{D}$ é única, salvo transformações de calibre $\vec{A}(\vec{\mathbf{r}}) \to \vec{A}(\vec{\mathbf{r}}) + \nabla\theta(\vec{\mathbf{r}})$. O campo escalar φ ante tal transformação muda por uma fase $\varphi(\vec{\mathbf{r}}) \to e^{ie\theta(\vec{\mathbf{r}})}\varphi(\vec{\mathbf{r}})$ e, portanto, o propagador sofre a seguinte modificação:

$$\overline{G}(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}') = \langle 0|T\left[\left(e^{ie\theta(\vec{\mathbf{r}})}\varphi(\vec{\mathbf{r}})\right),\left(e^{ie\theta(\vec{\mathbf{r}})}\varphi(\vec{\mathbf{r}}')\right)^{\dagger}\right]|0\rangle = e^{ie(\theta(\vec{\mathbf{r}})-\theta(\vec{\mathbf{r}}'))}G(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}'). \tag{4.31}$$

Será que existe uma função $\theta(\vec{\mathbf{r}})$ que fez a $\overline{G}(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}')$ ser invariante translacional? Seguindo a análise feita em [26], tal função existe e é

$$\theta(\vec{\mathbf{r}}) = -H\frac{(x_1+x_1')}{2}x_2, \qquad \theta(\vec{\mathbf{r}}') = -H\frac{(x_1+x_1')}{2}x_2'. \tag{4.32}$$

Verifiquemos se tal afirmação é certa, inserindo (4.32) em (4.31), temos

$$\overline{G}(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}') = e^{-i\frac{\omega}{2}(x_1+x_1')(x_2-x_2')}G(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}'). \tag{4.33}$$

Usando agora (4.30), obtemos

$$\overline{G}(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}')=\sum_{l=0}^{\infty}\int\frac{d^{D-2}\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^{D-2}}\frac{\omega dk}{2\pi}\left[\frac{\omega^{1/2}}{(2^l l!\sqrt{\pi})}e^{i\vec{\mathbf{q}}\cdot(\vec{\mathbf{z}}-\vec{\mathbf{z}}')}e^{i\omega(x_2-x_2')\left[k-\frac{x_1+x_1'}{2}\right]}e^{-\frac{\omega}{2}\left[(x_1-k)^2-(x_1'-k)^2\right]}\right.$$
$$\left.\times\frac{H_l\left(\sqrt{\omega}(x_1-k)\right)H_l\left(\sqrt{\omega}(x_1'-k)\right)}{(2l+1)\omega+\vec{\mathbf{q}}^2+a_0}\right]. \tag{4.34}$$

Fazendo a mudança de variável $\overline{k}=k-\frac{x_1+x_1'}{2}$, a qual redefine as variáveis

$$x_1-k=\frac{x_1-x_1'}{2}-\overline{k} \tag{4.35}$$
$$x_1'-k=-\left[\frac{x_1-x_1'}{2}+\overline{k}\right], \tag{4.36}$$

temos:

$$\overline{G}(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}')=\sum_{l=0}^{\infty}\int\frac{d^{D-2}\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^{D-2}}\frac{\omega d\overline{k}}{2\pi}\left[\frac{\omega^{1/2}}{(2^l l!\sqrt{\pi})}e^{i\vec{\mathbf{q}}\cdot(\vec{\mathbf{z}}-\vec{\mathbf{z}}')}e^{i\omega\overline{k}(x_2-x_2')}e^{-\frac{\omega}{2}\left[\left(\frac{x_1-x_1'}{2}-\overline{k}\right)^2-\left(\frac{x_1-x_1'}{2}+\overline{k}\right)^2\right]}\right.$$
$$\left.\times\frac{H_l\left(\sqrt{\omega}\left(\frac{x_1-x_1'}{2}-\overline{k}\right)\right)H_l\left(\sqrt{\omega}\left(-\left[\frac{x_1-x_1'}{2}+\overline{k}\right]\right)\right)}{(2l+1)\omega+\vec{\mathbf{q}}^2+a_0}\right]. \tag{4.37}$$

Por último, simplificando o argumento da terceira exponencial, obtemos

$$\overline{G}(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}')=\sum_{l=0}^{\infty}\int\frac{d^{D-2}\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^{D-2}}\frac{\omega d\overline{k}}{2\pi}\left[\frac{\omega^{1/2}}{(2^l l!\sqrt{\pi})}e^{i\vec{\mathbf{q}}\cdot(\vec{\mathbf{z}}-\vec{\mathbf{z}}')}e^{i\omega\overline{k}(x_2-x_2')}e^{-\frac{\omega}{4}\left[(x_1-x_1')^2+4\overline{k}^2\right]}\right.$$
$$\left.\times\frac{H_l\left(\sqrt{\omega}\left(\frac{x_1-x_1'}{2}-\overline{k}\right)\right)H_l\left(\sqrt{\omega}\left(-\left[\frac{x_1-x_1'}{2}+\overline{k}\right]\right)\right)}{(2l+1)\omega+\vec{\mathbf{q}}^2+a_0}\right]. \tag{4.38}$$

Claramente a ultima expressão é invariante sob translações espaciais $\overline{G}(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}')=\overline{G}(\vec{\mathbf{r}}-\vec{\mathbf{r}}')$ e, portanto, permite separar o propagador original numa parte invariante translacional e outra não-invariante translacional,

$$G(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}') = e^{i\frac{\omega}{2}(x_1+x_1')(x_2-x_2')}\overline{G}(\vec{\mathbf{r}}-\vec{\mathbf{r}}') = e^{i\frac{\omega}{2}(x_1+x_1')(x_2-x_2')}\int \frac{d^D\vec{\mathbf{k}}}{(2\pi)^D}e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot(\vec{\mathbf{r}}-\vec{\mathbf{r}}')}\widetilde{G}(\vec{\mathbf{k}},\omega), \quad (4.39)$$

com $\widetilde{G}(\vec{\mathbf{k}},\omega)$ a transformada de Fourier de $\overline{G}(\vec{\mathbf{r}}-\vec{\mathbf{r}}')$. Fazendo a mudança de variável $z=\sqrt{\omega}d\bar{k}$ e considerando $\vec{\mathbf{r}}=\vec{\mathbf{r}}'$, obtemos:

$$G(\vec{\mathbf{r}},\vec{\mathbf{r}}) = \int \frac{d^D\vec{\mathbf{k}}}{(2\pi)^D}\widetilde{G}(\vec{\mathbf{k}},\omega) = \frac{\omega}{2\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\int \frac{d^{D-2}\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^{D-2}}\frac{1}{(2l+1)\omega+\vec{\mathbf{q}}^2+a_0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{\sqrt{\pi}2^l l!}e^{-z^2}H_l(-z)H_l(-z). \quad (4.40)$$

Já que, devido a que todos os polinômios de Hermite são simétricos ou não simétricos, para todo l temos que:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{\sqrt{\pi}2^l l!}e^{-z^2}H_l(-z)H_l(-z) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{\sqrt{\pi}2^l l!}e^{-z^2}H_l(z)H_l(z) = 1, \quad (4.41)$$

então:

$$\int \frac{d^D\vec{\mathbf{k}}}{(2\pi)^D}\widetilde{G}(\vec{\mathbf{k}},\omega) = \frac{\omega}{2\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\int \frac{d^{D-2}\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^{D-2}}\frac{1}{(2l+1)\omega+\vec{\mathbf{q}}^2+a_0}. \quad (4.42)$$

Isto implica

$$\widetilde{G}(\vec{\mathbf{k}},\omega) = 2\pi\delta(k_1)\delta(k_2)\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\omega}{(2l+1)\omega+\vec{\mathbf{k}}^2+a_0}, \quad (4.43)$$

com $\vec{\mathbf{k}}^2 = k_1^2+k_2^2+\vec{\mathbf{q}}^2$.

Uma vez com a forma do propagador no espaço dos momenta, podemos generalizar o cálculo do parâmetro $a(T)$ do caso ferromagnético a nosso caso. A 1 loop, as conhecidas correções tipo "tadpole" do parâmetro a seriam

$$a = a_0 + \frac{b}{2}\int \frac{d^D\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^D}\frac{1}{\vec{\mathbf{q}}^2+a_0} = a_0 + \frac{b}{2}\int \frac{d^D\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^D}\widetilde{G}(\vec{\mathbf{q}},\omega). \quad (4.44)$$

Prestando atenção a (4.42), vemos que a generalização correspondente a nosso caso é

$$a = a_0 + \frac{b}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{d^{D-2}\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^{D-2}} \frac{\omega}{(2l+1)\omega + \vec{\mathbf{q}}^2 + a_0}. \tag{4.45}$$

É interessante notar que a integração nas $D-2$ dimensões (em vez de nas D dimensões totais), entende-se como uma integração no subespaço no qual o propagador continua conservando sua invariancia translacional; questão vital, já que somente para estes casos é que tem sentido aplicar as regras de Feynman para o cálculo perturbativo. A perda da propriedade do sistema de ser invariante translacional acontece nos mais simples casos do magnetismo clássico: uma partícula carregada num campo magnético aplicado na direção fixa $\hat{z}$ não é afetada pela presença do campo sempre que seu movimento seja em direção paralela ao eixo $\hat{z}$.

