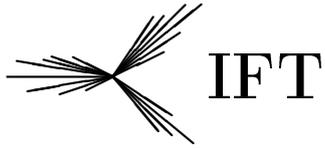


Thiago Carvalho Peixoto

**Dinâmica das transições quiral e
de desconfinamento da Cromodi-
nâmica Quântica com o modelo
Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio**

São Paulo

Março de 2014



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.006/2014

Dinâmica das transições quiral e de desconfinamento da
Cromodinâmica Quântica com o modelo
Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio

Thiago Carvalho Peixoto

Orientador

Gastão Inácio Krein

Março de 2014

Thiago Carvalho Peixoto

Dinâmica das transições quirais e de desconfinamento da Cromodinâmica
Quântica com o modelo Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio

Dissertação de Mestrado apresentada como parte das atividades para obtenção do título de Mestre em Física pelo Instituto de Física Teórica.

Orientador: Prof. Dr. Gastão Inácio Krein.

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Gastão Inácio Krein
IFT/UNESP (Orientador)

Prof. Dr. Marcus Emmanuel Benghi Pinto
UFSC

Prof. Dr. Ricardo D'Elia Matheus
IFT/UNESP

São Paulo, Março de 2014.

Dedico este trabalho ao meu filho e à minha esposa, por me mostrarem toda a beleza da Vida; dedico também aos meus pais, por terem me educado para a Vida.

Agradecimentos

Há muitas pessoas a quem devo agradecer. Início agradecendo à minha primeira família, meus pais e meus irmãos, pelo apoio, pelo incentivo, torcida, amor, confiança e liberdade; por serem grande parcela do que sou hoje.

Agradeço também à minha esposa, pelo amor, compreensão, motivação e inspiração, por sempre estar ao meu lado durante toda essa difícil jornada; definitivamente, sem ela não teria conseguido sequer dar o primeiro passo.

Ao meu filho, por me inspirar a ser uma pessoa melhor, por ser a maior graça que já recebi em minha vida.

À minha tia, por ter me acolhido em sua casa nesta nova cidade, por ter me ensinado lições valiosíssimas e por ter amenizado a saudade de minha terra.

Aos amigos feitos aqui no IFT; em especial, Kelvyn, Paulo, Fernando, Fagner, Tatiana e Pedro, pela ajuda, discussões, apoio, por me reanimarem todas as vezes em que acreditei que não conseguiria, por compartilharem comigo medos, angústias e alegrias. Guardarei carinhosamente nossa amizade. Agradeço também aos amigos de longa data; em particular, Cledson, Aquino, Yuri e Giordano, por fazerem parte de minha história e por sempre terem acreditado em minhas capacidades, muitas vezes até mais que eu mesmo acreditava.

Agradeço ao Prof. Mário Everaldo de Souza por me fazer acreditar que eu tinha condições de estudar Física Teórica e por alimentar minha curiosidade sobre a Física de Partículas.

Agradeço ao IFT, por toda a estrutura material e por ter me possibilitado aprender com professores de excelente nível. Agradeço, em particular, ao Prof. Pimentel, por me mostrar a beleza da Física várias vezes.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Gastão Krein, por acima de tudo sempre ter sido humano e humilde comigo, o que muitas vezes é raro no meio acadêmico. Agradeço pela paciência, pela disposição em discutir e explicar, por me ouvir, pela compreensão de minhas limitações e pela dedicação a este trabalho.

Por fim, agradeço a CAPES, pelo apoio financeiro.

Resumo

Nesta dissertação, propriedades de equilíbrio e não equilíbrio termodinâmico do setor de quarks leves u e d da Cromodinâmica Quântica (QCD) são estudadas empregando o modelo Polyakov–Nambu–Jona-Lasinio (PNJL). O modelo PNJL permite considerar simultaneamente as transições de fase quiral e de desconfinamento à temperatura finita. O grande potencial termodinâmico do modelo foi calculado na aproximação de campo médio. As equações de *gap* para os parâmetros de ordem que caracterizam essas transições de fase, o condensado de quarks e o loop de Polyakov, foram resolvidas numericamente para diferentes temperaturas e a natureza das transições de fase associadas foi determinada. A seguir, foram obtidas as equações de Ginzburg-Landau-Langevin (GLL) que descrevem a dinâmica temporal dos parâmetros de ordem. As escalas de tempo envolvidas na termalização do condensado de quark e do loop de Polyakov após o sistema ser submetido a um *quench* de temperatura foram investigadas como função dos parâmetros de Onsager para a QCD. A relevância dos resultados obtidos na presente dissertação para experimentos de colisões de íons pesados a altas energias é discutida.

Palavras-chave: Teoria Quântica de Campos à Temperatura Finita, Cromodinâmica Quântica, Transição de Fase Quiral, Transição de Desconfinamento, Equações de Ginzburg-Landau-Langevin

Área de Conhecimento: Física de Partículas, Física Nuclear, Mecânica Estatística

Abstract

Thermodynamic equilibrium and non-equilibrium properties of the light u and d quarks sector of Quantum Chromodynamics (QCD) are studied with the Polyakov–Nambu–Jona-Lasinio (PNJL) model. The PNJL model allows to take into account simultaneously the chiral and deconfinement transitions at finite temperatures. The grandpotential of the model is obtained in the mean field approximation. The gap equations for the order parameters that characterise these transitions, the quark condensate and the Polyakov loop, are solved numerically for different temperatures and the nature of the associated phase transitions is determined. Next, the Ginzburg-Landau-Langevin (GLL) equations that describe the temporal dynamics of the order parameters are obtained. The time scales involved in the thermalization of the quark condensate and Polyakov loop after a temperature quench are investigated as functions of the QCD Onsager parameters available in the literature. The relevance of the results obtained in the present dissertation for experiments of heavy ions collisions at high energies are discussed.

Keywords: Quantum Field Theory at Finite Temperature, Quantum Chromodynamics, Chiral Phase Transition, Deconfinement Transition, Ginzburg-Landau-Langevin Equations

Knowledge Area: Particle Physics, Nuclear Physics, Statistical Mechanics

Sumário

1	Introdução	vii
2	A Cromodinâmica Quântica e o Modelo PNJL	1
2.1	Desenvolvimento histórico sobre os hádrons	1
2.2	A Cromodinâmica Quântica	6
2.2.1	Simetrias aproximadas da QCD	9
2.2.1.1	Simetria de sabor	9
2.2.1.2	Simetria quiral	10
2.3	O modelo de Nambu e Jona-Lasinio	11
2.4	O modelo de Polyakov Nambu e Jona-Lasinio	13
3	Teoria quântica de campos à temperatura finita, fenômenos críticos e dinâmica de não equilíbrio	16
3.1	Sistemas em equilíbrio termodinâmico	16
3.1.1	Termodinâmica de equilíbrio	16
3.1.2	Mecânica Estatística	18
3.1.3	Conexão entre Termodinâmica e Mecânica Estatística	21
3.1.3.1	Ensemble Canônico	21
3.1.3.2	Ensemble Grande Canônico	22
3.1.4	Integração Funcional e a Função de Partição	23
3.1.4.1	Teoria Quântica de Campos	28
3.2	Fenômenos Críticos	30
3.2.1	Limite termodinâmico, fases, diagrama de fases e transições de fase	30
3.2.2	Parâmetro de ordem e Quebra de Simetria	33
3.2.3	Potenciais termodinâmicos e estabilidade	34
3.2.4	Teoria de Landau	36
3.3	Sistemas fora do equilíbrio	40
3.3.1	Nucleação e decomposição espinodal	42
3.4	Parâmetros de Ordem para a QCD	44
3.4.1	Transição de fase quiral	45
3.4.2	Transição de desconfinamento	45
4	Termodinâmica de equilíbrio e de não equilíbrio do modelo PNJL	49
4.1	Grande potencial para o modelo PNJL	49
4.1.1	Caso $\mu = 0$ com o loop de Polyakov	58
4.1.2	Caso $\mu = 0$ sem o loop de Polyakov	59

4.2	Energia livre de Landau e equações GLL	60
5	Resultados numéricos	65
5.1	Propriedades no Equilíbrio Termodinâmico	65
5.1.1	Modelo NJL	66
5.1.2	Modelo PNJL	68
5.2	Dinâmica de não equilíbrio	69
5.2.1	Modelo NJL	70
5.2.2	Modelo PNJL	74
6	Conclusões e perspectivas futuras	81
APÊNDICE A	Convenções e notações	84
A.1	Espaço de Minkowski	84
A.2	Matrizes de Dirac	85
APÊNDICE B	Variáveis de Grassmann	86
APÊNDICE C	Integrais Funcionais e a Função de Partição para TQC	92
C.1	Função de partição para n graus de liberdade	92
C.2	Função de partição para campos	94
C.2.1	Campo Escalar	94
C.2.2	Campo fermiônico	98
APÊNDICE D	Integrais gaussianas	101
D.1	Variáveis Reais	101
D.2	Variáveis Complexas	102
D.3	Variáveis de Grassmann	104
APÊNDICE E	Método das diferenças finitas	108
	Referências	110
	Índice	113

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A Cromodinâmica Quântica (QCD – do inglês, *Quantum Chromodynamics*) é a teoria quântica de campos que descreve as interações fortes (força forte). Ela é uma teoria fundamental no sentido de que é definida em termos de *quarks* e *glúons*, que acredita-se sejam partículas elementares. Como teoria fundamental, a partir dela deve-se ser capaz de entender todos os aspectos da estrutura e das interações entre os hádrons – partículas que interagem através da força forte como o próton, o nêutron, o méson π etc. Em particular, a partir da QCD pretende-se entender a origem das massas dos prótons e nêutrons, seus estados excitados e as forças que os mantêm ligados no interior dos núcleos atômicos. A maior parte da matéria visível no universo é formada por prótons e nêutrons, eles compõem os núcleos dos átomos daqui da Terra e do interior das estrelas. A QCD também deve descrever as propriedades da matéria hadrônica em condições extremas de temperatura e densidade. Essa matéria estava presente nos primeiros instantes do universo e compõe o interior de objetos estelares superdensos como as estrelas de nêutrons. Matéria quente e densa pode também ser produzida em laboratório através de colisões de íons pesados a altíssimas energias, como nos experimentos conduzidos atualmente no LHC do CERN.

A QCD é uma teoria de calibre não-abeliana e, como tal, exhibe a propriedade de liberdade assintótica [1, 2], o que permite o usual tratamento perturbativo na constante de acoplamento para descrever processos com alto momento transferido (processos duros – do inglês, *hard processes*). Em tais situações, a QCD tem sido experimentalmente testada com sucesso [2], estando, então, bem estabelecida. Por outro lado, quando o momento transferido é baixo (processos moles – *soft processes*), a teoria de perturbação usual não se aplica. Neste regime deve-se, então, aplicar métodos não perturbativos, dentre os quais se destacam a formulação de QCD na rede (*Lattice QCD*) e o uso de lagrangianas efetivas [3, 4]. O estudo de fenômenos não perturbativos na QCD é ao mesmo tempo desafiador e fascinante: a teoria é formulada em termos de excitações elementares, os quarks e glúons, não são os graus de liberdade acessíveis via experimentos. Os quarks e

glúons estão confinados no interior dos hádrons. Também, as forças geradas pela QCD são tão fortes que menos de 2% da massa de um próton ou de um nêutron pode ser atribuída às massas dos quarks; ela é gerada pelas interações peculiares dos glúons através de um mecanismo conhecido como quebra dinâmica da simetria quiral.

Os modelos baseados em lagrangianas efetivas são construídos de modo a incorporar as principais propriedades de simetria do problema em questão e há décadas eles vêm sendo utilizados com sucesso na fenomenologia da física de hádrons. Entretanto, a única maneira conhecida de tratar sistematicamente a QCD de modo não perturbativo é via QCD na rede, que é formulada a partir da continuação analítica para o espaço-tempo euclidiano (rotação de Wick) do funcional gerador obtido via quantização por integração funcional, a partir do qual todos os observáveis podem (em princípio) ser calculados. Com isso, a teoria fica determinada por um funcional que se assemelha a uma função de partição que define a mecânica estatística de uma teoria clássica de campos. As integrais funcionais são resolvidas discretizando o espaço-tempo de modo à teoria ser descrita em termos de um número finito de graus de liberdade, quando, enfim, pode-se usar o Método de Monte Carlo para o cálculo computacional das integrais [5]. Em particular, é notável a atual precisão com que se pode calcular a massa de alguns hádrons via QCD na rede [6].

Uma ampla área de pesquisa, de grande interesse atual, tanto do ponto de vista experimental quanto teórico, é o estudo da QCD sob condições extremas de temperatura e potencial químico bariônico (ou densidade bariônica) [3]. Do ponto de vista teórico, estudos de QCD na rede à temperatura finita têm indicado a restauração da simetria quiral e o desconfinamento de cor a temperaturas suficientemente altas [7–9]; sob essas condições, a matéria se apresentaria como um plasma de quarks e glúons. Além disso, várias abordagens teóricas diferentes sugerem um diagrama de fases muito rico para a QCD [3, 10]. O estudo dessas transições de fase permite um melhor entendimento das propriedades de simetria da QCD; a possibilidade de novas fases da matéria desperta grande interesse teórico também em cosmologia.

Experimentalmente, condições extremas de temperatura são obtidas em colisões relativísticas de íons pesados [10, 11]. Em tais experimentos, feixes de íons pesados são acelerados a velocidades relativísticas e colisões inelásticas entre os quarks são preponderantes. Os resultados indicam a formação de uma fase desconfiada, com propriedades de fluido, por curto intervalo de tempo; à medida que esse fluido se expande, a matéria é resfriada e sofre transições de fase até a hadronização do sistema. É através da detecção dos hádrons resultantes da hadronização e os produtos de seus decaimentos que se espera inferir sobre as propriedades da matéria produzida nas colisões. Assim, fica claro que o entendimento das propriedades de equilíbrio termodinâmico local de eventuais fases intermediárias presentes durante a evolução do sistema, bem como o das propriedades de não equilíbrio, seja crucial para a descrição das colisões.

Um problema fundamental que se enfrenta nesses estudos é a natureza não pertur-

bativa dos processos envolvidos nas de transições de fase, tanto no caso de transições em equilíbrio como fora do equilíbrio. A dificuldade é que não existem métodos de primeiros princípios em teorias quânticas de campos relativísticas que sejam de aplicação sistemática, em que erros e aproximação sejam controláveis. A QCD na rede, que é um método não perturbativo de primeiros princípios, apenas fornece informações sobre situações de equilíbrio termodinâmico, já que ela é formulada no espaço euclidiano; informações sobre evolução temporal, que naturalmente acontece no espaço de Minkowski, não são acessíveis. Portanto, a única alternativa disponível para se fazer progresso no entendimento da QCD é o emprego de modelos efetivos. É precisamente dentro desse cenário, de modelos efetivos, que o trabalho da presente dissertação se insere.

O presente trabalho tem como objetivo específico estudar as transições de fase quiral e de desconfinamento da QCD através de uma lagrangiana efetiva definida pelo modelo de Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio (PNJL) [12]. Em particular, o interesse central é a dinâmica de não equilíbrio dessas mudanças de fase. Para tal, a evolução temporal dos parâmetros de ordem é obtida resolvendo a equação de Ginzburg-Landau-Langevin (GLL) numericamente através do Método das Diferenças Finitas. A equação GLL é naturalmente empregada em problemas de não equilíbrio em Física da Matéria Condensada [13, 14] e tem sido bastante utilizada no contexto da dinâmica das transições de fase quiral da QCD [15–18]; ela ainda encontra diversas outras aplicações [19].

A dissertação está organizada em cinco capítulos e cinco apêndices além desta introdução. No próximo capítulo expõe-se sobre o estabelecimento da QCD como a teoria quântica de campos que descreve as interações fortes, algumas de suas propriedades são discutidas e o modelo PNJL é introduzido. No Capítulo 3 é feita uma breve revisão sobre Termodinâmica e Mecânica Estatística a fim de introduzir o formalismo de integração de funcional para a Teoria Quântica de Campos à Temperatura Finita, também revisamos a Teoria de Landau para fenômenos críticos e introduzimos a equação GLL com o intuito de descrever a dinâmica de termalização após um *quench* de temperatura; o capítulo se encerra com a definição dos parâmetros de ordem das transições quiral e de desconfinamento da QCD, quando o modelo PNJL fica então justificado. Apesar de esses parâmetros apenas estarem bem definidos nos limites não físicos de quarks sem massa e de quarks infinitamente pesados respectivamente, eles são úteis para descrever as fases termodinâmicas da QCD.

No Capítulo 4 o método de integração funcional é aplicado para calcular o grande potencial termodinâmico referente ao modelo PNJL na aproximação de campo médio; a partir deste, são encontradas as equações de *gap* que descrevem os parâmetros de ordem em função da temperatura a potencial químico nulo no equilíbrio termodinâmico e obtemos as equações GLL que descrevem a dinâmica de termalização dos parâmetros de ordem. No Capítulo 5 são apresentados os resultados obtidos resolvendo numericamente as equações de *gap* para ambos os modelos PNJL e NJL, que é um caso particular do

primeiro, a fim de se discutir o efeito da transição de desconfinamento sobre a transição quiral; em seguida são mostrados os resultados referentes à dinâmica de não equilíbrio. O Capítulo 6 finaliza a dissertação com as conclusões e perspectivas futuras do trabalho.

CAPÍTULO 2

A CROMODINÂMICA QUÂNTICA E O MODELO PNJL

A Cromodinâmica Quântica (QCD) é a teoria quântica de campos que faz parte do Modelo Padrão das Partículas Elementares atualmente usada para descrever as interações fortes entre quarks e glúons. Seu estabelecimento se deu como resultado da busca por uma teoria capaz de descrever a chamada força forte que, entre outras coisas, é responsável por manter os núcleos atômicos coesos, equilibrando a repulsão coulombiana entre os prótons. Outro aspecto de extrema importância da QCD é que quase a totalidade da massa dos prótons e nêutrons advém de efeitos dinâmicos da interação entre os quarks; portanto, praticamente toda a nossa massa é fruto dessas interações. Assim, é necessário conhecê-la para entender a matéria de que somos feitos, por exemplo.

Neste capítulo, será feita uma breve exposição sobre como o estudo dos hádrons contribuiu para o estabelecimento da QCD. Em seguida, serão salientadas algumas propriedades importantes da QCD e, finalmente, o capítulo se encerra com a introdução do modelo de Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio (PNJL).

2.1 Desenvolvimento histórico sobre os hádrons

Logo após a descoberta do nêutron em 1932, Heisenberg notou que sua massa era muito semelhante à do próton apesar de suas cargas elétricas serem diferentes. Para explicar essa similaridade, ele introduziu, em analogia ao spin, uma nova grandeza chamada *isospin*: propôs que estas duas partículas correspondem a estados com diferentes projeções do isospin de uma mesma partícula de isospin $1/2$ chamada *núcleon* e sugeriu que a força nuclear forte é invariante sob rotações num espaço abstrato de isospin. Isso significa dizer que a força forte afeta prótons e nêutrons de maneira que respeita essa invariância e que o isospin de um sistema de núcleons é conservado.

Em 1935, Yukawa formulou uma teoria quântica de campos para descrever a força forte¹ em que a interação entre os núcleons seria mediada por bósons de spin 0. Como era sabido que o alcance da força forte é da ordem de 10^{-15} m, ele estimou a massa do bóson mediador em torno de 300 vezes a massa do elétron; por ter uma massa bem maior que a do elétron e ainda menor que a do próton, o bóson passou a ser chamado genericamente de *méson*. Em 1947, o grupo liderado por Cecil Powell detectou em raios cósmicos uma partícula com as características descritas por Yukawa, que passou a ser chamada de pión (méson π); de fato, há três estados de carga elétrica diferentes para o pión - π^+ , π^- e π^0 .

Na linguagem de teoria de grupos, a teoria de Yukawa traduz-se dizendo que a força forte possui o grupo SU(2) como grupo de simetria (simetria de isospin), os núcleons são descritos por campos que pertencem à representação fundamental (bidimensional – isospin 1/2) de SU(2) e os píons pertencem à representação adjunta (ou regular).

Nas décadas de 1950 e 1960, muitas outras partículas que interagem via força forte foram descobertas; elas foram genericamente chamadas de *hádrons* e classificadas em mésons – *bósons*, tais como os píons (π) e os káons (K) – e *bárions* – *férmions*, tais como o próton, o antipróton e o lâmbda (Λ). Foram descobertos também hádrons, chamados *estranhos*, com a peculiar característica de serem produzidos numa escala de tempo de 10^{-23} s e decaírem com vida média na escala de 10^{-10} s. Essa enorme diferença de escalas de tempo sugere que a interação forte é responsável pela criação destes hádrons, enquanto que a interação fraca determina o decaimento. Para explicar essa discrepância, foi atribuído aos hádrons um novo número quântico chamado *estranheza* e propôs-se que a força forte conserva estranheza enquanto que a força fraca não. De fato, a produção de hádrons com estranheza não nula a partir de hádrons sem estranheza ocorre aos pares.

No início da década de 1960, haviam sido descobertos tantos hádrons que se fazia necessário um modo de organizá-los por suas propriedades. Por outro lado, conheciam-se apenas alguns poucos léptons (tais como elétron, pósitron, múon e neutrino), de modo que já se desconfiava que os hádrons deveriam ser compostos por partículas fundamentais. O primeiro passo para se conhecer tais constituintes foi a organização dos vários hádrons em padrões geométricos simples; essa organização foi proposta por Murray Gell-Mann em 1961 e ficou conhecida como *Eightfold-Way*.

Os oito bárions mais leves formam o *Octeto de Bárions de spin 1/2* e são dispostos como na Figura 1, em que as partículas numa mesma linha horizontal possuem mesma estranheza (s), as na mesma linha diagonal descendente têm mesma carga elétrica (q) em unidades da carga elementar e as numa mesma linha vertical possuem mesmo isospin.

Seguindo o mesmo critério, tanto os mésons de spin 0 quanto os de spin 1 são arranjados segundo um padrão hexagonal, formando para cada spin um *Noneto de mésons*² conforme a Figura 2. Por fim, os bárions de spin 3/2 mais leves formam um padrão tri-

¹ Nesta época, as únicas partículas conhecidas que interagiam via força forte eram o nêutron e o próton.

² Quando essa organização foi proposta, o méson η' não havia sido descoberto e o padrão da Figura 2 era conhecido como octeto de mésons.

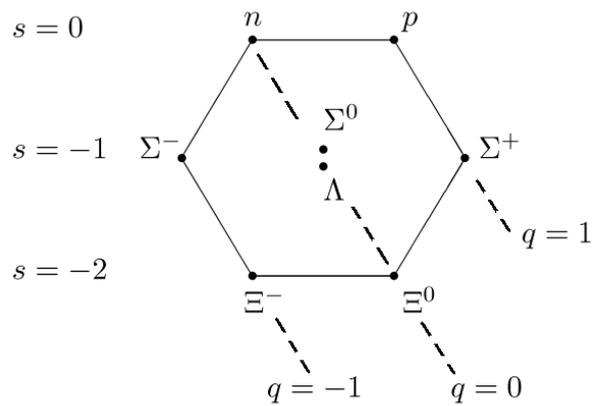


Figura 1 – Octeto de bárions de spin 1/2.

angular, conhecido como *Decuplo de Bárions*, como na Figura 3. A partícula Ω^- ainda não havia sido descoberta e Gell-Mann predisse suas propriedades – inclusive a massa – através dessa organização; poucos anos depois a partícula foi observada, o que forneceu grande confiabilidade ao Eightfold Way.

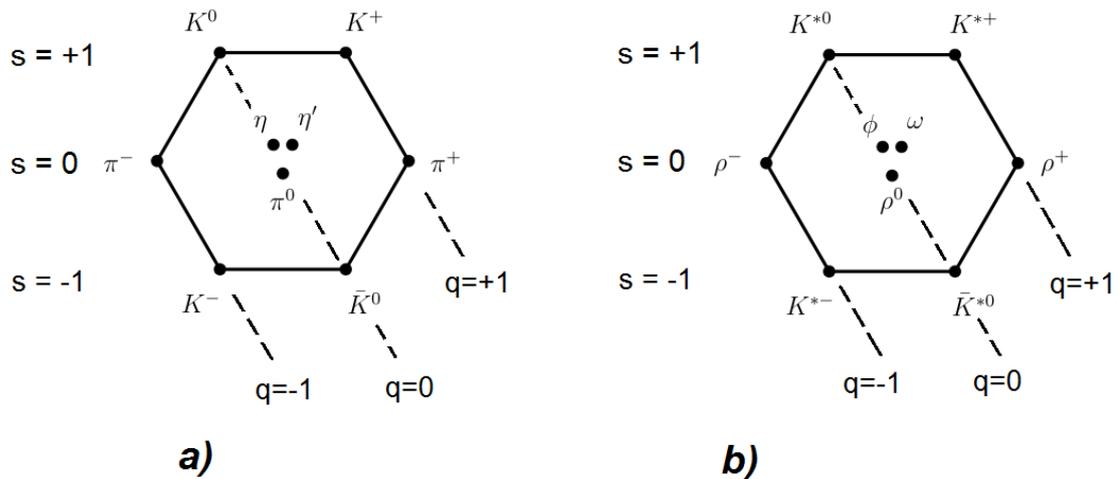


Figura 2 – Nonetos de mésons: a), noneto de mésons de spin 0; b), noneto de mésons de spin 1.

Os padrões das Figuras 1, 2 e 3 descrevem multipletos do grupo $SU(3)$; entretanto, não haviam sido observadas partículas formando um padrão de triplete, que corresponde à representação fundamental de $SU(3)$. A partir disso, Gell-Mann e Zweig, independentemente, propuseram que os hádrons são compostos por partículas (antipartículas) fundamentais de spin 1/2, que passaram a ser chamadas *quarks* (q) (antiquarks (\bar{q})), da seguinte forma: cada bárion (antibárion) é constituído por três quarks (antiquarks) e cada méson é composto por um quark e um antiquark, estabelecendo o *modelo de quarks*.

Introduzindo três tipos de quarks – sabores *up* (u), *down* (d) e *strange* (s) – com as propriedades listadas na Tabela 1, é possível reproduzir os padrões geométricos do

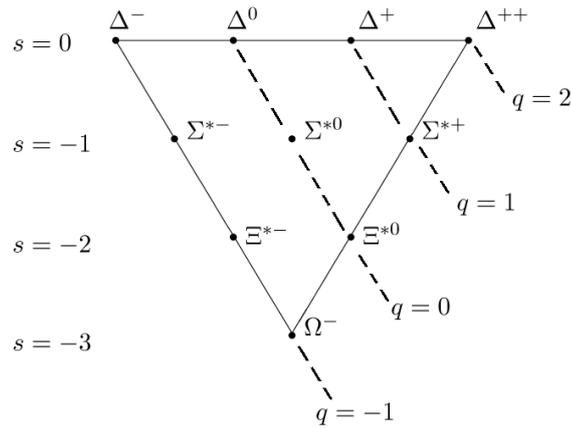


Figura 3 – Decuplete de bárions

q	B	I	I_3	S	$Q(e)$
u	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{2}{3}$
d	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{3}$
s	$\frac{1}{3}$	0	0	-1	$\frac{2}{3}$

Tabela 1 – Propriedades dos quarks.

Eightfold Way identificando por quais quarks cada hádron é composto. Nesta, B é o número bariônico, I é o isospin, I_3 é a terceira componente do isospin, S é a estranheza e Q é a carga elétrica em unidades da carga elementar e ; os respectivos antiquarks $-\bar{u}$, \bar{d} e \bar{s} possuem os números quânticos B , I_3 , S e Q com o sinal oposto.

A título de exemplo, a partícula Δ^{++} possui carga $Q = +2e$, estranheza $S = 0$ e isospin $I_3 = 3/2$, logo, deve ser composta por três quarks u . Vale notar que partículas diferentes podem ter o mesmo *conteúdo de quarks*; por exemplo, tanto a Σ^{*0} quanto a Λ possuem $Q = 0e$, $S = -1$ e $I_3 = 0$, tendo, então, conteúdo (uds) . Contudo, deve-se lembrar que os sabores (u, d, s) são rótulos para determinados números quânticos, que são adicionados³ para se obter o número quântico total do bárion de modo semelhante a como dois spins $1/2$ são adicionados de modo a fornecer três estados ortogonais com spin total 1; no caso dos hádrons, diferentes combinações de sabor fornecem diferentes estados de sabor e cada partícula corresponde a uma determinada combinação linear desses estados. Ainda, além da composição dos sabores, deve-se levar em conta a adição dos spins para formar o estado de um dado hádron.

Nas décadas de 1970 e 1980, mais hádrons pesados foram sendo encontrados nos

³ Esses números quânticos são somados de acordo com as regras de adição ditadas pelo grupo $SU(3)$, que são similares às regras de adição de momento angular.

aceleradores de partículas e leis de conservação de novos números quânticos foram introduzidas para descrever a interação forte, introduzindo novos sabores. Atualmente, as interações fortes são descritas usando seis sabores de quarks: *charm* (c), *bottom* (b) e *top* (t)⁴, além dos três já mencionados acima (u , d e s) [20].

Apesar do sucesso em explicar o *Eightfold Way* e de até prever novos hádrons, o modelo de quarks apresenta dois problemas importantes: o primeiro é o fato de nunca se ter detectado alguma partícula com carga fracionária, o segundo é que algumas partículas, de acordo com o modelo, parecem violar o princípio de exclusão de Pauli, discutido logo abaixo. A primeira dificuldade é contornada pela *hipótese de confinamento*, segundo a qual a interação entre os quarks – seja qual for – ocorre de modo que eles são “confinados” a estados ligados, formando bárions e mésons.

Tão logo o modelo de quarks foi proposto, buscou-se calcular as propriedades dos hádrons postulando interações entre quarks, condizentes com a hipótese de confinamento, e resolvendo a equação de Schrödinger assim obtida – de modo semelhante ao que era feito em Física Nuclear. Alguns hádrons, como a partícula Δ^{++} – cujo conteúdo de quarks é (uuu) – parecia violar o princípio de exclusão de Pauli, segundo o qual o estado que descreve um sistema de férmions indistinguíveis deve ser *antissimétrico* com respeito à troca de quaisquer dois destes férmions.

Ocorre que o estado no qual a partícula Δ^{++} possui a componente do momento angular total $J_3 = 3/2$ requer que o momento angular orbital seja nulo e todos os spins estejam “alinhados”, ou seja, que tanto o estado referente aos graus de liberdade orbitais quanto o estado de spin sejam *simétricos*⁵; além disso, o estado referente aos graus de liberdade de sabor também é *simétrico* pela constituição do bárion. Dessa forma a Δ^{++} parece violar o princípio de exclusão de Pauli.

Para resolver esse problema, foi introduzido um grau de liberdade com ao menos três números quânticos – para tornar distinguíveis os três quarks que compõem a Δ^{++} . Esse novo grau de liberdade foi chamado de *carga de cor* e se assume que para cada sabor de quark há três cores possíveis: *red* (r), *green* (g) e *blue* (b); da mesma forma, para cada sabor de antiquark – \bar{u} , \bar{d} , \bar{s} , \bar{c} , \bar{b} , \bar{t} – há três possíveis *anticores* – *antired* (\bar{r}), *antigreen* (\bar{g}) e *antiblue* (\bar{b}). Entretanto, esses graus de liberdade não são observados nos hádrons, de modo que qualquer sistema hadrônico é indiferente a se as cores de todos os quarks forem alteradas entre si. Em termos de cores, a hipótese de confinamento dos quarks se expressa dizendo que *os estados físicos e os observáveis num sistema de hádrons são singletos de cor*, ou seja, são invariantes sob transformações no espaço de cor [2, 20].

É importante salientar que as sugestões teóricas descritas acima são confirmadas experimentalmente. Espalhamentos núcleon-núcleon e lépton-núcleon a altas energias confirmam a estrutura interna de prótons e nêutrons; os experimentos mais bem conhe-

⁴ Os sabores b e t também são referidos como *beauty* e *truth*, respectivamente, em textos mais antigos.

⁵ A hipótese de momento angular não nulo é inconsistente com a previsão do momento magnético dos bárions.

cidos que confirmam a quantidade de cores ($N_c = 3$) são: o decaimento $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$, cuja largura de decaimento é proporcional a N_c^2 , e aniquilação de elétron-pósitron de altas energias em hádrons, cuja seção de choque é proporcional a N_c [2, 21].