Como introduzir temperatura na equação (4.45)? Tentemos com a sugestão descartada no final da seção anterior, à Matsubara, somente a um loop. Como analisamos, a única possibilidade é que a_0, seja negativo, $a_0 = -a_R$, para algum $a_R \in \mathbb{R}^+$. Aqui o procedimento de renormalização será o mesmo que no capítulo anterior resultando em funções de Bessel do tipo K; portanto, o procedimento será válido sempre que

$$(2l+1)\omega - a_R > 0, \qquad \forall\ l. \tag{4.46}$$

Esta condição é satisfeita para o caso em que $\omega > a_R$. Compactifiquemos duas coordenadas das $D-2$ possíveis. Uma corresponderá à temperatura, outra à coordenada espacial associada à direção paralela ao campo magnético. Por propósitos de generalidade, introduzimos também potencial químico μ da forma usual em temperatura finita [13]. Assim, a prescrição de Matsubara generalizada, será

$$\int \frac{dq_\tau}{2\pi} \rightarrow \frac{1}{\beta}\sum_{n_\tau=-\infty}^{\infty}, \qquad q_\tau \rightarrow \frac{2n_\tau\pi}{\beta} - i\mu,$$
$$\int \frac{dq_x}{2\pi} \rightarrow \frac{1}{L}\sum_{n_x=-\infty}^{\infty}, \qquad q_x \rightarrow \frac{2n_x\pi}{L}. \tag{4.47}$$

Introduzindo esta prescrição em (4.45), obtemos

$$a(T) = -a_R + \frac{b}{4\pi}\frac{\omega}{\beta L}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{n_x=-\infty}^{\infty}\sum_{n_\tau=-\infty}^{\infty}\int \frac{d^{D-4}\vec{\mathbf{q}}}{(2\pi)^{D-4}}\frac{1}{\vec{\mathbf{q}}^2 + \frac{4n_x^2\pi^2}{L^2} + \left(\frac{2n_\tau\pi}{\beta} - i\mu\right)^2 + a_l}, \tag{4.48}$$

com $a_l = (2l+1)\omega - a_R$.

Redefinindo alguns dos parâmetros da seguinte forma:

$$q_i = 2\pi q_i' \ ; \alpha_1 = \frac{1}{L} \ ; \alpha_2 = \frac{1}{\beta} \ ; n_x = n_1 \ ; n_\tau = n_2 \ ; c_l^2 = \frac{a_l}{4\pi^2} \ ; \vartheta = \frac{i\mu\beta}{2\pi}, \tag{4.49}$$

obtemos

$$a(T) = -a_R + \frac{b\omega\alpha_1\alpha_2}{(4\pi)^3}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{n_1=-\infty}^{\infty}\sum_{n_2=-\infty}^{\infty}\int d^{D-4}\vec{\mathbf{q}}'\frac{1}{\vec{\mathbf{q}}'^2 + \alpha_1^2 n_1^2 + \alpha_2^2\left(n_2+\vartheta\right)^2 + c_l^2}. \tag{4.50}$$

A última integral é a mesma que em (3.72) no caso $I(1)$; substituindo este resultado, obtemos

$$a(T) = -a_R + \frac{b\omega\alpha_1\alpha_2}{(4\pi)^3}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{n_1=-\infty}^{\infty}\sum_{n_2=-\infty}^{\infty}\pi^{\frac{D-4}{2}}\left(\alpha_1^2 n_1^2 + \alpha_2^2\left(n_2+\vartheta\right)^2 + c_l^2\right)^{\frac{D-4}{2}-1}\Gamma\left(1 - \frac{D-4}{2}\right), \tag{4.51}$$

a qual pode-se reescrever

$$a(T) = -a_R + \frac{b\omega\pi^{\frac{D-4}{2}-3}}{64\beta L}\Gamma\left(1-\frac{D-4}{2}\right)\sum_{l=0}^{\infty} Z_2^{c_l^2}\left(1-\frac{D-4}{2};\alpha_1^2,\alpha_2^2;0,\vartheta\right), \quad (4.52)$$

com $Z_2^{c_l^2}$ uma função zeta de Epstein-Hurwitz, a qual é definida como

$$Z_2^{c_l^2}\left(1-\frac{D-4}{2};\alpha_1^2,\alpha_2^2;0,\vartheta\right) = \sum_{n_1=-\infty}^{\infty}\sum_{n_2=-\infty}^{\infty}\frac{1}{\left(\alpha_1^2 n_1^2 + \alpha_2^2\left(n_2+\vartheta\right)^2 + c_l^2\right)^{1-\frac{D-4}{2}}}. \quad (4.53)$$

O tratamento efetuado para a função $A_d^{c^2}(\nu,\alpha_i)$ em (3.77) pode generalizar-se para funções zeta do tipo Epstein-Hurwitz (ver apêndice C), admitindo uma extensão em todo o plano complexo:

$$\begin{aligned} Z_2^{c_l^2}\left(1-\frac{D-4}{2};\alpha_1^2,\alpha_2^2;0,\vartheta\right) &= \frac{\pi(c_l^2)^{\frac{D-4}{2}}}{\alpha_1\alpha_2}\frac{\Gamma\left(\frac{4-D}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{6-D}{2}\right)} + \frac{4\pi^{\frac{6-D}{2}}|c_l|^{\frac{D-4}{2}}}{\alpha_1\alpha_2\Gamma\left(\frac{6-D}{2}\right)}\left[\sum_{n_1=1}^{\infty}\left(\frac{n_1}{\alpha_1}\right)^{\frac{4-D}{2}} K_{\frac{4-D}{2}}\left(\frac{2\pi n_1 c_l}{\alpha_1}\right)\right. \\ &+ \sum_{n_2=1}^{\infty}\cos(2\pi n_2\vartheta)\left(\frac{n_2}{\alpha_2}\right)^{\frac{4-D}{2}} K_{\frac{4-D}{2}}\left(\frac{2\pi n_2 c_l}{\alpha_2}\right) \\ &\left. +2\sum_{n_1,n_2=1}^{\infty}\cos(2\pi n_2\vartheta)\left(\left(\frac{n_1^2}{\alpha_1^2}+\frac{n_2^2}{\alpha_2^2}\right)^{1/2}\right)^{\frac{4-D}{2}} K_{\frac{4-D}{2}}\left(2\pi c_l\left(\frac{n_1^2}{\alpha_1^2}+\frac{n_2^2}{\alpha_2^2}\right)^{1/2}\right)\right]. \end{aligned} \quad (4.54)$$

A função gama do denominador é cancelada pela função gama do segundo termo de $a(T)$ em (4.52) quando fazemos a substitução. Entretanto, a função $\Gamma((4-D)/2)$ é singular para $D \geq 4$; portanto, como de costume, renormalizamos a $Z_2^{c_l^2}$ subtraindo seu primeiro termo. Com estas modificações, e voltando às variáveis originais, obtemos

$$
\begin{aligned}
a(T) = &- a_R + \frac{b\omega}{(4\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} |c_l|^{\frac{D-4}{2}} \left[\sum_{n_1=1}^{\infty} (n_1 L)^{\frac{4-D}{2}} K_{\frac{4-D}{2}} (2\pi n_1 c_l L) \right. \\
&+ \sum_{n_2=1}^{\infty} \cosh\left(\frac{n_2\mu}{T}\right) \left(\frac{n_2}{T}\right)^{\frac{4-D}{2}} K_{\frac{4-D}{2}} \left(\frac{2\pi n_2 c_l}{T}\right) \\
&\left. +2 \sum_{n_1,n_2=1}^{\infty} \cosh\left(\frac{n_2\mu}{T}\right) \left(\left(n_1^2 L^2 + \frac{n_2^2}{T^2}\right)^{1/2}\right)^{\frac{4-D}{2}} K_{\frac{4-D}{2}} \left(2\pi c_l \left(n_1^2 L^2 + \frac{n_2^2}{T^2}\right)^{1/2}\right) \right].
\end{aligned}
\tag{4.55}
$$

a_R é, em princípio, uma constante positiva arbitrária, que pode servir para deixar os parâmetros de nosso modelo adimensionais (em unidades naturais). Se definirmos

$$
t = \frac{T}{a_R^{1/2}}; \quad \lambda = a_R^{1/2} L; \quad \gamma = \frac{\mu}{a_R^{1/2}}; \quad \delta = \frac{\omega}{a_R}, \tag{4.56}
$$

e dividindo (4.55) por a_R, chegamos a

$$
\begin{aligned}
\frac{a(T)}{a_R} = &-1 + \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D-4}{2}}} \frac{b\delta}{(4\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\sqrt{(2l+1)\delta - 1}}{n_1\lambda} \right)^{\frac{D-4}{2}} K_{\frac{4-D}{2}} \left(n_1\lambda\sqrt{(2l+1)\delta-1}\right) \right. \\
&+ \sum_{n_2=1}^{\infty} \cosh\left(\frac{n_2\gamma}{t}\right) \left(\frac{t\sqrt{(2l+1)\delta-1}}{n_2} \right)^{\frac{D-4}{2}} K_{\frac{4-D}{2}} \left(\frac{n_2}{t}\sqrt{(2l+1)\delta-1}\right) \\
&\left. +2 \sum_{n_1,n_2=1}^{\infty} \cosh\left(\frac{n_2\gamma}{t}\right) \left(\left[\frac{(2l+1)\delta-1}{n_1^2\lambda^2 + \frac{n_2^2}{t^2}} \right]^{1/2} \right)^{\frac{D-4}{2}} K_{\frac{4-D}{2}} \left(\left[[(2l+1)\delta - 1] \left(n_1^2\lambda^2 + \frac{n_2^2}{t^2}\right) \right]^{1/2} \right) \right\}.
\end{aligned}
\tag{4.57}
$$

A condição $\omega > a_R$ implica $\delta > 1$, para que o nosso cálculo tenha sentido. A última expressão não é estritamente adimensional, já que não fizemos a correspondente mudança da constante de acoplamento b. Mas, para o casso de nosso interesse ($D = 4$), ela é por si só adimensional. A expressão pode reescrever-se da seguinte maneira:

$$\frac{a(T)}{a_R} = -1 + \mathcal{K}\left(t, \lambda, \gamma, \delta\right). \tag{4.58}$$

Portanto, na criticalidade ($a(T_c)$) teremos

$$\mathcal{K}\left(t_c, \lambda, \gamma, \delta\right) = 1. \tag{4.59}$$

A relação anterior se simplifica para o caso $D = 4$, sendo escrita como

$$\begin{aligned} 1 =& \frac{b\delta}{(4\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} K_0\left(n_1 \lambda \sqrt{(2l+1)\delta - 1}\right) + \sum_{n_2=1}^{\infty} \cosh\left(\frac{n_2\gamma}{t_c}\right) K_0\left(\frac{n_2}{t_c}\sqrt{(2l+1)\delta-1}\right) \right. \\ & \left. +2 \sum_{n_1,n_2=1}^{\infty} \cosh\left(\frac{n_2\gamma}{t_c}\right) K_0\left(\left[[(2l+1)\delta - 1]\left(n_1^2\lambda^2 + \frac{n_2^2}{t_c^2}\right)\right]^{1/2}\right)\right\}. \end{aligned} \tag{4.60}$$

Uma última restrição, aplicada sobre o potencial químico γ, deve ser considerada no estudo desta equação para $t_c \to 0$. Para tal caso, teremos que os produtos de cossenos hiperbólicos e as funções K_0 possuem o seguinte comportamento assintótico em $t_c \to 0$ (argumento tendendo a infinito)

$$\cosh\left(\frac{n_2\gamma}{t_c}\right) K_0\left(\frac{n_2}{t_c}\sqrt{(2l+1)\delta-1}\right) \approx \frac{e^{\frac{n_2}{t_c}\gamma}}{2}\left(\frac{\pi t_c}{2n_2\sqrt{(2l+1)\delta-1}}\right)^{1/2} e^{-\frac{n_2}{t_c}\sqrt{(2l+1)\delta-1}}, \tag{4.61}$$

que é convergente quando

$$\gamma < \sqrt{(2l+1)\delta - 1}, \tag{4.62}$$

o que estritamente acontece, para todo l, sempre que

$$\gamma < \sqrt{\delta - 1}. \tag{4.63}$$

Fixando os valores dos parâmetros: campo magnético $\delta = 100$, constante de acoplamento $b = 1$, para quatro valores de potencial químico γ ($\{\gamma = 0$; delgado$\}$,$\{\gamma = 3$; delgado tracejado$\}$,$\{\gamma = 6$, grosso$\}$,$\{\gamma = 9$; grosso tracejado$\}$), a partir da equação (4.60), obtemos o gráfico de temperatura crítica t_c em função do inverso do comprimento reduzido $1/\lambda$ (sendo todas as somas truncadas para $l = n_1 = n_2 = 15$) apresentado na figura 4.2.

Vemos como o gráfico delgado ($\gamma = 0$) na (figura 4.2) é simétrico com respeito à troca dos eixos t_c e $1/\lambda$, enquanto que a presença de potencial químico γ faz com que essa simetria seja perdida. Mas todos os gráficos têm associada a mesma quantidade $1/\lambda \approx 11,7612$ quando $t_c \to 0$. Tal valor do inverso do comprimento reduzido é máximo, o que implica a existência de um mínimo comprimento do sistema L_{min}, atingido quando $t_c \to 0$, sendo independente do potencial químico.

Fixemos nossa atenção só no caso $\gamma = 0$, para $1/\lambda$ pequeno (o que significa λ grande): temos que a temperatura crítica é independente do comprimento λ do sistema (ver figura(4.2)), tomando o valor constante $t_{c0} = 11,7612$. Fisicamente, isto implica que, para uma espessura do filme o suficientemente grande, não vemos nenhum efeito de tamanho finito sobre o filme supercondutor.

A diminuição da temperatura crítica ao diminuir a espessura do filme é também uma caraterística qualitativa de todos os filmes supercondutores comprovada por experiências [27], [28], levando à existência de um comprimento mínimo, abaixo do qual não acontece a transição supercondutora.

Nossa tentativa inicial de ignorar as flutuações do campo magnético numa primeira aproximação, restringe-nos de inserir o campo magnético em nosso estudo da criticalidade a partir da equação (4.60); de fato, no limite $\lambda \to \infty$, tomando o comportamento assintótico da função de Bessel K_0 no primeiro e terceiro termo ($K_0(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}$ para $z \to \infty$), vemos que estes são desprezíveis com respeito ao segundo termo. O estudo da criticalidade limita-se então a

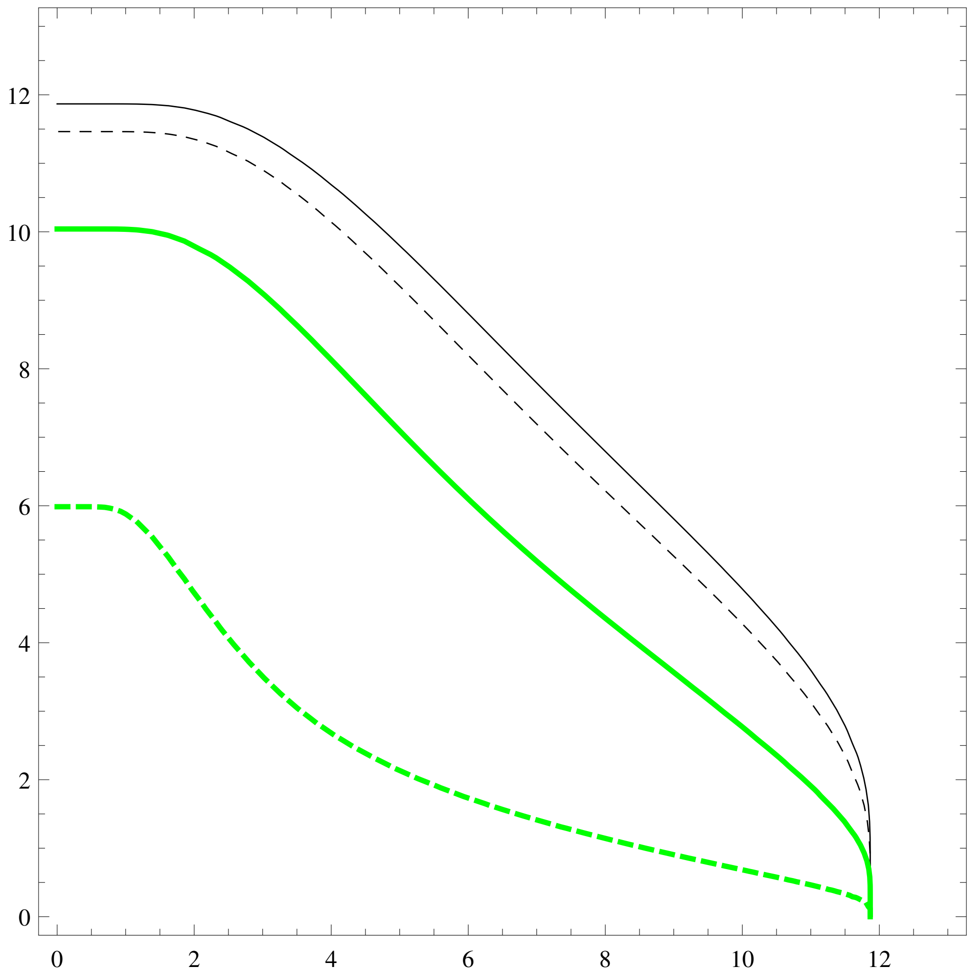

Figura 4.2: Gráfico t_c em função de $1/\lambda$ para diferentes γ ($\{\gamma = 0$; delgado$\}$,$\{\gamma = 3$; delgado tracejado $\}$,$\{\gamma = 6$, grosso$\}$,$\{\gamma = 9$; grosso tracejado$\}$) e $\delta = 100$.

$$1 = \frac{b\delta}{(4\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n_2=1}^{\infty} K_0 \left(\frac{n_2}{t_c} \sqrt{(2l+1)\delta - 1} \right). \tag{4.64}$$

Aqui, como em (4.60), podemos analisar os valores de δ e t_c que satisfazem a igualdade. O resultado obtido (para $b = 1$) é que a temperatura crítica decresce conforme aumenta o campo magnético e, a partir de $\delta \approx 30$, a temperatura crítica volta a aumentar (figura 4.3). Isto não corresponde com a experiência, já que campos magnéticos maiores que um campo crítico destroem a supercondutividade (embora, campos menores que o crítico afetem a temperatura crítica diminuindo-a [2]). Porém, a equação (4.64) fornece o valor de temperatura t_{c0} (no caso $\delta = 100$, obtemos o valor $t_{c0} = 11,7612$).

Sendo o campo magnético externo H e a temperatura T_{c0}, dados experimentais (em nosso modelo expressos em unidades naturais), em princípio poderiam fornecer alguma informação sobre aquele parâmetro a_R, dando seu melhor valor que se ajusta com a experiência. Assim, o possível valor de a_R seria obtido da solução da seguinte equação:

$$a_R = \frac{b\omega}{(4\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n_2=1}^{\infty} K_0 \left(\frac{n_2}{T_{c0}} \sqrt{(2l+1)\omega - a_R} \right), \tag{4.65}$$

onde ω, T_{c0} e b são conhecidos. Portanto, inserindo este valor a_R na equação (4.60) com o comprimento de filme L como dado experimental, poderíamos encontrar a nova temperatura crítica da solução da seguinte equação:

$$\begin{aligned} a_R = & \frac{b\omega}{(4\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} K_0 \left(L n_1 \sqrt{(2l+1)\omega - a_R} \right) + \sum_{n_2=1}^{\infty} K_0 \left(\frac{n_2}{T_c} \sqrt{(2l+1)\omega - a_R} \right) \right. \\ & \left. + 2 \sum_{n_1,n_2=1}^{\infty} K_0 \left(\left[[(2l+1)\omega - a_R] \left(L^2 n_1^2 + \frac{n_2^2}{T_c^2} \right) \right]^{1/2} \right) \right\}. \end{aligned} \tag{4.66}$$

As unidades de a_R são as mesmas que as unidades de ω, as quais são

$$[a_R] = [\omega] = [e][B] = [M] \frac{[L]}{[\text{tempo}]^2} \frac{[\text{tempo}]}{[L]} = \frac{[M]}{[\text{tempo}]} = [M]^2, \tag{4.67}$$