2.2 A Cromodinâmica Quântica

Uma vez estabelecida a ideia de que os hádrons possuem estrutura interna, procura-se entender como os constituintes interagem e como essa dinâmica é responsável pelas propriedades observadas nas interações fortes.

Um jeito natural de estudar experimentalmente a estrutura interna de hádrons é fazer com que eles espalhem feixes formados por partículas sem estrutura, como léptons (elétrons, por exemplo) a altas energias; esse procedimento, quando se produz mais partículas, é chamado de *espalhamento inelástico profundo*⁶. Experimentos desse tipo forneceram evidências experimentais para dois fatos muito importantes ao estabelecimento da QCD: os graus de liberdade de cor e a *liberdade assintótica* [2]. O conceito de cor já foi introduzido na seção anterior, a liberdade assintótica será discutida a seguir.

No fim da década de 1960, tais experimentos indicavam uma lei de escalamento das funções de estrutura, em termos das quais se expressam os fatores de forma magnético e elétrico do próton⁷, para a região de altos momentos e energia transferidos muito intensos, o que permite alta resolução espaço-temporal. Tal escalamento ficou conhecido como *escalamento de Bjorken*, cuja interpretação é que *os constituintes dos núcleons se comportam como partículas pontuais essencialmente livres para altos momentos transferidos (curtas distâncias)*. Estes constiuintes foram chamados de *pártons* e, posteriormente, identificados com os quarks [2].

Por outro lado, a não manifestação dos graus de liberdade de cor nos estados hadrônicos sugere que a interação entre os quarks possui uma simetria de cor associada ao grupo SU(3), chamada simetria SU(3) de cor; ou seja, as interações são indiferentes a transformações do grupo SU(3) que agem sobre o espaço de cor. Ainda, como devemos assumir que apenas estados de singlete são observáveis, a força forte deve ser dependente da cor; do contrário, seria observada uma degenerescência de cor no espectro hadrônico.

Portanto, as interações fortes em quatro dimensões são descritas por uma teoria de Yang-Mills com simetria SU(3) de cor em que cada sabor de quark se transforma como triplete na representação fundamental; essa teoria é a *Cromodinâmica Quântica* (QCD), cuja densidade de lagrangiana no espaço de Minkowski com métrica $\mathbf{g} = \text{diag}(+, -, -, -)$ é:

$$\mathcal{L}_{QCD} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu} + \sum_{j=1}^{N_f} \bar{\psi}_j (i\gamma^\mu D_\mu - m_j) \psi_j \quad (2.1)$$

⁶ *Deep inelastic scattering*, em inglês.

⁷ Os fatores de forma estão associados à distribuição espacial da carga elétrica e do momento magnético no interior do próton.

em que μ, ν são índices espaço-temporais, $\{\gamma^\mu; \mu = 0, \dots, 3\}$ são as matrizes de Dirac⁸, o tensor de intensidade de campo $F_{\mu\nu}^a$ e a derivada covariante D_μ são dados por:

$$F_{\mu\nu}^a \equiv \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf^{abc} A_\mu^b A_\nu^c \quad (2.2)$$

$$D_\mu \equiv \partial_\mu - igT^a A_\mu^a \equiv \partial_\mu - ig\mathbb{A}_\mu \quad (2.3)$$

$\{T^a; a = 1, \dots, 8\}$ são os geradores do grupo $SU(3)$ ⁹, cuja álgebra é caracterizada pelas constantes de estrutura f^{abc} , ou seja, T^a são matrizes hermiteanas que satisfazem as relações de comutação características da álgebra $su(3)$ associada ao grupo $SU(3)$: $[T^a, T^b] = if^{abc}T^c$.

Os campos $\{\psi_j(x); j = 1, \dots, N_f\}$ são espinores de Dirac ($\bar{\psi}_j = \psi_j^\dagger \gamma^0$) que descrevem os quarks, cujo sabor com massa m_j é indexado por j e N_f é a quantidade de sabores ($\psi_j; j = u, d, s, c, \dots$); os campos de calibre $A_\mu^a(x)$ são os mediadores da interação forte (glúons) e g é a constante de acoplamento entre os quarks e os glúons (acoplamento de calibre), note-se que esta constante é universal na teoria (não depende de cor nem sabor). Subentende-se que se deve somar sobre todo o domínio dos índices repetidos.

Apesar de não estar explícito em (2.1), os campos ψ_j possuem índices A de cor ($\psi_j = \psi_j^A; A = r, g, b$), ou seja, ψ_j é um vetor no espaço de cor cujas componentes ψ_j^A são, de fato, os espinores de Dirac

$$\psi_j = \begin{pmatrix} \psi_j^r \\ \psi_j^g \\ \psi_j^b \end{pmatrix}$$

e as matrizes 3×3 T^a possuem componentes rotuladas por índices de cor $T^a = (T^a)_{AB}$; $A, B = r, g, b$, pois elas atuam em vetores coluna como o escrito acima, ou seja, os férmions estão na representação fundamental do grupo $SU(3)$ enquanto que as matrizes T^a e, conseqüentemente, os glúons estão na representação adjunta.

Resta ainda explicitar a simetria de calibre exigida para a lagrangiana da QCD. Por simetria, entende-se uma transformação sobre os campos que deixa o sistema (a ação, ou equações de movimento) invariante; uma *transformação local de calibre* segundo o grupo $SU(3)$ de cor é determinada por oito parâmetros reais e contínuos $\vec{\theta} = (\theta^1, \dots, \theta^8)$ e transforma os campos do seguinte modo:

$$\psi_j(x) \rightarrow \psi'_j(x) = [U(\vec{\theta}(x))] \psi_j(x) \quad (2.4)$$

$$\mathbb{A}_\mu(x) \rightarrow \mathbb{A}'_\mu(x) = [U(\vec{\theta}(x))] \mathbb{A}_\mu(x) [U(\vec{\theta}(x))]^{-1} - \frac{i}{g} [\partial_\mu U(\vec{\theta}(x))] [U(\vec{\theta}(x))]^{-1}$$

em que a dependência espaço-temporal dos parâmetros foi explicitada – é isso que significa a transformação ser local – e $U(\vec{\theta}(x))$ é uma matriz 3×3 dada por

$$U(\vec{\theta}(x)) = \exp[-iT^a \theta^a(x)] \quad (2.5)$$

⁸ As matrizes de Dirac são definidas no Apêndice A.

⁹ As matrizes T^a são expressas em termos das matrizes de Gell-Mann λ^a através de $T^a = \lambda^a/2$. De fato, as matrizes T^a geram a *álgebra* e não o grupo - elas pertencem à álgebra e *não* ao grupo; contudo, é comum, tendo isso subentendido, dizer que geram o grupo.

A derivada covariante em (2.3) é assim chamada porque, em consequência de (2.4), satisfaz:

$$(D_\mu \psi_j(x)) \rightarrow (D_\mu \psi_j(x))' = [U(\vec{\theta}(x))] (D_\mu \psi_j(x)) \quad j = 1, \dots, N_f \quad (2.6)$$

Para encontrar como é transformado o tensor de intensidade de campo, é conveniente notar que (2.3) e (2.2) fornecem para cada sabor j :

$$[D_\mu, D_\nu] \psi_j(x) = -ig T^a F_{\mu\nu}^a \psi_j(x) \quad (2.7)$$

além de que o fato de $(D_\mu \psi_j(x))$ ter a mesma transformação que o próprio $\psi_j(x)$ implica a seguinte lei de transformação:

$$[D_\mu, D_\nu] \psi_j(x) \rightarrow ([D_\mu, D_\nu] \psi_j(x))' = [U(\vec{\theta}(x))] ([D_\mu, D_\nu] \psi_j(x)) \quad (2.8)$$

Omitindo a dependência de $\vec{\theta}$ em x e usando (2.7), a equação acima é escrita como:

$$\begin{aligned} ([D_\mu, D_\nu] \psi_j(x))' &\stackrel{(2.7)}{=} -ig T^a F_{\mu\nu}^a [U(\vec{\theta})] \psi_j(x) = [U(\vec{\theta})] (-ig T^a F_{\mu\nu}^a \psi_j(x)) \\ &= -ig [U(\vec{\theta})] T^a F_{\mu\nu}^a \psi_j(x) \\ &\Rightarrow \left(T^a F_{\mu\nu}^a [U(\vec{\theta})] - [U(\vec{\theta})] T^a F_{\mu\nu}^a \right) \psi_j(x) = 0 \end{aligned}$$

cuja solução para $T^a F_{\mu\nu}^a$ é:

$$T^a F_{\mu\nu}^a = [U(\vec{\theta})] T^a F_{\mu\nu}^a [U(\vec{\theta})]^{-1} \quad (2.9)$$

esta última equação fornece a lei de transformação para o tensor de intensidade de campo.

Usando (2.4) e (2.6) é imediato mostrar que os termos sob o somatório em (2.1) são invariantes de calibre. É importante salientar que isso não seria verdade caso, para um dado sabor, a cada cor correspondesse uma massa diferente. Para mostrar a invariância do termo restante, é útil fazer uso da seguinte relação de ortogonalidade entre os geradores:

$$\frac{1}{2} \text{Tr} [T^a T^b] = \delta^{ab}$$

para escrever:

$$F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu} = \frac{1}{2} F_{\mu\nu}^a F_b^{\mu\nu} \text{Tr} [T^a T^b] = \frac{1}{2} \text{Tr} [(F_{\mu\nu}^a T^a) (F_b^{\mu\nu} T^b)] \quad (2.10)$$

obtendo-se:

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu} \rightarrow (F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu})' &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[(F_{\mu\nu}^a T^a)' (F_b^{\mu\nu} T^b)' \right] \\ &\stackrel{(2.9)}{=} \frac{1}{2} \text{Tr} \left[[U(\vec{\theta})] T^a F_{\mu\nu}^a [U(\vec{\theta})]^{-1} [U(\vec{\theta})] T^b F_b^{\mu\nu} [U(\vec{\theta})]^{-1} \right] \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[T^a F_{\mu\nu}^a T^b F_b^{\mu\nu} [U(\vec{\theta})]^{-1} [U(\vec{\theta})] \right] \\ &\stackrel{(2.10)}{=} F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu} \end{aligned}$$

de onde se conclui que o termo $F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu}$ também é invariante de calibre e que toda a lagrangiana (2.1) e, assim, a própria ação é invariante de calibre. Note-se que se a transformação de calibre agisse sobre o espaço-tempo não seria suficiente mostrar a invariância da densidade de lagrangiana para concluir que a ação seria invariante.

2.2.1 Simetrias aproximadas da QCD

É importante destacar que a lagrangiana (2.1) é a mais geral obtida (a menos de termos de superfície) exigindo apenas a simetria local de cor e a renormalizabilidade em quatro dimensões, além das simetrias de Lorentz – especial, conjugação de carga e paridade [1]. Estas simetrias são exatas, ou seja, são transformações que realmente deixam o sistema invariante. Entretanto, há certos tipos de transformações segundo as quais a QCD é “aproximadamente” invariante, ou seja, há simetrias que são quebradas e que são exatas num dado limite não tão distante da situação física – este é o significado do termo “aproximadamente”. Apesar de não serem manifestamente realizadas, por vezes é útil e esclarecedor pensar sobre tais transformações.

2.2.1.1 Simetria de sabor

Explicitando os índices de cor da representação fundamental, o segundo termo em (2.1) é escrito como:

$$\sum_{j=1}^{N_f} \bar{\psi}_j^A \left[\delta^{AB} i\gamma^\mu \partial_\mu + g (T_a)^{AB} \gamma^\mu A_\mu^a - m_j \delta^{AB} \right] \psi_j^B$$

de onde se vê que os termos de interação entre quarks e glúons são diagonais no espaço de sabor, de forma aos números quânticos associados (isospin, estranheza...) serem conservados, o que não ocorreria caso o glúon fosse dependente do sabor. Ainda, a interação forte agiria do mesmo modo sobre os quarks de diferentes sabores se suas massas – com origem no setor eletrofraco – não fossem distintas [21], neste caso haveria uma simetria exata $SU(N_f)$ de sabor como discutido a seguir.

Considere a seguinte transformação $SU(N_f)$ global de sabor:

$$\begin{aligned} \psi_j(x) &\rightarrow \psi'_j(x) &= U(\theta)_{jk} \psi_k(x) \\ \psi_j^\dagger(x) &\rightarrow \psi'^\dagger_j(x) &= \psi_k^\dagger(x) (U(\theta)^\dagger)_{kj} \\ U(\theta)_{jk} &= (\exp[i\theta^a t^a])_{jk} \end{aligned} \tag{2.11}$$

em que $\{\theta^a; a = 1, \dots, n\}$ são um conjunto de n parâmetros reais, contínuos e constantes e $\{t^a; a = 1, \dots, n\}$ são n geradores do grupo $SU(N_f)$ e $\{j, k = 1, \dots, N_f\}$ identificam o sabor. Esta transformação deixa invariante o campo dos glúons. Para mostrar a invariância (ou não) dos demais termos, é útil usar a notação $\psi^T = (\psi_1, \dots, \psi_j, \dots, \psi_{N_f})$ para

considerar todos os índices de sabor numa só equação matricial:

$$\begin{aligned} \bar{\psi} [i\gamma^\mu (\partial_\mu - ig\mathbb{A}_\mu)] \psi &\rightarrow \{\bar{\psi} [i\gamma^\mu (\partial_\mu - ig\mathbb{A}_\mu)] \psi\}' = \bar{\psi}' [i\gamma^\mu (\partial_\mu - ig\mathbb{A}_\mu)] \psi' \\ &= \bar{\psi} (U^\dagger) [i\gamma^\mu (\partial_\mu - ig\mathbb{A}_\mu)] (U) \psi \\ &= \bar{\psi} [i\gamma^\mu (\partial_\mu - ig\mathbb{A}_\mu)] \psi \end{aligned}$$

em que usou-se o fato de que a hermiticidade dos geradores torna a matriz $U(\theta)$ unitária, assim, o termo referente à derivada covariante é invariante; já o termo de massa:

$$\begin{aligned} \bar{\psi} \hat{m} \psi &\rightarrow (\bar{\psi} \hat{m} \psi)' = \bar{\psi} U^\dagger \hat{m} U \psi \\ &= \bar{\psi} \exp[-i\theta^a t^a] \hat{m} \exp[i\theta^a t^a] \psi \\ &= \bar{\psi} \hat{m} \psi + \bar{\psi} [\hat{m}, \exp(i\theta^a t^a)] \psi \end{aligned}$$

é invariante apenas se a matriz de massa \hat{m} , cujos elementos são as massas dos respectivos sabores $(\hat{m})_{ij} = m_i \delta_{ij}$, comutar com a matriz $U = \exp(i\theta^a t^a)$. Para verificar, os parâmetros são feitos infinitesimais:

$$\begin{aligned} [\hat{m}, \exp(i\theta^a t^a)]_{jk} &= [\hat{m}, \mathbf{I} + i\theta^a t^a + O(\theta^2)]_{jk} \\ &= i\theta^a [\hat{m}, t^a]_{jk} + O(\theta^2) \\ &= i\theta^a \left\{ m_j \delta_{jl} (t^a)_{lk} - (t^a)_{jl} m_l \delta_{lk} \right\} + O(\theta^2) \\ &= i\theta^a \{m_j - m_k\} (t^a)_{jk} + O(\theta^2) \end{aligned}$$

Portanto, o termo de massa é invariante se a matriz de massa for proporcional à identidade. Dessa forma, conclui-se que a simetria de sabor da QCD seria exata *apenas* se as massas dos quarks fossem idênticas.

Mesmo assim, quando se trabalha somente com os sabores mais leves (u , d e s) – setor leve da QCD – é útil pensar numa *simetria de sabor aproximada* em situações tais que a diferença entre as massas possam ser desprezadas.

2.2.1.2 Simetria quiral

Por simplicidade, consideremos o caso com apenas dois sabores (u e d), ou seja, faz-se $\{\psi_j(x); j = u, d\}$ em (2.1) e a lagrangiana se torna:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu} + \sum_{j=\{u,d\}} \bar{\psi}_j (i\gamma^\mu D_\mu - m_j) \psi_j \quad (2.12)$$

analisemos, agora, o efeito da seguinte transformação global $SU(2)$ quiral de sabor:

$$\begin{aligned} \psi_j(x) &\rightarrow \psi'_j(x) = U(\beta)_{jk} \psi_k(x) \\ \psi_j^\dagger(x) &\rightarrow \psi'^\dagger_j(x) = \psi_k^\dagger(x) U(\beta)^\dagger_{kj} \\ U(\beta)_{jk} &= \left(\exp \left[i\beta^a \frac{\tau^a}{2} \gamma_5 \right] \right)_{jk} \end{aligned} \quad (2.13)$$

sobre a lagrangiana (2.12) em que γ_5 é uma matriz hermiteana que age sobre os espiniores e anticomuta com todas as quatro matrizes de Dirac, $\{\tau^a; a = 1, 2, 3\}$ são as matrizes de Pauli e $\{\beta^a\}$ são constantes reais. Tal como acima, será usada a notação $\psi^T = (\psi_u, \psi_d)$.

Novamente, os termos envolvendo os glúons são invariantes. O termo cinético para os férmions também é invariante:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi \rightarrow (\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi)' &= \psi'^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\partial_\mu\psi' \\ &= \psi^\dagger\left(\exp\left[-i\beta^a\frac{\tau^a}{2}\gamma_5\right]\right)\gamma^0\gamma^\mu\left(\exp\left[i\beta^a\frac{\tau^a}{2}\gamma_5\right]\right)\partial_\mu\psi \\ &= \psi^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\left(\exp\left[-i\beta^a\frac{\tau^a}{2}\gamma_5\right]\right)\left(\exp\left[i\beta^a\frac{\tau^a}{2}\gamma_5\right]\right)\partial_\mu\psi \\ &= \bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi \end{aligned}$$

em que usou-se $(\exp[-i\beta^a\frac{\tau^a}{2}\gamma_5])\gamma^\mu = \gamma^\mu(\exp[i\beta^a\frac{\tau^a}{2}\gamma_5])$ devido às relações de anticomutação. De modo semelhante, mostra-se a invariância de $\bar{\psi}\gamma^\mu A_\mu\psi$. Por fim, analisemos o termo de massa:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}\hat{m}\psi \rightarrow (\bar{\psi}\hat{m}\psi)' &= \psi'^\dagger\gamma^0\hat{m}\psi' \\ &= \psi^\dagger\left(\exp\left[-i\beta^a\frac{\tau^a}{2}\gamma_5\right]\right)\gamma^0\hat{m}\left(\exp\left[i\beta^a\frac{\tau^a}{2}\gamma_5\right]\right)\psi \\ &= \bar{\psi}\left(\exp\left[i\beta^a\frac{\tau^a}{2}\gamma_5\right]\right)\hat{m}\left(\exp\left[-i\beta^a\frac{\tau^a}{2}\gamma_5\right]\right)\psi \end{aligned}$$

Tem-se, portanto, que o termo de massa viola a simetria quiral de (2.12). Assim, a simetria quiral na QCD seria exata apenas se os quarks fossem não massivos.

Como os quarks u e d são muito leves em comparação com as escalas de massas típicas no espectro hadrônico, por vezes é útil analisar um problema sob o ponto de vista da simetria quiral; conforme será mostrado na seção seguinte.

2.3 O modelo de Nambu e Jona-Lasinio

O modelo de Nambu e Jona-Lasinio (NJL) permite entender as massas dos núcleons e dos píons como efeito da *quebra dinâmica da simetria quiral* da teoria fundamental das interações fortes [22, 23]. No início da década de 1960, os quarks e a própria QCD eram desconhecidos, portanto, originalmente os graus de liberdade fundamentais do modelo NJL eram os núcleons; atualmente, o modelo é reinterpretado em termos de quarks u e d [21, 24].

O modelo foi inspirado por uma analogia entre as equações obedecidas por espiniores de Dirac e as que descrevem excitações do tipo quasi-partículas na teoria da supercondutividade desenvolvida por Bardeen, Cooper e Schrieffer em 1957 [25]. Nesta teoria, interações efetivas atrativas entre elétrons devido a efeitos da rede formam pares de elétrons correlacionados, a energia necessária para desfazer essa correlação dá origem ao *gap de energia* entre o estado fundamental e os estados excitados e as excitações são descritas como combinações de estados de elétrons e buracos [22].

Um ponto importante é que o estado fundamental do sistema na fase supercondutora *não* é invariante sob transformações de gauge $U(1)$, ao contrário do operador hamiltoniano, ou, em outros termos, o estado fundamental não é autoestado do operador de carga elétrica (gerador do grupo de simetria). Como o estado fundamental não é invariante pelas mesmas transformações que deixam o hamiltoniano invariante, ou seja, o estado fundamental possui menos simetria que o hamiltoniano, diz-se que houve uma *quebra dinâmica de simetria* [21, 24], pois a dinâmica das interações causa a quebra. O gap de energia é entendido como consequência dessa quebra de simetria.

A partir da referida analogia, Nambu e Jona-Lasinio associaram o gap de energia à massa dos férmions, os autoestados de carga (elétron e buraco) que descrevem excitações no supercondutor foram associados a autoestados de férmions não massivos com quiralidades opostas em termos dos quais os férmions massivos são expressos; dessa forma, a massa dos férmions é entendida como consequência da quebra da simetria quiral.

Escolhendo uma lagrangiana com a simetria quiral $U(1)$ exata e usando um método autoconsistente [21, 22] – para tratar a teoria não perturbativamente a fim de procurar por soluções com quebra de simetria, Nambu e Jona-Lasinio perceberam que bósons pseudoescalares sem massa e que interagem com os férmions surgiam como consequência de o hamiltoniano ser invariante e, ainda assim, os férmions adquirem massa. Portanto, duas consequências imediatas da quebra de simetria quiral são os férmions adquirem massa e interagem com bósons não massivos, ainda que estes não tivessem sido considerados na teoria desde o início.

De fato, é um resultado geral conhecido como *Teorema de Goldstone* – provado após o trabalho de (NJL) – que a cada simetria de gauge *global* do hamiltoniano não respeitada pelo estado fundamental (vácuo) corresponde um bóson não massivo com os mesmos números quânticos da carga associada à respectiva simetria quebrada, genericamente chamado *bóson de Goldstone* [24, 26, 27]. No caso em questão, a carga conservada é um operador pseudoescalar e, portanto, o bóson de Goldstone é um pseudoescalar. Nambu e Jona-Lasinio associaram tal bóson ao pión, que é pseudoescalar [22, 23]; entretanto, era sabido que os píons são massivos, apesar de suas massas serem pequenas em comparação com os demais hádrons.

A fim de descrever a massa não nula observada para os píons, NJL sugeriram que a lagrangiana tivesse a simetria quiral ligeiramente quebrada *explicitamente* (simetria aproximada ou quase exata); para isso, adicionaram um termo de massa para os férmions e introduziram os graus de liberdade de isospin [23] (sabores u e d na interpretação em termos de quarks), chegando à seguinte lagrangiana:

$$\mathcal{L}_{NJL} = \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - \hat{m}_0) \psi + \frac{G}{2} \left[(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\vec{\tau}\psi)^2 \right] \quad (2.14)$$

em que novamente foi usada a notação $\psi^T(x) = (\psi_u(x), \psi_d(x))$ com $\{\psi_j(x); j = u, d\}$ espiniores de Dirac ($\bar{\psi}_j = \psi_j^\dagger \gamma^0$) que descrevem os quarks u e d ; \hat{m}_0 é a matriz de massa,

cujos elementos são as massas dos respectivos sabores $(\hat{m}_0)_{ij} = m_i \delta_{ij}$, as matrizes τ^a ; $a = 1, 2, 3$ são as matrizes de Pauli e G é a constante de acoplamento do modelo. Para a escolha do termo de interação em (2.14), foram impostas as exigências de que a interação entre partícula e antipartícula fosse atrativa (para ser possível a formação de estados ligados, os quais são identificados com mésons) e de que ela fosse invariante sob as transformações globais de $SU(2)$ quiral dadas por (2.13) (para que, com a quebra dinâmica da simetria $SU(2)$ quiral, emergissem bósons de Goldstone pseudoescalares e isovetoriais, os quais foram identificados com os píons).

É importante comentar que o modelo é não renormalizável em quatro dimensões espaço-temporais, de modo a ser necessária a definição de um *cutoff* para as integrais de *loop* no espaço dos momentos. Dessa forma, escolhendo o mesmo valor para as massas de ambos os sabores (para manter exata a simetria isospin), o modelo possui três parâmetros livres: a massa na lagrangiana (massa de corrente), o *cutoff* e a constante de acoplamento, que podem ser ajustados para reproduzir observáveis como as massas de alguns mésons e constantes de acoplamento entre mésons e núcleons. Encontra-se, por exemplo, que o *cutoff* deve ser da ordem da massa do núcleon. Um resultado notável do modelo foi estimar em 5 MeV a massa de corrente necessária para reproduzir a massa observada dos píons, o que é impressionante, visto que as massas dos quarks u e d são dessa ordem; além disso, o modelo fornece vínculos para as massas de outros mésons.

Por fim, vale comentar que o fator decisivo para as implicações do modelo é a quebra dinâmica da simetria quiral e *não* a escolha feita para o termo de interação em (2.14), pois qualquer outra interação que levasse à quebra da simetria quiral teria como consequência bósons pseudoescalares no limite de simetria exata interagindo com os férmions. Obviamente, um modelo diferente apresentaria resultados numéricos diferentes, mas qualitativamente seria muito semelhante.

Mais adiante, estaremos interessados nas transições de fase associadas à restauração da simetria quiral bem como ao desconfinamento a temperaturas suficientemente altas e a versão modificada do modelo NJL apresentada na próxima seção será utilizada.

2.4 O modelo de Polyakov Nambu e Jona-Lasinio

O modelo NJL é uma teoria efetiva que modela a quebra dinâmica da simetria quiral aproximada que ocorre no setor leve da QCD e consegue descrever a transição de fase quiral à temperatura finita. Entretanto, nesse modelo a simetria de calibre de cor é *global* em vez de local e, portanto, o modelo NJL *não* é capaz de descrever o confinamento.

No limite em que as massas dos quarks são infinitas, ou seja, limite em que os quarks são pesados demais para serem excitados, a QCD torna-se uma teoria de puro calibre pois os únicos graus de liberdade são os glúons. Como será discutido na Seção 3.4, neste limite, a teoria à temperatura finita apresenta uma simetria sob o centro $Z(3)$

do grupo de gauge $SU(3)^{10}$ que permite identificar o traço do loop de Polyakov, ϕ (definido a seguir), como um parâmetro de ordem para a transição de desconfinamento: seu valor médio termodinâmico¹¹ é nulo na fase em que há confinamento e não-nulo na fase desconfiada [28].

Portanto, o modelo que usaremos para descrever simultaneamente ambas as transições é o modelo NJL estendido de modo a incluir o loop de Polyakov; esse modelo é chamado modelo Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio (PNJL) e definido pela densidade lagrangiana [12]:

$$\mathcal{L}_{PNJL} = \bar{\psi} (i\not{D} - m_0) \psi + \frac{G}{2} \left[(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\vec{\tau}\psi)^2 \right] - \mathcal{U}(\bar{\phi}, \phi, T) \quad (2.15)$$

a qual depende da temperatura T , o potencial $\mathcal{U}(\bar{\phi}, \phi, T)$ bem como as quantidades $\bar{\phi}$ e ϕ serão definidas logo adiante. Nesta lagrangiana, ψ é um espinor de Dirac com índices A de cor e a de sabor (tal como na Seção 2.2):

$$\psi(x) = \{\psi_A(x); \mathbf{A} = (\alpha, a, A), \alpha = 1, \dots, 4; a = u, d; A = r, g, b\}$$

pois estamos interessados apenas nos quarks mais leves u e d e m_0 é a massa de corrente, assumida a mesma para ambos os sabores – caso com simetria de isospin. Esse modelo é, então, conhecido como modelo PNJL com dois sabores.

A primeira diferença entre a lagrangiana (2.15) e a do modelo NJL (2.14) é a introdução de um campo de calibre $\mathbb{A}_\mu(x)$ através de \mathbb{D}_μ :

$$\mathbb{D}_\mu = \partial_\mu - i\mathbb{A}_\mu, \quad \mathbb{A}_\mu = \delta_{\mu 0}\mathbb{A}_0, \quad \mathbb{A}_\mu(x) = gA_\mu^a(x)\frac{\lambda^a}{2}$$

em que $\left\{ \frac{\lambda^a}{2}; a = 1, \dots, 8 \right\}$ são os oito geradores do grupo $SU(3)$ de cor e g é uma constante de acoplamento entre os férmions e esse campo. Note-se que, por não haver uma dinâmica associada ao campo \mathbb{A}_μ (não ha termo cinético associado a \mathbb{A}_μ), ele é entendido como um campo de fundo, uma fonte externa, que dá origem ao *loop* de Polyakov $L(\vec{x})^{12}$:

$$L(\vec{x}) = \mathcal{T} \exp \left[i \int_0^\beta d\tau \mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau) \right], \quad \beta = \frac{1}{T} \quad (2.16)$$

que é uma matriz no espaço de cor; \mathcal{T} indica que a integral deve ser feita ordenando a variável de integração τ de modo que campos com o argumento τ maior ficam à esquerda na expansão da exponencial:

$$\mathcal{T} \exp \left[i \int_0^\beta d\tau \mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau) \right] = \mathbf{1}_3 + i \int_0^\beta d\tau \mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau) + \frac{i^2}{2!} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \mathcal{T} [\mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau_1) \mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau_2)] + \dots$$

¹⁰ A ser explicada na Seção 3.4.

¹¹ Valores médios termodinâmicos serão definidos na Subseção 3.1.2.

¹² Como será visto no Capítulo 4, o grande potencial termodinâmico associado à lagrangiana (2.15) pode ser expressa em termos do *loop* de Polyakov.

$$\mathcal{T} [\mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau_1) \mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau_2)] = \begin{cases} \mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau_1) \mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau_2) & \text{se } \tau_1 > \tau_2 \\ \mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau_2) \mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau_1) & \text{se } \tau_2 > \tau_1 \end{cases} \quad (2.17)$$

em que $\mathbf{1}_3$ denota a matriz identidade no espaço de cor. Conforme adiantado, o parâmetro de ordem é o traço de $L(\vec{x})$ definido acima:

$$\phi(\vec{x}) = \frac{\text{Tr}_c [L]}{N_c} \quad \bar{\phi}(\vec{x}) = \frac{\text{Tr}_c [L^\dagger]}{N_c} \quad (2.18)$$

em que N_c é o número de cores, que será tomado $N_c = 3$ neste trabalho. É comum também se referir ao traço como *loop* de Polyakov.

Em adição, temos também o potencial efetivo $\mathcal{U}(\bar{\phi}, \phi, T)$, dependente da temperatura T , que descreve o parâmetro de ordem ϕ na ausência de quarks e é dado por

$$\mathcal{U}(\bar{\phi}, \phi, T) = T^4 \left\{ -\frac{b_2(T)}{2} \bar{\phi}\phi - \frac{b_3}{6} (\bar{\phi}^3 + \phi^3) + \frac{b_4}{4} (\bar{\phi}\phi)^2 \right\} \quad (2.19)$$

$$b_2(T) = \alpha_0 + \alpha_1 \left(\frac{T_0}{T} \right) + \alpha_2 \left(\frac{T_0}{T} \right)^2 + \alpha_3 \left(\frac{T_0}{T} \right)^3 \quad (2.20)$$

assim escolhido por ser invariante sob $Z(3)$ e ser uma expressão simples, porém capaz de reproduzir a transição de primeira ordem observada em cálculos de puro gauge de QCD na rede, com mínimos em zero e em um para temperaturas baixas e altas respectivamente. De fato, os parâmetros em (2.19) são obtidos ajustando os resultados fornecidos pelo modelo aos que se obtêm por cálculos de QCD na rede no setor de puro gauge à temperatura finita [12]. No próximo capítulo definiremos o que são parâmetros de ordem e, então, a associação entre o valor numérico de ϕ e o fato de se há ou não confinamento será descrita com detalhes.