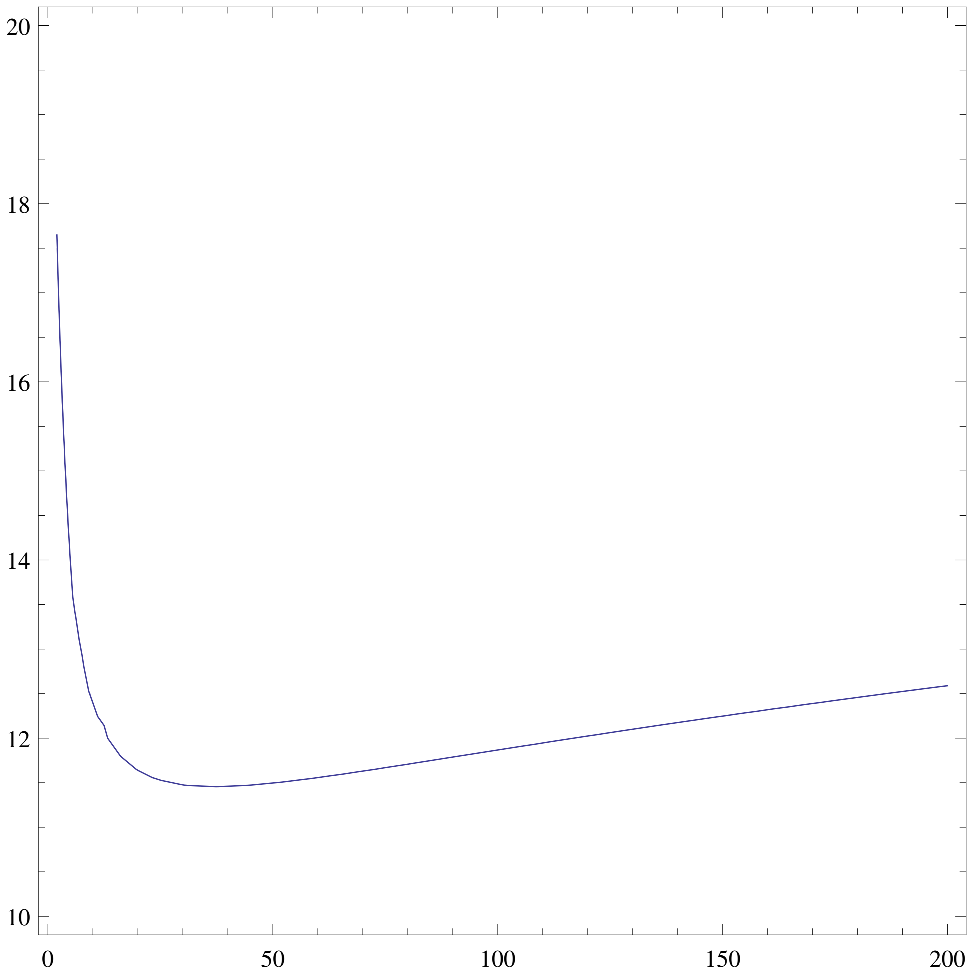

Figura 4.3: Gráfico de t_c em função de δ para $b = 1$ e $\lambda \to \infty$.

onde $[M]$,$[L]$ e [tempo] são as unidades de massa, comprimento e tempo, respectivamente. Alem disso, $[L] = [\text{tempo}] = [M]^{-1}$ em unidades naturais, o que implica que as quantidades t e λ definidas em (4.56) são realmente adimensionais em unidades naturais.

Por último, estudemos a ligação de nosso modelo com a teoria de Ginzburg-Landau para os casos sem correções de tamanho finito. Fazendo o limite $t \to t_c$, vemos que uma aproximação linear da curva $\widetilde{a}(t) = a(t)/a_R$ é possivel. No caso $\lambda \to \infty$, só temos que derivar em relação de t a seguinte expressão:

$$\widetilde{a}(t) = -1 + \frac{b\delta}{(4\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n_2=1}^{\infty} K_0 \left(\frac{n_2}{t} \sqrt{(2l+1)\delta - 1} \right), \tag{4.68}$$

e cálcula-la em $t = t_{c0}$. Para o caso com efeitos de tamanho finito, temos que derivar também em relação a t a seguinte equação ($\gamma = 0$):

$$\begin{aligned} \widetilde{a}(t) = & -1 + \frac{b\delta}{(4\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} K_0 \left(n_1 \lambda \sqrt{(2l+1)\delta - 1} \right) + \sum_{n_2=1}^{\infty} K_0 \left(\frac{n_2}{t} \sqrt{(2l+1)\delta - 1} \right) \right. \\ & \left. +2 \sum_{n_1, n_2 = 1}^{\infty} K_0 \left(\left[[(2l+1)\delta - 1] \left(n_1^2 \lambda^2 + \frac{n_2^2}{t^2} \right) \right]^{1/2} \right) \right\}, \end{aligned} \tag{4.69}$$

e calcular na correspondente $t = t_c$; nos dois casos, a aproximação de Landau é dada por

$$\widetilde{a}(t) = \left[\frac{d\widetilde{a}(t)}{dt} \right]_{t=t_c} (t - t_c) = t_c \left[\frac{d\widetilde{a}(t)}{dt} \right]_{t=t_c} \left(\frac{t}{t_c} - 1 \right) = a_0 \left[\frac{t}{t_c} - 1 \right], \tag{4.70}$$

onde a_0 é uma constante que depende da temperatura crítica em questão (ver as inclinações das retas (figura 4.4)). Para o caso $\delta = 100$, com os valores sem compactificação de $t_{c0} = 11,7612$, e com compactificação os valores $t_c = 2,62027$ e $\lambda = 0,08696$, obtemos os gráficos correspondentes $a(t)/a_R$ em função de t (figura 4.4). O comprimento

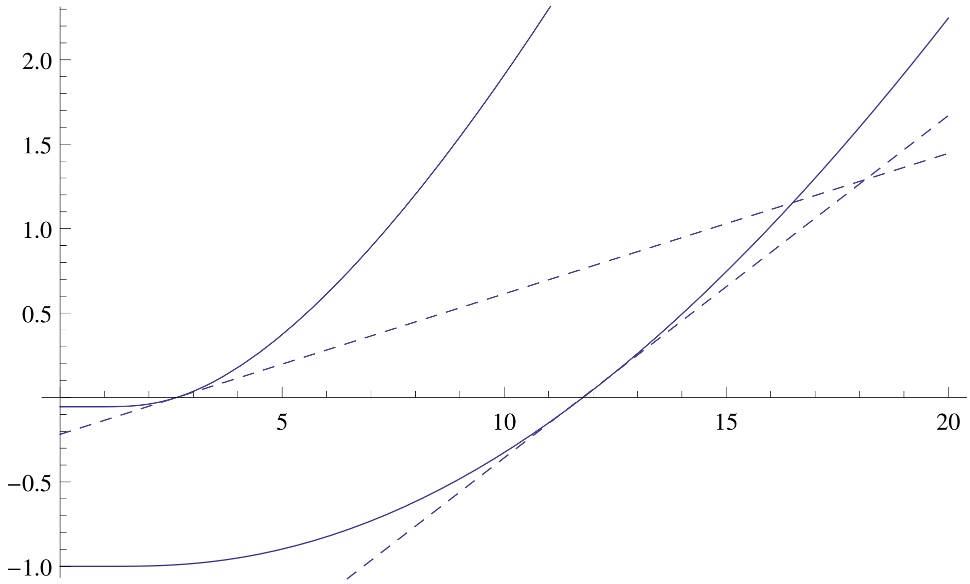

Figura 4.4: Gráficos de $a(t)/a_R$ em função de t com $\delta = 100$ para $t_c = 2,62027$, $\lambda = 0,08696$ (izquerda); e $t_{c0} = 11,7612$ (direita). As retas a traços são as correspondes aproxomações lineais em t_c

do λ filme não só altera o valor de t_c, também altera a "constante"a_0.

Como vimos na secção anterior, a temperatura crítica de filmes supercondutores decresce ao diminuir a espessura do filme. Na literatura, não existe acordo entre as possíveis causas de tal fenômeno, havendo diferentes hipóteses que tentam explicar esta supressão [28],[27]; algumas de natureza microscópica. Em particular, T_c é uma quantidade que é diferente em filmes de diferente composição. Então, cabe aqui perguntar: será esta supressão da temperatura com relação à espessura do filme um fenômeno universal?.

Neste sentido, nossa descrição em nenhum momento involucra algum aspeito microscópico da supercondutividade, sendo uma descrição universal. Porém, uma comparação entre teoria e experimento torna-se necessária, implicando uma conexão com quantidades físicas microscópicas. As referencias [29] e [30] são também estudos do tipo universal, mas feitos no contexto da teoria de Ginzburg-Landau (3.48). O método de comparação teórico-experimental deve ser semelhante ao destas referências, mas precisamos dos dados referentes ao campo magnético externo. [28] é a unica referencia que faz menção a valores de campo magnético externo H, nosso modelo depende do campo magnético B; assim, é necessário conhecer as relações constitutivas do material supercondutor. Por questões de tempo, não tentaremos semelhante análise neste momento, permanecendo também em aberto o procedimento indicado para introduzir no modelo as quantidades físicas relevantes em unidades do sistema internacional de unidades, para comparações diretas com dados experimentais.

Capítulo 5

Conclusões

A aproximação de Landau pode ser considerada como a primeira aproximação possível que contenha as caraterísticas qualitativas de uma transição de fase de segunda ordem. Sendo uma teoria fenomenológica, se encontra em intrínseca conexão com a aproximação de campo médio, a qual é a aproximação mais simples possível que parte do ponto de vista microscópico, ignorando as flutuações microscópicas do sistema. Estabelecendo como hipótese que as duas aproximações são equivalentes, a aproximação de Landau ignora as flutuações estatísticas microscópicas.