Conforme já citado na seção anterior, o modelo NJL não é renormalizável e é necessária a introdução de um *cutoff* Λ para integrais no espaço de momentos; o mesmo vale para o modelo PNJL. Assim, além dos parâmetros que definem \mathcal{U} , é necessário definir os valores numéricos dos parâmetros: massa de corrente m_0 , *cutoff* Λ e constante de acoplamento G referentes ao modelo NJL. Estes parâmetros são determinados ajustando os valores para a massa do pión (m_π), constante de decaimento do pión (f_π) e do condensado quiral calculados através do modelo NJL aos valores experimentais de m_π e f_π e ao valor do condensado quiral obtido via regras de soma da QCD,¹³ conforme descrito na Ref. [12], cujos valores obtidos para todos os parâmetros são os utilizados no presente trabalho.

¹³ QCD sum rules.

CAPÍTULO 3

TEORIA QUÂNTICA DE CAMPOS À
TEMPERATURA FINITA, FENÔMENOS
CRÍTICOS E DINÂMICA DE NÃO
EQUILÍBRIO

Este capítulo tem como objetivo estabelecer o formalismo da teoria quântica de campos à temperatura finita. Para isso, iniciaremos com uma breve revisão sobre termodinâmica e mecânica estatística e a relação entre elas. Em seguida, discutiremos como calcular a função de partição em teoria quântica de campos usando integrais de trajetória. Como o intuito deste trabalho é estudar a dinâmica de como o equilíbrio térmico é atingido após um *quench*, discutiremos sobre fenômenos críticos e introduziremos a equação de Ginzburg-Landau-Langevin para estudar sistemas ligeiramente fora do equilíbrio. O capítulo se encerra com a definição dos parâmetros de ordem que descrevem as transições de fase quiral e de desconfinamento.

3.1 Sistemas em equilíbrio termodinâmico

3.1.1 Termodinâmica de equilíbrio

O primeiro ramo da Física a estudar sistemas compostos por um número muito grande de partículas em equilíbrio térmico – como porções cotidianas de gases ou líquidos – foi a Termodinâmica. Ela procura descrever propriedades térmicas dos materiais estabelecendo, empiricamente, relações entre propriedades *macroscópicas* tais como: pressão, temperatura, volume, momentos elétrico ou magnético, energia, entropia... Tais grandezas, também chamadas *variáveis termodinâmicas*, são ditas macroscópicas porque

descrevem o sistema como um todo.

Usualmente, essas grandezas são relacionadas entre si através de *equações de estado*, as quais permitem determinar várias grandezas macroscópicas a partir de outras. Dessa forma, conhecendo *todas* as equações de estado, pode-se conhecer *todas* as variáveis termodinâmicas a partir de algumas poucas, ou seja, pode-se determinar o estado termodinâmico do sistema, o que é chamado de *macroestado*. A completa caracterização termodinâmica de um sistema é dada pelo conjunto de suas equações de estado. Nesse sentido, é possível definir funções termodinâmicas, chamadas *potenciais termodinâmicos*, que fornecem todas as equações de estado a partir de derivadas parciais e, deste modo, os potenciais termodinâmicos contém toda a informação termodinâmica sobre o sistema, desde que estejam expressos em termos de suas *variáveis naturais*.

Por exemplo, a Primeira Lei da Termodinâmica¹ para processos quasi-estáticos² envolvendo um fluido composto de uma única substância em que seja possível a troca de partículas com o meio externo é dada por:

$$dU = TdS - pdV + \mu dN \quad (3.1)$$

que relaciona a energia interna U , a temperatura T , a entropia S , a pressão p , o volume V , o potencial químico μ , e o número de partículas N ; nesta, as diferenciais indicam as variações nas grandezas durante um processo quasi-estático. Esta expressão revela que a energia interna possui S , V e N como variáveis naturais, ou seja, $U = U(S, V, N)$. Conhecendo-se a função $U(S, V, N)$, as equações de estado podem ser obtidas:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial S} \right|_{V,N} = T(S, V, N) \quad \left. \frac{\partial U}{\partial V} \right|_{S,N} = -p(S, V, N) \quad \left. \frac{\partial U}{\partial N} \right|_{S,V} = \mu(S, V, N) \quad (3.2)$$

é neste sentido que a função $U(S, V, N)$ contém toda a informação termodinâmica sobre o sistema.

Outros potenciais termodinâmicos podem ser obtidos a partir da energia interna via transformações de Legendre, cujo efeito é expressar a mesma informação termodinâmica em função de outras variáveis naturais – que sejam mais convenientes ao aparato experimental disponível, por exemplo. Os potenciais que usaremos para fazer a conexão entre a Mecânica Estatística e a Termodinâmica são a *energia livre de Helmholtz* F e o *grande potencial termodinâmico*³ \mathcal{J} , ou simplesmente grande potencial, definidos por:

$$F(T, V, N) \equiv U - TS \quad \mathcal{J}(T, V, \mu) \equiv U - TS - \mu N = F - \mu N \quad (3.3)$$

¹ A Primeira Lei da Termodinâmica exprime a conservação de energia para sistemas em contato com um banho térmico.

² Um processo é dito quasi-estático se o sistema encontra-se num estado de equilíbrio termodinâmico, ou infinitesimalmente próximo a um, durante todo o processo. Claramente, processos quasi-estáticos são infinitamente lentos, pois requerem alterações infinitesimais dos parâmetros de controle e que se espere tempo suficiente para o sistema reestabelecer o equilíbrio a cada alteração. Entretanto, tais processos são uma idealização útil.

³ Também chamado de potencial grande canônico [29].

em que indicamos as respectivas variáveis naturais; isso pode ser verificado tomando as diferenciais dessas definições⁴:

$$\begin{aligned} dF &= dU - TdS - SdT = -SdT - pdV + \mu dN \\ d\mathcal{J} &= dF - \mu dN - Nd\mu = -SdT - pdV - Nd\mu \end{aligned} \quad (3.4)$$

Tendo feito essa breve revisão sobre termodinâmica baseada nas Refs. [13, 29, 30], será apresentado como a Mecânica Estatística de Equilíbrio fornece uma descrição da termodinâmica de um sistema. Para isso, serão usadas as Refs. [13, 30].

3.1.2 Mecânica Estatística

A Mecânica Estatística procura obter a termodinâmica que descreve um sistema a partir da dinâmica entre seus constituintes; portanto, estabelece uma conexão entre as descrições microscópica e macroscópica de um sistema físico.

Tomemos como exemplo um sistema clássico de N partículas com a dinâmica determinada por uma hamiltoniana; segundo a Mecânica Clássica, o estado do sistema, que no contexto de mecânica estatística é chamado *microestado*, é determinado por um ponto $(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, \vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N)$ no *espaço de fase* e, ao menos em princípio, conhecendo o estado num dado instante de tempo, pode-se saber o estado em qualquer outro instante. De modo semelhante, se o referido sistema é descrito pela Mecânica Quântica e a dinâmica é definida por um operador hamiltoniano, o estado é definido por um *vetor de estado* $|\psi\rangle$ num espaço de Hilbert e, novamente, conhecendo o estado num instante pode-se calcular o estado em qualquer outro. Dessa forma, parece que uma *descrição microscópica*, ou seja, a partir dos graus de liberdade que descrevem o sistema, é sempre possível.

Entretanto, em sistemas macroscópicos usuais, o número de partículas (e o de graus de liberdade) é demasiadamente grande – em 18 g de água há da ordem de $6,02 \times 10^{23}$ moléculas de água. Para uma completa descrição clássica, a quantidade de equações diferenciais a ser resolvidas é da mesma magnitude; para uma descrição quântica, a quantidade de argumentos da função de onda seria igualmente elevado. Do ponto de vista experimental, simplesmente não há como reproduzir com precisão arbitrariamente grande um estado com tantas partículas assim. Usualmente, somente é possível conhecer o estado termodinâmico, chamado *macroestado*, com o qual há vários microestados (configurações do sistema) compatíveis.

Em face do acima exposto, é natural que a mecânica estatística seja baseada em *distribuições de probabilidade* de o sistema estar em determinados microestados compatíveis com um dado macroestado. A seguir será explicado como isso é feito, baseado em uma descrição quântica e seguindo [30].

⁴ Note-se que para F depender de T, V, N é necessário que $T = T(S, V, N)$ em (3.2) seja invertível para fornecer $S = S(T, V, N)$; comentário semelhante vale para as variáveis naturais de \mathcal{J} : é preciso que $\mu(T, V, N) = \left. \frac{\partial F}{\partial N} \right|_{T, V}$ seja invertível para fornecer $N = N(T, V, \mu)$.

Dado um macroestado, existe um conjunto C de microestados com ele compatíveis $C = \{|\psi_n\rangle; n = 1, 2, \dots\}$ em que os estados $|\psi_n\rangle$ são normalizados mas *não* necessariamente ortogonais e assumidos enumeráveis por simplicidade; a esse conjunto associa-se uma *distribuição de probabilidade* \mathcal{P} definida pelo conjunto de probabilidades $\mathcal{P} = \{p_n; p_n \geq 0 \text{ e } \sum_n p_n = 1\}$ de o sistema estar no estado $|\psi_n\rangle$ ⁵; ou seja, em vez de conhecer o estado que descreve o sistema, sabe-se a probabilidade de que ele esteja em cada um dos estados em C ; diz-se então que o sistema está numa *mistura estatística*⁶. Neste caso, o sistema é descrito por um *operador densidade*⁷ \hat{D} :

$$\hat{D} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \quad (3.5)$$

que é hermitiano e pode ser diagonalizado; em termos de seus autoestados $|m\rangle$ e autovalores P_m , \hat{D} é dado por:

$$\hat{D} = \sum_m P_m |m\rangle \langle m| \quad (3.6)$$

por (3.5), vê-se que $\text{Tr}(\hat{D}) = \sum_n p_n = 1$.

Quando o sistema está numa mistura estatística \mathcal{P} , o valor esperado de um observável \hat{A} é definido como a média ponderada do valor esperado associado a cada estado que define \mathcal{P} :

$$\langle \hat{A} \rangle_{\mathcal{P}} = \sum_n p_n \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle \quad (3.7)$$

esse valor esperado pode ser expresso em termos do operador densidade a que corresponde \mathcal{P} . Para isso, note-se que, sendo $|\chi\rangle$ e $|\phi\rangle$ dois vetores de estado quaisquer e o conjunto $\{|i\rangle\}$ um conjunto completo e ortonormal:

$$\langle \phi | \chi \rangle = \sum_i \langle \phi | i \rangle \langle i | \chi \rangle = \sum_i \langle i | \chi \rangle \langle \phi | i \rangle = \text{Tr}(|\chi\rangle \langle \phi|) \quad (3.8)$$

assim, $\langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle = \text{Tr}(\hat{A} | \psi_n \rangle \langle \psi_n |)$, o que permite escrever:

$$\langle \hat{A} \rangle_{\mathcal{P}} = \sum_n p_n \text{Tr}(\hat{A} | \psi_n \rangle \langle \psi_n |) = \text{Tr}(\hat{A} \sum_n p_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n |) = \text{Tr}(\hat{A} \hat{D}) \quad (3.9)$$

A partir do operador densidade, define-se a *entropia estatística*:

$$S_{est.}[\hat{D}] = -k_B \sum_m P_m \ln(P_m) = -k_B \text{Tr} \left[\hat{D} \ln(\hat{D}) \right] \quad (3.10)$$

⁵ Quando se diz “o sistema está no estado $|\psi_n\rangle$ ” significa que o estado $|\psi_n\rangle$ descreve completamente o sistema.

⁶ Note-se que, sendo $B = \{|\varphi_i\rangle; i = 1, \dots, n\}$ uma base do espaço de Hilbert em que $|\varphi_i\rangle$ é autovetor de um dado observável \mathcal{O} com autovalor f_i e se o sistema está no estado normalizado $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |\varphi_i\rangle$, $|c_i|^2$ *não* é a probabilidade de o sistema ser descrito por $|\varphi_i\rangle$, mas sim a probabilidade de uma medição de \mathcal{O} fornecer o autovalor f_i . O estado do sistema é bem determinado: $|\psi\rangle$. Neste caso, diz-se que o sistema está num *estado puro*.

⁷ Além de [30], uma boa apresentação sobre operador densidade é encontrada no complemento E_{III} de [31].

em que k_B é a constante de Boltzmann. $S_{est.}$ mede a falta de informação numa distribuição de probabilidades; isso é fácil de entender considerando dois casos extremos: o primeiro em que apenas um dos P_m é não nulo (igual a 1), o que fornece $S_{est.} = 0$ e o caso em que há M estados com mesma probabilidade $P = \frac{1}{M}$, o que fornece $S_{est.} = k_B \ln M$.

O operador densidade que descreve corretamente o sistema em equilíbrio termodinâmico é obtido aplicando o *postulado da máxima entropia estatística* [30], segundo o qual o operador densidade que corresponde a uma distribuição de probabilidade menos viesada e condizente com os vínculos macroscópicos é aquele que maximiza a entropia estatística. A seguir, é mostrado como o macroestado restringe o operador densidade.

Suponha que apenas os valores médios $A_i = \text{Tr}(\hat{A}_i \hat{D})$ sejam conhecidos; por (3.10), $S_{est.}$ deve ser maximizada sujeita às restrições:

$$A_i = \text{Tr}(\hat{A}_i \hat{D}) \quad \text{Tr} \hat{D} = 1 \quad (3.11)$$

Para isso, utilizam-se multiplicadores de Lagrange λ_i e a seguinte expressão é maximizada com respeito a \hat{D} :

$$\begin{aligned} \tilde{S}[\hat{D}] &= k_B \left\{ -\text{Tr}[\hat{D} \ln \hat{D}] + \sum_i \lambda_i [\text{Tr}(\hat{A}_i \hat{D}) - A_i] - \lambda_0 [\text{Tr} \hat{D} - 1] \right\} \\ &= k_B \left\{ -\text{Tr} \left[\hat{D} \ln \hat{D} - \sum_i \lambda_i \hat{A}_i \hat{D} + \lambda_0 \hat{D} \right] + \lambda_0 - \sum_i \lambda_i A_i \right\} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Usando $d\text{Tr}[f(\hat{D})] = \text{Tr}[f'(\hat{D}) d\hat{D}]$, obtém-se:

$$d\tilde{S}[\hat{D}] = -k_B \text{Tr} \left\{ \left[\ln(\hat{D}) + 1 - \sum_i \lambda_i \hat{A}_i + \lambda_0 \right] d\hat{D} \right\} \quad (3.13)$$

Para que $S_{est.}[D]$ seja máxima e as condições (3.11) sejam satisfeitas, deve-se ter $d\tilde{S}[\hat{D}] = 0$ para qualquer diferencial $d\hat{D}$; assim:

$$\ln(\hat{D}) + 1 - \sum_i \lambda_i \hat{A}_i + \lambda_0 = 0$$

$$\therefore \hat{D} = e^{-(1+\lambda_0)} \exp \left(\sum_i \lambda_i \hat{A}_i \right) \quad (3.14)$$

Como $\text{Tr} \hat{D} = 1$:

$$e^{-(1+\lambda_0)} \text{Tr} \left[\exp \left(\sum_i \lambda_i \hat{A}_i \right) \right] = 1 \Rightarrow e^{(1+\lambda_0)} = \text{Tr} \left[\exp \left(\sum_i \lambda_i \hat{A}_i \right) \right] \equiv Z \quad (3.15)$$

Z define a *função de partição*, cuja importância será discutida logo adiante.

Dessa forma, denotando por \hat{D}_B o operador que maximiza $S_{est.}[D]$ sujeito às restrições (3.11), que corresponde à *distribuição de Boltzmann*, escreve-se:

$$\hat{D}_B = \frac{1}{Z} \exp \left(\sum_i \lambda_i \hat{A}_i \right), \quad Z = \text{Tr} \left[\exp \left(\sum_i \lambda_i \hat{A}_i \right) \right] \quad (3.16)$$

e sendo $S_B \equiv S_{est.}[\hat{D}_B]$ a entropia maximizada:

$$S_B = -k_B \text{Tr} \left[\hat{D}_B \ln \hat{D}_B \right] = -k_B \text{Tr} \left[\hat{D}_B \left(-\ln Z + \sum_i \lambda_i \hat{A}_i \right) \right]$$

$$S_B = k_B \left(\ln Z - \sum_i \lambda_i A_i \right) \quad (3.17)$$

É importante notar que os valores médios A_i podem ser obtidos a partir da função de partição Z , pois:

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda_i} = \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \left\{ \text{Tr} \left[\exp \left(\sum_j \lambda_j \hat{A}_j \right) \right] \right\} = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[\hat{A}_i \exp \left(\sum_j \lambda_j \hat{A}_j \right) \right] = \text{Tr} \left(\hat{A}_i \hat{D}_B \right)$$

$$\therefore A_i = \frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda_i} \quad (3.18)$$

assim, a função $\ln Z$ quando expressa em termos dos multiplicadores de Lagrange é uma *função geratriz* dos valores médios termodinâmicos; de fato a determinação $\ln Z$ fornece toda a termodinâmica do sistema. Além disso, por (3.17) e (3.18) vê-se que S_B é a transformada de Legendre de $\ln Z$ e, sendo $\ln Z$ função dos multiplicadores λ_i , S_B é função natural dos valores termodinâmicos A_i .

3.1.3 Conexão entre Termodinâmica e Mecânica Estatística

Nas duas subseções anteriores vimos como a termodinâmica e a mecânica estatística descrevem sistemas físicos macroscópicos; nesta subseção, procuraremos mostrar que as realações termodinâmicas empíricas podem ser obtidas a partir da microscopia utilizando a mecânica estatística. Para estabelecer essa conexão entre ambas as descrições, adotaremos as Refs. [30] e [19]; serão considerados os ensembles *canônico* e *grande canônico*.

3.1.3.1 Ensemble Canônico

O ensemble canônico é conveniente para descrever sistemas que podem trocar calor com um banho térmico à temperatura T , mas com número fixo de partículas e volume bem definido; o vínculo macroscópico é dado pelo valor médio E do hamiltoniano \hat{H} ao qual é associado o multiplicador de Lagrange $-\beta$. Portanto, (3.16) fornece:

$$\hat{D}_B = \frac{1}{Z} \exp \left(-\beta \hat{H} \right) \quad Z = \text{Tr} \left[\exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right] \quad (3.19)$$

$$E = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[\hat{H} \exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right] = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (3.20)$$

e a equação (3.17) fica:

$$S_B = k_B (\ln Z + \beta E) \quad (3.21)$$

Rearranjando os termos:

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z = E - \frac{1}{k_B \beta} S_B \quad (3.22)$$

e notando a semelhança com a equação termodinâmica que define a energia livre de Helmholtz F em (3.3), fazem-se as seguintes identificações:

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z \leftrightarrow F \quad E \leftrightarrow U \quad \beta \leftrightarrow \frac{1}{k_B T} \quad S_B \leftrightarrow S \quad (3.23)$$

Destas identificações, fica evidente que a função $\ln Z$ contém toda a informação termodinâmica, pois fornece um potencial termodinâmico.

3.1.3.2 Ensemble Grande Canônico

O ensemble grande canônico é conveniente quando se permite ao sistema trocar calor e partículas com um reservatório à temperatura T e potencial químico μ ; assim, além do valor médio E do hamiltoniano \hat{H} , tem-se acesso ao número médio de partículas no sistema $\bar{N} = \text{Tr}(\hat{N}\hat{D})$ em que \hat{N} é o operador número de partículas do sistema. Designando por $-\beta$ e α os multiplicadores de Lagrange associados a E e a N respectivamente, deve-se maximizar com respeito a \hat{D} a função \tilde{S} :

$$\tilde{S}[\hat{D}] = k_B \left\{ -\text{Tr} [\hat{D} \ln \hat{D}] - \beta [\text{Tr} (\hat{H}\hat{D}) - E] + \alpha [\text{Tr} (\hat{N}\hat{D}) - \bar{N}] - \lambda_0 [\text{Tr} \hat{D} - 1] \right\} \quad (3.24)$$

o que fornece o operador densidade de equilíbrio \hat{D}_B e a *grande função de partição* Ξ :

$$\hat{D}_B = \frac{1}{\Xi} \exp(-\beta\hat{H} + \alpha\hat{N}), \quad \Xi = \text{Tr} \left[\exp(-\beta\hat{H} + \alpha\hat{N}) \right] \quad (3.25)$$

Os valores médios termodinâmicos da energia e do número de partículas são:

$$E = \frac{1}{\Xi} \text{Tr} \left[\hat{H} (-\beta\hat{H} + \alpha\hat{N}) \right] \quad \bar{N} = \frac{1}{\Xi} \text{Tr} \left[\hat{N} (-\beta\hat{H} + \alpha\hat{N}) \right] \quad (3.26)$$

A entropia estatística é dada por

$$S_B = k_B (\ln \Xi + \beta E - \alpha \bar{N}) \quad (3.27)$$

de onde se encontra

$$-\frac{1}{\beta} \ln \Xi = E - \frac{1}{k_B \beta} S_B - \frac{\alpha}{\beta} \bar{N} \quad (3.28)$$

Comparando com (3.3) se identificam:

$$-\frac{1}{\beta} \ln \Xi \leftrightarrow \mathcal{J}, \quad E \leftrightarrow U, \quad \beta \leftrightarrow \frac{1}{k_B T}, \quad S_B \leftrightarrow S, \quad \alpha = \frac{\mu}{k_B T}, \quad \bar{N} \leftrightarrow N \quad (3.29)$$

e (3.25) se torna

$$\hat{D}_B = \frac{1}{\Xi} \exp \left[-\beta (\hat{H} - \mu\hat{N}) \right], \quad \Xi = \text{Tr} \left(\exp \left[-\beta (\hat{H} - \mu\hat{N}) \right] \right), \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (3.30)$$

Novamente, a função $\ln \Xi$ contém toda a informação termodinâmica, pois fornece um potencial termodinâmico – o grande potencial termodinâmico.

É importante comentar que o potencial químico no ensemble grande canônico está, de um modo geral, associado a uma lei de conservação do sistema. Em Mecânica Clássica e Mecânica Quântica não relativística, o número de partículas de um sistema fechado é conservado; portanto, em sistemas como fluidos não relativísticos, a quantidade de partículas do conjunto sistema *mais* reservatório é fixa (tal qual a energia).

Entretanto, isso *não* ocorre para sistemas relativísticos; em Mecânica Quântica relativística, o hamiltoniano não comuta com o número de partículas. Por exemplo, num sistema formado por elétrons e pósitrons, as interações são tais que a *carga elétrica*, em vez de o número de elétrons ou de pósitrons, é conservada. Portanto, a carga elétrica do conjunto sistema *mais* reservatório é fixa e, naturalmente, é associado um potencial químico à carga elétrica e não ao número de partículas. Dessa forma, em um sistema descrito por uma teoria quântica de campos relativísticos em que haja uma carga conservada \hat{Q} , é esse operador que entra em lugar de \hat{N} em (3.30).

Por fim, é útil definir uma notação que será empregada mais adiante para designar valores médios termodinâmicos. Seja \hat{D} o operador densidade que descreve o sistema em equilíbrio termodinâmico à temperatura $\beta = 1/k_B T$, o *valor médio termodinâmico* de um dado observável \hat{O} será denotado por $\langle \hat{O} \rangle_\beta$:

$$\langle \hat{O} \rangle_\beta = \text{Tr}(\hat{O}\hat{D}) \quad (3.31)$$

3.1.4 Integração Funcional e a Função de Partição

No Capítulo 4, a função de partição para os modelos apresentados no Capítulo 2 será calculada segundo a aproximação de campo médio usando integrais funcionais sobre os campos; as expressões para a função de partição para campos bosônicos e campos fermiônicos são desenvolvidas no Apêndice C.

Nesta subseção será apresentado como a função de partição para um sistema quântico unidimensional pode ser expressa como integral funcional; a generalização para o caso n -dimensional é escrita mais adiante. O objetivo aqui é desenvolver um exemplo mais simples para que o leitor possa se familiarizar com o formalismo empregado [32].

Considere um sistema com um único grau de liberdade denotado por q e cuja dinâmica é regida por uma Hamiltoniana $H(p, q)$ independente do tempo. Segundo a quantização canônica na descrição de Schrödinger, a coordenada q e o momento canonicamente conjugado a ela p são operadores \hat{q} e \hat{p} independentes de tempo que satisfazem a *relação de comutação* $[\hat{q}, \hat{p}] \equiv \hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = i\hbar\hat{I}$; seus autoestados $|q\rangle$ e $|p\rangle$ formam um

conjunto completo e ortogonal⁸:

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle \quad \hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (3.32)$$

$$\langle q'|q\rangle = \delta(q' - q) \quad \langle p'|p\rangle = 2\pi\hbar\delta(p' - p) \quad (3.33)$$

$$\hat{I} = \int dq |q\rangle \langle q| \quad \hat{I} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} |p\rangle \langle p| \quad (3.34)$$

$$\langle q|p\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}pq\right) \quad (3.35)$$

No ensemble canônico, a função de partição é dada por (3.19); comumente, é usado um conjunto completo de autoestados ortonormais $|n\rangle$ do hamiltoniano para expressar o traço ($\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$; $\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}$):

$$Z = \sum_n \langle n| \exp\left(-\beta\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})\right) |n\rangle = \sum_n \exp(-\beta E_n); \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (3.36)$$

No entanto, pode-se também usar os autoestados $|q\rangle$:

$$Z = \int dq \langle q| \exp\left(-\beta\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})\right) |q\rangle \quad (3.37)$$

Estamos, então, interessados em calcular $\langle q| \exp\left(-\beta\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})\right) |q\rangle$. Para isso, o intervalo $[0, \beta]$ é particionado em N subintervalos de amplitude $\epsilon = \frac{\beta}{N}$; denotando $\hat{U}(\epsilon) = \exp\left(-\epsilon\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})\right)$, podemos escrever:

$$\begin{aligned} Z &= \int dq \langle q| \underbrace{\hat{U}(\epsilon)\hat{U}(\epsilon)\cdots\hat{U}(\epsilon)\hat{U}(\epsilon)}_{N \text{ termos}} |q\rangle \\ &= \int dq \langle q| \hat{U}(\epsilon)\hat{I}_{(N-1)}\hat{U}(\epsilon)\cdots\hat{I}_2\hat{U}(\epsilon)\hat{I}_1\hat{U}(\epsilon) |q\rangle \\ &= \int dq \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dq_{N-1} \cdots dq_1 \langle q| \hat{U}(\epsilon) |q_{N-1}\rangle \langle q_{N-1}| \hat{U}(\epsilon) |q_{N-2}\rangle \cdots \times \right. \\ &\quad \left. \times \cdots \langle q_2| \hat{U}(\epsilon) |q_1\rangle \langle q_1| \hat{U}(\epsilon) |q\rangle \right\} \\ &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int dq \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dq_{N-1} \cdots dq_1 \prod_{k=0}^{N-1} \langle q_{k+1}| \hat{U}(\epsilon) |q_k\rangle; \quad q_0 = q = q_N \quad (3.38) \end{aligned}$$

em que $q_0 = q = q_N$ e é tomado o limite $\epsilon \rightarrow 0$ mantendo $N\epsilon = \beta$ finito; note-se que foram inseridas $N - 1$ relações de completeza dos autoestados $|q\rangle$ indicadas em (3.34).

⁸ Note-se que foi feita uma escolha em que os estados $|q\rangle$ são normalizados, mas os $|p\rangle$ não.

Passemos agora ao cálculo do elemento de matriz $\mathcal{T}_k = \langle q_{k+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_k \rangle$:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T}_k &= \langle q_{k+1} | \exp \left(-\epsilon \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) \right) | q_k \rangle = \langle q_{k+1} | \hat{I} \exp \left(-\epsilon \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) \right) | q_k \rangle \\
 &\stackrel{(3.34)}{=} \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \langle q_{k+1} | p_k \rangle \langle p_k | \exp \left(-\epsilon \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) \right) | q_k \rangle \\
 &\stackrel{(3.35)}{=} \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp \left(\frac{i}{\hbar} p_k q_{k+1} \right) \langle p_k | \left[\hat{I} - \epsilon \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) \right] | q_k \rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\
 &= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp \left(\frac{i}{\hbar} p_k q_{k+1} \right) [1 - \epsilon H(p_k, q_k)] \exp \left(-\frac{i}{\hbar} p_k q_k \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\
 &= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp \left(\frac{i}{\hbar} p_k [q_{k+1} - q_k] \right) [1 - \epsilon H(p_k, q_k)] + \mathcal{O}(\epsilon^2) \tag{3.39}
 \end{aligned}$$

Note-se que esta última expressão *não* faz referência a nenhum operador, mas sim a seus autovalores⁹ e usou-se $\langle p_k | \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) | q_k \rangle = H(p_k, q_k) \langle p_k | q_k \rangle$ ¹⁰.

Como pelo limite indicado em (3.38) $\epsilon \rightarrow 0$, pode-se substituir $1 - \epsilon H(p_k, q_k)$ por $\exp(-\epsilon H(p_k, q_k))$ em (3.39); fazendo isso e substituindo o resultado em (3.38) escreve-se:

$$\begin{aligned}
 \prod_{k=0}^{N-1} \langle q_{k+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_k \rangle &= \prod_{k=0}^{N-1} \left\{ \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp \left(\frac{i}{\hbar} p_k [q_{k+1} - q_k] \right) \exp(-\epsilon H(p_k, q_k)) \right\} \\
 &= \int \cdots \int \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} \cdots \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{i}{\hbar} p_k \frac{(q_{k+1} - q_k)}{\epsilon} - H(p_k, q_k) \right] \right\} \\
 \therefore Z &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int dq \left(\prod_{j=1}^{N-1} \int dq_j \right) \left(\prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \right) \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \hbar \epsilon \left[ip_k \frac{(q_{k+1} - q_k)}{\hbar \epsilon} - H(p_k, q_k) \right] \right\} \tag{3.40}
 \end{aligned}$$

No limite em que $\epsilon \rightarrow 0$ ($N \rightarrow \infty$), define-se:

$$\int \mathcal{D}q = \int dq \left(\prod_{j=1}^{N-1} \int dq_j \right) \quad \int \mathcal{D}p = \left(\prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \right) \tag{3.41}$$

e reconhece-se

$$\sum_{k=0}^{N-1} \hbar \epsilon \left[ip_k \frac{(q_{k+1} - q_k)}{\hbar \epsilon} - H(p_k, q_k) \right] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ip \frac{dq}{d\tau} - H(p, q) \right]$$

$$q_0 = q = q_N \leftrightarrow q(0) = q(\hbar\beta)$$

Finalmente, a função de partição se escreve como uma integral funcional:

$$Z = \int_{q(0)=q(\hbar\beta)} \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ip \frac{dq}{d\tau} - H(p, q) \right] \right\}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \tag{3.42}$$

⁹ Portanto, p_k *não* é o momento canonicamente conjugado a q avaliado no “instante” k .

¹⁰ Isso é válido desde que termos envolvendo produtos de \hat{q} e \hat{p} tenham todos os fatores \hat{p} à esquerda de \hat{q} . Caso isso não ocorra, o produto deve ser simetrizado fazendo uma média sobre todos os ordenamentos possíveis – Ordenamento de Weyl; mas quando se toma o limite $\epsilon \rightarrow 0$, chega-se ao mesmo resultado a que chegamos [33]. Portanto, não há perda de generalidade na dedução aqui apresentada.

Alguns comentários se fazem necessários:

Medida de Integração

A definição das medidas de integração em (3.41) significa que se deve somar sobre todas as funções $q(\tau)$ e $p(\tau)$, daí o nome integral funcional. As “variáveis” de integração $q(\tau)$ e $p(\tau)$ são independentes entre si.

Condição de Contorno Periódica

A condição contorno $q(0) = q(\hbar\beta)$ em (3.42) é consequência de o mesmo autovalor q ser associado ao ket e ao bra em (3.37); vê-se, pois, que a periodicidade é consequência de a integral funcional representar um traço. Não há restrições sobre os caminhos $p(\tau)$.

Relação com Amplitude de Transição na Mecânica Quântica

Pela equação (3.40), tem-se:

$$\langle q | \exp \left(-\beta \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) \right) | q \rangle = \int_{q(0)=q; q(\hbar\beta)=q} \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ip \frac{dq}{d\tau} - H(p, q) \right] \right\} \quad (3.43)$$

Esse elemento de matriz lembra bastante uma amplitude de transição na mecânica quântica:

$$\langle q | \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (t'' - t') \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) \right) | q \rangle = \int_{q(t')=q; q(t'')=q} \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \left[p \frac{dq}{dt} - H(p, q) \right] \right\} \quad (3.44)$$

A expressão à direita é obtida seguindo os mesmos passos que nos levaram a (3.43), que pode ser obtida a partir de (3.44) através da *continuação analítica* definida por:

$$t \rightarrow -i\tau \quad dt \rightarrow -id\tau \quad \frac{d}{dt} \rightarrow i \frac{d}{d\tau} \quad (t'' - t') \rightarrow -i\hbar\beta \quad (3.45)$$

com $\tau \in \mathbb{R}$. Diz-se, então, que é usado o *formalismo de tempo imaginário*. Esta relação permite o cálculo computacional de amplitudes de transição como (3.44) usando métodos de mecânica estatística.

Caso a hamiltoniana dependa quadraticamente do momento

Usualmente, a hamiltoniana depende quadraticamente do momento, sendo da forma:

$$H(p, q) = \frac{1}{2m} p^2 + V(q) \quad (3.46)$$

Quando isso ocorre, a integração sobre os momentos indicada em (3.42) se torna gaussiana e pode ser calculada exatamente, restando apenas a integração sobre as coordenadas. Fazendo a substituição $1 - \epsilon H(p_k, q_k)$ por $\exp(-\epsilon H(p_k, q_k))$ e usando (3.46), a equação (3.39) se torna:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_k &= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_k [q_{k+1} - q_k]\right) \exp\left[-\epsilon \left(\frac{1}{2m} p_k^2 + V(q_k)\right)\right] + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\ &= \exp[-\epsilon V(q_k)] \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp\left[-\frac{\epsilon}{2m} p_k^2 + \frac{i}{\hbar} (q_{k+1} - q_k) p_k\right] + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\ &= \exp[-\epsilon V(q_k)] \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{\epsilon}{2m} \left[p_k^2 - \frac{2mi(q_{k+1} - q_k)}{\epsilon\hbar} p_k\right]\right\} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \end{aligned}$$

completando quadrados e resolvendo a integral em p_k :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_k &= \exp[-\epsilon V(q_k)] \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{\epsilon}{2m} \left[\left(p_k - \frac{mi(q_{k+1} - q_k)}{\epsilon\hbar}\right)^2 - \left(\frac{mi(q_{k+1} - q_k)}{\epsilon\hbar}\right)^2\right]\right\} \\ &= \exp\left\{-\epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\epsilon\hbar}\right)^2 + V(q_k)\right]\right\} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\epsilon}} \end{aligned} \quad (3.47)$$

Substituindo (3.47) em (3.38):

$$\begin{aligned} \prod_{k=0}^{N-1} \mathcal{T}_k &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon\hbar \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\epsilon\hbar}\right)^2 + V(q_k)\right]\right\} \\ \therefore Z &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int dq \left(\prod_{j=1}^{N-1} \int dq_j\right) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon\hbar \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\epsilon\hbar}\right)^2 + V(q_k)\right]\right\} \end{aligned} \quad (3.48)$$

Definindo:

$$\mathcal{N} = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \quad (3.49)$$

e reconhecendo no expoente a soma de Riemann para a integral que define a *ação euclidiana*:

$$S_E(\beta) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\tau}\right)^2 + V(q)\right] \quad (3.50)$$

chega-se a:

$$Z = \mathcal{N} \int \mathcal{D}q \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E(\beta)\right) \quad (3.51)$$

Nesta última expressão para a função de partição, note-se que a ação euclidiana é positiva definida e sua exponencial é o peso da distribuição de equilíbrio. Perceba-se, também, que a constante \mathcal{N} diverge, mas no cálculo dos valores médios termodinâmicos essa constante se cancela e no cálculo da energia livre sua contribuição é independente de β , sendo irrelevante para a termodinâmica descrita por essa função de partição.

Como mostrado no Apêndice C, a generalização da expressão (3.42) para a função de partição de um sistema quântico com n graus de liberdade sem spin $\{\hat{q}_i; i = 1, 2, \dots, n\}$ é dada por:

$$Z = \left(\prod_{l=1}^n \int_{q_j(0)=q_j(\hbar\beta)} \mathcal{D}q_j \right) \left(\prod_{m=1}^n \int \mathcal{D}p_m \right) \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[i\vec{p} \cdot \frac{d\vec{q}}{d\tau} - H(\vec{p}, \vec{q}) \right] \right\}; \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (3.52)$$

em que $H(\vec{p}, \vec{q})$ é uma notação abreviada para $H(p_1, \dots, p_n, q_1, \dots, q_n)$ e $\vec{p} \cdot \frac{d\vec{q}}{d\tau} = \sum_{l=1}^n p_l \frac{dq_l}{d\tau}$.

3.1.4.1 Teoria Quântica de Campos

Nesta subseção, estamos interessados em desenvolver a Mecânica Estatística para sistemas compostos de partículas relativísticas, que usualmente são descritas através de Teoria Quântica de Campos Relativísticos (TQCR). Em TQCR, os graus de liberdade são os campos quantizados; as partículas são entendidas como excitações dos campos, o que significa que os diferentes estados de energia correspondem a estados de uma partícula, de duas, de várias partículas e, possivelmente, a estados ligados; o nível fundamental, o de mais baixa energia, corresponde a um estado sem partícula alguma chamado *estado de vácuo*. Para fixar os conceitos, tomemos o campo escalar real, que descreve partículas sem spin e sem carga.

Considere um sistema clássico relativístico descrito por um campo escalar real $\phi(x) = \phi(x^0, \vec{x})$ e uma densidade lagrangiana $\mathcal{L}(\partial_\mu \phi, \phi)$ dependente do campo ϕ e de suas derivadas espaciais e temporal. O campo $\phi(x)$ é entendido como sendo uma coleção infinita e não enumerável de graus de liberdade, ou seja, a posição \vec{x} é um rótulo contínuo dos graus de liberdade.¹¹

Define-se o momento $\pi(x)$ canonicamente conjugado ao campo $\phi(x)$:

$$\pi(x) \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \phi)}(x) \quad (3.53)$$

e a densidade hamiltoniana $\mathcal{H}(\pi, \phi)$:

$$\mathcal{H}(\pi, \phi) \equiv \pi \partial_0 \phi - \mathcal{L} \quad (3.54)$$

o que fornece a hamiltoniana $H[\pi, \phi]$:

$$H[\pi, \phi] = \int d^3x \mathcal{H}(\pi, \phi) \quad (3.55)$$

que é um funcional dos campos π e ϕ e assumida ser independente do tempo.

¹¹ Por exemplo, para estudar a propagação de ondas numa corda, pode-se modelá-la como sendo uma coleção de massas puntiformes idênticas, igualmente espaçadas e conectadas através de molas; com isto, se obtém um sistema com número finito de graus de liberdade. O limite do contínuo, que descreve a corda propriamente dita, é obtido quando se faz o espaçamento tender a zero e, assim, a cada vetor posição na corda associa-se um grau de liberdade.

Segundo a quantização canônica na descrição de Heisenberg, os campos passam a ser operadores $\hat{\phi}(x)$ e $\hat{\pi}(x)$ que satisfazem as relações de comutação a tempos iguais:

$$\begin{aligned} \left[\hat{\phi}(x^0, \vec{x}), \hat{\pi}(x^0, \vec{y}) \right] &= i\hbar\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y})\hat{I} \\ \left[\hat{\phi}(x^0, \vec{x}), \hat{\phi}(x^0, \vec{y}) \right] &= \left[\hat{\pi}(x^0, \vec{x}), \hat{\pi}(x^0, \vec{y}) \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.56)$$

com isso, os possíveis valores da energia são os autovalores do operador hamiltoniano $\hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}] = \int d^3x \hat{\mathcal{H}}(\hat{\pi}, \hat{\phi})$.

Se não há nenhuma carga conservada, deve-se usar o ensemble canônico. Por (3.19), a função de partição é dada por:

$$Z = \text{Tr} \left[\exp \left(-\beta \hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}] \right) \right] = \text{Tr} \left[\exp \left(-\beta \int d^3x \hat{\mathcal{H}}(\hat{\pi}, \hat{\phi}) \right) \right]; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (3.57)$$

Conforme mostrado no Apêndice C, o traço acima pode ser expresso como uma integral funcional, Eq. (C.28):

$$Z = \int_{\phi(0, \vec{x}) = \phi(\hbar\beta, \vec{x})} \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \left[i\pi \frac{\partial\phi}{\partial\tau} - \mathcal{H}(\pi, \phi) \right] \right\}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (3.58)$$

Expressar a função de partição como integral funcional possui a vantagem de não haver referência a operadores de campo, mas sim a seus autovalores, que são funções. Isso facilita o cálculo da função de partição.

Caso haja uma carga conservada $\hat{Q}[\hat{\pi}, \hat{\phi}] = \int d^3x j^0(x)$ em que j^0 é uma densidade de carga conservada:

$$\left[\hat{Q}, \hat{H} \right] = 0 \quad (3.59)$$

o ensemble grande canônico deve ser usado. Por (3.30), a função de partição é dada por:

$$\Xi = \text{Tr} \left(\exp \left[-\beta \left(\hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}] - \mu \hat{Q}[\hat{\pi}, \hat{\phi}] \right) \right] \right) = \text{Tr} \left(\exp \left[-\beta \int d^3x \left(\hat{\mathcal{H}}(\hat{\pi}, \hat{\phi}) - \mu j^0(\hat{\pi}, \hat{\phi}) \right) \right] \right) \quad (3.60)$$

com $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

A expressão como integral funcional para o traço acima é obtida substituindo $\mathcal{H}(\pi, \phi)$ por $\mathcal{H}(\pi, \phi) - \mu j^0(\pi, \phi)$ em (3.58):

$$\Xi = \int_{\phi(0, \vec{x}) = \phi(\hbar\beta, \vec{x})} \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \left[i\pi \frac{\partial\phi}{\partial\tau} - \mathcal{H}(\pi, \phi) + \mu j^0(\pi, \phi) \right] \right\}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (3.61)$$

Como discutido no Apêndice C, a função de partição para férmions no ensemble canônico é, Eq. (C.49):

$$Z = \int_{\psi(0, \vec{x}) = -\psi(\beta, \vec{x})} \mathcal{D}(\psi^\dagger) \mathcal{D}\psi \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[\psi^\dagger \frac{\partial\psi}{\partial\tau} + \mathcal{H}(\psi^\dagger, \psi) \right] \right\}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (3.62)$$

Pela operação de conjugação definida para variáveis de Grassmann no Apêndice B, vê-se que os campos $\psi^\dagger(x)$ satisfazem as mesmas condições de contorno que $\psi(x)$. Quando há uma densidade de carga conservada $j^0(\psi^\dagger, \psi)$, basta substituir $\mathcal{H}(\psi^\dagger, \psi)$ por $\mathcal{H}(\psi^\dagger, \psi) - \mu j^0(\psi^\dagger, \psi)$ na expressão logo acima, obtendo a função de partição no ensemble grande canônico para férmions:

$$\Xi = \int_{\psi(0, \vec{x}) = -\psi(\beta, \vec{x})} \mathcal{D}(\psi^\dagger) \mathcal{D}\psi \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[\psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \mathcal{H}(\psi^\dagger, \psi) - \mu j^0(\psi^\dagger, \psi) \right] \right\}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (3.63)$$

Em particular, esta expressão será o ponto de partida para o cálculo do granpotencial no próximo capítulo.

3.2 Fenômenos Críticos

Nesta subseção serão desenvolvidos alguns conceitos importantes para a descrição física das transições de fases termodinâmicas. Iniciaremos definindo o limite termodinâmico, o que permite definir seguramente transições de fase e então relacionaremos a classificação das transições com parâmetros de ordem e quebra espontânea de simetria. Em seguida, discutiremos a estabilidade termodinâmica em termos dos potenciais termodinâmicos e a seção se encerra com uma revisão sobre a teoria de Landau das transições de fase.

3.2.1 Limite termodinâmico, fases, diagrama de fases e transições de fase

Uma distinção importante em termodinâmica é a que se faz entre grandezas (ou variáveis) *intensivas* e *extensivas*. Num sistema composto em *equilíbrio térmico*, grandezas cujo valor é igual à soma dos valores em cada subsistema constituinte são chamadas *extensivas* e as que possuem o mesmo valor que em cada subsistema são ditas *intensivas* [29, 30]. Assim, volume, número de partículas e energia interna são extensivas enquanto que temperatura, pressão e potencial químico são intensivas. Note-se que a razão entre duas grandezas extensivas é intensiva, por exemplo, a densidade de partículas por unidade de volume.

Vamos agora introduzir o conceito de *limite termodinâmico*. Sejam V o volume do

sistema, $n = \frac{N}{V}$ a densidade e B uma grandeza *extensiva* tal que¹²

$$\lim_{\substack{V \rightarrow \infty \\ n \text{ finito}}} \frac{B}{V} = b \quad (3.64)$$

em que o limite é tomado fazendo o volume do sistema ir a infinito mantendo a densidade fixa. Se b , a densidade de B , é finita diz-se que existe o limite termodinâmico, caso contrário, o limite termodinâmico não existe [14,30]. A existência do limite termodinâmico significa que *as propriedades termodinâmicas independem do tamanho do sistema*; um sistema físico pode ser estável ainda que o limite termodinâmico não seja atingido.

A existência do limite termodinâmico depende da dimensionalidade do espaço, do alcance das forças entre os constituintes, de se há efeitos de blindagem, tal como no eletromagnetismo, e de efeitos quânticos, como o Princípio de Exclusão de Pauli. Provar que o limite termodinâmico existe para um sistema qualquer é, pois, tarefa bastante árdua. Contudo, Dyson e Lenard [34] provaram sua existência assumindo que:

- O sistema seja globalmente neutro;
- A energia cinética seja dada pela mecânica quântica;
- Ao menos um dos tipos de carga, positiva ou negativa, seja carregada por férmions.

Conforme já discutido, usualmente basta conhecer algumas grandezas termodinâmicas para se determinar o estado termodinâmico do sistema; pode-se, então, construir um *diagrama de fases*. Para entender um diagrama de fases, considere um diagrama típico como o da Figura 4:

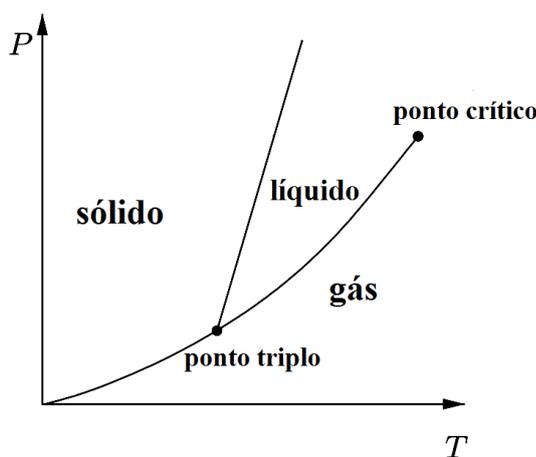


Figura 4 – Diagrama de fases típico.

¹² B pode depender de um número qualquer de variáveis, tanto extensivas quanto intensivas; entretanto, sua densidade é função apenas de grandezas intensivas, incluindo razões entre grandezas extensivas. Por isso não foi indicada a dependência de B ; contudo, por exemplo, pode-se pensar em $B = B(T, V, N)$ e $b = b(T, n)$.

As regiões em que a densidade de energia livre tomada no limite termodinâmico são analíticas definem *as fases termodinâmicas* do sistema em questão; as linhas correspondem a regiões de não-analicidade e “encerram” as fases. Variando os parâmetros que definem os eixos, definem-se trajetórias no diagrama de fases, as quais representam processos a que o sistema é submetido. Diz-se que o sistema passa por (ou sofre) uma *transição de fase* durante um processo sempre que a trajetória correspondente atravessa alguma das linhas que delimitam as fases [14]. Como salientado pelas Refs. [14, 30], a *descrição matemática* das transições de fase apenas pode ser obtida tomando o limite termodinâmico¹³; obviamente, um sistema físico real *não* precisa ter um número infinito de partículas para admitir transições de fase: a água em um copo pode congelar ou evaporar. A leitura de um diagrama de fases é simples: se um ponto está em uma das fases, significa que o sistema em equilíbrio se encontra naquela fase para os valores dos parâmetros que definem o ponto.

Voltando ao diagrama da Figura 4, percebe-se que a linha entre as fases gasosa e líquida termina num ponto chamado *ponto crítico*. Este ponto define uma pressão crítica e uma temperatura crítica, a partir da qual o sistema se encontra na fase gasosa para qualquer pressão. Note-se que é possível escolher uma trajetória contornando o ponto crítico que leve o sistema da fase líquida para a gasosa *sem* cruzar uma das linhas do diagrama, enquanto que isso é impossível ao passar das fases líquida ou gasosa para a sólida. Isso significa que a fase sólida se distingue muito bem das demais, enquanto que não se pode distinguir claramente a fase líquida da fase gasosa.

Como já dito, as transições de fase são identificadas por não-analicidade da energia livre; a partir disso, elas são classificadas em [14]:

- **Transição de fase de 1ª ordem:** ao menos alguma das primeiras derivadas da energia livre é descontínua.
- **Transição de fase contínua:** todas as primeiras derivadas da energia livre são contínuas.

Uma classificação mais antiga proposta por Ehrenfest é baseada na ordem da derivada da energia livre que é descontínua; assim, quando a descontinuidade está na primeira derivada, a transição é dita de 1ª ordem, quando está na segunda, a transição é de 2ª ordem e assim sucessivamente.

No diagrama da Figura 4, as linhas que separam as fases definem transições de 1ª ordem, portanto, ao longo delas ambas as fases coexistem em equilíbrio; por isso, essas linhas são chamadas *linhas de coexistência*. Outro ponto notável neste diagrama é o *ponto triplo*, determinado pelo encontro das linhas que separam as fases, o que define valores de temperatura e de pressão para os quais as três fases coexistem.

¹³ Na verdade, transições de fase à temperatura nula *não* requerem o limite termodinâmico; neste caso, a não-analicidade é obtida pelo limite $\beta \rightarrow \infty$ em vez de $N \rightarrow \infty$ [14].

3.2.2 Parâmetro de ordem e Quebra de Simetria

É esclarecedor utilizar como exemplo a transição entre as fases paramagnética e ferromagnética de um ímã para introduzir o conceito de *parâmetro de ordem*. Como bem sabido, a temperaturas suficientemente altas, um ímã só é magnetizado na presença de um campo magnético externo; isso significa que a magnetização é nula quando o campo magnético é nulo. Por outro lado, abaixo de uma certa temperatura chamada *temperatura crítica* o ímã apresenta uma magnetização mesmo na ausência de campo externo, por isso, a magnetização é dita espontânea. Um parâmetro de ordem é uma quantidade termodinâmica que, tal como a magnetização, é não nula em apenas uma possíveis fases do sistema [14].

O conceito de parâmetro de ordem tem forte relação com as propriedades de simetria do estado termodinâmico [13, 14]. Voltemos ao ímã na ausência de campo externo como exemplo. A altas temperaturas, o sistema – tal qual o próprio hamiltoniano – possui o grupo de rotações em três dimensões como grupo de simetria¹⁴. A altas temperaturas, o vetor magnetização (média espacial sobre os momentos de dipolo magnético) é nulo. A baixas temperaturas, o vetor magnetização torna-se não nulo, sendo invariante apenas sob rotações em torno do eixo por ele definido; ou seja, o sistema passa a ser invariante sob um subgrupo do grupo de simetria do hamiltoniano. Diz-se, então, que houve uma quebra de simetria. Isso é referido como *quebra espontânea de simetria*, para distinguir do caso em que a magnetização é imposta pela presença de campo externo. Contudo, é bom ter em mente que o próprio hamiltoniano na presença do campo *não* é invariante sob rotações tridimensionais.

A quebra espontânea de simetria ocorre de um modo geral. Comumente, o sistema na fase a temperaturas mais altas possui o mesmo grupo de simetria que o hamiltoniano e operadores que *não* sejam invariantes sob tal grupo possuem valores termodinâmicos necessariamente nulos; a baixas temperaturas o sistema é invariante sob algum subgrupo e um operador pode se tornar invariante sob esse subgrupo, de modo a possibilitar que seu valor médio termodinâmico seja não nulo [13].

Por fim, é importante comentar que o parâmetro de ordem permite classificar uma dada transição de fase. Quando o gráfico do parâmetro de ordem versus a temperatura apresenta uma descontinuidade, a transição é de primeira ordem; quando não, a transição é contínua. A temperatura em que isso ocorre é chamada *temperatura crítica* e usualmente denotada por T_c .

¹⁴ Para um sistema cuja evolução é dada por uma hamiltoniana, o grupo de simetria é o conjunto de transformações que deixam a ação invariante; usualmente, esse conjunto possui as propriedades de grupo.

3.2.3 Potenciais termodinâmicos e estabilidade

Como é bem sabido, pela Segunda Lei da Termodinâmica, a entropia de um sistema termodinâmico isolado não pode decrescer¹⁵. Pela Primeira Lei da Termodinâmica, a variação da energia interna ΔU de um sistema termodinâmico é a soma entre a quantidade de calor Q por ele *recebido* e o trabalho mecânico W_{ext} que o ambiente exerce sobre ele. Tendo isso em mente, procuraremos descrever a condição de equilíbrio termodinâmico em termos de potenciais termodinâmicos, em vez da entropia, seguindo [30].

Considere um sistema \mathcal{S} com volume constante em contato térmico com um reservatório \mathcal{R} à temperatura $T^{(r)}$ e potencial químico $\mu^{(r)}$, mantidos constantes, através de uma parede fixa, permeável e que permite troca de calor (diatérmica). O sistema em conjunto com o reservatório é isolado; portanto, a soma entre as entropias do sistema e do reservatório não decresce:

$$\Delta S_{tot} = \Delta S + \Delta S^{(r)} \geq 0 \quad (3.65)$$

Usaremos o índice r para designar valores das variáveis referentes ao reservatório, as grandezas sem índice referem-se ao sistema.

Se \mathcal{S} recebe uma quantidade de calor Q de \mathcal{R} :

$$\Delta S^{(r)} = -\frac{Q}{T^{(r)}} \quad (3.66)$$

pois a temperatura do reservatório não muda; como o volume do sistema é fixo, a Primeira Lei fornece:

$$\Delta U = Q + W_{ext} = Q + \mu^{(r)} \Delta N \quad (3.67)$$

Substituindo (3.66) e (3.67) em (3.65), escreve-se:

$$\Delta S_{tot} = \Delta S - \frac{Q}{T^{(r)}} = \Delta S - \frac{\Delta U - \mu^{(r)} \Delta N}{T^{(r)}} = -\frac{1}{T^{(r)}} \Delta (U - T^{(r)} S - \mu^{(r)} N) \geq 0$$

$$\therefore \Delta (U - T^{(r)} S - \mu^{(r)} N) \leq 0 \quad (3.68)$$

Por outro lado, quando o equilíbrio térmico entre o sistema e o reservatório é estabelecido, a temperatura T e o potencial químico μ do sistema se igualam aos do reservatório; portanto, no equilíbrio térmico, a condição de estabilidade (3.68) é expressa inteiramente em função de variáveis referentes ao sistema:

$$\Delta (U - TS - \mu N) \leq 0 \quad (3.69)$$

¹⁵ Um sistema é dito *isolado* se não troca nem partículas nem energia com o ambiente ao redor, seja em forma de trabalho ou de calor; um sistema isolado *não* interage com o ambiente. Um sistema *fechado* troca energia, mas não partículas e um sistema *aberto* pode trocar tanto partículas quanto energia.

Mas, por (3.3), reconhece-se que a quantidade entre parênteses é o grande potencial termodinâmico \mathcal{J} . Portanto, *estando fixos o potencial químico e a temperatura do reservatório, conclui-se que o sistema atinge o equilíbrio termodinâmico minimizando o grande potencial*. Se desde o início tivéssemos assumido que a parede (fixa) fosse impermeável, teríamos $\Delta N = 0$ e chegaríamos a

$$\Delta(U - TS) \leq 0 \quad (3.70)$$

Portanto, concluiríamos que *o equilíbrio termodinâmico é atingido minimizando a energia livre de Helmholtz*.

A relação entre o equilíbrio termodinâmico e a minimização desses potenciais termodinâmicos fornece uma clara interpretação física para como o sistema atinge o equilíbrio¹⁶. Para tal, vale salientar que usualmente se tem controle sobre alguns parâmetros ditos *externos* tais como volume e campos eletromagnéticos¹⁷. O ajuste desses parâmetros determina os potenciais termodinâmicos; então, fixados os parâmetros externos, o sistema em equilíbrio exibirá *parâmetros internos* – usualmente são parâmetros de ordem, como a magnetização – de forma a minimizar o potencial termodinâmico em questão.

Essa interpretação permite reexpressar as condições de estabilidade deduzidas acima do seguinte modo: *o valor de qualquer parâmetro interno livre dos vínculos termodinâmicos é tal que o grande potencial ou a energia livre de Helmholtz – a depender da configuração implementada – é minimizado(a)* [29]. Como exemplo, considere um sistema magnético em que o experimental possui controle sobre a temperatura e o campo \vec{H} ; no equilíbrio termodinâmico, a magnetização assume um valor que minimiza a energia livre de Gibbs.

Por fim, obtenhamos uma intuição física de por que ocorre a quebra espontânea de simetria tendo em mente que a energia livre de Helmholtz é mínima no equilíbrio termodinâmico. A energia livre de Helmholtz é dada por – ver Eq. (3.3):

$$F(T, V, N) = U - TS \quad (3.71)$$

Para temperaturas altas o suficiente, a energia livre é minimizada com o aumento da entropia; assim, geralmente altas temperaturas favorecem fases com a mesma simetria que o hamiltoniano. Por outro lado, para temperaturas demasiadamente baixas, a energia interna torna-se mais importante que o termo TS , sendo suficiente minimizar a energia interna; usualmente o estado que minimiza a energia interna para temperaturas muito baixas possui menos simetria que o hamiltoniano. Portanto, em casos típicos, é de se esperar que ocorra a quebra espontânea de simetria.

¹⁶ Aqui, apenas mostramos que a energia livre de Helmholtz e o grande potencial são mínimos no equilíbrio termodinâmico; contudo, [29] mostra que o mesmo é válido para os demais potenciais termodinâmicos.

¹⁷ Deve-se ressaltar que os campos elétrico \vec{E} e magnético \vec{B} não são controláveis pelo experimental, pois este depende das correntes livres e dos momentos de dipolo magnético no material e aquele depende tanto das cargas livres como das ligadas. O que se controla são os campos \vec{D} e \vec{H} , que dependem apenas das cargas livres e das correntes livres respectivamente.

3.2.4 Teoria de Landau

Nesta subseção, a Teoria de Landau para transições de fase contínuas será brevemente descrita seguindo a Ref. [14]. Inicialmente será apresentada de um ponto de vista fenomenológico e, em seguida, será relacionada com a mecânica estatística.

A teoria postula uma função, da temperatura T , dos parâmetros $\{x_i\}$ que definem o hamiltoniano do sistema¹⁸ e do(s) parâmetro(s) de ordem, chamada *energia livre de Landau* ou *funcional de Landau* (caso os parâmetros de ordem dependam da posição), que será denotado por F_L , e possui dimensão de energia. Assume-se que o estado de equilíbrio termodinâmico corresponde a um mínimo *global* de F_L com respeito ao(s) parâmetro(s) de ordem¹⁹ e que as funções termodinâmicas podem ser obtidas diferenciando F_L como se fosse um potencial termodinâmico.

A energia livre de Landau F_L é determinada pelas condições de que [13, 14]:

1. F_L deve ser invariante sob o grupo de simetria da fase desordenada²⁰;
2. Perto da temperatura crítica, F_L pode ser expandida em série de Taylor no parâmetro de ordem, que será denotado por η . Isso significa que F_L é função analítica de η .

- a) Para um sistema uniforme e de volume V , define-se a função *densidade de energia livre de Landau (homogênea)*, $\Omega = \Omega(\eta)$ como:

$$\Omega \equiv \frac{F_L}{V} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \eta^n \quad (3.72)$$

em que os coeficientes a_n são entendidos como *parâmetros fenomenológicos* que dependem da temperatura e dos parâmetros que definem o hamiltoniano.

- b) Para um sistema não-homogêneo, a densidade de energia livre de Landau é função do parâmetro de ordem $\eta(\vec{r})$ e de um número finito de suas derivadas. Usualmente, toma-se a expressão analítica mais simples para a dependência nas derivadas e escreve-se:

$$F_L = \int_V d^d r \left\{ \frac{1}{2} \gamma [\nabla \eta(\vec{r})]^2 + \Omega(\eta(\vec{r})) \right\} \quad (3.73)$$

em que o parâmetro γ é uma função positiva que, próximo à temperatura crítica, varia muito pouco com a temperatura e por isso é tomada como constante.

3. Próximo à temperatura crítica, o parâmetro de ordem é nulo na fase desordenada (usualmente logo acima da temperatura crítica), enquanto seu valor é pequeno –

¹⁸ Por exemplo: volume, constantes de acoplamento, campos externos...

¹⁹ Por simplicidade, de agora em diante assumiremos que há apenas um parâmetro de ordem, denotado por η .

²⁰ A fase desordenada é aquela em que o parâmetro de ordem é nulo no equilíbrio termodinâmico.

porém não-nulo – na fase ordenada. Isso significa que F_L deve ser minimizada por $\eta = 0$ e $\eta \neq 0$ nas fases desordenada e ordenada respectivamente.

É importante comentar sobre a motivação para essas condições.

A hipótese de que o parâmetro de ordem minimiza a energia de Landau no equilíbrio termodinâmico permite o uso das técnicas variacionais, o que simplifica o problema e, por outro lado, é natural em termodinâmica (no equilíbrio, a entropia é máxima e os potenciais termodinâmicos são mínimos). Assim, pela Teoria de Landau, a configuração $\eta(\vec{r})$ do parâmetro de ordem no equilíbrio termodinâmico é a solução da equação

$$\frac{\delta F_L[\eta]}{\delta \eta(\vec{r})} = 0 \quad (3.74)$$

à qual nos referiremos por equação de Ginzburg-Landau (GL); perceba que sua solução também depende dos mesmos parâmetros que F_L , ou seja, sua solução é $\eta(\vec{r}, T, x_i)$.

A condição de que F_L seja invariante pelo grupo de simetria na fase desordenada é entendida assumindo que a probabilidade P de a configuração do parâmetro de ordem ser uma dada função $\eta(\vec{r})$ é tal que: $P \propto \exp(-\beta F_L[\eta(\vec{r})])$ ²¹. Assim, se na fase desordenada o sistema é invariante sob um certo grupo de simetria, a energia livre de Landau também deve ser.

Próximo à temperatura crítica, o parâmetro de ordem é próximo de zero (ele é nulo na fase desordenada e torna-se não nulo, *de forma contínua*, na fase ordenada). Assim, geralmente basta tomar apenas os primeiros termos da expansão em (3.72) – e que sejam consistentes com a simetria.

A forma escolhida para o termo derivativo em (3.73) é motivada pelos sistemas magnéticos, em que o parâmetro de ordem é a magnetização. Sabe-se que a origem do magnetismo na matéria são os momentos de dipolo magnético de seus átomos ou íons constituintes, que são bastante afastados uns dos outros na escala *microscópica* (a distância entre dois átomos é muito maior que o tamanho de um deles)²². Entretanto, para a descrição prática de materiais magnéticos, é útil dividir o sistema em vários blocos de volume v e definir a magnetização $M(\vec{r})$ como sendo o momento de dipolo magnético médio do bloco centrado em \vec{r} . Para que essa descrição seja útil o volume v deve ser grande na escala microscópica (para conter número suficientemente grande de dipolos constituintes), mas pequeno na escala macroscópica (para que os valores médios termodinâmicos de cada um dos momentos de dipolo do bloco não se desviem muito do valor médio $M(\vec{r})$).

Se a magnetização varia bastante de um volume v para o volume adjacente, a energia interna é maior do que se a magnetização variar pouco. Assim, há um custo

²¹ Essa proporcionalidade será bem estabelecida quando considerarmos a relação entre a função de partição e a energia livre de Landau.