No caso ferromagnético demonstra-se experimentalmente que as flutuações estatísticas são relevantes; mostrando, ao se comparar teoria e experimento, que a aproximação de Landau é uma grosseira estimativa do comportamento crítico do sistema. O caso supercondutor é muito particular, já que aqui, a aproximação de Landau concorda (na criticalidade) excelentemente com os dados experimentais. De fato, Gorkov [8] demonstrou que a teoria microscópica BCS, em sua forma convencional, implica a teoria fenomenológica de Ginzburg-Landau [31]. Isto não é uma contradição: de fato, só significa que as flutuações microscópicas são verdadeiramente desprezíveis no caso supercondutor. Teoricamente, existe o critério de Landau, o qual diz que as flutuações são certamente desprezíveis sempre que $\tau \gg \tau_G$, onde $\tau = \frac{T}{T_c} - 1$ e τ_G é uma constante que depende do material supercondutor em questão.

Tipicamente, $\tau_G \approx 10^{-14}$ para supercondutores tipo I, e $\tau_G \approx 10^{-6}$ para supercondutores tipo II. Em particular, 10^{-6} é um domínio de resolução na medição da temperatura, por agora inatingível com os atuais equipamentos experimentais (existem também evidências de que, neste domínio de temperaturas, a transição em questão seja realmente de primeira ordem; porém, para fins práticos, é valido dizer que é de segunda ordem) e, portanto, pode-se afirmar que a teoria de Ginzburg-Landau é a teoria crítica dos supercondutores.

Cabe aqui a seguinte dúvida: Para que calcular as flutuações, se só dariam correções da teoria num grau de resolução experimental ainda não existente? Em sua forma corrente, a teoria de Ginzburg-Landau não considera possíveis efeitos de tamanho finito, existindo forte evidência experimental de mudança da temperatura crítica em filmes de espessura pequena (quanto mais delgado seja o filme de um tipo de material supercondutor, menor será sua temperatura crítica). Isto pode ser interpretado da seguinte forma: é possível que neste caso as flutuações voltem a ser relevantes.

O formalismo de teoria quântica de campos em topologias toroidais é um método consistente de introdução destes efeitos no potencial efetivo, o qual representa as flutuações do sistema na primeira ordem de aproximação. A "equivalência" tamanho finito-compactificação com condições de contorno periódicas é suposta em materiais com uma geometria específica (filmes, fios e grãos, sendo as dimensões pequenas as que correspondem com a compactificação) e, no caso de um supercondutor em presença de um campo magnético externo, é suposta somente em filmes (em vista da quebra de simetria translacional que o campo magnético externo fornece). Duas abordagens são em princípio possíveis no caso supercondutor:

1. Introdução da temperatura à Ginzburg-Landau e compactificação de uma coordenada espacial ($\mathbb{S}^1 \times \mathbb{R}^2$ com $\mathbb{S}^1$ a coordenada compactificada). O método é apresentado a partir da equação (3.95), e obtém-se uma solução fechada linear em T_c em função de $1/L$ (3.101). Ele é aplicado especificamente no caso supercondutor e comparado com experimentos nas referências [29] e [30], obtendo-se boa concordância, e predizendo a existência de um comprimento mínimo abaixo do qual não ocorre transição.

2. Introdução da temperatura à Matsubara e compactificação de uma coordenada espacial ($\mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1 \times \mathbb{R}^2$, com $\mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1$ a temperatura e a dimensão compactificada). Embora continue em aberto na equação (4.60) (com $\gamma = 0$) a relação das quantidades físicas reduzidas t, λ, δ, e b em relação às correspondentes unidades físicas no sistema internacional de unidades; obtemos desta equação, por cálculo numérico, o comportamento qualitativo de diminuição da temperatura crítica quando a espessura do filme decresce (figura 4.2), e a existência de um comprimento mínimo abaixo do qual não acontece transição. Na figura 4.2, vemos um comportamento em t_c não linear em $1/\lambda$, diferente do tratamento à Ginzburg-Landau presente em (3.101). Se introduzimos o potencial químico via a prescrição de Matsubara, obtemos que o comportamento da curva muda para diferentes valores do potencial químico γ (mantendo o campo magnético δ constante), mas o comprimento mínimo (na qual $t_c = 0$) mantém-se constante ao variar γ.

   Já que ignoramos nos cálculos das correções em (4.45) as próprias flutuações do campo magnético externo, é imprópria a inserção deste no estudo da criticalidade. De fato, no limite $\lambda \to \infty$ (o que em princípio corresponderia ao limite da teoria original de Ginzburg-Landau), ao resolver numericamente a equação (4.64) em $\delta(t_c)$, não obtemos o comportamento crítico do campo magnético obtido experimentalmente [2]. Porém, fixado o campo magnético ω ($\delta = \omega/a_R$) e no limite $\lambda \to \infty$, conhecida T_{c0} como dado experimental, a resolução de (4.65) permitiria, em princípio, conhecer a constante a_R. Uma vez encontrada a_R (que tem as mesmas unidades de ω), o seguinte passo seria inseri-la em (4.60) com todas as outras quantidades físicas em unidades SI e comparar diretamente com os dados experimentais. Não conhecemos uma forma consistente de se introduzir as unidades SI, questão que fica em aberto.

Da figura 4.2, vemos que para λ maior que algum λ_0, temos que t_c toma o valor máximo t_{c0}, o que significa que os efeitos de tamanho finito na criticalidade deixam de ser importantes para espessuras maiores que uma espessura *finita* λ_0.

Uma última consideração de caráter geral: na figura 4.4, vemos que a forma de $a(T)$ perto da temperatura crítica recupera o comportamento linear que corresponderia à teoria de Ginzburg-Landau, sendo esta uma descrição que, além de descrever o limite linear da teoria, toma em conta os efeitos da extensão espacial finita do sistema nos aspectos da criticalidade. É uma formulação que depende intrinsecamente da geometria do material, continuando em aberto como poderia generalizar-se no caso de geometria gerais. O termo $a(T)$, corresponde ao temo m^2 usual em teoria quântica de campos e, em nosso caso, sua adição a

$$\mathcal{H}_{GL}(\nabla\varphi(\vec{\mathbf{r}}), \varphi(\vec{\mathbf{r}})) = \frac{1}{2}\nabla\varphi(\vec{\mathbf{r}}) \cdot \nabla\varphi(\vec{\mathbf{r}}) + \frac{1}{2!}a(T)\varphi^2(\vec{\mathbf{r}}) + \frac{1}{4!}b\varphi^4(\vec{\mathbf{r}}). \tag{5.1}$$

descreve o fenômeno de transição de fase. A procura por $a(T)$ neste trabalho é feita via correções renormalizadas a um loop de um termo “nu”. No caso de Ginzburg-Landau, este termo “nu”é $a_0[T - T_c]$, o qual contém a temperatura. Nas correções, é indiferente introduzir o termo nu ou o próprio $a(T)$, já que estamos interessados na criticalidade ($T \to T_c$) e ambos termos anulam-se, levando ao mesmo resultado. No caso de topologias toroidais, o termo nu é, em princípio, uma constante independente da temperatura e a introdução nas correções do termo “nu” ou da própria função $a(T)$

produz resultados diferentes. Na seção 4.2, trabalhamos com o termo nu nas correções, e pode-se dizer com propriedade que este cálculo é a um loop. Porém, na seção 4.1 introduzimos nas correções o próprio $a(T)$, levando a uma equação recorrente (4.1), a qual pode-se interpretar como uma equação com termos em loops de ordens superiores. Aqui, o interessante é que não se obtém a aproximação de Landau em nenhum limite, mudando os expoentes críticos da teoria. Existem cálculos [31] em loops até ordem 5, dos expoentes críticos na teoria geral ϕ^4. Guardarão nossos resultados alguma relação com aqueles? Mudam os efeitos de tamanho finito do sistema o valor dos expoentes críticos? Todas estas questões sugerem uma possível extensão de nosso trabalho.

Apêndice A

Equação (3.83) implica (3.87)

Seja

$$T_1(t;\alpha_i) = -\frac{1}{2} + \left(\frac{\pi}{\alpha_i^2 t}\right)^{1/2}\left[\frac{1}{2} + S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2 t}\right)\right], \tag{A.1}$$

então (3.83) é idêntica a (3.87) sempre que:

$$\begin{aligned}
&1 + 2\sum_{i=1}^{d} T_1(\alpha_i;t) + \cdots + 2^m \sum_{i_1=1}^{d-m+1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d} T_1(\alpha_{i_1};t)\cdots T_1(\alpha_{i_m};t) + \cdots \\
&+ 2^d T_1(\alpha_1;t)\cdots T_1(\alpha_d;t) = \frac{\pi^{d/2}}{t^{d/2}\alpha_1\cdots\alpha_d}\left[1 + 2\sum_{i=1}^{d} S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2 t}\right) + \cdots\right. \\
&\left. 2^m \sum_{i_1=1}^{d-m+1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d} S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_{i_1}^2 t}\right)\cdots S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_{i_m}^2 t}\right) + \cdots + 2^d\prod_{i=1}^{d} S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2 t}\right)\right].
\end{aligned} \tag{A.2}$$

Demostremos (A.2), primeiro redefinamos a equação $T_1(t;\alpha_i) = T_1(t;a_i) = -\frac{1}{2} + a_i$, onde

$$a_i = \left(\frac{\pi}{\alpha_i^2 t}\right)^{1/2}\left[\frac{1}{2} + S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2 t}\right)\right]. \tag{A.3}$$

Desenvolvamos cada termo do lado esquerdo de (A.2)

Termo 0

$$1 = \binom{d}{0} \tag{A.4}$$

Termo 1

$$2\sum_{i=1}^{d} T_1(a_i;t) = -\sum_{i=1}^{d}(1) + 2\sum_{i=1}^{d} a_i = -d + 2\sum_{i=1}^{d} a_i = -\binom{d}{1} + 2\binom{d-1}{0}\sum_{i=1}^{d} a_i \tag{A.5}$$

a expressão tem sentido para cada $d \in \mathbb{N}$, onde $\binom{m}{n} = \frac{m!}{n!(m-n)!}$

Termo 2

$$2^2\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d} T_1(a_i;t)T_1(a_j;t) = \sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d}(1) - 2\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d}(a_i + a_j) + 2^2\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d} a_i a_j \tag{A.6}$$

Determinemos cada termo da equação anterior:

1)

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d}(1) =& \sum_{j=2}^{d}(1) + \sum_{j=3}^{d}(1) + \cdots + \sum_{j=d-1}^{d}(1) + (1)\\ =&(d-1) + (d-2) + (d-3) + \cdots + [d-(d-2)] + [d-(d-1)]\\ =&d(d-1) - \sum_{n=1}^{d-1} n = d(d-1) - \frac{d(d-1)}{2} = \frac{d(d-1)}{2} = \binom{d}{2}\end{aligned} \tag{A.7}$$

2)

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d} a_i =& \sum_{j=2}^{d} a_1 + \sum_{j=3}^{d} a_2 + \sum_{j=4}^{d} a_3 + \cdots + \sum_{j=d-1}^{d} a_{d-2} + a_{d-1}\\ =&(d-1)a_1 + (d-2)a_2 + (d-3)a_3 + \cdots + [d-(d-2)]\, a_{d-2} + a_{d-1},\end{aligned} \tag{A.8}$$

e

$$\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d} a_j = \sum_{j=2}^{d} a_j + \sum_{j=3}^{d} a_j + \sum_{j=4}^{d} a_j + \cdots + \sum_{j=d-1}^{d} a_j + a_d$$

$$=(a_2 + a_3 + \cdots + a_d) + (a_3 + a_4 + \cdots + a_d) + \cdots + (a_{d-1} + a_d) + a_d \tag{A.9}$$

$$=a_2 + 2a_3 + 3a_4 + \cdots + (d-3)a_{d-2} + (d-2)a_{d-1} + (d-1)a_d \tag{A.10}$$

somando (A.8) com (A.10), obtemos:

$$\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d} (a_i + a_j) = (d-1)\sum_{i=1}^{d} a_i \tag{A.11}$$

Portanto, (A.6) pode ser escrito assim:

$$2^2 \sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d} T_1(a_i;t)T_1(a_j;t) = \binom{d}{2} - 2\binom{d-1}{1}\sum_{i=1}^{d} a_i + \binom{d-2}{0}\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d} a_i a_j \tag{A.12}$$

A expressão anterior tem sentido no caso de d natural e $d \geq 2$.

A partir da forma das formulas (A.4),(A.5) e (A.12) é claro que pode-se tentar uma demostração por indução para o caso geral do termo N-esimo ($N \leq d$).

Termo N **(**$2 < N \leq d$**)**

Suponhamos que o termo m do lado esquerdo da expressão (A.2) possa ser reescrito assim:

$$
\begin{aligned}
2^m \sum_{i_1=1}^{d-m+1} \sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2} \cdots \sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d} \prod_{r=1}^{m} T(a_{i_r},t) = {} & (-1)^m \binom{d}{m} + 2(-1)^{m-1}\binom{d-1}{m-1}\sum_{i_1=1}^{d} a_{i_1} \\
& + 2^2(-1)^{m-2}\binom{d-2}{m-2}\sum_{i_1=1}^{d-1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d} a_{i_1}a_{i_2} + \cdots \\
& + 2^{m-1}(-1)^{m-(m-1)}\binom{d-(m-1)}{m-(m-1)}\sum_{i_1=1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_{m-1}=i_{m-2}+1}^{d}\prod_{r=1}^{m-1} a_{i_r} \\
& + 2^m(-1)^{m-m}\binom{d-m}{0}\sum_{i_1=1}^{d-m+1}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}\prod_{r=1}^{m} a_{i_r}
\end{aligned} \tag{A.13}
$$

Demonstremos por indução que também é válido escrever todos os termo da mesma forma, ou equivalentemente, se para m é certo, então é válido no caso $m+1$. Seja o termo $m+1$ em questão:

$$
\begin{aligned}
2^{m+1} \sum_{i_1=1}^{d-(m+1)+1} \sum_{i_2=i_1+1}^{d-(m+1)+2} \cdots \sum_{i_{m+1}=i_m+1}^{d} \prod_{r=1}^{m+1} T(a_{i_r},t) &= \sum_{i_1=1}^{d-m} 2T(a_{i_1},t) \\
& \quad \times \left[2^m \sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+1} \cdots \sum_{i_{m+1}=i_m+1}^{d} \prod_{r=2}^{m+1} T(a_{i_r},t) \right] \\
&= \sum_{i_1=1}^{d-m} (2a_{i_1}-1)\mathcal{T}_{i_1} = 2\sum_{i_1=1}^{d-m} a_i \mathcal{T}_{i_1} - \sum_{i_1=1}^{d-m} \mathcal{T}_{i_1}
\end{aligned} \tag{A.14}
$$

onde

$$
\mathcal{T}_{i_1} = 2^m \sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+1} \sum_{i_3=i_2+1}^{d-m+2} \cdots \sum_{i_{m+1}=i_m+1}^{d} \prod_{r=2}^{m+1} T(a_{i_r},t) \tag{A.15}
$$

É obvio que a equação (A.13) pode ser utilizada na formula (A.15), a qual é reescrita assim:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{T}_{i_1} =& (-1)^m \binom{d-i_1}{m} + 2(-1)^{m-1}\binom{d-i_1-1}{m-1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d} a_{i_2} \\
&+ 2^2(-1)^{m-2}\binom{d-i_1-2}{m-2}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-1}\sum_{i_3=i_2+1}^{d} a_{i_2}a_{i_3} + \cdots \\
&+ 2^{m-1}(-1)^{m-(m-1)}\binom{d-i_1-(m-1)}{1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}\prod_{r=2}^{m} a_{i_r} \\
&+ 2^m(1)^{m-m}\binom{d-i_1-m}{0}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+1}\cdots\sum_{i_{m+1}=i_m+1}^{d}\prod_{r=2}^{m+1} a_{i_r}
\end{aligned}
\tag{A.16}
$$

podemos inserir (A.16) em cada $\mathcal{T}_{i_1}$ presentes nos dois termos finais de (A.14), agrupando por termos que contém $2^0, 2^1, \cdots, 2^m, 2^{m+1}$; obtemos:

$$
\begin{aligned}
2\sum_{i_1=1}^{d-m} a_i\mathcal{T}_{i_1} =& (-1)^m 2\left[\binom{d-1}{m}a_1 + \binom{d-2}{m}a_2 + \cdots + \binom{m+1}{m}a_{d-m-1} + a_{d-m}\right] \\
&+ (-1)^{m-1}2^2\left[\binom{d-2}{m-1}a_1\sum_{i_2=2}^{d} a_{i_2} + \binom{d-3}{m-1}a_2\sum_{i_2=3}^{d} a_{i_2} + \cdots + \binom{m}{m-1}a_{d-m-1}\sum_{i_2=d-m}^{d} a_{i_2}\right. \\
&\qquad \left. + a_{d-m}\sum_{i_2=d-m+1}^{d} a_{i_2}\right] + \cdots \\
&+ (-1)2^m\left[\binom{d-m}{1}a_1\sum_{i_2=2}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}\prod_{r=2}^{m} a_{i_r} + \binom{d-m-1}{1}a_2\sum_{i_2=3}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}\prod_{r=2}^{m} a_{i_r}\right. \\
&\left. + \cdots + \binom{2}{1}a_{d-m-1}\sum_{i_2=d-m}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}\prod_{r=2}^{m} a_{i_r} + a_{d-m}\sum_{i_2=d-m+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}\prod_{r=2}^{m} a_{i_r}\right] \\
&+ 2^{m+1}\left[\sum_{i_1=1}^{d-m}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+1}\cdots\sum_{i_{m+1}=i_m+1}^{d}\prod_{r=1}^{m+1} a_{i_r}\right],
\end{aligned}
\tag{A.17}
$$

e o segundo termo é:

$$
\begin{aligned}
-\sum_{i_1=1}^{d-m}\mathcal{T}_{i_1} =&(-1)^{m+1}\left[\binom{d-1}{m}+\binom{d-2}{m}+\cdots+\binom{m+1}{m}+\binom{m}{m}\right]\\
&+(-1)^{m}2\left[\binom{d-2}{m-1}a_2+\left\{\binom{d-2}{m-1}+\binom{d-3}{m-1}\right\}a_3+\cdots\right.\\
&\qquad+\left\{\binom{d-2}{m-1}+\binom{d-3}{m-1}+\cdots+\binom{m}{m-1}\right\}a_{d-m}\\
&\qquad\left.+\left\{\binom{d-2}{m-1}+\binom{d-3}{m-1}+\cdots+\binom{m-1}{m-1}\right\}\sum_{i_1=d-m+1}^{d}a_{i_1}\right]\\
&+(-1)^{m-1}2^2\left[\binom{d-3}{m-2}a_2\sum_{i_2=3}^{d}a_{i_2}+\left\{\binom{d-3}{m-2}+\binom{d-4}{m-2}\right\}a_3\sum_{i_2=4}^{d}a_{i_2}+\cdots\right.\\
&\qquad+\left\{\binom{d-3}{m-2}+\binom{d-4}{m-2}+\cdots+\binom{m-1}{m-2}\right\}a_{d-m}\sum_{i_2=d-m+1}^{d}a_{i_2}\\
&\qquad\left.+\left\{\binom{d-3}{m-2}+\binom{d-4}{m-2}+\cdots+\binom{m-2}{m-2}\right\}\sum_{i_1=d-m+1}^{d-1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d}a_{i_1}a_{i_2}\right]+\cdots\\
&+(-1)2^m\left[a_2\sum_{i_2=3}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}\prod_{r=2}^{m}a_{i_r}+2a_3\sum_{i_2=4}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}\prod_{r=2}^{m}a_{i_r}+\cdots\right.\\
&\qquad\left.+(d-m-1)a_{d-m}\sum_{i_2=d-m+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}\prod_{r=2}^{m}a_{i_r}+(d-m)a_{d-m+1}\cdots a_d\right].
\end{aligned}
\tag{A.18}
$$