²² Apenas a interação dipolo-dipolo não é suficiente para explicar o magnetismo na matéria. Por exemplo, considerando apenas este tipo de interação, a temperatura crítica não excederia 1 K; contudo, a temperatura crítica para o ferro é da ordem de 1000 K. Para descrever corretamente as propriedades ferromagnéticas, deve-se considerar a interação coulombiana entre os íons e a interação de troca, que ocorre devido ao princípio de exclusão de Pauli [30].

de energia para que a magnetização varie bastante entre blocos adjacentes e o termo derivativo em (3.73) considera esse custo, pois favorece configurações $M(\vec{r})$ suaves para minimizar a energia livre de Landau. Portanto, o termo derivativo considera efeitos de *tensão superficial* e de formação de *paredes de domínio* quando o sistema é não-homogêneo.

De um modo geral, o procedimento de realizar médias locais sobre graus de liberdade microscópicos para obter uma descrição mecânico-estatística mais simples em que essas médias são tratadas como os graus de liberdade microscópicos é chamada *coarse graining*. O *coarse graining* pode ser implementando sistematicamente definindo os blocos de modo que seu tamanho característico l seja muito maior que a distância a típica entre os constituintes (por exemplo, o espaçamento da rede em sólidos) e menor que *comprimento de correlação* para a temperatura em questão $\xi(T)$ ²³ e que l seja da ordem de $\xi(T)$.

A energia livre de Landau introduz facilmente a classificação de um dado estado termodinâmico quanto à sua estabilidade. Um estado é dito *estável* se o parâmetro de ordem corresponde a um mínimo *global* (degenerado ou não) de F_L , é dito *mestaestável* se o parâmetro de ordem corresponde a um mínimo *local* e é *instável* se o valor do parâmetro fornece um *máximo* de F_L . Se um estado corresponde a um mínimo local, as flutuações térmicas – se intensas o suficiente – podem fazer com que o sistema decaia para um estado estável. Neste caso, diz-se que o sistema é instável quanto às flutuações térmicas, que podem induzir uma transição de fase.

Examinando a energia livre de Landau em função do parâmetro de ordem à medida que se variam os parâmetros externos, pode-se inferir a ordem da transição de fase que ocorre. Para isso, consideremos as sucessões *a)* e *b)* de gráficos da energia livre de Landau em função do parâmetro de ordem η esboçados na Figura 5 para diferentes valores dos parâmetros externos (como a temperatura, por exemplo).

Em todos os esboços, o valor do parâmetro de ordem que minimiza F_L é destacado com o ponto. A sucessão *a)* inicia numa configuração em que há um estado estável (representado pelo valor negativo de η), um metaestável (que corresponde a um valor positivo de η) e um estado instável quando η é nulo – configuração I. À medida que os parâmetros externos são alterados, ocasionalmente o sistema passa para a configuração II, em que o estado instável se manteve, mas o que era metaestável teve sua energia livre reduzida e passou a ser estável, de forma que há mais de um estado estável. Finalmente, na configuração III, esse segundo estado possui energia mais reduzida ainda e passa a ser o único estado estável. Assim, vê-se que o valor de η no equilíbrio termodinâmico é função *descontínua* dos parâmetros externos; portanto, a sucessão *a)* descreve uma *transição de primeira ordem* e η pode ser identificado como o parâmetro de ordem da transição²⁴.

²³ O comprimento de correlação é a distância típica até a qual os graus de liberdade estão correlacionados.

²⁴ Tal como está esboçado, η não é nulo em nenhuma das fases; entretanto, pode-se construir um verdadeiro parâmetro de ordem a partir dele redefinindo o zero de η .

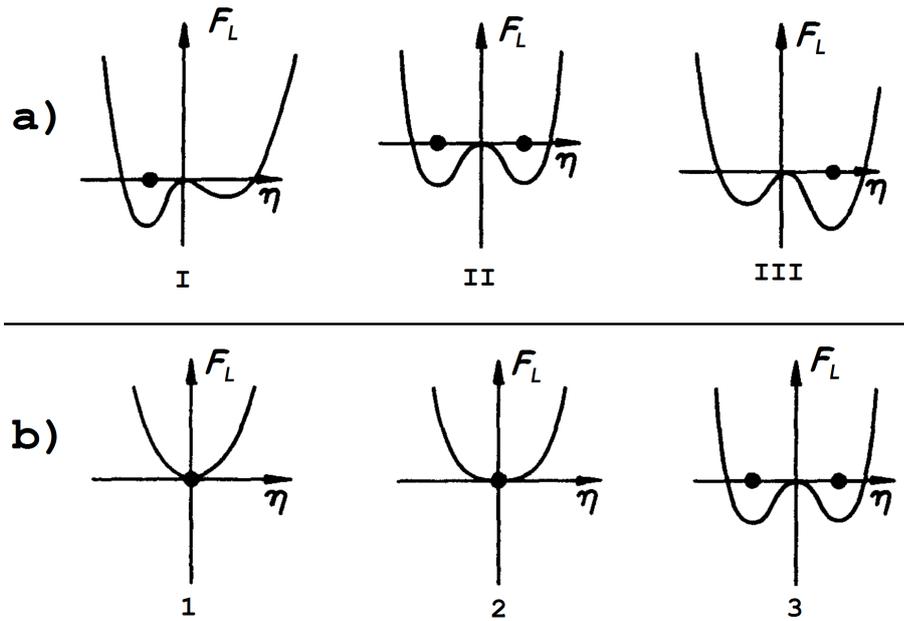


Figura 5 – Energia livre de Landau F_L em função do parâmetro de ordem η para duas sucessões dos parâmetros externos. A sucessão *a)* indica uma transição de primeira ordem, enquanto que a *b)* indica uma transição contínua. Figura adaptada da Ref. [14]

Note-se a coexistência das fases (caracterizadas pelo valor de η) devido aos estados metaestáveis²⁵. Apesar de não indicado na figura, usualmente existem configurações em que há apenas um estado estável ($\eta > 0$ ou $\eta < 0$) e *nenhum* metaestável; assim, essas três configurações são vistas como intermediárias.

A sucessão *b)* inicia numa configuração em que há apenas um mínimo global e a concavidade é positiva (aqui, em $\eta = 0$) – configuração 1. Variando de determinada maneira os parâmetros externos, chega-se à configuração 2 em que $\eta = 0$ ainda é o mínimo global, mas a concavidade é nula. Finalmente, na configuração 3, o estado $\eta = 0$ passa a ser instável (concavidade negativa) e tem-se mais de um estado estável, ocorreu a quebra espontânea de simetria. Em toda a sequência, note-se que *não há estados metaestáveis*; portanto, não há coexistência de fases. Além disso, como a concavidade do estado de mínimo chega a ser nula, o parâmetro de ordem varia continuamente de zero até um dos valores que minimizam a energia livre na configuração 3. Portanto, a sucessão *b)* descreve uma *transição contínua* e η pode ser identificado como um parâmetro de ordem da transição.

Para obter um melhor entendimento sobre a energia livre de Landau, é interessante relacioná-la com a função de partição da mecânica estatística. Para isso, lembramos que a função de partição Z é obtida considerando todas as configurações possíveis dos graus de liberdade microscópicos, ou seja, considerando a probabilidade de o sistema estar em

²⁵ Ao colocar uma porção de água para ferver, você constatará que em algum momento começam-se a formar bolhas de vapor de água, indicando a coexistência de fases e a metaestabilidade.

cada um dos microestados a ele acessíveis – ver Subseção 3.1.2. Por outro lado, dada uma configuração do parâmetro de ordem, há vários microestados com ele compatíveis. Assim, a energia livre de Landau pode ser formalmente definida por:

$$\exp(-\beta F_L[\eta(\vec{r})]) = \text{Tr}_{\{\sigma_i\} \rightarrow \eta(\vec{r})} [\exp(-\beta H(\sigma_i))] \quad (3.75)$$

em que σ_i denota os graus de liberdade microscópicos e o símbolo $\text{Tr}_{\{\sigma_i\} \rightarrow \eta(\vec{r})}$ significa que apenas os microestados compatíveis com a configuração $\eta(\vec{r})$ são considerados.

Seja $\mathcal{C}(\eta(\vec{r}))$ o conjunto de todos os microestados *incompatíveis* com uma dada configuração $\eta(\vec{r})$. A função de partição pode ser expressa como:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} [\exp(-\beta H(\sigma_i))] = \text{Tr}_{\{\sigma_i\} \in \mathcal{C}(\eta(\vec{r}))} \left\{ \text{Tr}_{\{\sigma_i\} \rightarrow \eta(\vec{r})} [\exp(-\beta H(\sigma_i))] \right\} \\ &\stackrel{(3.75)}{=} \text{Tr}_{\{\sigma_i\} \in \mathcal{C}(\eta(\vec{r}))} [\exp(-\beta F_L[\eta(\vec{r})])] \end{aligned}$$

em que primeiro soma-se sobre todas os microestados compatíveis com $\eta(\vec{r})$ e, então, soma-se sobre todos os microestados incompatíveis; note-se que essa soma varre *todos* os microestados possíveis. Notando que um dado microestado é compatível com uma única configuração do parâmetro de ordem, vê-se que Z pode ser expresso como uma soma sobre todas as configurações possíveis para o parâmetro de ordem, o que é escrito como:

$$Z = \int \mathcal{D}\eta(\vec{r}) \exp(-\beta F_L[\eta(\vec{r})]) \quad (3.76)$$

Esta última expressão permite interpretar

$$\frac{1}{Z} \exp(-\beta F_L[\eta(\vec{r})])$$

como a probabilidade de o sistema estar na configuração $\eta(\vec{r})$; por isso, a energia livre de Landau F_L também é chamada *hamiltoniana efetiva*.

Por fim, vale ressaltar que a Teoria de Landau é uma teoria de campo médio, pois seus graus de liberdade ($\eta(\vec{r})$) interagem com a média de outros graus de liberdade – a descrição teórica é feita mais simples considerando uma média sobre alguns graus de liberdade suficientemente correlacionados (pequeno efeito das flutuações). Portanto, a teoria perde aplicabilidade quando as flutuações termodinâmicas tornam-se muito importantes.

3.3 Sistemas fora do equilíbrio

Nesta seção será apresentada uma descrição de como o sistema ligeiramente fora do equilíbrio evolui no tempo até atingir novo estado de equilíbrio, o que é chamado *termalização*. No caso estático descrito logo acima, foi útil argumentar em termos do parâmetro de ordem $\eta(\vec{r})$, obtido pelo procedimento de *coarse-grainig*, e da energia livre

de Landau F_L ; manteremos esses conceitos e, então, descreveremos a evolução temporal do parâmetro de ordem $\eta = \eta(t, \vec{r})$ durante a termalização seguindo as Refs. [13, 14].

Se o sistema descrito pela configuração $\eta \equiv \lambda(\vec{r})$ do parâmetro de ordem está ligeiramente fora do equilíbrio, então $\lambda(\vec{r})$ não minimiza F_L , mas corresponde a um ponto próximo do mínimo. A evolução do parâmetro de ordem durante a termalização, o que é chamado de *relaxação do parâmetro de ordem*, deve ser tal que $\eta(t, \vec{r})$ tenda a uma configuração de equilíbrio estável no limite em que $t \rightarrow \infty$.

Por razões fenomenológicas, usualmente é feita a hipótese de que a variação temporal do parâmetro de ordem é proporcional ao desvio em relação ao equilíbrio – *hipótese da resposta linear*. Com isso, a evolução temporal do parâmetro de ordem é dada pela equação de Ginzburg-Landau dependente do tempo (equação GLTD):

$$\frac{\partial \eta(t, \vec{r})}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F_L[\eta]}{\delta \eta(t, \vec{r})} \quad (3.77)$$

em que o parâmetro Γ , introduzido fenomenologicamente, é assumido pouco sensível à temperatura e independente de η . Na equação, Γ lembra uma constante de decaimento, sendo inversamente proporcional à rapidez com que a transição ocorre.

A equação (3.77) pode ter como solução uma configuração $\eta(\vec{r})$ que corresponde a um estado metaestável (mínimo local de F_L), a depender da condição inicial do problema. Para garantir que a solução seja um estado estável (mínimo global), os efeitos aleatórios dos graus de liberdade sobre os quais tomou-se uma média para definir $\eta(\vec{r})$ devem ser levados em conta. Esses efeitos são entendidos como flutuações térmicas que, ocasionalmente, podem afastar o sistema de um mínimo local de forma a solução corresponder a um estado estável; eles são modelados através de um *termo de ruído* $\xi(t, \vec{r})$ que assume valores aleatórios e independentes uns dos outros para cada posição e instante de tempo.

Escolhe-se o termo de ruído de modo que *uma média sobre realizações de ruído*, $\langle \dots \rangle_r$, corresponda a uma média sobre um ensemble de equilíbrio:

$$\langle \xi(t, \vec{r}) \rangle_r = 0 \quad \text{e} \quad \langle \xi(t_1, \vec{r}_1) \xi(t_2, \vec{r}_2) \rangle_r = 2\Gamma k_B T \delta(t_1 - t_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (3.78)$$

em que $\sqrt{(2\Gamma k_B T)}$ é intensidade do ruído; de fato, é intuitivo que a intensidade do ruído cresça com a temperatura. O termo de ruído (3.78) é chamado *gaussiano e branco* porque essas relações podem ser obtidas definindo-se uma distribuição de probabilidades sobre o espaço das funções de ruído que é gaussiana com variância $(2\Gamma k_B T)$, o que garante a equivalência entre as médias sobre os ruídos e sobre o ensemble de equilíbrio.

Levando-se em conta as flutuações térmicas implementadas pelo termo de ruído, chega-se à equação que de fato descreve a dinâmica da evolução temporal do parâmetro de ordem durante a termalização:

$$\frac{\partial \eta(t, \vec{r})}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F_L[\eta]}{\delta \eta(t, \vec{r})} + \xi(t, \vec{r}) \quad (3.79)$$

que também é referida como equação de Ginzburg-Landau dependente do tempo ou como equação de Ginzburg-Landau-Langevin – equação GLL. Mostra-se [14] que a equação GLL (3.79) em que o termo de ruído satisfaz (3.78) está associada com uma distribuição de probabilidade que varia no tempo segundo a equação de Fokker-Planck e que fornece a distribuição de Boltzmann definida pelo hamiltoniano de Landau no limite $t \rightarrow \infty$.

Tendo motivado a descrição da dinâmica de termalização, passaremos à descrição dos processos físicos de nucleação e decomposição espinodal. Quando se submete o sistema a uma variação brusca de algum parâmetro externo – o que é chamado *quench* do parâmetro externo, esses dois são os principais processos pelo qual um sistema homogêneo torna-se não homogêneo através da formação de *paredes de domínio* quando o equilíbrio é reestabelecido após um quench.

3.3.1 Nucleação e decomposição espinodal

Para facilitar o entendimento do processo de nucleação, é útil considerar o bem conhecido modelo de Ising para sistemas magnéticos. A Figura 6 mostra o diagrama de fases no plano $H - T$ para o modelo de Ising. Abaixo da temperatura crítica T_c , o sistema sofre uma transição de fase de primeira ordem quando se inverte o sentido do campo H ; na linha definida por $H = 0$ e $T < T_c$, tanto a fase com magnetização positiva quanto a com magnetização negativa são estáveis. Os gráficos esboçados representam a energia livre de Landau em função do parâmetro de ordem representado por ϕ (que, no caso do modelo de Ising, é a magnetização M) para cada região do diagrama de fases.

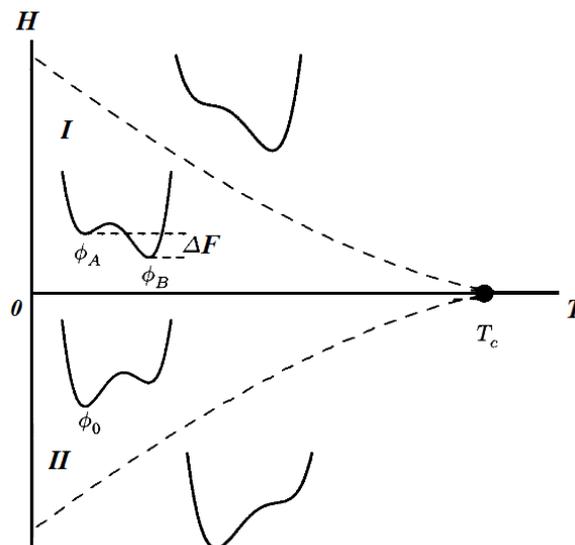


Figura 6 – Diagrama de fases para o modelo de Ising no plano $H - T$. As curvas esboçadas representam o padrão da energia livre de Landau em cada região do diagrama. Figura adaptada da Ref. [13]

Na região acima (abaixo) da linha pontilhada em que H é positivo (negativo), o estado de equilíbrio – mínimo global – é caracterizado por valores positivos (negativos) do parâmetro ϕ . Na região I , há um estado estável e um metaestável caracterizados, respectivamente, por valores positivos e negativos de ϕ ; enquanto que, na região II , o estável é caracterizado por $\phi < 0$ e o metaestável por $\phi > 0$. Como há estados metaestáveis apenas na região do diagrama de fases delimitada pelas linhas pontilhadas, estas são chamadas *limites de metaestabilidade*.

Suponha-se que o sistema inicialmente se encontra num ponto da região II em que o estado de equilíbrio é caracterizado por uma magnetização homogênea com valor $\phi_0 < 0$ e, então, o sentido do campo H é bruscamente alterado de forma que os estados caracterizados pelas configurações homogêneas de magnetização com valores $\phi_A < 0$ e $\phi_B > 0$ sejam, respectivamente, metaestável e estável. Logo após o *quench*, a energia livre é completamente alterada, enquanto que o parâmetro de ordem possui o mesmo valor ϕ que antes do *quench* e, então, relaxa para o valor ϕ_A próximo de ϕ_0 . Caso não houvessem flutuações termodinâmicas, o sistema ficaria na configuração ϕ_0 indefinidamente.

Entretanto, as flutuações termodinâmicas geram regiões de diversos tamanhos com valores do parâmetro de ordem muito próximos ao valor ϕ_B do estado estável; em outros termos, as flutuações formam *bolhas* da fase estável num “mar” da fase metaestável. Neste caso, o sistema pode se tornar não homogêneo (com regiões com a fase caracterizada por ϕ_A distintas das caracterizadas por ϕ_B) apenas quando ocorrem flutuações termodinâmicas suficientemente intensas, o que é conhecido como *nucleação homogênea*.

A relação entre as flutuações e a quebra (ou não) da homogeneidade é entendida do seguinte modo: o sistema se mantém homogêneo com parâmetro dado por ϕ_A desde que *todas* as bolhas da fase de equilíbrio sejam tão pequenas que a redução da energia livre devido ao interior de cada uma – *bulk free energy* – não *compense* o custo energético, dado pela energia livre superficial, para a formação das bolhas. Neste caso, as bolhas colapsariam e o sistema permaneceria homogêneo. Por outro lado, caso haja bolhas grandes o suficiente, o sistema terá energia livre reduzida favorecendo o crescimento dessas bolhas. Com o tempo, verificam-se domínios contendo apenas uma das fases.

Consideremos a diferença de energia livre ΔF_L do sistema quando se compara um estado com *uma* bolha de raio R a um estado sem bolha alguma. Sendo σ a energia livre por unidade de área e Ω a energia livre por unidade de volume, tem-se:

$$\Delta F_L = 4\pi\sigma R^2 - \frac{4}{3}\pi\Omega R^3 \quad (3.80)$$

vê-se que essa expressão apresenta um máximo para $R_c = \frac{2\sigma}{\Omega}$, que é chamado *raio crítico*. Assim, bolhas com raio inferior (superior) ao raio crítico colapsam (crescem), dando origem à nucleação. Contudo, é possível que $\sigma = 0$, a depender do ponto no espaço de fase; nesse caso, bolhas de todos os tamanhos crescerão, o que dá origem à *decomposição*

espinodal. Note-se que em ambos os processos o sistema torna-se mais estável admitindo não uniformidade no parâmetro de ordem.

Por fim, convém salientar que, de um modo geral, a dinâmica associada ao parâmetro de ordem é mais lenta quando a termalização ocorre através da nucleação do que quando ocorre por decomposição espinodal; isso ocorre porque na decomposição espinodal bolhas de todos os tamanhos contribuem para a formação da nova fase, enquanto que na nucleação não. Outro aspecto importante para a velocidade da termalização é o fato de se o parâmetro de ordem é conservado (como uma densidade de cargas) ou não (como é o caso da magnetização) [35]; quando o parâmetro é conservado, apenas flutuações consistentes com a lei de conservação contribuem para a dinâmica (as não consistentes não existem) e, portanto, a dinâmica associada a parâmetros conservados é mais lenta do que a de parâmetros não-conservados, pois não há restrições sobre as flutuações neste último caso.

Ocasionalmente, o sistema pode ser descrito por mais de um parâmetro de ordem de forma que não haja como dissociar suas dinâmicas (a equação (3.79) torna-se um *sistema* de equações acopladas – uma para cada parâmetro). Neste caso, diz-se que os parâmetros de ordem estão acoplados e isso pode alterar a velocidade da termalização; em particular, a dinâmica de um parâmetro de ordem não conservado é tornada mais lenta quando ele é acoplado a um parâmetro conservado [35].

3.4 Parâmetros de Ordem para a QCD

Finalmente estamos em condições de introduzir os parâmetros de ordem que descrevem as transições de fase quiral e de desconfinamento da QCD. Pelo exposto na Subseção 3.2.2, para que uma quantidade seja um parâmetro de ordem, ele deve ser capaz de distinguir entre as fases em que ocorre a simetria e a em que a simetria é quebrada; para tanto, basta que ele *não* seja invariante pelo grupo da simetria espontaneamente quebrada numa das fases, pois uma quantidade não invariante sob a simetria deve ter valor nulo na fase em que a simetria ocorre.

Para ilustrar a afirmação feita acima, voltemos ao exemplo da transição entre as fases paramagnética e ferromagnética na ausência de campo externo. Na fase desordenada, paramagnética, que ocorre a altas temperaturas, o sistema apresenta simetria rotacional – é invariante sob o grupo $O(3)$ – e a magnetização é nula; entretanto, abaixo da temperatura de Curie, o sistema exhibe magnetização não-nula, de modo que ele é invariante apenas sob rotações em torno do eixo determinado pelo vetor magnetização, ou seja, a simetria $O(3)$ é quebrada. Note-se que o vetor magnetização *não* é invariante sob o grupo da simetria quebrada.

3.4.1 Transição de fase quiral

Na Subseção 2.2.1.2, mostramos para o caso de dois sabores que o termo de massa dos férmions quebra explicitamente a simetria quiral; chega-se à mesma conclusão considerando um número N_f de sabores. Neste caso, define-se a transformação global $SU(N_f)$ quiral de sabor:

$$\begin{aligned} \psi_j(x) &\rightarrow \psi'_j(x) = U(\theta)_{jk} \psi_k(x) \\ \psi_j^\dagger(x) &\rightarrow \psi'^\dagger_j(x) = \psi_k^\dagger(x) U(\theta)^\dagger_{kj} \\ U(\theta)_{jk} = U(\theta^1, \dots, \theta^{N_f})_{jk} &= (\exp[i\theta^a T^a \gamma_5])_{jk} \\ a = 1, \dots, (N_f^2 - 1) & \quad j, k = 1, \dots, N_f \end{aligned} \quad (3.81)$$

em que $\psi_k(x)$ é um espinor de Dirac que descreve o sabor k , $\{T^a\}$ são os geradores do grupo $SU(N_f)$ e $\{\theta^a\}$ são constantes reais que definem a transformação $U(\theta)_{jk}$.

Tal como antes, mostra-se que o produto

$$\hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x) \quad (3.82)$$

não é invariante sob a transformação (3.81). Pelo já discutido, o valor termodinâmico desse observável $\langle \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x) \rangle_\beta$, chamado *condensado quiral*, pode ser escolhido como parâmetro de ordem para a transição de fase quiral, ou seja, a transição é entre uma fase em que a simetria quiral é realizada e uma em que a simetria quiral é quebrada. O nome condensado quiral vem da analogia feita com a teoria de supercondutividade comentada na Seção 2.3; como o vácuo não carrega nem momento linear nem momento angular e conserva o número fermiônico, um valor não nulo para o valor esperado de vácuo de $\hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x)$ é interpretado como uma coleção de férmions e anti-férmions correlacionados com quiralidades opostas.

É importante ressaltar que a simetria quiral é exata *apenas* no limite em que os quarks não são massivos; as massas dos quarks, mesmo que sejam baixas (caso dos quarks leves) quebra *explicitamente* a simetria quiral (tal qual um campo magnético não nulo quebra a simetria $O(3)$ em sistemas magnéticos). Quando se trabalha apenas com os quarks mais leves, a simetria é aproximada; portanto, a transição é entre uma fase com simetria quebrada e uma fase com simetria aproximada e, portanto, o condensado quiral *não* assume valor nulo na fase em que a simetria é “restaurada”. Mesmo não sendo um parâmetro de ordem no sentido estrito, o condensado permite identificar e caracterizar uma transição de fase.

3.4.2 Transição de desconfinamento

Como apresentado na Seção 2.1, o confinamento é expresso em termos dos graus de liberdade de cor afirmando que os estados físicos são singletos de cor, ou seja, são invariantes por transformações de calibre de cor. Como não é evidente qual é a simetria

quebrada numa transição entre as fases confinada e desconfinada, isso poderia (erroneamente) ser entendido como uma indicação de que a simetria de cor é quebrada na fase desconfinada. Entretanto, a simetria de calibre local de cor é preservada mesmo na fase desconfinada.

Nesta subseção justificaremos a afirmação adiantada na Seção 2.4 de que o *loop* de Polyakov é um parâmetro de ordem bem definido para a transição de fase de desconfinamento no limite de quarks infinitamente pesados. Para que a dificuldade introduzida pela não comutatividade do grupo SU(3) de cor não obscureça a interpretação do *loop* de Polyakov, a argumentação será feita em termos de uma teoria de calibre U(1), seguindo a Ref. [28].

A teoria de puro calibre U(1) é definida a partir da seguinte densidade lagrangiana:

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \\ F_{\mu\nu} &= \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu\end{aligned}\quad (3.83)$$

Na situação em que há uma distribuição *estática* de cargas $\rho(\vec{x})$, tratada como um campo de fundo (pois não há dinâmica associada às cargas), pode-se mostrar [28] que a função de partição é um funcional de ρ dado por:

$$Z[\rho] = \int_{ccp} \mathcal{D}A_\mu \exp(-S_E) \exp\left(i \int_0^\beta d\tau \int d^3x \rho(\vec{x}) A_0(x)\right) \quad (3.84)$$

em que *ccp* indica que a integração funcional deve ser efetuada usando condições de contorno periódicas nos campos A_μ :

$$A_\mu(\vec{x}, 0) = A_\mu(\vec{x}, \beta) \quad (3.85)$$

e S_E denota a ação euclidiana:

$$S_E = - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (3.86)$$

obtida de (3.83) através da rotação de Wick (continuação analítica para tempos imaginários).

O *loop* de Polyakov surge naturalmente quando se considera uma distribuição de duas cargas pontuais

$$\rho(\vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{x}_n) - \delta(\vec{x} - \vec{y}_m) \quad (3.87)$$

Substituindo (3.87) em (3.84), encontra-se:

$$Z(\vec{x}_n, \vec{y}_m) = \int_{ccp} \mathcal{D}A_\mu \exp(-S_E) \exp\left[i \int_0^\beta d\tau A_0(\vec{x}_n)\right] \exp\left[-i \int_0^\beta d\tau A_0(\vec{y}_m)\right] \quad (3.88)$$

Introduzindo a seguinte definição para o *loop* de Polyakov (no caso abeliano):

$$L(\vec{x}) = \exp\left[i \int_0^\beta d\tau A_0(\vec{x})\right] \quad (3.89)$$

e a definição do valor médio termodinâmico $\langle \mathcal{O}[\mathcal{A}_\mu] \rangle_\beta$ para o observável $\mathcal{O}[\mathcal{A}_\mu]$:

$$\langle \mathcal{O}[\mathcal{A}_\mu] \rangle_\beta \equiv \frac{\int_{ccp} \mathcal{D}A_\mu \exp(-S_E) \mathcal{O}[\mathcal{A}_\mu]}{\int_{ccp} \mathcal{D}A_\mu \exp(-S_E)} \equiv \frac{\int_{ccp} \mathcal{D}A_\mu \exp(-S_E) \mathcal{O}[\mathcal{A}_\mu]}{Z[\rho = 0]} \quad (3.90)$$

chega-se à seguinte expressão para a função de partição de duas cargas estáticas:

$$Z(\vec{x}_n, \vec{y}_m) = Z[\rho = 0] \langle L(\vec{x}_n) L^\dagger(\vec{y}_m) \rangle_\beta \quad (3.91)$$

Em particular, para apenas uma carga q localizada em \vec{x} , a função de partição é:

$$Z(\vec{x}) = Z[\rho = 0] \langle L(\vec{x}) \rangle_\beta \quad (3.92)$$

A energia livre do vácuo F_0 é definida do modo usual:

$$F_0 = -\frac{1}{\beta} \ln \left(Z[\rho = 0] \right) \quad (3.93)$$

A energia livre correspondente a apenas uma carga é, por (3.92):

$$F_q - F_0 = -\frac{1}{\beta} \ln \left[\langle L(\vec{x}) \rangle_\beta \right] \quad (3.94)$$

e a energia livre de um par carga-anticarga é, por (3.91):

$$F_{q\bar{q}} - F_0 = -\frac{1}{\beta} \ln \left[\langle L(\vec{x}_n) L^\dagger(\vec{y}_m) \rangle_\beta \right] \quad (3.95)$$

o que permite escrever a função de correlação entre dois *loops* (e, portanto, entre a carga e a anticarga) da seguinte forma:

$$\langle L(\vec{x}_n) L^\dagger(\vec{y}_m) \rangle_\beta = \exp[-\beta (F_{q\bar{q}} - F_0)] \quad (3.96)$$

As conclusões aqui obtidas valem para o caso em que o grupo de calibre é $SU(N_c)$; com a ressalva de que o *loop* de Polyakov passa a ser definido por:

$$\begin{aligned} L(\vec{x}) &= \mathcal{T} \exp \left[i \int_0^\beta d\tau \mathbb{A}_0(\vec{x}, \tau) \right] \\ \phi(\vec{x}) &= \frac{\text{Tr}_c [L(\vec{x})]}{N_c} \end{aligned}$$

em que \mathcal{T} denota o ordenamento temporal definido por (2.17). Portanto, de agora em diante, estaremos interessados no caso não-abeliano; em particular, quando o grupo de simetria de calibre é $SU(3)$.

Resta ainda determinar a simetria que deve ser espontaneamente quebrada na transição. Pelo já discutido, deve-se procurar por uma transformação que deixe a ação invariante, mas que altere o *loop* de Polyakov. De fato, já sabemos que as transformações *locais* de calibre definidas em por (2.4) e (2.5):

$$\begin{aligned} T^a A_\mu^a(x) \rightarrow T^a A_\mu'^a(x) &= [U(x)] T^a A_\mu^a(x) [U(x)]^{-1} - \frac{i}{g} [\partial_\mu U(x)] [U(x)]^{-1} \\ U(x) &= \exp[-iT^a \theta^a(x)] \end{aligned} \quad (3.97)$$

deixam a ação invariante e transforma o *loop* de Polyakov da seguinte forma:

$$\phi(\vec{x}) \rightarrow \phi(\vec{x})' = \frac{1}{N_c} \text{Tr} [U(\vec{x}, 0)L(\vec{x})U^\dagger(\vec{x}, \beta)] \quad (3.98)$$

que, em geral, *não* é invariante. Entretanto, a transformação de simetria que desejamos deve manter inalterada a condição de contorno periódica dos campos A_μ^a no cálculo da função de partição. Transformações de calibre periódicas, definidas por $U(\vec{x}, 0) = U(\vec{x}, \beta)$, deixam $\phi(\vec{x})$ invariante – como se vê por (3.98) – e, portanto, não servem para identificar a transição de desconfinamento.