Somando as relações (A.17) e (A.18), e usando as seguintes propriedades dos números combinatórios para $a > b$ (a segunda recorrentemente):

$$
\binom{a+1}{b+1}=\binom{a}{b}+\binom{a-1}{b}+\binom{a-2}{b}+\cdots+\binom{b+1}{b}+\binom{b}{b} \tag{A.19}
$$

$$
\binom{a+1}{b}=\binom{a}{b}+\binom{a}{b-1} \tag{A.20}
$$

obtemos:

$$2\sum_{i_1=1}^{d-m} a_i \mathcal{T}_{i_1} - \sum_{i_1=1}^{d-m} \mathcal{T}_{i_1} = (-1)^{m+1}\binom{d}{m+1} + 2(-1)^m \binom{d-1}{m} \sum_{i_1=1}^{d} a_{i_1}$$
$$+ 2^2(-1)^{m-1}\binom{d-2}{m-1} \sum_{i_1=1}^{d-1} \sum_{i_2=i_1+1}^{d} a_{i_1} a_{i_2} + \cdots$$
$$+ 2^m(-1)^1 \binom{d-m}{1} \sum_{i_1=1}^{d-(m+1)+2} \sum_{i_2=i_1+1}^{d-(m+1)+3} \cdots \sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d} \prod_{r=1}^{m} a_{i_r}$$
$$+ 2^{m+1}\binom{d-(m+1)}{0} \sum_{i_1=1}^{d-(m+1)+1} \sum_{i_2=i_1+1}^{d-(m+1)+2} \cdots \sum_{i_{m+1}=i_m+1}^{d} \prod_{r=1}^{m+1} a_{i_r} \tag{A.21}$$

mas esta é a fórmula (A.13) para o caso $m \to m+1$. Assim, (A.13) é valida para todo $m \in \{0, 1, \cdots, d-1, d\}$.

Uma vez com todos os termos, podemos inserir-los diretamente no lado esquerdo da equação (A.2), obtendo:

$$1 + 2\sum_{i=1}^{d} T_1(\alpha_i; t) + \cdots + 2^m \sum_{i_1=1}^{d-m+1} \sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2} \cdots \sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d} T_1(\alpha_{i_1}; t) \cdots T_1(\alpha_{i_m}; t) + \cdots$$
$$+ 2^d T_1(\alpha_1; t) \cdots T_1(\alpha_d; t) = \left[\sum_{n=0}^{d} (-1)^n \binom{d}{n} + 2\sum_{n=0}^{d-1} (-1)^n \binom{d-1}{n} \sum_{i_1=1}^{d} a_{i_1} \right.$$
$$+2^2 \sum_{n=0}^{d-2} (-1)^n \binom{d-2}{n} \sum_{i_1=1}^{d-1} \sum_{i_2=1_1+1}^{d} a_{i_1} a_{i_2} + \cdots + 2^{d-1} \sum_{n=0}^{1} \binom{1}{n} \sum_{i_1=1}^{2} \sum_{i_2=i_1+1}^{3} \cdots \sum_{i_{d-1}=i_{d-2}+1}^{d} \prod_{r=1}^{d-1} a_{i_r}$$
$$\left. +2^d \prod_{r=1}^{d} a_r \right] \tag{A.22}$$

Porém, temos a seguinte propriedade:

$$\sum_{n=0}^{a} (-1)^n \binom{a}{n} = 0 \tag{A.23}$$

assim

$$1+2\sum_{i=1}^{d}T_1(\alpha_i;t)+\cdots+2^m\sum_{i_1=1}^{d-m+1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}T_1(\alpha_{i_1};t)\cdots T_1(\alpha_{i_m};t)+\cdots$$
$$+2^dT_1(\alpha_1;t)\cdots T_1(\alpha_d;t)=2^d\prod_{r=1}^{d}a_r \tag{A.24}$$

e usando (A.3) pode verificar-se facilmente que:

$$2^d\prod_{r=1}^{d}a_r=\frac{\pi^{d/2}}{t^{d/2}\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_d}\left[1+2\sum_{i=1}^{d}S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2t}\right)+2^2\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d}S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2t}\right)S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_j^2t}\right)+\cdots\right.$$
$$\left.+2^m\sum_{i_1=1}^{d-m+1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d}S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_{i_1}^2t}\right)\cdots S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_{i_m}^2t}\right)+\cdots+2^d\prod_{i=1}^{d}S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2t}\right)\right] \tag{A.25}$$

Apêndice B

O problema de Sturm-Liouville do operador (4.24)

Seja o seguinte operador diferencial $\mathcal{D}$

$$\mathcal{D} = \nabla^2 - 2i\omega x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - \omega^2 x_1^2 - a_0 \tag{B.1}$$

com a notação estabelecida na equação (4.24), calculemos formalmente as autofunções e os autovalores de tal operador ($\mathcal{D}\psi_E = -E\psi_E$). Separemos variáveis:

$$\psi(x_1, \cdots, x_D) = X_1(x_1)X_2(x_2)\cdots X_D(x_D) \tag{B.2}$$

substituindo na equação de autovalores e, depois de algum cálculo, obtemos:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{X_1}\frac{\partial^2 X_1}{\partial x_1^2} + \frac{1}{X_2}\left[\frac{\partial^2 X_2}{\partial x_2^2} - 2i\omega x_1 \frac{\partial X_2}{\partial x_2}\right] \\ &+ \frac{1}{X_3}\frac{\partial^2 X_3}{\partial x_3^2} + \frac{1}{X_4}\frac{\partial^2 X_4}{\partial x_4^2} + \cdots + \frac{1}{X_D}\frac{\partial^2 X_D}{\partial x_D^2} + (E - \omega^2 x_1^2 - a_0) = 0, \end{aligned} \tag{B.3}$$

para o caso $m \in \{3, \cdots, D\}$ proporemos

$$\frac{1}{X_m}\frac{\partial^2 X_m}{\partial x_m^2} = -q_m^2 \tag{B.4}$$

cuja solução vem dada por

$$X_m(x_m) = Ae^{iq_m x_m} \tag{B.5}$$

A é uma constante qualquer. Com a subsequente modificação, temos que a equação (B.3) transforma-se em

$$\begin{aligned} &\frac{1}{X_1X_2}\left[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right]X_1X_2 \\ &-\frac{2i\omega x_1}{X_1X_2}\frac{\partial(X_1X_2)}{\partial X_2}+(E-\omega^2x_1^2-a_0)-\mathbf{q}^2=0 \end{aligned} \tag{B.6}$$

onde $\mathbf{q}^2 = \mathbf{q}_3^2 + \cdots + \mathbf{q}_D^2$. Uma forma de desacoplar as variáveis x_1 e x_2 da última equação diferencial seria propor como solução $X_2(x_2) = e^{i\omega k x_2}$; onde, em princípio, k é uma constante real qualquer ($k \in \mathbb{R}$). Fazendo esta mudança, a equação em x_1 que devemos resolver é simplesmente:

$$\frac{d^2X_1}{dx_1^2} - \omega^2(x_1-k)^2X_1 + (E-\mathbf{q}^2-a_0)X_1 = 0 \tag{B.7}$$

definindo $\overline{x} = x_1 - k$ e $\overline{E} = E - \mathbf{q}^2 - a_0$, obtemos

$$\frac{d^2X_1(\overline{x})}{d\overline{x}^2} + (\overline{E} - \omega^2\overline{x}^2) = 0. \tag{B.8}$$

Se reescrevemos a função $X_1(\overline{x})$ como

$$X_1(\overline{x}) = e^{-\omega\frac{\overline{x}}{2}}\upsilon(\overline{x}) \tag{B.9}$$

então chegamos à equação de Hermite, da qual conhecemos suas soluções. Para ver isto introduzimos em (B.7) a modificação anterior, obtendo:

$$\frac{d^2\upsilon(\overline{x})}{d\overline{x}^2} - 2\omega\overline{x}\frac{d\upsilon(\overline{x})}{d\overline{x}} + (\overline{E}-\omega)\upsilon(\overline{x}) = 0 \tag{B.10}$$

Por último, fazendo a mudança $\xi = \overline{x}\sqrt{\omega}$, e definindo

$$l = \frac{\overline{E}}{2\omega} - \frac{1}{2} \tag{B.11}$$

chegamos à equação de Hermite:

$$\frac{d^2\upsilon(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{d\upsilon(\xi)}{d\xi} + 2l\upsilon(\xi) = 0. \tag{B.12}$$

Vemos que $l = 0, 1, 2, \cdots$ define um problema de Sturm-Liouville autoadjunto com soluções (normalizadas):

$$\upsilon(\overline{x}) = \frac{\omega^{1/4}}{(2^n n!\sqrt{\pi})^{1/2}} H_l(\overline{x}\sqrt{\omega}). \tag{B.13}$$

onde H_l são os polinômios de Hermite. Usando $\overline{E} = E - \mathbf{q}^2 - a_0$ em (B.11), temos:

$$E = (2l+1)\omega + \mathbf{q}^2 + a_0 \tag{B.14}$$

e voltando todas as mudanças de variáveis e redefinições até (B.2), obtemos o seguinte conjunto completo de autofunções:

$$\psi_{n,k,\mathbf{q}}(\mathbf{x}) = \frac{\omega^{1/4}}{(2^n n!\sqrt{\pi})^{1/2}} e^{i\mathbf{q}.\mathbf{z}} e^{i\omega k x_2} e^{-\omega\frac{(x_1-k)^2}{2}} H_l\left(\sqrt{\omega}(x_1 - k)\right) \tag{B.15}$$

onde $\mathbf{z} = (x_3, \cdots, x_D)$, $k \in \mathbb{R}$ e $l = 0, 1, 2, \cdots$