Pelas transformações (3.97) e (3.98), vê-se que as transformações calibre de tais que:

$$U^\dagger(\vec{x}, \tau + \beta) = zU^\dagger(\vec{x}, \tau); \quad z = \exp \left[i \frac{2\pi n}{N_c} \right] \mathbf{1}_{N_c} \in Z(N_c) \quad (3.99)$$

em que $\mathbf{1}_{N_c}$ denota a matriz identidade formam um grupo, deixam os campos de calibre invariantes, mas alteram o *loop* de Polyakov:

$$\phi(\vec{x}) \rightarrow \phi(\vec{x})' = z\phi(\vec{x}) \quad (3.100)$$

O grupo $Z(N_c)$ é chamado centro do grupo de calibre $SU(N_c)$ e é definido como sendo o subgrupo de $SU(N_c)$ em que todos os elementos comutam entre si. Portanto, $Z(N_c)$ é o grupo de simetria de que precisávamos: ele deixa a teoria à temperatura finita invariante, mas altera ϕ . Dessa forma, ϕ é um parâmetro de ordem bem definido (no limite de quarks infinitamente pesados).

A Eq. (3.94) permite associar esse parâmetro de ordem com a transição de desconfinamento. Por ela, vê-se que quando $\langle L(\vec{x}) \rangle_\beta = 0$ a energia livre correspondente a apenas um quark é infinitamente superior à do vácuo, enquanto que para $\langle L(\vec{x}) \rangle_\beta = 1$ ambas as energias tornam-se iguais. Essa observação permite identificar $\langle L(\vec{x}) \rangle_\beta = 0$ com a fase confinada.

Para determinar qual das duas fases é mais simétrica, basta notar que, na fase com a simetria exata, deve-se ter $\phi = 0$, o que identifica a fase confinada; portanto, a fase em que a simetria é espontaneamente quebrada corresponde à fase desconfina. É importante ressaltar que cálculos na rede de QCD pura (sem quarks) mostram uma transição de fase associada ao desconfinamento usando o *loop* de Polyakov [36]. Temos, então, um contra-exemplo em que a fase com maior simetria é estável a temperaturas mais baixas.

Deve-se comentar ainda que a simetria sob o grupo $Z(N_c)$ deixa de ser exata quando quarks dinâmicos são incluídos. Isso ocorre porque os férmions se transformam por $U(\vec{x}, \tau)$ e, por (3.99), vê-se que a condição de contorno antiperiódica dos férmions não é respeitada pela transformação do centro do grupo, ou seja, os férmions quebram explicitamente a simetria. Contudo cálculos de QCD na rede incluindo férmions dinâmicos [8] mostram que o *loop* apresenta comportamento qualitativo semelhante com o aqui discutido e, assim, pode ser usado como indicador da transição de fase de desconfinamento.

CAPÍTULO 4

TERMODINÂMICA DE EQUILÍBRIO E DE NÃO EQUILÍBRIO DO MODELO PNJL

Tendo apresentado o modelo PNJL na Seção 2.4, agora será calculada a correspondente densidade grande potencial na aproximação de campo médio. A partir disso, serão obtidas as equações de *gap* – que descrevem os parâmetros de ordem no equilíbrio termodinâmico – e as equações de Ginzburg-Landau-Langevin – que descrevem a dinâmica de não equilíbrio dos parâmetros de ordem.

4.1 Grande potencial para o modelo PNJL

Nesta seção, desejamos calcular o grande potencial na aproximação de campo médio para o modelo PNJL, cuja lagrangiana é – Eq. (2.15):

$$\mathcal{L}_{PNJL} = \bar{\psi} (i\not{D} - m_0) \psi + \frac{G}{2} \left[(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5 \vec{\tau}\psi)^2 \right] - \mathcal{U}(\bar{\phi}, \phi, T) \quad (4.1)$$

Para tornar a derivação mais simples, tomemos $\mathbb{A}_0 = 0$, ou seja, desconsideremos o *loop* de Polyakov e, portanto, o termo \mathcal{U} também é desconsiderado; mais adiante, será argumentado como o *loop* de Polyakov é devidamente reintroduzido. Neste caso, a densidade lagrangiana torna-se a do modelo NJL – Eq. (2.14):

$$\mathcal{L}_{NJL} = \bar{\psi} (i\not{D} - m_0) \psi + \frac{G}{2} \left[(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5 \vec{\tau}\psi)^2 \right] \quad (4.2)$$

em que $\psi(x) = \{\psi_{\mathbf{A}}(x); \mathbf{A} = (\alpha, a, A), \alpha = 1, \dots, 4; a = u, d; A = r, g, b\}$; α são índices de Dirac, a são índices de sabor e A são índices de cor.

Desta lagrangiana, encontra-se o momento $\Pi_{\mathbf{A}}(x)$ canonicamente conjugado a $\psi(x)_{\mathbf{A}}$:

$$\Pi_{\mathbf{A}}(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \psi_{\mathbf{A}}(x))} = \bar{\psi}(x)_{\mathbf{B}} (i\gamma^0)_{\mathbf{BA}} = i\psi(x)_{\mathbf{A}}^* \quad (4.3)$$

de forma que a densidade hamiltoniana é:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} &= \Pi_{\mathbf{A}} (\partial_0 \psi_{\mathbf{A}}) - \mathcal{L}_{NJL} \\
 &= i\psi_{\mathbf{A}}^\dagger (\partial_0 \psi_{\mathbf{A}}) - i\bar{\psi} \gamma^0 \partial_0 \psi - i\bar{\psi} \gamma^k \partial_k \psi + m_0 \bar{\psi} \psi - \\
 &\quad - \frac{G}{2} \left[(\bar{\psi} \psi)^2 + (\bar{\psi} i \gamma_5 \vec{\tau} \psi)^2 \right] \\
 \mathcal{H} &= \bar{\psi} [-i \gamma^k \partial_k + m_0] \psi - \frac{G}{2} \left[(\bar{\psi} \psi)^2 + (\bar{\psi} i \gamma_5 \vec{\tau} \psi)^2 \right]
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

A seguinte transformação global U(1):

$$\begin{aligned}
 \psi(x) &\rightarrow \psi'(x) = e^{-i\alpha} \psi(x) \\
 \psi^\dagger(x) &\rightarrow \psi'^\dagger(x) = \psi^\dagger(x) e^{i\alpha}
 \end{aligned}$$

é uma simetria do sistema à qual é associada a densidade de corrente conservada

$$j^\mu(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi(x))} \frac{\delta \psi(x)}{\delta \alpha} + \frac{\delta \psi^\dagger(x)}{\delta \alpha} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi^\dagger(x))} = \bar{\psi}(x) \gamma^\mu \psi(x)$$

cuja densidade de carga conservada é a densidade de número bariônico:

$$j^0(x) = \psi^\dagger(x) \psi(x) \tag{4.5}$$

A grande função de partição é dada por

$$\begin{aligned}
 \Xi(\beta, \mu, V) &\equiv \text{Tr} \left[\exp \left(-\beta \left[\hat{H} - \mu \hat{Q} \right] \right) \right] = \text{Tr} \left[\exp \left(-\beta \int d^3x \left[\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{j}^0 \right] \right) \right] \\
 &= \int_{\psi_{\mathbf{A}}(0, \vec{x}) = -\psi_{\mathbf{A}}(\beta, \vec{x})} \mathcal{D}(\psi_{\mathbf{A}}^*, \psi_{\mathbf{A}}) \exp \left\{ - \int_0^\beta d^4x \left[\psi_{\mathbf{A}}^* \partial_\tau \psi_{\mathbf{A}} + \mathcal{H} - \mu j^0 \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

onde μ é o potencial químico associado à carga conservada (4.5) (potencial químico bariônico¹). Como \mathcal{H} não é quadrática nos campos ψ e ψ^\dagger , a integral funcional em (4.6) não é gaussiana e, portanto, não pode ser integrada exatamente. No entanto, uma expressão analítica para a grande função de partição pode ser obtida na *aproximação de campo médio*, que consiste em desprezar termos de ordem quadrática na flutuação em torno dos seguintes valores médios termodinâmicos:

$$\sigma(x) \equiv G \langle \bar{\psi}(x) \psi(x) \rangle_\beta \quad \vec{\pi}(x) \equiv G \langle \bar{\psi}(x) i \gamma_5 \vec{\tau} \psi(x) \rangle_\beta \tag{4.7}$$

Mas $\vec{\pi} = \vec{0}$ porque o hamiltoniano possui paridade bem definida e o operador $\bar{\psi}(x) i \gamma_5 \vec{\tau} \psi(x)$ é ímpar. Assim, a aproximação de campo médio consiste em:

$$\begin{aligned}
 \left(\bar{\psi} \psi - \frac{\sigma}{G} \right)^2 &= (\bar{\psi} \psi)^2 - 2 \frac{\sigma}{G} \bar{\psi} \psi + \frac{\sigma^2}{G^2} \approx 0 \\
 \left(\bar{\psi} i \gamma_5 \vec{\tau} \psi - \frac{\vec{\pi}}{G} \right)^2 &= (\bar{\psi} i \gamma_5 \vec{\tau} \psi)^2 - 2 \underbrace{\frac{\vec{\pi}}{G}}_{=0} \cdot (\bar{\psi} i \gamma_5 \vec{\tau} \psi) + \underbrace{\frac{\vec{\pi}^2}{G^2}}_{=0} \approx 0
 \end{aligned}$$

¹ O potencial químico bariônico será referido apenas por potencial químico.

$$\therefore (\bar{\psi}\psi)^2 \approx 2\frac{\sigma}{G}\bar{\psi}\psi - \frac{\sigma^2}{G^2} \quad \text{e} \quad (\bar{\psi}i\gamma_5\vec{\tau}\psi)^2 \approx 0 \quad (4.8)$$

A densidade hamiltoniana na aproximação de campo médio, \mathcal{H}_{CM} , é obtida substituindo (4.8) em (4.4):

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{CM} &= \bar{\psi} [-i\gamma^k \partial_k + m_0] \psi - \frac{G}{2} \left[2\frac{\sigma}{G}\bar{\psi}\psi - \frac{\sigma^2}{G^2} \right] \\ &= \bar{\psi} [-i\gamma^k \partial_k + m_0 - \sigma] \psi + \frac{\sigma^2}{2G} \\ &= \psi^\dagger [-i\gamma^0 \gamma^k \partial_k + \gamma^0 M] \psi + \frac{\sigma^2}{2G} \end{aligned} \quad (4.9)$$

em que foi introduzida a definição para a massa constituinte M :

$$M = m_0 - \sigma \quad (4.10)$$

Usando (4.9) em (4.6) e omitindo por simplicidade de notação a condição de contorno de antiperiodicidade dos campos ψ e ψ^\dagger , a grande função de partição na aproximação de campo médio é calculada a partir de:

$$\begin{aligned} \Xi_{CM}(\beta, \mu, V) &= \int \mathcal{D}(\psi_{\mathbf{A}}^*, \psi_{\mathbf{A}}) \exp \left\{ - \int_0^\beta d^4x [\psi_{\mathbf{A}}^* \partial_\tau \psi_{\mathbf{A}} + \mathcal{H}_{CM} - \mu \psi_{\mathbf{A}}^* \psi_{\mathbf{A}}] \right\} \\ &= \int \mathcal{D}(\psi_{\mathbf{A}}^*, \psi_{\mathbf{A}}) \exp \left(- \int_0^\beta d^4x \left\{ \psi_{\mathbf{A}}^* [\partial_\tau - \mu - i\gamma^0 \gamma^k \partial_k + \gamma^0 M]_{\mathbf{AB}} \psi_{\mathbf{B}} + \frac{\sigma^2}{2G} \right\} \right) \\ &= \exp \left[-\beta V \frac{\sigma^2}{2G} \right] \int \mathcal{D}(\psi_{\mathbf{A}}^*, \psi_{\mathbf{A}}) \exp \left\{ - \int_0^\beta d^4x \psi_{\mathbf{A}}^* [\partial_\tau - \mu - i\gamma^0 \gamma^k \partial_k + \gamma^0 M]_{\mathbf{AB}} \psi_{\mathbf{B}} \right\} \end{aligned}$$

em que na última expressão foi usado o fato de que σ é uniforme no equilíbrio termodinâmico; portanto, $\int_0^\beta d^4x \sigma^2 = \beta V \sigma^2$.

A partir da função de partição, é obtida a densidade de grande potencial calculada na aproximação de campo médio:

$$\mathcal{J}_{CM}(\beta, \mu) = -\frac{1}{\beta V} \ln \Xi_{CM}(\beta, \mu, V)$$

de onde, definindo Z

$$Z \equiv \int \mathcal{D}(\psi_{\mathbf{A}}^*, \psi_{\mathbf{A}}) \exp \left\{ - \int_0^\beta d^4x \psi_{\mathbf{A}}^* [\partial_\tau - \mu - \gamma^0 (i\gamma^k \partial_k - M)]_{\mathbf{AB}} \psi_{\mathbf{B}} \right\} \quad (4.11)$$

escreve-se:

$$\mathcal{J}_{CM} = \frac{\sigma^2}{2G} - \frac{1}{\beta V} \ln Z \quad (4.12)$$

Por esta expressão, resta apenas calcular $\ln Z$ para obter o grande potencial; para tal, é conveniente expressar os campos em termos de suas componentes de Fourier:

$$\psi_{\mathbf{A}}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_n \sum_{\vec{p}} e^{(-i\omega_n \tau + i\vec{p} \cdot \vec{x})} \tilde{\psi}_{\mathbf{A}}(n, \vec{p}) \quad \psi_{\mathbf{A}}^*(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_r \sum_{\vec{q}} e^{(i\omega_r \tau - i\vec{q} \cdot \vec{x})} \tilde{\psi}_{\mathbf{A}}^*(r, \vec{q}) \quad (4.13)$$

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (4.14)$$

onde ω_n são as frequências de Matsubara; o fator $2n+1$ é devido à condição de antiperiodicidade $\psi(0, \vec{x}) = -\psi(\beta, \vec{x})$ e o fator $(\sqrt{V})^{-1}$ foi explicitado para que as componentes de Fourier sejam adimensionais.

Designando por $-\mathcal{E}[\psi^\dagger, \psi]$ o expoente em (4.11), escreve-se:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\psi^\dagger, \psi] &= \int_0^\beta d^4x \psi_{\mathbf{A}}^*(x) [\partial_\tau - \mu - \gamma^0 (i\gamma^k \partial_k - M)]_{\mathbf{AB}} \psi_{\mathbf{B}}(x) \\ &= \int_0^\beta d^4x \sum_{n, \vec{p}} \sum_{r, \vec{q}} \frac{1}{V} e^{-i(\omega_n - \omega_r)\tau} e^{i(\vec{p} - \vec{q}) \cdot \vec{x}} \times \\ &\quad \times \tilde{\psi}_{\mathbf{A}}^*(r, \vec{q}) [(-i\omega_n - \mu) - \gamma^0 (i\gamma^k (ip_k) - M)]_{\mathbf{AB}} \tilde{\psi}_{\mathbf{B}}(n, \vec{p}) \end{aligned}$$

Usando

$$\int_0^\beta e^{-i(\omega_n - \omega_r)\tau} d\tau = \beta \delta_{n,r} \quad \text{e} \quad \int_V e^{i(\vec{p} - \vec{q}) \cdot \vec{x}} d^3\vec{x} = V \delta_{\vec{p}, \vec{q}}$$

encontra-se

$$\mathcal{E}[\psi^\dagger, \psi] = \sum_{n, \vec{p}} \beta \tilde{\psi}_{\mathbf{A}}^*(n, \vec{p}) [(-i\omega_n - \mu) + \gamma^0 (\gamma^k p_k + M)]_{\mathbf{AB}} \tilde{\psi}_{\mathbf{B}}(n, \vec{p})$$

Então², escreve-se:

$$Z = \int \mathcal{D}(\tilde{\psi}_{\mathbf{A}}^*, \tilde{\psi}_{\mathbf{A}}) \exp \left\{ - \sum_{n, \vec{p}} \tilde{\psi}_{\mathbf{A}}^*(n, \vec{p}) \beta [(-i\omega_n - \mu) + \gamma^0 (\gamma^k p_k + M)]_{\mathbf{AB}} \tilde{\psi}_{\mathbf{B}}(n, \vec{p}) \right\}$$

Esta expressão, após a integração sobre $\tilde{\psi}_{\mathbf{A}}^*$ e $\tilde{\psi}_{\mathbf{A}}$, pode ser escrita como

$$Z = \det D$$

em que D é a matriz dada pelos elementos:

$$D = \beta [(-i\omega_n - \mu) + \gamma^0 (\gamma^k p_k + M)]_{\alpha\beta} \delta_{a,b} \delta_{A,B} \delta_{n,m} \delta_{\vec{p}, \vec{k}} \quad (4.15)$$

assim:

$$\begin{aligned} \det D &= \prod_{A=r,g,b} \prod_{a=u,d} \prod_{n, \vec{p}} \det \left\{ \beta [(-i\omega_n - \mu) + \gamma^0 (\gamma^k p_k + M)]_{\alpha\beta} \right\} \\ &= \left(\prod_{n, \vec{p}} \det \left\{ \beta [(-i\omega_n - \mu) + \gamma^0 (\gamma^k p_k + M)]_{\alpha\beta} \right\} \right)^{N_f \times N_c} \end{aligned} \quad (4.16)$$

² Note-se que a transformada de Fourier é uma transformação unitária e, portanto, deixa a medida de integração funcional invariante.

Portanto, escreve-se:

$$\begin{aligned} \ln Z &= \ln(\det D) = N_f N_c \sum_{n, \vec{p}} \ln \left(\det \left\{ \beta \left[-(i\omega_n + \mu) + \gamma^0 (\gamma^k p_k + M) \right]_{\alpha\beta} \right\} \right) \\ &= N_f N_c V \int \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^3} \sum_n \ln \left(\det \left\{ \beta \left[-(i\omega_n + \mu) + \gamma^0 (\gamma^k p_k + M) \right]_{\alpha\beta} \right\} \right) \end{aligned} \quad (4.17)$$

em que tornou-se contínua a soma sobre os momentos através de:

$$\sum_{\vec{p}} \rightarrow V \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}$$

Designando por \mathcal{T} o logaritmo do determinante sobre os índices de Dirac nesta última equação, escreve-se:

$$\begin{aligned} \mathcal{T} &= \ln \left(\det \left\{ \beta \left[-(i\omega_n + \mu) + \gamma^0 (\gamma^k p_k + M) \right] \right\} \right) \\ &= \ln \left(\det \left\{ \beta \left[-(i\omega_n + \mu) \gamma^0 + (\gamma^0)^2 (\gamma^k p_k + M) \right] \right\} \right) \\ &= \ln \left[\beta^4 \det \begin{pmatrix} [M - (i\omega_n + \mu)] \mathbf{1}_2 & p_k \sigma_k \\ -p_j \sigma_j & [M + (i\omega_n + \mu)] \mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \right] \\ &= \ln \left[\beta^4 \det \left([M^2 - (i\omega_n + \mu)^2] \mathbf{1}_2 + \vec{p}^2 \mathbf{1}_2 \right) \right] \\ &= \ln \left[\beta^4 \left(\vec{p}^2 + M^2 - (i\omega_n + \mu)^2 \right)^2 \right] \\ &= 2 \ln \left\{ \beta^2 \left[(i\omega_n + \mu)^2 - (\vec{p}^2 + M^2) \right] \right\} \end{aligned}$$

Da primeira para a segunda linha multiplicamos a matriz por γ^0 , pois $\det(\gamma^0) = 1$; da segunda para a terceira usamos a representação (A.14) para as matrizes de Dirac e da terceira para a quarta linha usaram-se as seguintes relações:

$$(\vec{p} \cdot \vec{\sigma})^2 = p_i p_j \sigma_i \sigma_j = p_i p_j \frac{1}{2} \{ \sigma_i, \sigma_j \} = p_i p_j \delta_{ij} \mathbf{1}_2 = \vec{p}^2 \mathbf{1}_2$$

e

$$\det \begin{bmatrix} A_{n \times n} & B_{n \times n} \\ C_{n \times n} & D_{n \times n} \end{bmatrix} = \det \{ (AD)_{n \times n} - (BC)_{n \times n} \} \quad \text{se } [C, D] = 0$$

esta última é demonstrada na Ref. [37]. Portanto:

$$\ln Z = N_f N_c V \int \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^3} \sum_n 2 \ln \left[\beta^2 \left\{ (i\omega_n + \mu)^2 - \omega_p^2 \right\} \right]; \quad \omega_p = \sqrt{\vec{p}^2 + M^2}$$

Para efetuar o somatório indicado acima, é conveniente reescrevê-lo de modo à dependência em ω_n do logaritmando ser apenas em ω_n^2 . Para isso, define-se:

$$\ln Z = N_f N_c V \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \mathcal{A}(p) \quad (4.18)$$

$$\mathcal{A}(p) \equiv 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln (\beta^2 [(i\omega_n + \mu)^2 - \omega_p^2])$$

notando-se que $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$ é linear em n e que a soma é sobre todos os inteiros, pode-se trocar n por $-n$ num dos dois termos em \mathcal{A} :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(p) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{ \ln (\beta^2 [(i\omega_n + \mu)^2 - \omega_p^2]) + \ln (\beta^2 [(-i\omega_n + \mu)^2 - \omega_p^2]) \} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln \{ (\beta^2 [(i\omega_n + \mu)^2 - \omega_p^2]) (\beta^2 [(-i\omega_n + \mu)^2 - \omega_p^2]) \} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln \{ \beta^4 [(i\omega_n + \mu)(-i\omega_n + \mu)]^2 - \omega_p^2 [(i\omega_n + \mu)^2 + (-i\omega_n + \mu)^2] + \omega_p^4 \} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln \left\{ \beta^4 \left([\omega_n^2 + \mu^2]^2 - \omega_p^2 [-2\omega_n^2 + 2\mu^2] + \omega_p^4 \right) \right\} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln \left\{ \beta^4 (\omega_n^4 + 2\omega_n^2\mu^2 + \mu^4 + 2\omega_p^2\omega_n^2 - 2\omega_p^2\mu^2 + \omega_p^4) \right\} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln \left\{ \beta^4 \left(\omega_n^4 + \omega_n^2 [2\mu^2 + 2\omega_p^2] + [\omega_p^2 - \mu^2]^2 \right) \right\} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln \left\{ \beta^4 \left(\omega_n^4 + \omega_n^2 [(\omega_p + \mu)^2 + (\omega_p - \mu)^2] + [\omega_p^2 - \mu^2]^2 \right) \right\} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln \left\{ \beta^4 \left([\omega_n^2 + (\omega_p + \mu)^2] [\omega_n^2 + (\omega_p - \mu)^2] \right) \right\} \\ \mathcal{A}(p) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{ \ln (\beta^2 [\omega_n^2 + (\omega_p + \mu)^2]) + \ln (\beta^2 [\omega_n^2 + (\omega_p - \mu)^2]) \} \end{aligned}$$

substituindo a expressão acima em (4.18):

$$\ln Z = N_f N_c V \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{ \ln (\beta^2 [\omega_n^2 + \omega_+^2]) + \ln (\beta^2 [\omega_n^2 + \omega_-^2]) \}; \quad \omega_{\pm} = \omega_p \pm \mu \quad (4.19)$$

Por fim, o somatório é calculado usando as seguintes identidades [7]:

$$\begin{aligned} \ln (\beta^2 [\omega_n^2 + w^2]) &= \ln [(\beta\omega_n)^2 + (\beta w)^2] \\ &= \int_1^{(\beta w)^2} \frac{1}{(\beta\omega_n)^2 + y^2} d(y^2) + \ln [(\beta\omega_n)^2 + 1] \end{aligned}$$

e

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{[(2n + 1)\pi]^2 + y^2} = \frac{1}{y} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{e^y + 1} \right) \quad (4.20)$$

que fornecem:

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln(\beta^2 [\omega_n^2 + w^2]) &= \int_1^{(\beta w)^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(\beta \omega_n)^2 + y^2} d(y^2) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln [(\beta \omega_n)^2 + 1] \\ &= \int_1^{(\beta w)^2} \frac{1}{y} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{e^y + 1} \right) d(y^2) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln [(\beta \omega_n)^2 + 1] \end{aligned}$$

O segundo somatório diverge, mas é independente de temperatura ou potencial químico; logo, sua contribuição para o grande potencial é a de uma constante aditiva, o que não altera a termodinâmica e pode, assim, ser desprezada; fazendo-o e resolvendo a integral, escreve-se:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln(\beta^2 [\omega_n^2 + w^2]) = \beta w + 2 \ln(1 + e^{-\beta w}) - [1 + 2 \ln(1 + e^{-1})] \quad (4.21)$$

Portanto, obtém-se:

$$\begin{aligned} &\sum_{n=-\infty}^{\infty} \{ \ln(\beta^2 [\omega_n^2 + (\omega_p + \mu)^2]) + \ln(\beta^2 [\omega_n^2 + (\omega_p - \mu)^2]) \} = \\ &= \beta(\omega_p + \mu) + 2 \ln(1 + e^{-\beta(\omega_p + \mu)}) + \beta(\omega_p - \mu) + 2 \ln(1 + e^{-\beta(\omega_p - \mu)}) - 2 [1 + 2 \ln(1 + e^{-1})] \end{aligned}$$

novamente, o último termo na expressão acima é uma constante aditiva independente de temperatura ou potencial químico e pode ser desconsiderada, de modo que (4.19) é escrita como:

$$\ln Z = 2N_f N_c V \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left[\beta \omega_p + \ln(1 + e^{-\beta(\omega_p + \mu)}) + \ln(1 + e^{-\beta(\omega_p - \mu)}) \right] \quad (4.22)$$

Substituindo (4.22) em (4.12) e usando $\beta = T^{-1}$ ($\hbar = c = k_B = 1$ em unidades naturais), chega-se à seguinte expressão para o grande potencial:

$$\mathcal{J}_{CM} = \frac{\sigma^2}{2G} - 2N_f N_c \int_0^\Lambda \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \omega_p - 2N_f N_c T \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left[\ln(1 + e^{-\beta(\omega_p + \mu)}) + \ln(1 + e^{-\beta(\omega_p - \mu)}) \right] \quad (4.23)$$

em que foi explicitado o uso do *cutoff* para regularizar a primeira integral, enquanto que a segunda não é divergente.

Tendo calculado o grande potencial na aproximação de campo médio para o modelo NJL com N_f sabores e N_c cores, vamos reintroduzir o campo \mathbb{A}_0 e o potencial \mathcal{U} para, assim, encontrar o grande potencial para o modelo PNJL.

Conforme discutido na Subseção 3.4.2, a Ref. [28] mostra que, quando o *loop* de Polyakov é considerado, o campo \mathbb{A}_0 se acopla com a densidade de carga – ver Eq. (3.84). Por outro lado, como se vê pela Eq. (4.6), o potencial químico multiplica a densidade conservada na grande função de partição. Portanto, considerar o *loop* de Polyakov equivale a adicionar um termo $i\mathbb{A}_0$ ao potencial químico [38]:

$$\mu \rightarrow \mu + i\mathbb{A}_0 \quad (4.24)$$

Com isso, são feitas as seguintes substituições em (4.23):

$$\begin{aligned} e^{-\beta(\omega_p - \mu)} &\rightarrow e^{-\beta[\omega_p - (\mu + i\mathbb{A}_0)]} = e^{i\beta\mathbb{A}_0} e^{-\beta(\omega_p - \mu)} = L e^{-\beta(\omega_p - \mu)} \\ e^{-\beta(\omega_p + \mu)} &\rightarrow e^{-\beta[\omega_p + (\mu + i\mathbb{A}_0)]} = e^{-i\beta\mathbb{A}_0} e^{-\beta(\omega_p + \mu)} = L^\dagger e^{-\beta(\omega_p + \mu)} \end{aligned} \quad (4.25)$$

pois, no equilíbrio termodinâmico, o campo \mathbb{A}_0 é constante, portanto $\int_0^\beta d\tau \mathbb{A}_0 = \beta\mathbb{A}_0$.

Além disso, deve-se notar que na derivação acima foi obtido um fator N_c porque a matriz D em (4.16) é proporcional à unidade nos índices de cor e foi calculado o traço do logaritmo da matriz. Entretanto, fazendo as substituições (4.24) em (4.15) para se obter o modelo PNJL, tem-se que a matriz em questão não mais é proporcional à identidade e, portanto, resta um traço sobre os índices de cor a ser feito.

Ainda, como o potencial \mathcal{U} não depende dos campos fermiônicos sobre os quais é definida a integral funcional que fornece a grande função de partição, encontra-se que ele contribui aditivamente ao grande potencial (assim como o termo $\sigma^2/2G$):

$$\frac{\sigma^2}{2G} \rightarrow \mathcal{U} + \frac{\sigma^2}{2G}$$

Dessa forma, chega-se à seguinte expressão para o grande potencial para o modelo PNJL na aproximação de campo médio:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{CM} &= \mathcal{U}(\bar{\phi}, \phi, T) + \frac{\sigma^2}{2G} - 6N_f \int_0^\Lambda \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \omega_p - 2N_f T \times \\ &\times \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left[\text{Tr}_c \ln \left(1 + L^\dagger \exp \left[-\frac{\omega_p + \mu}{T} \right] \right) + \text{Tr}_c \ln \left(1 + L \exp \left[-\frac{\omega_p - \mu}{T} \right] \right) \right] \end{aligned} \quad (4.26)$$

Por fim, deseja-se expressar o grande potencial em em termos do traço do *loop* de Polyakov (ϕ e $\bar{\phi}$) em vez de L e L^\dagger . Para isso, usa-se o fato de que, no gauge de Polyakov, o *loop* pode ser escrito como uma matriz diagonal [38] dada por:

$$L = \begin{bmatrix} e^{i\varphi} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\rho} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i(\varphi+\rho)} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad L^\dagger = \begin{bmatrix} e^{-i\varphi} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\rho} & 0 \\ 0 & 0 & e^{i(\varphi+\rho)} \end{bmatrix} \quad (4.27)$$

com φ e ρ reais, de onde se escreve:

$$\begin{aligned} \phi &= \frac{\text{Tr} L}{3} = \frac{e^{i\varphi} + e^{i\rho} + e^{-i(\varphi+\rho)}}{3} \\ \bar{\phi} &= \frac{\text{Tr} L^\dagger}{3} = \frac{e^{-i\varphi} + e^{-i\rho} + e^{i(\varphi+\rho)}}{3} \end{aligned} \quad (4.28)$$

Definindo

$$f_\pm = \exp \left[-\frac{\omega_p \pm \mu}{T} \right] = \exp \left[-\frac{\sqrt{p^2 + M^2} \pm \mu}{T} \right] \quad (4.29)$$

tem-se:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}_c \ln \left(1 + L \exp \left[-\frac{\omega_p - \mu}{T} \right] \right) &= \text{Tr}_c \ln (1 + f_- L) = \ln \det_c (1 + f_- L) \\
 &\stackrel{(4.27)}{=} \ln \det_c \begin{bmatrix} 1 + f_- e^{i\varphi} & 0 & 0 \\ 0 & 1 + f_- e^{i\rho} & 0 \\ 0 & 0 & 1 + f_- e^{-i(\varphi+\rho)} \end{bmatrix} \\
 &= \ln \left\{ (1 + f_- e^{i\varphi})(1 + f_- e^{i\rho})(1 + f_- e^{-i(\varphi+\rho)}) \right\} \\
 &= \ln \left\{ \left[1 + f_- (e^{i\rho} + e^{i\varphi}) + f_-^2 e^{i(\varphi+\rho)} \right] \times \right. \\
 &\quad \left. \times (1 + f_- e^{-i(\varphi+\rho)}) \right\} \\
 &= \ln \left\{ 1 + f_- (e^{i\rho} + e^{i\varphi} + e^{-i(\varphi+\rho)}) + \right. \\
 &\quad \left. + f_-^2 (e^{i(\varphi+\rho)} + e^{-i\varphi} + e^{-i\rho}) + f_-^3 \right\} \\
 &\stackrel{(4.28)}{=} \ln \left\{ 1 + 3\phi f_- + 3\bar{\phi} f_-^2 + f_-^3 \right\} \tag{4.30}
 \end{aligned}$$

procedendo do mesmo modo, também se encontra:

$$\text{Tr}_c \ln \left(1 + L^\dagger \exp \left[-\frac{\omega_p - \mu}{T} \right] \right) = \text{Tr}_c \ln (1 + f_- L^\dagger) = \ln \left\{ 1 + 3\bar{\phi} f_- + 3\phi f_-^2 + f_-^3 \right\} \tag{4.31}$$

portanto, substituindo (4.30) e (4.31) em (4.26) e explicitando a função \mathcal{U} chega-se à expressão desejada para o grande potencial na aproximação de campo médio para o modelo PNJL [12, 38]:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}_{CM}(T, \mu) &= T^4 \left\{ -\frac{b_2(T)}{2} \bar{\phi}\phi - \frac{b_3}{6} (\bar{\phi}^3 + \phi^3) + \frac{b_4}{4} (\bar{\phi}\phi)^2 \right\} + \frac{\sigma^2}{2G} - 6N_f \int_0^\Lambda \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \omega_p - \\
 &\quad - 2N_f T \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left\{ \ln[1 + 3\phi f_- + 3\bar{\phi} f_-^2 + f_-^3] + \ln[1 + 3\bar{\phi} f_+ + 3\phi f_+^2 + f_+^3] \right\} \tag{4.32}
 \end{aligned}$$

note-se que há uma dependência em σ através de $M = m_0 - \sigma$, identificada com a massa constituinte dos quarks u e d , que é um parâmetro de ordem tão bom quanto o condensado quiral (σ/G) para descrever teoricamente a transição de fase quiral.