Apêndice C

Extensão analítica da função Zeta de Epstein-Hurwitz

O agrupamento de termos efetuado na equação (3.78) tem a desvantagem de introduzir uma grande quantidade de termos espúrios, os quais ao final dos cálculos cancelam-se entre si (ver apêndice A). Um procedimento equivalente mais simples pode ser feito, e será aplicado no caso generalizado de funções Zeta de Eptein-Hurwitz:

$$Z_d^{c^2}\left(\nu;\alpha_1^2,\cdots,\alpha_d^2;\vartheta_1,\cdots,\vartheta_d\right)=\sum_{n_1,\cdots,n_d=-\infty}^{\infty}\big(\alpha_1^2(n_1+\vartheta_1)^2+\alpha_2^2(n_2+\vartheta_2)^2+\cdots$$
$$+\alpha_d^2(n_d+\vartheta_d)^2+c^2\big)^{-\nu}. \qquad \text{(C.1)}$$

Utilizando (3.80) diretamente na equação anterior, obtemos:

$$Z_d^{c^2}\left(\nu;\alpha_i^2;\vartheta_i\right)=\frac{1}{\Gamma(\nu)}\int_0^{\infty}dte^{-tc^2}t^{\nu-1}\sum_{n_1,n_2,\cdots,n_d=-\infty}^{\infty}e^{-t\left(\alpha_1^2(n_1+\vartheta_1)^2+\alpha_2^2(n_2+\vartheta_2)^2+\cdots+\alpha_d^2(n_d+\vartheta_d)^2\right)} \qquad \text{(C.2)}$$

$$=\frac{1}{\Gamma(\nu)}\int_0^{\infty}dte^{-tc^2}t^{\nu-1}\sum_{n_1=-\infty}^{\infty}e^{-t\alpha_1^2(n_1+\vartheta_1)^2}\cdots\sum_{n_d=-\infty}^{\infty}e^{-t\alpha_d^2(n_d+\vartheta_d)^2}. \qquad \text{(C.3)}$$

Centremos a nossa atenção no termo m-ésimo dos produtos de somas de exponenciais da equação anterior:

$$\sum_{n_m=-\infty}^{\infty} e^{-t\alpha_m^2(n_m+\vartheta_m)^2} = \sum_{n_m=-\infty}^{\infty} e^{-t\alpha_m^2\left(n_m^2+2n_m\vartheta_m+\vartheta_m^2\right)} = e^{-t\alpha_m^2\vartheta_m^2} \sum_{n_m=-\infty}^{\infty} e^{-(t\alpha_m^2)n_m^2+2\pi i\left(\frac{t\alpha_m^2 i\vartheta_m}{\pi}\right)n_m} \tag{C.4}$$

Usando (3.84), com as correspondentes identificações, obtemos:

$$\begin{aligned}\sum_{n_m=-\infty}^{\infty} e^{-t\alpha_m^2(n_m+\vartheta_m)^2} =& e^{-t\alpha_m^2\vartheta_m^2}\left(\frac{\pi}{t\alpha_m^2}\right)^{1/2} \sum_{n_m=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2}{t\alpha_m^2}\left(n_m-\frac{t\alpha_m^2 i\vartheta_m}{\pi}\right)^2} \\ =& \left(\frac{\pi}{t\alpha_m^2}\right)^{1/2} \sum_{n_m=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n_m^2}{t\alpha_m^2}+2\pi i\vartheta_m n_m} \equiv I_m \end{aligned} \tag{C.5}$$

centremos a nossa atenção na somatória anterior

$$\begin{aligned}\sum_{n_m=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n_m^2}{t\alpha_m^2}+2\pi i\vartheta_m n_m} =& 1+\sum_{n_m=-\infty}^{-1} e^{-\frac{\pi^2 n_m^2}{t\alpha_m^2}+2\pi i\vartheta_m n_m} + \sum_{n_m=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n_m^2}{t\alpha_m^2}+2\pi i\vartheta_m n_m} \\ =& 1+\sum_{n_m=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n_m^2}{t\alpha_m^2}}\left[e^{2\pi i\vartheta_m n_m}+e^{-2\pi i\vartheta_m n_m}\right] \\ =& 1+2\sum_{n_m=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n_m^2}{t\alpha_m^2}}\cos(2\pi\vartheta_m n_m). \end{aligned} \tag{C.6}$$

Agora definamos:

$$S\left(\frac{\pi^2}{t\alpha_m^2};\vartheta_m\right) = \sum_{n_m=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n_m^2}{t\alpha_m^2}}\cos(2\pi\vartheta_m n_m) \tag{C.7}$$

então

$$\prod_{m=1}^{d}\sum_{n_m=-\infty}^{\infty} e^{-t\alpha_m^2(n_m+\vartheta_m)^2} = \frac{\pi^{d/2}}{t^{d/2}\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_d}\prod_{m=1}^{d}\left[1+2S\left(\frac{\pi^2}{t\alpha_m^2};\vartheta_m\right)\right] = \prod_{m=1}^{d} I_m \tag{C.8}$$

$$
\begin{aligned}
\prod_{m=1}^{d} I_m =& \frac{\pi^{d/2}}{t^{d/2}\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_d}\left[1 + 2\sum_{i=1}^{d} S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2 t};\vartheta_i\right) + 2^2\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d} S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2 t};\vartheta_i\right) S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_j^2 t};\vartheta_j\right) + \cdots\right. \\
&\left. +2^m \sum_{i_1=1}^{d-m+1}\sum_{i_2=i_1+1}^{d-m+2}\cdots\sum_{i_m=i_{m-1}+1}^{d} S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_{i_1}^2 t};\vartheta_{i_1}\right)\cdots S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_{i_m}^2 t};\vartheta_{i_m}\right) + \cdots + 2^d \prod_{i=1}^{d} S\left(\frac{\pi^2}{\alpha_i^2 t};\vartheta_i\right)\right]
\end{aligned}
\tag{C.9}
$$

Inserindo a ultima equação em (C.3), é claro que o procedimento de continuação analítica da função Zeta de Epstein-Hurwitz é idêntico ao realizado a partir da expressão (3.87). Vemos que o argumento da função cosseno é independente de t e, portanto, as integrais a resolver são exatamente as mesmas que em (3.87). A única mudança obtém-se a partir da substituição

$$
S\left(\frac{\pi^2}{t\alpha_m^2}\right) \rightarrow S\left(\frac{\pi^2}{t\alpha_m^2};\vartheta_m\right) \tag{C.10}
$$

Bibliografia

[1] J. Zinn-Justin: Phase Transitions and Renormalization Group, Oxford University Press (2007).

[2] L.P Lévy: Magnetism and Superconductivity, Springer-Verlag (2000).

[3] F.C. Khanna & A.P.C. Malbouisson & J.M.C. Malbouisson & A.E. Santana: Physics Reports 539 (2014).

[4] M. Tinkham: Introduction to superconductivity, McGraw-Hill, Inc (1996).

[5] D. Ruelle: Statistical Mechanics Rigorous Results, W. A. BENJAMIN, INC. (1974).

[6] N. Goldenfeld: Lectures on phase transitions and the renormalization group, Addison-Wesley (1992).

[7] K.H. Bennemann & J.B. Ketterson: Superconductivity, Vol I conventional and undconventional superconductores, Springer-Verlag (2008).

[8] L.P Gorkov Sov-Phys JETP Vol 36(9) Num 6, pag 1364 (1959).

[9] M. Le Bellac: Quantum and Statistical Field Theory, Oxford University Press (1991).

[10] L.E. Riechl: A Modem Course in Statistical Physics, John Wiley and Sons, INC. (1998).

[11] P. Dennery & A. Krzywicki: Mathematics for Physicists, Dover publications INC (1995).

[12] M.E. Peskin & D.V schroeder: An Introduction to Quantum Field Theory, Perseus Books Publishing, L.L.C. (1995).

[13] F.C Khanna & A.P. Malbouisson & J.C Malbouisson & A.E Santana: Thermal Quantum Field Theory, World scientific publications (2009).

[14] J. Zinn-Justin: Quantum Field Theory and Critical Phenomena, Clarendon Press - Oxford (2002).

[15] C. Itzikson & J.B. Zuber: Quantum Field Theory , Mcgraw Hill (1980).

[16] S. Colemann & E. Weinberg, Physical Review D Vol 7 num 6, pag 1888 (1972).

[17] I.S. Gradshteyn & I.M. Ryzhik: Table of Integrals, Series, and Products Seventh Edition; Elsevier (2007).

[18] Stevenson A. F; Phys. Rev., 59 (1941), 842-843.

[19] R.M. Wald: Quantum Field Theory in Curved Spacetime and Black Hole Thermodynamics; The University of Chicago Press, (1984).

[20] F.C Khanna & A.P. Malbouisson & J.C Malbouisson & A.E Santana: Annals of physics 326 (2011) 2634-2657.

[21] E. Elizalde: Ten Physical Applications of Spectral Zeta Functions; Springer-Verlag (1995).

[22] A.P.C. Malbouisson & J.M.C. Malbouisson & A.E. Santana: Nuclear Physics B 631 (2002).

[23] L.M Abreu & C de Calan & A.P. Malbouisson & J.C Malbouisson & A.E Santana: Journal of Mathematical physics 46,012304 (2005).

[24] A. Elizalde & E. Romeo: Journal of Mathematical physics. 30,1133 (1989).

[25] L.M Abreu & A.P. Malbouisson & J.C Malbouisson & A.E Santana: Physical review B 67, 212502 (2003).

[26] I.D Lawrie: Physical review Letters, vol 79, Number 1 (1997).

[27] J. Kodama & M. Itoh & H. Hirai : Journal of Applied Physics 54, 4050 (1983).

[28] M. S. M. Minhaj & S. Meepagala & J. T. Chen & and L. E. Wenger: Physical Review B, vol 49 Num 21 (1994).

[29] L.M. Abreu & A.P.C. Malbouisson & I. Roditi: Eur. Phys. J. B 37, 515–522 (2004).

[30] C. A. Linhares & A. P. C. Malbouisson & Y. W. Milla & I. Roditi: Physical Review B 73, 214525 (2006).

[31] H. Kleinert: Gauge fields in condensed matter, vol I, world scientific publications (1990).