Neste ponto, deve-se comentar que a massa de corrente m_0 é vista como um parâmetro da hamiltoniana (semelhante o campo magnético no modelo de Ising, mas com a diferença de não poder ser ajustado experimentalmente) e as únicas variáveis independentes das quais $\mathcal{J}_{CM}(T, \mu)$ depende são T e μ , ainda que (4.32) indique dependência explícita em ϕ , $\bar{\phi}$ e σ . Isso ocorre porque, fixado um par (T, μ) , a configuração de equilíbrio termodinâmico é aquela que minimiza o grande potencial pois o grande potencial calculado na aproximação de campo médio pode ser interpretado como uma energia livre de Landau na Teoria Microscópica de Landau. Em outros termos, o sistema se ajusta de

modo que os campos ϕ , $\bar{\phi}$ e σ minimizem o grande potencial $\mathcal{J}_{CM}(T, \mu)$; portanto, ϕ , $\bar{\phi}$ e σ são funções de T e μ apenas.

De fato, as configurações de campo no equilíbrio termodinâmico são obtidas resolvendo o sistema de equações (chamadas *equações de gap*):

$$\left(\frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \sigma}\right)_{(T, \mu, \bar{\phi}, \phi)} = 0 \quad \left(\frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \phi}\right)_{(T, \mu, \bar{\phi}, \sigma)} = 0 \quad \left(\frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \bar{\phi}}\right)_{(T, \mu, \phi, \sigma)} = 0 \quad (4.33)$$

e tomando as soluções correspondentes a pontos de mínimo do grande potencial. Usando coordenadas esféricas para as integrais em (4.32) e denotando $p = |\vec{p}|$, as derivadas parciais são dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \sigma}(T, \mu) &= \frac{\sigma}{G} + \frac{3N_f}{\pi^2} \int_0^\Lambda dp p^2 \frac{M}{\omega_p} - \\ &- \frac{3N_f}{\pi^2} M \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\omega_p} \left\{ \frac{f_- (\phi + 2\bar{\phi}f_- + f_-^2)}{1 + 3\phi f_- + 3\bar{\phi}f_-^2 + f_-^3} + \frac{f_+ (\bar{\phi} + 2\phi f_+ + f_+^2)}{1 + 3\bar{\phi}f_+ + 3\phi f_+^2 + f_+^3} \right\} \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \phi}(T, \mu) &= \frac{T^4}{2} \{-b_2(T)\bar{\phi} - b_3\phi^2 + b_4\bar{\phi}^2\phi\} - \\ &- \frac{3N_f T}{\pi^2} \int_0^\infty dp p^2 \left\{ \frac{f_-}{1 + 3\phi f_- + 3\bar{\phi}f_-^2 + f_-^3} + \frac{f_+^2}{1 + 3\bar{\phi}f_+ + 3\phi f_+^2 + f_+^3} \right\} \end{aligned} \quad (4.35)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \bar{\phi}}(T, \mu) &= \frac{T^4}{2} \{-b_2(T)\phi - b_3\bar{\phi}^2 + b_4\bar{\phi}\phi^2\} - \\ &- \frac{3N_f T}{\pi^2} \int_0^\infty dp p^2 \left\{ \frac{f_-^2}{1 + 3\phi f_- + 3\bar{\phi}f_-^2 + f_-^3} + \frac{f_+}{1 + 3\bar{\phi}f_+ + 3\phi f_+^2 + f_+^3} \right\} \end{aligned} \quad (4.36)$$

portanto, as soluções de equilíbrio são obtidas substituindo as equações (4.34)–(4.36) em (4.33), resolvendo o sistema assim formado e tomando as soluções que correspondam a mínimos do grande potencial.

A seguir, as expressões para a densidade grande potencial na aproximação de campo médio, \mathcal{J}_{CM} , dada por (4.32) e de suas derivadas, equações (4.34)–(4.36), serão particularizadas para dois casos de interesse.

4.1.1 Caso $\mu = 0$ com o loop de Polyakov

A quantidade de hádrons criados numa colisão de íons pesados é significativamente superior à quantidade inicialmente presente nos íons; assim, além de ser mais simples, o caso $\mu = 0$ é de relevância física. Estudar o sistema com *loop* de Polyakov quando o potencial químico é nulo significa considerar, além da transição quiral, a transição de desconfinamento a $\mu = 0$. Conforme discutido em [39], quando $\mu = 0$, $\phi = \bar{\phi}$ e f_\pm se torna:

$$f = \exp\left[-\frac{\omega_p}{T}\right] \quad (4.37)$$

fazendo essas substituições em (4.32), (4.34), (4.35) e (4.36), obtém-se:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{CM}(T, \mu = 0) &= T^4 \left\{ -\frac{b_2(T)}{2} \phi^2 - \frac{b_3}{3} \phi^3 + \frac{b_4}{4} \phi^4 \right\} + \frac{\sigma^2}{2G} - \frac{3N_f}{\pi^2} \int_0^\Lambda dpp^2 \omega_p - \\ &\quad - \frac{2N_f T}{\pi^2} \int_0^\infty dpp^2 \ln [1 + 3\phi f + 3\phi f^2 + f^3] \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \sigma}(T, \mu = 0) &= \frac{\sigma}{G} - \frac{3N_f}{\pi^2} \int_0^\Lambda dpp^2 \frac{\sigma - m_0}{\sqrt{p^2 + (m_0 - \sigma)^2}} - \\ &\quad - \frac{6N_f}{\pi^2} (m_0 - \sigma) \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\omega_P} \left[\frac{f(\phi + 2\phi f + f^2)}{1 + 3\phi f + 3\phi f^2 + f^3} \right] \end{aligned} \quad (4.39)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \phi}(T, \mu = 0) &= \frac{T^4}{2} \{ -b_2(T) \phi - b_3 \phi^2 + b_4 \phi^3 \} - \\ &\quad - \frac{3N_f T}{\pi^2} \int_0^\infty dpp^2 \left[\frac{f + f^2}{1 + 3\phi f + 3\phi f^2 + f^3} \right] = \frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\phi}} \end{aligned} \quad (4.40)$$

Se, ainda, é feito o limite $T \rightarrow 0^+$, (4.38) fica:

$$\mathcal{J}_{CM}(T = 0, \mu = 0) = \frac{\sigma^2}{2G} - \frac{3N_f}{\pi^2} \int_0^\Lambda dpp^2 \sqrt{p^2 + (m_0 - \sigma)^2} \quad (4.41)$$

e as derivadas tornam-se:

$$\frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \sigma}(T = 0, \mu = 0) = \frac{\sigma}{G} - \frac{3N_f}{\pi^2} \int_0^\Lambda dpp^2 \frac{\sigma - m_0}{\sqrt{p^2 + (m_0 - \sigma)^2}} \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \bar{\phi}}(T = 0, \mu = 0) = 0 = \frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\phi}}(T = 0, \mu = 0) \quad (4.43)$$

note-se que para $(T = 0, \mu = 0)$ o grande potencial não depende do loop de Polyakov, o que era esperado pois $\phi = 0$ identifica a fase em que há confinamento.

4.1.2 Caso $\mu = 0$ sem o loop de Polyakov

Analisar o caso em que o efeito do loop de Polyakov é desconsiderado significa desconsiderar a transição de desconfinamento e, quando comparado com o caso anterior, permite evidenciar a sua importância para a dinâmica do sistema rumo ao equilíbrio térmico.

Para desconsiderar o loop de Polyakov, basta fazer $\mathcal{U} \equiv 0$ e $\mathbb{A}^\mu = 0$ em (2.15), o que fornece $\phi = 1 = \bar{\phi}$. Perceba-se que com isso se obtém a lagrangiana do modelo NJL (2.14), ou seja, o caso do PNJL que estamos considerando equivale ao modelo NJL. Fazendo essas alterações em (4.32), encontra-se a seguinte expressão para o grande potencial a temperatura e potencial químico finitos, mas sem o loop de Polyakov:

$$\mathcal{J}_{CM}(T, \mu) = \frac{\sigma^2}{2G} - \frac{3N_f}{\pi^2} \int_0^\Lambda dpp^2 \omega_p - \frac{3N_f T}{\pi^2} \int_0^\infty dpp^2 \{ \ln [1 + f_+] + \ln [1 + f_-] \} \quad (4.44)$$

e para a derivada:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \sigma}(T, \mu) &= \frac{\sigma}{G} - \frac{3N_f}{\pi^2} \int_0^\Lambda dp p^2 \frac{\sigma - m_0}{\omega_p} - \\
 &- \frac{3N_f}{\pi^2} (m_0 - \sigma) \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\omega_P} \left\{ \frac{f_- (1 + 2f_- + f_-^2)}{1 + 3f_- + 3f_-^2 + f_-^3} + \frac{f_+ (1 + 2f_+ + f_+^2)}{1 + 3f_+ + 3f_+^2 + f_+^3} \right\} \\
 &= \frac{\sigma}{G} + \frac{3N_f}{\pi^2} (m_0 - \sigma) \left\{ \int_0^\Lambda dp \frac{p^2}{\omega_p} - \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\omega_P} \left[\frac{f_-}{(1 + f_-)} + \frac{f_+}{(1 + f_+)} \right] \right\} \\
 &= \frac{\sigma}{G} + \frac{3N_f}{\pi^2} (m_0 - \sigma) \left\{ \int_0^\Lambda dp \frac{p^2}{\omega_p} - \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\omega_P} [n_p(T, \mu) + \bar{n}_p(T, \mu)] \right\}
 \end{aligned} \tag{4.45}$$

com $n(T, \mu)$ e $\bar{n}(T, \mu)$ sendo as distribuições de Fermi-Dirac para férmions e antiférmions respectivamente e são dadas por:

$$n_p(T, \mu) = \frac{1}{\exp \left[\frac{\omega_p - \mu}{T} \right] + 1} \quad \bar{n}_p(T, \mu) = \frac{1}{\exp \left[\frac{\omega_p + \mu}{T} \right] + 1} \tag{4.46}$$

No limite $\mu = 0$ ($f_\pm \rightarrow f$), se encontra:

$$\mathcal{J}_{CM}(T, \mu = 0) = \frac{\sigma^2}{2G} - \frac{3N_f}{\pi^2} \int_0^\Lambda dp p^2 \omega_p - \frac{6N_f T}{\pi^2} \int_0^\infty dp p^2 \ln \left[1 + \exp \left(-\frac{\omega_p}{T} \right) \right] \tag{4.47}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \sigma}(T, \mu = 0) &= \frac{\sigma}{G} - \frac{3N_f}{\pi^2} \int_0^\Lambda dp p^2 \frac{\sigma - m_0}{\omega_p} - \frac{6N_f}{\pi^2} (m_0 - \sigma) \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\omega_P} \frac{f}{(1 + f)} \\
 &= \frac{\sigma}{G} + \frac{3N_f}{\pi^2} (m_0 - \sigma) \left\{ \int_0^\Lambda dp \frac{p^2}{\omega_p} - 2 \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\omega_P} n_p(T, 0) \right\}
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

usando (4.10) para expressar σ em termos de M obtém-se, a partir de (4.48), a equação de *gap* que descreve a massa constituinte em função da temperatura quando o potencial químico é nulo:

$$\frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \sigma}(T, \mu = 0) = 0 \Rightarrow \frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial M}(T, \mu = 0) = 0$$

$$\therefore \frac{\partial \mathcal{J}_{CM}}{\partial \sigma}(T, \mu = 0) = 0 \Rightarrow M - m_0 + \frac{3N_f G}{\pi^2} \left\{ \int_0^\Lambda dp p^2 \frac{M}{\omega_p} - 2 \int_0^\infty dp p^2 \frac{M}{\omega_P} n_p(T, 0) \right\} = 0 \tag{4.49}$$

Por fim, aplicando o limite $T \rightarrow 0^+$ às expressões (4.47) e (4.48), se obtém as equações (4.41) e (4.42) novamente, como esperado, já que no primeiro cálculo vimos que o grande potencial não depende de ϕ quando $T, \mu = 0$.

4.2 Energia livre de Landau e equações GLL

Para o cálculo da dinâmica de não equilíbrio logo após o sistema ser submetido a um *quench* de temperatura, foi usada uma (densidade de) *energia livre de Landau*, entendida no contexto da Teoria Fenomenológica de Landau para transições de fase discutida

no capítulo anterior. A energia livre utilizada nas simulações foi obtida ajustando uma determinada função (discutida logo adiante) ao grande potencial em (4.38) tomado no limite quiral; neste contexto, os parâmetros do ajuste são entendidos como parâmetros fenomenológicos.

A função escolhida, um polinômio nos parâmetros de ordem σ e ϕ , é dada por:

$$\Omega_L(T, \mu = 0) = a_0 + \frac{a_1}{2}\sigma^2 + \frac{a_2}{4}\sigma^4 + a_3\phi + \frac{a_4}{2}\phi^2 + \frac{a_5}{3}\phi^3 + \frac{a_6}{4}\phi^4 + \frac{a_7}{2}\phi\sigma^2 + \frac{a_8}{4}\phi\sigma^4 \quad (4.50)$$

em que $a_i = a_i(T)$, $i = 0, \dots, 8$ são os parâmetros fenomenológicos determinados através do ajuste e dependem apenas da temperatura, já que nos restringimos ao caso em que o potencial químico é nulo.

Os termos $\{1, \sigma^2, \sigma^4\}$ são os usualmente empregados quando se estuda a quebra de simetria no modelo de Ising³, os termos $\{\phi^2, \phi^3, \phi^4\}$ já estão presentes no grande potencial (4.38) e os termos $\{\phi, \phi\sigma^2, \phi\sigma^4\}$ foram incluídos por ajustarem muito bem a última integral em (4.38), a qual é responsável pelo acoplamento entre os parâmetros de ordem σ e ϕ .

A energia livre de Landau (4.50) é usada para definir a *Hamiltoniana de Guinzburg-Landau*:

$$H_{GL} = \int d^3r \left\{ \frac{\kappa_\sigma}{2} (\vec{\nabla}\sigma)^2 + \frac{\kappa_\phi}{2} (\vec{\nabla}\phi)^2 + \Omega_L(T, \mu = 0) \right\} \quad (4.51)$$

todas as equações derivadas da Hamiltoniana acima será a $\mu = 0$, portanto essa condição será omitida.

A partir de (4.51), escrevem-se as equações de Guinzburg-Landau-Langevin (GLL):

$$\begin{aligned} \frac{\partial\sigma}{\partial t}(t, \vec{r}) &= -\Gamma_\sigma \frac{\delta H_{GL}}{\delta\sigma(t, \vec{r})} + \xi_\sigma(t, \vec{r}) = -\Gamma_\sigma \left[\frac{\partial\Omega_L}{\partial\sigma} - \kappa_\sigma \nabla^2\sigma \right](t, \vec{r}) + \xi_\sigma(t, \vec{r}) \\ \frac{\partial\phi}{\partial t}(t, \vec{r}) &= -\Gamma_\phi \frac{\delta H_{GL}}{\delta\phi(t, \vec{r})} + \xi_\phi(t, \vec{r}) = -\Gamma_\phi \left[\frac{\partial\Omega_L}{\partial\phi} - \kappa_\phi \nabla^2\phi \right](t, \vec{r}) + \xi_\phi(t, \vec{r}) \end{aligned} \quad (4.52)$$

em que $\xi_\sigma(\vec{r}, t)$ e $\xi_\phi(\vec{r}, t)$ são ruídos brancos e gaussianos para os campos σ e ϕ respectivamente, ou seja, para a e b denotando ϕ ou σ , tem-se:

$$\begin{aligned} \langle \xi_a(\vec{r}, t) \rangle_r &= 0 \\ \langle \xi_a(\vec{r}, t) \xi_b(\vec{r}', t') \rangle_r &= (2\Gamma_a T) \delta_{a,b} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'); \quad a, b = \sigma, \phi \end{aligned} \quad (4.53)$$

em que $\langle \dots \rangle_r$ denota uma média sobre realizações de ruído.

Calculando as derivadas parciais em (4.52) e omitindo a dependência dos campos em (t, \vec{r}) , o sistema de equações GLL (4.52) se escreve como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\sigma}{\partial t} &= -\Gamma_\sigma \left\{ a_1\sigma + a_2\sigma^3 + a_7\phi\sigma + a_8\phi\sigma^3 - \kappa_\sigma \nabla^2\sigma \right\} + \xi_\sigma \\ \frac{\partial\phi}{\partial t} &= -\Gamma_\phi \left\{ a_3 + a_4\phi + a_5\phi^2 + a_6\phi^3 + \frac{a_7}{2}\sigma^2 + \frac{a_8}{4}\sigma^4 - \kappa_\phi \nabla^2\phi \right\} + \xi_\phi \end{aligned} \quad (4.54)$$

³ Quando $m_0 = 0$, a simetria quiral é exata e o grande potencial possui como simetria a transformação $\sigma \rightarrow -\sigma$, tal como a energia livre no modelo de Ising possui a simetria $S_i \rightarrow -S_i$.

note-se que os termos $\{\phi\sigma^2, \phi\sigma^4\}$ acoplam os campos σ e ϕ , tornando (4.54) um sistema de sistema de equações diferenciais estocásticas acopladas cuja resolução fornece a dinâmica de relaxação do sistema ao equilíbrio termodinâmico.

É conveniente tornar adimensionais as equações no sistema acima para a simulação numérica; para isso, introduzem-se as seguintes variáveis adimensionais (identificadas pelo til)

$$\sigma(t, \vec{r}) = \sigma_0 \tilde{\sigma}(\tilde{t}, \tilde{\vec{r}}), \quad t = t_0 \tilde{t}, \quad \vec{r} = r_0 \tilde{\vec{r}}, \quad \nabla^2 = \frac{1}{r_0^2} \tilde{\nabla}^2 \quad (4.55)$$

Adimensionalizando o sistema acima, escreve-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\sigma}}{\partial \tilde{t}}(\tilde{t}, \tilde{\vec{r}}) &= -\frac{t_0}{\sigma_0} \Gamma_\sigma \left[a_1 \sigma_0 \tilde{\sigma} + a_2 \sigma_0^3 \tilde{\sigma}^3 + a_7 \sigma_0 \phi \tilde{\sigma} + a_8 \sigma_0^3 \phi \tilde{\sigma}^3 \right](\tilde{t}, \tilde{\vec{r}}) + \\ &\quad + \frac{t_0 \Gamma_\sigma}{r_0^2} \kappa_\sigma \tilde{\nabla}^2 \tilde{\sigma}(\tilde{t}, \tilde{\vec{r}}) + \underbrace{\frac{t_0}{\sigma_0} \xi_\sigma(t, \vec{r})}_{\tilde{\xi}_\sigma(\tilde{t}, \tilde{\vec{r}})} \end{aligned} \quad (4.56)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{t}}(\tilde{t}, \tilde{\vec{r}}) &= -t_0 \Gamma_\phi \left[a_3 + a_4 \phi + a_5 \phi^2 + a_6 \phi^3 + \frac{a_7 \tilde{\sigma}_0^2}{2} \sigma^2 + \frac{a_8 \tilde{\sigma}_0^4}{4} \sigma^4 \right](\tilde{t}, \tilde{\vec{r}}) + \\ &\quad + \frac{t_0 \Gamma_\phi}{r_0^2} \kappa_\phi \tilde{\nabla}^2 \phi(\tilde{t}, \tilde{\vec{r}}) + \underbrace{t_0 \xi_\phi(t, \vec{r})}_{\tilde{\xi}_\phi(\tilde{t}, \tilde{\vec{r}})} \end{aligned}$$

em que foram introduzidos os ruídos adimensionalizados:

$$\tilde{\xi}_\sigma(\tilde{t}, \tilde{\vec{r}}) = \frac{t_0}{\sigma_0} \xi_\sigma(t, \vec{r}) \quad \text{e} \quad \tilde{\xi}_\phi(\tilde{t}, \tilde{\vec{r}}) = t_0 \xi_\phi(t, \vec{r}) \quad (4.57)$$

O sistema acima é escrito de modo mais simples introduzindo as seguintes definições:

$$\begin{aligned} a_\sigma &= t_0 a_1, \quad b_\sigma = t_0 \sigma_0^2 a_2, \quad c_\sigma = t_0 a_7, \quad d_\sigma = t_0 \sigma_0^2 a_8, \quad e_\phi = \frac{t_0 \sigma_0^2}{2} a_7, \quad \kappa'_\sigma = \frac{t_0 \kappa_\sigma}{r_0^2} \\ a_\phi &= t_0 a_3, \quad b_\phi = t_0 a_4, \quad c_\phi = t_0 a_5, \quad d_\phi = t_0 a_6, \quad f_\phi = \frac{t_0 \sigma_0^4}{4} a_8, \quad \kappa'_\phi = \frac{t_0 \kappa_\phi}{r_0^2} \end{aligned} \quad (4.58)$$

o que fornece:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\sigma}}{\partial \tilde{t}} &= \Gamma_\sigma \left\{ \kappa'_\sigma \tilde{\nabla}^2 \tilde{\sigma} - \left[a_\sigma \tilde{\sigma} + b_\sigma \tilde{\sigma}^3 + c_\sigma \phi \tilde{\sigma} + d_\sigma \phi \tilde{\sigma}^3 \right] \right\} + \tilde{\xi}_\sigma \\ \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{t}} &= \Gamma_\phi \left\{ \kappa'_\phi \tilde{\nabla}^2 \phi - \left[a_\phi + b_\phi \phi + c_\phi \phi^2 + d_\phi \phi^3 + e_\phi \tilde{\sigma}^2 + f_\phi \tilde{\sigma}^4 \right] \right\} + \tilde{\xi}_\phi \end{aligned} \quad (4.59)$$

Deve-se ainda explicitar um detalhe sobre a adimensionalização dos termos de ruído que será importante na implementação computacional de (4.59). O interesse agora é expressar as relações de correlação dos ruídos adimensionalizados em termos de funções

delta de Dirac adimensionalizadas $\tilde{\delta}(\tilde{t} - \tilde{t}')$ e $\tilde{\delta}(\vec{r} - \vec{r}')$ escrevendo (nesta dedução, não será usada a convenção de somatório nos índices repetidos):

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\xi}_a(\tilde{t}_1, \vec{r}_1) \tilde{\xi}_b(\tilde{t}_2, \vec{r}_2) \rangle_r &= 2\epsilon_a \delta_{ab} \tilde{\delta}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \tilde{\delta}(\tilde{t}_1 - \tilde{t}_2); \quad a, b = \sigma, \phi \quad (4.60) \\ \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) &= \frac{1}{r_0^3} \tilde{\delta}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad \text{e} \quad \delta(t_1 - t_2) = \frac{1}{t_0} \tilde{\delta}(\tilde{t}_1 - \tilde{t}_2) \end{aligned}$$

e determinar o fator ϵ_a .

Para tal, a partir de (4.57), define-se:

$$B_a = \frac{\tilde{\xi}_a(\tilde{t}, \vec{r})}{\xi_a(t, \vec{r})} = \begin{cases} \frac{t_0}{\sigma_0}, & a = \sigma \\ t_0, & a = \phi \end{cases} \quad (4.61)$$

de forma que:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\xi}_a(\tilde{t}_1, \vec{r}_1) \tilde{\xi}_b(\tilde{t}_2, \vec{r}_2) \rangle_r &= B_a^2 \langle \xi_a(t_1, \vec{r}_1) \xi_b(t_2, \vec{r}_2) \rangle_r \\ &\stackrel{(4.53)}{=} B_a^2 (2\Gamma_a T) \delta_{ab} \delta(t_1 - t_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ &= 2 \frac{B_a^2 \Gamma_a T}{t_0 r_0^3} \delta_{ab} \tilde{\delta}(\tilde{t}_1 - \tilde{t}_2) \tilde{\delta}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \end{aligned}$$

de onde se lê, usando (4.60) e (4.61):

$$\begin{aligned} \epsilon_a &= \frac{B_a^2 \Gamma_a T}{t_0 r_0^3} \\ \therefore \epsilon_\sigma &= \frac{t_0 \Gamma_\sigma T}{\sigma_0^2 r_0^3} \quad \text{e} \quad \epsilon_\phi = \frac{t_0 \Gamma_\phi T}{r_0^3} \end{aligned} \quad (4.62)$$

Para a resolução numérica do sistema (4.59), usa-se o método das diferenças finitas exposto no Apêndice E, de forma que o espaço-tempo é discretizado:

$$\sigma(t, \vec{x}) \rightarrow (\sigma)_{i,j,k}^n \quad \text{e} \quad \phi(t, \vec{x}) \rightarrow (\phi)_{i,j,k}^n \quad (4.63)$$

e deve-se discretizar os termos de ruído adimensionalizados, que, segundo (4.60) e (4.62) são definidos por (omitindo o símbolo \sim para denotar quantidades adimensionalizadas):

$$\begin{aligned} \langle \xi_a(t, \vec{r}) \xi_b(t', \vec{r}') \rangle_r &= 2\epsilon_a \delta_{ab} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t, t'); \quad a, b = \sigma, \phi \\ \epsilon_a &= \frac{B_a^2 \Gamma_a T}{t_0 r_0^3} \end{aligned} \quad (4.64)$$

em que B_a é dado por (4.61).

Por esta última equação, deve-se discretizar as funções Delta de Dirac, o que naturalmente é feito em termos de deltas de Kronecker, tendo em vista a discretização do espaço-tempo. Assim, segundo a discretização⁴:

$$\delta(t - t') \rightarrow \frac{1}{\Delta t} \delta^{n,n'} \quad \text{e} \quad \delta(\vec{r} - \vec{r}') \rightarrow \frac{1}{h^3} \delta_{i,i'} \delta_{j,j'} \delta_{k,k'} \quad (4.65)$$

⁴ Usam-se índices superiores em $\delta^{n,n'}$ apenas para manter a notação aqui usada de denotar os índices referentes à discretização temporal como superiores e os referentes à rede espacial como índices inferiores nas funções discretizadas.

de forma que (4.64) fica:

$$\left\langle (\xi_a)^n_{i,j,k} (\xi_b)^{n'}_{i',j',k'} \right\rangle_r = 2 \frac{\epsilon_a}{h^3 \Delta t} \delta_{ab} \delta^{n,n'} \delta_{i,i'} \delta_{j,j'} \delta_{k,k'}; \quad a, b = \sigma, \phi \quad (4.66)$$

e, como o ruído é branco:

$$\left\langle (\xi_a)^n_{i,j,k} \right\rangle_r = 0; \quad a = \sigma, \phi \quad (4.67)$$

Computacionalmente, os termos de ruído $(\xi_a)^n_{i,j,k}$ são implementados definindo um ruído $\zeta^n_{i,j,k}$ gaussiano, branco e de autocorrelação igual à unidade:

$$\begin{aligned} \left\langle \zeta^n_{i,j,k} \zeta^{n'}_{i',j',k'} \right\rangle_r &= \delta^{n,n'} \delta_{i,i'} \delta_{j,j'} \delta_{k,k'} \\ \left\langle \zeta^n_{i,j,k} \right\rangle_r &= 0 \end{aligned} \quad (4.68)$$

através de:

$$(\xi_a)^n_{i,j,k} = \sqrt{\frac{2\epsilon_a}{h^3 \Delta t}} \zeta^n_{i,j,k} \quad (4.69)$$

explicitamente:

$$(\xi_\sigma)^n_{i,j,k} = \sqrt{\frac{2}{h^3 \Delta t} \frac{t_0 \Gamma_\sigma T}{\sigma_0^2 r_0^3}} \zeta^n_{i,j,k} \quad (4.70)$$

$$(\xi_\phi)^n_{i,j,k} = \sqrt{\frac{2}{h^3 \Delta t} \frac{t_0 \Gamma_\phi T}{r_0^3}} \zeta^n_{i,j,k} \quad (4.71)$$

No próximo capítulo será resolvida numericamente a versão discretizada do sistema de equações GLL (4.59) em que os ruídos discretizados $(\xi_\sigma)^n_{i,j,k}$ e $(\xi_\phi)^n_{i,j,k}$ são dados por (4.70) e (4.71) respectivamente. Por fim, percebe-se que conhecendo apenas os parâmetros fenomenológicos da energia livre de Landau o sistema de equações GLL adimensionalizado não fica *numericamente* bem definido, pois é necessário também saber os valores numéricos de κ_σ , κ_ϕ , Γ_σ e Γ_ϕ ; no próximo capítulo serão estimados valores numéricos para esses parâmetros, bem como serão definidos os valores numéricos dos fatores de rescalamento em (4.55).

RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo serão apresentados os resultados numéricos obtidos para as propriedades de equilíbrio termodinâmico e da dinâmica de termalização dos parâmetros de ordem para os modelos NJL e PNJL já apresentados. Os valores de equilíbrio são obtidos resolvendo as equações de *gap*, o que equivale a minimizar a energia livre de Landau. A dinâmica de termalização é calculada simulando um *quench* partindo de uma temperatura alta para uma abaixo da temperatura crítica através das equações de Ginzburg-Landau-Langevin; para tal, é usado o método das diferenças finitas exposto no Apêndice E. Os resultados obtidos nos permitem classificar as transições de fase que ocorrem bem como determinar as respectivas temperaturas críticas.

5.1 Propriedades no Equilíbrio Termodinâmico

Nesta seção, os gráficos para as equações de estado que relacionam os parâmetros de ordem com a temperatura (a potencial químico nulo) são apresentados para ambos os modelos já discutidos: NJL e PNJL; isso nos permitirá evidenciar as diferenças introduzidas pelo loop de Polyakov.

Os resultados referentes ao equilíbrio termodinâmico são importantes por nos informar qual é a fase de equilíbrio para um dado par (T, μ) , por nos permitir identificar qual a ordem da transição de fase – ver Subseção 3.2.2 – e, ainda, por nos possibilitar a verificação de se a solução das equações que descrevem a dinâmica da termalização converge corretamente para o valor de equilíbrio dos parâmetros de ordem. Todos os resultados aqui apresentados são referentes a $\mu = 0$ e $N_f = 2$. A motivação principal para a escolha desses parâmetros, como já mencionado anteriormente, é a simulação do ambiente resultante de uma colisão de íons pesados a altas energias. A matéria formada é dominada pelos quarks leves u e d , e a esmagadora maioria dos hádrons que compõem o estado final da evolução da matéria é composta por píons, o que justifica o emprego de

$\mu_B = 0$.

5.1.1 Modelo NJL

Conforme visto na Subseção 4.1.2, o modelo NJL pode ser obtido do PNJL fazendo $\mathbb{A}^\mu = 0$; nesta mesma subseção, derivamos a equação de *gap* (4.49), que descreve o parâmetro de ordem σ no equilíbrio termodinâmico como função da temperatura T para potencial químico nulo e desconsiderando o efeito do *loop* de Polyakov:

$$\sigma = \frac{3N_f G}{\pi^2} \left\{ \int_0^\Lambda dp p^2 \frac{(m_0 - \sigma)}{\omega_p} - 2 \int_0^\infty dp p^2 \frac{(m_0 - \sigma)}{\omega_p} n_p(T, 0) \right\} \quad (5.1)$$

Os valores numéricos dos parâmetros que nela constam são apresentados na Tabela 2 abaixo e a Figura 7 mostra as soluções gráficas dessa equação de *gap* em termos da massa constituinte $M = m_0 - \sigma$ obtidas tanto para o limite quiral ($m_0 = 0$) quanto para o caso em que a simetria quiral é aproximada.

Parâmetro	Valor
G (GeV ⁻²)	10.08
Λ (MeV)	651
m_0 (MeV)	5.5

Tabela 2 – Parâmetros usados para a resolução da equação de *gap* (5.1) – valores retirados da Ref. [12].

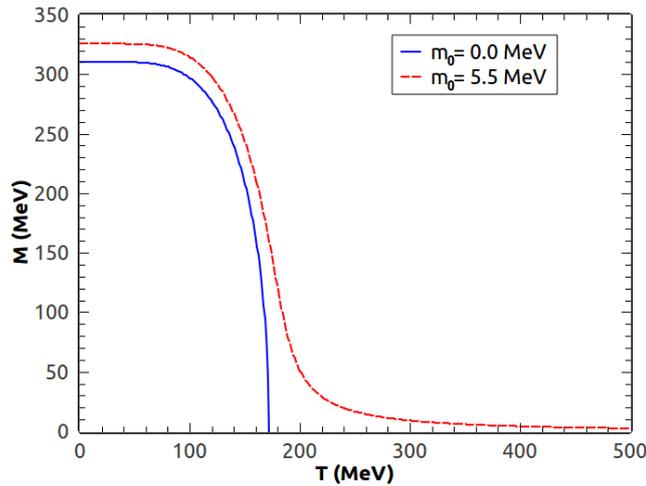


Figura 7 – Massa constituinte M em função da temperatura T para $\mu = 0$ segundo o modelo NJL.

Por este gráfico, vê-se que a transição de fase quiral é contínua no limite quiral ($m_0 = 0$) do modelo NJL e a solução numérica da equação de *gap* indica que a transição ocorre à temperatura crítica $T_c \approx 173$ MeV, em acordo com o valor (173 ± 8) MeV

encontrado em cálculos de primeiros princípios via QCD na rede no limite quiral [40]. Vale destacar que, à temperatura nula, o modelo fornece os valores $M = 310$ MeV e $M = 326$ MeV para os casos em que a massa de corrente é nula ou finita, respectivamente; note-se que a transição de fase se torna um *crossover* quando se consideram massas finitas para os quarks u e d .

É interessante observar também o padrão da energia livre de Landau como função de σ (a $\mu = 0$) para cada uma das fases em questão no limite quiral. Para a temperatura de 300 MeV, a (densidade de) energia livre de Landau é mostrada na Figura 8. Note-se que $\sigma = 0$ ($M = 0$) é um mínimo a essa temperatura; portanto, a fase de equilíbrio apresenta simetria quiral restaurada e isso se reflete no gráfico de M versus T logo acima. Tomando $m_0 = 5,5$ MeV, o mínimo ocorre em $\sigma = -3,48$ MeV, o que fornece $M = 9,0$ MeV e, então, a simetria quiral é dita *quase exata* ou *aproximada*.

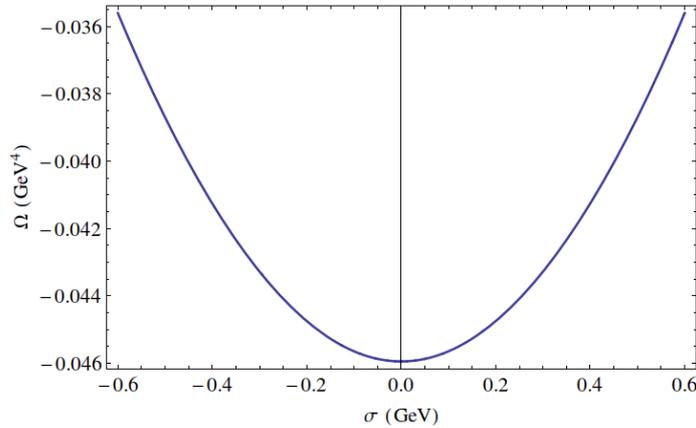


Figura 8 – Energia livre de Landau em função de σ para $T = 300$ MeV segundo o limite quiral do modelo NJL.

A Figura 9 mostra a energia livre de Landau para a temperatura crítica ($T_c = 173$ MeV) bem como para algumas temperaturas mais baixas: 50 MeV, 100 MeV e 150 MeV. Note-se que o mínimo é degenerado para temperaturas abaixo de T_c ; entretanto, a solução numérica da equação de *gap* fornece como solução o valor negativo de σ (que corresponde a $M > 0$), houve, portanto, a quebra espontânea de simetria. Nesse caso, a fase de equilíbrio é aquela em que a simetria quiral é quebrada, ou seja, a que possui massa constituinte não nula, como se vê na Figura 7.

Conforme discutido na Subseção 3.2.4, a energia livre nos permite inferir sobre a classificação da transição de fase; estes gráficos revelam que não há estado metaestável e que a simetria quiral é espontaneamente quebrada pela ocorrência de um vácuo degenerado abaixo da temperatura crítica. Portanto, a transição é contínua; em particular, a concavidade da energia livre de Landau é nula na temperatura crítica, como se vê pelo gráfico d) da Figura 9, o qual mostra a energia livre de Landau como função de σ para $T = T_c \approx 173$ MeV. É interessante comparar essa figura com a sucessão b) da Figura 5.

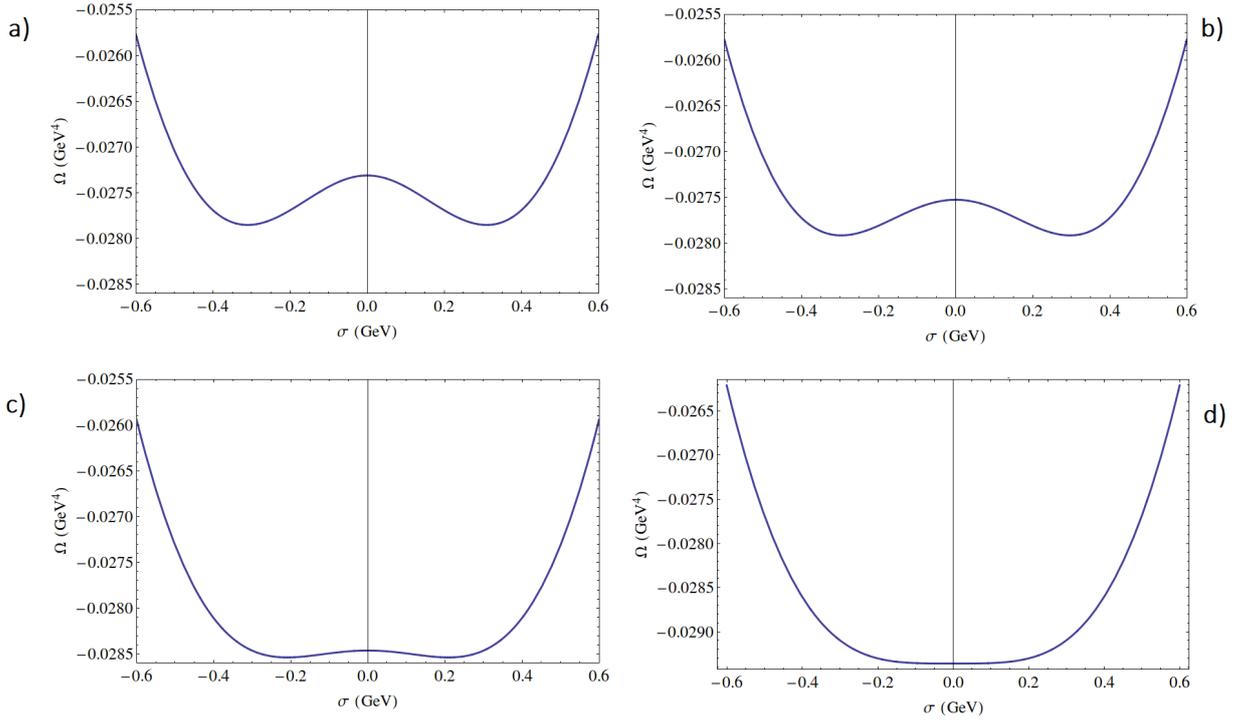


Figura 9 – Energia livre de Landau segundo o modelo NJL em função de σ para as temperaturas: a) 50 MeV; b) 100 MeV; c) 150 MeV e d) 173 MeV, que é a temperatura crítica da transição quiral.

5.1.2 Modelo PNJL

As equações de gap para o modelo PNJL a $\mu = 0$ são obtidas igualando a zero as expressões (4.39) e (4.40):

$$\frac{\sigma}{G} - \frac{3N_f}{\pi^2} \int_0^\Lambda dp p^2 \frac{\sigma - m_0}{\omega_p} - \frac{6N_f}{\pi^2} (m_0 - \sigma) \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\omega_P} \left[\frac{f(\phi + 2\phi f + f^2)}{1 + 3\phi f + 3\phi f^2 + f^3} \right] = 0 \quad (5.2)$$

$$\frac{T^4}{2} \{ -b_2(T) \phi - b_3 \phi^2 + b_4 \phi^3 \} - \frac{3N_f T}{\pi^2} \int_0^\infty dp p^2 \left[\frac{f + f^2}{1 + 3\phi f + 3\phi f^2 + f^3} \right] = 0$$

em que $\omega_p = \sqrt{p^2 + (m_0 - \sigma)^2}$, $f = \exp(-\omega_p/T)$ e $b_2(T)$ é dado por (2.20):

$$b_2(T) = \alpha_0 + \alpha_1 \left(\frac{T_0}{T} \right) + \alpha_2 \left(\frac{T_0}{T} \right)^2 + \alpha_3 \left(\frac{T_0}{T} \right)^3$$

Os valores numéricos dos vários parâmetros que nela constam estão na Tabela 3. A Figura 10 mostra a solução desse sistema de equações de gap no limite quiral ($m_0 = 0$); para melhor apresentação gráfica, o condensado quiral $\langle \bar{\psi} \psi \rangle \equiv \langle \bar{\psi} \psi \rangle_\beta$ é reescalado pelo seu valor à temperatura nula¹.

¹ O parâmetro σ relaciona-se com o condensado quiral através de $\sigma = G \langle \bar{\psi} \psi \rangle_\beta$ – ver (4.7). Portanto, $\langle \bar{\psi} \psi \rangle_\beta / \langle \bar{\psi} \psi \rangle_{T=0} = \sigma(T) / \sigma(T=0)$.

α_0	α_1	α_2	α_3	b_3	b_4	$T_0(\text{MeV})$	$m_0(\text{MeV})$	$\Lambda(\text{GeV})$	$G(\text{GeV}^{-2})$
6,75	-1,95	2,625	-7,44	0,75	7,5	270	5,5	0,651	10,08

Tabela 3 – Valores numéricos dos parâmetros do modelo PNJL – valores retirados da Ref. [12].

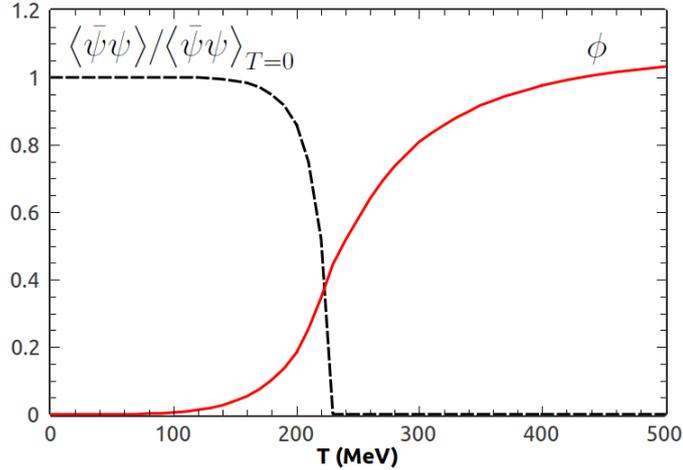


Figura 10 – Condensado quiral e *loop* de Polyakov em função da temperatura segundo o limite quiral do modelo PNJL a $\mu = 0$.

Comparando com a Figura 7, vê-se que o limite quiral do modelo PNJL fornece o mesmo valor para massa constituinte M à temperatura nula que o do modelo NJL, a saber, $M = 310$ MeV. Outra semelhança é que a transição quiral ainda é contínua, mas a temperatura crítica correspondente, $T_c \approx 230$ MeV, é mais elevada no modelo PNJL. Deste gráfico vê-se também que a transição de desconfinamento no limite quiral do modelo PNJL torna-se um suave *crossover* em torno da temperatura crítica da transição quiral, em contraste com a transição de primeira ordem na teoria de puro gauge obtida via QCD na rede [12]. Vale comentar que nossos resultados estão em acordo com os da Ref. [12], o que indica que os códigos aqui implementados estão corretos.

5.2 Dinâmica de não equilíbrio

Nesta seção serão apresentados os resultados referentes à dinâmica da termalização dos parâmetros de ordem que ocorre quando o sistema é submetido a um *quench* de temperatura mantendo $\mu = 0$. Como já discutido, a dinâmica é descrita segundo as equações GLL; novamente, analisaremos os casos sem e com o *loop* de Polyakov.

5.2.1 Modelo NJL

Desconsiderando o *loop* de Polyakov, a energia livre de Landau (4.50) no limite quiral ($m_0 = 0$) se torna:

$$\Omega_L(T, \mu = 0) = a_0 + \frac{a_1}{2}\sigma^2 + \frac{a_2}{4}\sigma^4 \quad (5.3)$$

que é suficiente para ajustar o grande potencial $\mathcal{J}_{CM}(T, \mu = 0)$ no limite quiral, calculado para o modelo NJL usando a aproximação de campo médio, dado por (4.47). Dessa forma, em vez do sistema de equações GLL (4.54), tem-se apenas uma equação GLL, que é dada por:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = -\Gamma_\sigma \{a_1\sigma + a_2\sigma^3 - \kappa_\sigma \nabla^2 \sigma\} + \xi_\sigma \quad (5.4)$$

Para resolvê-la, é conveniente utilizar [17] as seguintes definições para o reescalamto introduzido em (4.55):

$$\sigma_0 = \sqrt{\frac{|a_1|}{|a_2|}}, \quad t_0 = \frac{1}{\Gamma_\sigma |a_1|}, \quad r_0 = \sqrt{\frac{|\kappa_\sigma|}{|a_1|}}, \quad \frac{1}{r_0^2} = \frac{|a_1|}{\kappa_\sigma} \quad (5.5)$$

de modo que (5.4) é adimensionalizada e se escreve como:

$$\frac{\partial \tilde{\sigma}}{\partial \tilde{t}} = \tilde{\nabla}^2 \tilde{\sigma} - \{\text{sgn}(a_1)\tilde{\sigma} + \text{sgn}(a_2)\tilde{\sigma}^3\} + \tilde{\xi}_\sigma \quad (5.6)$$

É importante notar que, fixada uma temperatura, há uma solução da equação GLL (5.6) para cada realização de ruído², que será denotada $\sigma_r(t, \vec{x})$. Assim, é preciso tomar uma média sobre o volume do sistema e uma sobre as realizações de ruído para se obter uma função que dependa apenas do tempo, denotada por $\bar{\sigma}(t)$, que nos permita inferir sobre a evolução temporal do parâmetro de ordem considerando o sistema como um todo. Outro ponto importante é que a equação GLL é resolvida numericamente; para isso, é utilizado o *método das diferenças finitas* exposto no Apêndice E.

Para a implementação numérica da equação GLL usamos os valores $\epsilon_\sigma = 0,008$ [17] para a amplitude de correlação dos ruídos discretizados – ver (4.66), $N_e = 64$ para a quantidade de sítios em cada direção espacial, $h = 1,0$ e $\Delta \tilde{t} = 0,1$ para os espaçamentos adimensionalizados nas direções espaciais e temporal respectivamente, ou seja, $r_0 h = \Delta x$ e $t_0 \Delta \tilde{t} = \Delta t$ em que Δx é a distância espacial ao longo de qualquer uma das três direções espaciais entre dois sítios e Δt é a amplitude dos subintervalos usados para particionar o intervalo de tempo. Usando esses valores, o programa apresenta boa estabilidade numérica.

Para o estudo da dinâmica de termalização da transição quiral usando o modelo NJL no limite quiral, escolhemos três valores para a temperatura de *quench*: 50 MeV, 100 MeV e 150 MeV; todas são baixas o suficiente para haver a quebra espontânea da simetria

² Funções de ruído $\xi_\sigma(t, \vec{r})$ diferentes significam diferentes realizações de ruído.

quiral³. Os valores numéricos de a_0 , a_1 e a_2 em unidades naturais apresentados na Tabela 4 são obtidos ajustando a expressão (5.3) ao grande potencial calculado na aproximação de campo médio (4.47) para cada temperatura de *quench*.

T (MeV)	a_0 (GeV ⁴)	a_1 (GeV ²)	a_2 (GeV ⁰)
50	-0,027405	-0,013927	0,128933
100	-0,027594	-0,011119	0,118688
150	-0,028501	-0,002586	0,093842

Tabela 4 – Parâmetros fenomenológicos da energia de Landau no limite quiral do modelo NJL para diferentes valores de temperatura a $\mu = 0$.

Todos os *quenches* são realizados partindo de uma temperatura mais alta que a temperatura crítica, situação em que $\sigma = 0$ minimiza a energia livre de Landau. Fisicamente, isso corresponde a submeter o sistema repentinamente a um banho térmico a uma temperatura bem menor que a inicial. Pela Figura 9, vê-se que $\sigma = 0$ corresponde a um estado instável abaixo da temperatura crítica; portanto, quando submetido a tais *quenches* de temperatura, o sistema evolui no tempo até atingir o equilíbrio termodinâmico numa fase em que a simetria quiral é espontaneamente quebrada.

Antes de mostrarmos os resultados para a dinâmica do parâmetro de ordem, há uma consideração a ser feita sobre a condição inicial. Como no limite quiral e abaixo da temperatura crítica a energia livre de Landau indica dois estados estáveis (vácuo degenerado), ao escolher como condição inicial para o campo $\sigma(t, \vec{r})$ um ruído em torno do valor nulo obtém-se que em aproximadamente metade das vezes o sistema termaliza em direção a um mínimo e que o outro mínimo é atingido nas demais vezes; dessa forma, $\bar{\sigma}(t)$ é nulo para um número suficientemente grande de realizações de ruído e, assim, não se obteria informação alguma sobre a dinâmica de termalização.

A Figura 11 mostra a configuração do campo $\sigma(t, \vec{r})$ ao longo de uma determinada seção transversal do volume do sistema para três instantes de tempo durante o processo de termalização com a temperatura de *quench* $T_q = 100$ MeV, obtidas resolvendo a equação GLL (5.6) para uma única realização de ruído a partir da condição inicial

$$\sigma_{i,j,k}^0 = 0,0000 + 0,0001 (2 \times \mathbf{rand} - 1)$$

em que o campo é dado por um ruído em torno do valor nulo.

Essa figura ilustra bem o que foi dito logo acima. Ela mostra que, fixando a condição inicial em torno do zero, as flutuações térmicas (implementadas através do termo de ruído) geram pequenas “bolhas” nas quais o valor médio de σ é ligeiramente diferente

³ Há de se lembrar que os cálculos aqui apresentados são a $\mu = 0$. De fato, 50 MeV é uma temperatura demasiadamente baixa para que $\mu = 0$ – ou, equivalentemente, densidade bariônica nula – seja uma aproximação realista. Contudo, tomar $\mu = 0$ mesmo a temperaturas tão baixas simplifica bastante o grande potencial, sendo útil para aplicações didáticas; em particular, o problema do sinal não existe a $\mu = 0$ [39].

de zero (positivo ou negativo) e que são distribuídas aleatoriamente por todo o volume, conforme o primeiro quadro da Figura 11. Com o passar do tempo, as bolhas crescem e são formados domínios com uma das fases de equilíbrio (lembre-se de que o vácuo é degenerado). Isso pode ser visto nos dois últimos quadros da figura, em que as regiões mais escuras correspondem ao valor $\sigma = -\sigma_0 = -306$ MeV e as mais claras a $\sigma = \sigma_0 = 306$ MeV, que minimizam a energia de Landau para $T = 100$ MeV. É interessante notar a formação de paredes de domínio bem definidas entre as fases. Uma dada realização de ruído pode privilegiar uma das fases. Entretanto, implementando-se várias realizações, se vê que ora predomina uma das fases predomina ora a outra; desta forma, ao se tomar um número suficientemente grande de realizações de ruído, obtém-se $\bar{\sigma}(t) = 0$.

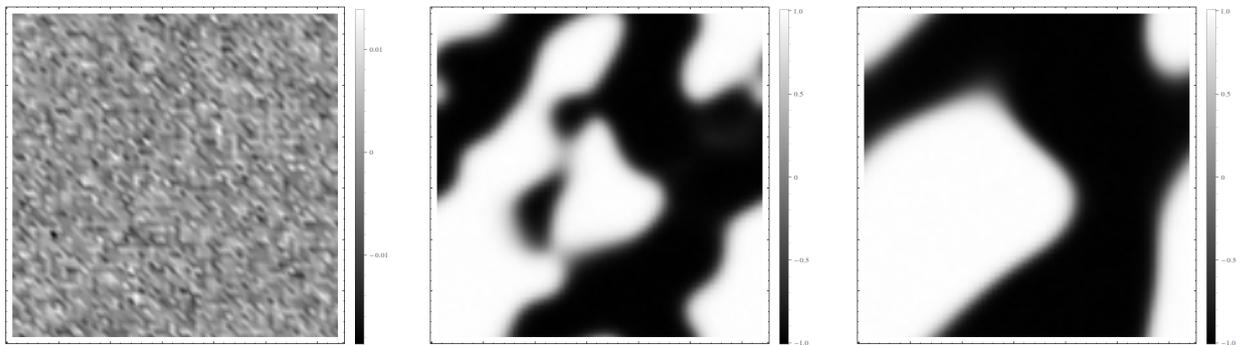


Figura 11 – Perfil da evolução temporal de σ durante a transição quiral para uma temperatura de *quench* de 100 MeV.

Para se obter $\bar{\sigma}(t) \neq 0$, deve-se escolher a condição inicial de modo que um dos mínimos seja privilegiado. No caso em questão, sabe-se que fisicamente o sistema atinge o equilíbrio com $M > 0$ e isso corresponde ao mínimo em que $\sigma < 0$. Portanto, escolhe-se como condição inicial para σ um ruído em torno de um valor *negativo*, mas ainda próximo de zero.

Esse aspecto é característico de situações em que há a quebra espontânea de simetria. Um exemplo típico é o que ocorre quando se calcula a magnetização na ausência de campo externo utilizando o modelo de Ising, em que se deve tomar o limite termodinâmico *antes* de tomar o limite do campo magnético nulo porque os limites não comutam [14, 30]. Além disso, deve-se tomar o limite pela direita (esquerda) caso se deseje encontrar o valor positivo (negativo) da magnetização⁴. No caso em estudo, escolher como condição inicial para σ um valor negativo mas próximo de zero significa atingir o limite quiral com a massa de corrente tendendo a zero por valores positivos e é análoga a escolher o campo magnético tender a zero por valores positivos no modelo de Ising.

⁴ Outro modo de escolher a magnetização positiva é definir condições de contorno em que os spins na borda apontam na direção positiva [30]; o que é legítimo, pois efeitos de superfície são desprezíveis no limite termodinâmico.

Em vista do acima discutido, foi escolhida a seguinte condição inicial para o campo sigma discretizado:

$$\sigma_{i,j,k}^0 = -0,1m + 0,01m(2 \times \mathbf{rand} - 1) \quad (5.7)$$

em que $m = 5,5$ MeV é a massa de corrente no caso em que a simetria é quase exata e **rand** é uma função que gera aleatoriamente um número real entre 0 e 1, ou seja, definimos como condição inicial para σ um valor negativo cujo módulo e a amplitude de ruído valem, respectivamente, 10% e 1% da massa de corrente⁵. Esses valores se mostraram baixos o suficiente para que a dinâmica convergisse para valores negativos de sigma em todas as realizações de ruído, como desejado.

A Figura 12 apresenta as médias $\bar{\sigma}(t)$, tomadas sobre o volume e sobre cinco realizações de ruído, que descrevem a dinâmica de termalização do parâmetro de ordem σ para as três temperaturas de *quench* definidas anteriormente e são obtidas resolvendo a equação GLL com os parâmetros apresentados na Tabela 4 e a condição inicial (5.7). Neste gráfico, $\bar{\sigma}(t)$ é dado em unidades de σ_0 cujo valor, por (5.5) e pela Tabela 4, são $\sigma_0 = 329$ MeV, $\sigma_0 = 306$ MeV e $\sigma_0 = 166$ MeV para as respectivas temperaturas de *quench* de 50 MeV, 100 MeV e 150 MeV.

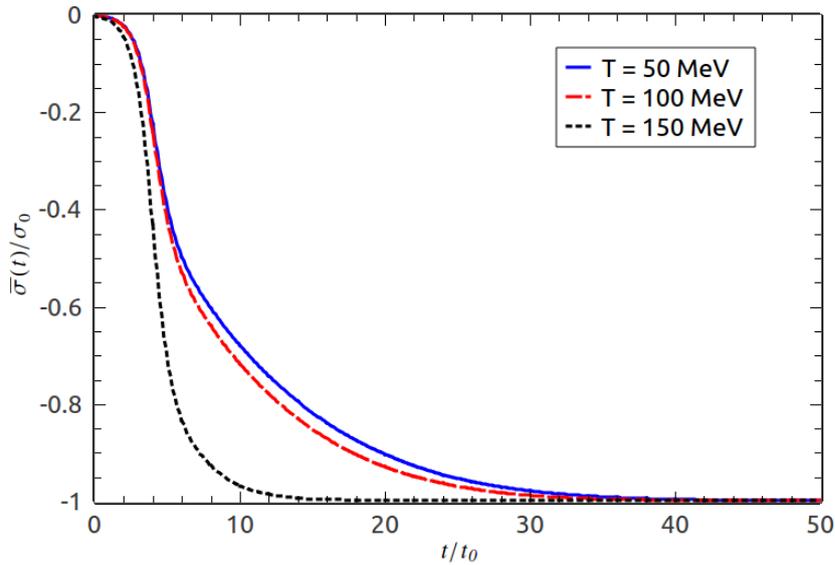


Figura 12 – Dinâmica de termalização do campo σ para algumas temperaturas de *quench*.

Note-se que em todos os *quenches* o parâmetro de ordem atinge o valor de equilíbrio $\bar{\sigma}(t \rightarrow \infty) = -\sigma_0$, pois para $t \rightarrow \infty$, obtivemos $\bar{\sigma}(t \rightarrow \infty)/\sigma_0 = -1$, o que valida nossos códigos numéricos. Também, claramente nota-se que quanto mais próxima a temperatura do *quench* da temperatura inicial, mais rápida é a termalização, como é esperado fisicamente.

⁵ De fato, implementamos numericamente a equação GLL *adimensionalizada*; portanto, o campo σ foi adimensionalizado pelo fator σ_0 .

5.2.2 Modelo PNJL

No limite quiral e tomando $\mu = 0$, o grande potencial calculado na aproximação de campo médio $\mathcal{J}_{CM}(T, \mu = 0)$ dado por (4.38) é bem ajustado pela expressão (4.50) para a energia livre de Landau, aqui reescrita:

$$\Omega_L(T, \mu = 0) = a_0 + \frac{a_1}{2}\sigma^2 + \frac{a_2}{4}\sigma^4 + a_3\phi + \frac{a_4}{2}\phi^2 + \frac{a_5}{3}\phi^3 + \frac{a_6}{4}\phi^4 + \frac{a_7}{2}\phi\sigma^2 + \frac{a_8}{4}\phi\sigma^4 \quad (5.8)$$

que, como mostrado no capítulo anterior, fornece o seguinte sistema de equações GLL adimensionalizadas (4.59) aqui reescrito:

$$\frac{\partial \tilde{\sigma}}{\partial \tilde{t}} = \Gamma_\sigma \left\{ \kappa'_\sigma \tilde{\nabla}^2 \tilde{\sigma} - \left[a_\sigma \tilde{\sigma} + b_\sigma \tilde{\sigma}^3 + c_\sigma \phi \tilde{\sigma} + d_\sigma \phi \tilde{\sigma}^3 \right] \right\} + \tilde{\xi}_\sigma \quad (5.9)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{t}} = \Gamma_\phi \left\{ \kappa'_\phi \tilde{\nabla}^2 \phi - \left[a_\phi + b_\phi \phi + c_\phi \phi^2 + d_\phi \phi^3 + e_\phi \tilde{\sigma}^2 + f_\phi \tilde{\sigma}^4 \right] \right\} + \tilde{\xi}_\phi$$

em que os coeficientes são dados por (4.58). Note-se que esse é um sistema de equações diferenciais acopladas, ou seja, a dinâmica de termalização de um parâmetro de ordem influencia a termalização do outro. Para resolver numericamente o sistema acima, foi feito um reescalamto que é obtido usando as seguintes definições em (4.55):

$$t_0 = r_0 = \frac{1}{\sigma_0}, \quad \sigma_0 \equiv |\sigma(T = 0)| = 0,310207 \text{ GeV} \quad (5.10)$$

no qual $\sigma(T = 0) = -0,310207 \text{ GeV}$ é o valor de equilíbrio para o parâmetro σ calculado a partir das equações de *gap* (5.2). Com esse reescalamto, obtém-se as seguintes expressões para κ_σ , κ_ϕ , a_σ , b_σ , c_σ , d_σ , a_ϕ , b_ϕ , c_ϕ , d_ϕ , e_ϕ , e f_ϕ :

$$a_\sigma = \frac{a_1}{\sigma_0}, \quad b_\sigma = \sigma_0 a_2, \quad c_\sigma = \frac{a_7}{\sigma_0}, \quad d_\sigma = \sigma_0 a_8, \quad e_\phi = \frac{\sigma_0}{2} a_7, \quad \kappa'_\sigma = \sigma_0 \kappa_\sigma \quad (5.11)$$

$$a_\phi = \frac{a_3}{\sigma_0}, \quad b_\phi = \frac{a_4}{\sigma_0}, \quad c_\phi = \frac{a_5}{\sigma_0}, \quad d_\phi = \frac{a_6}{\sigma_0}, \quad f_\phi = \frac{\sigma_0^3}{4} a_8, \quad \kappa'_\phi = \sigma_0 \kappa_\phi$$

Tal como no estudo da dinâmica do modelo NJL, o método das diferenças finitas foi empregado. Como há uma solução para cada realização de ruído, que denotaremos por $\{\sigma_r(t, \vec{r}), \phi_r(t, \vec{r})\}$, foi feita uma média sobre o volume do sistema e uma sobre as realizações de ruído, que serão denotadas simplesmente por $\{\sigma(t), \phi(t)\}$; estas médias dependem apenas do tempo e, assim, permitem estudar a dinâmica de termalização de ambos os parâmetros.

Em todas as simulações, usamos os valores $h = 1,0$, $\Delta \tilde{t} = 0,1$ e $N_e = 64$. Os parâmetros fenomenológicos da energia de Landau em (5.8) são calculados fazendo um ajuste ao grande potencial para a temperatura de *quench* escolhida (50 MeV), seus valores estão dispostos na Tabela 5; a partir destes, são calculados os parâmetros para as equações GLL adimensionalizadas (5.9) através de (5.11).

T (MeV)	50
a_0 (GeV ⁴)	-0,0273500
a_1 (GeV ²)	-0,0180385
a_2 (GeV ⁰)	0,1649468
a_3 (GeV ⁴)	-0,0000098
a_4 (GeV ⁴)	0,0068682
a_5 (GeV ⁴)	-0,0000052
a_6 (GeV ⁴)	0,0000470
a_7 (GeV ²)	0,0002671
a_8 (GeV ⁰)	-0,0015723

Tabela 5 – Parâmetros da energia livre de Landau para a temperatura de $T = 50$ MeV a $\mu = 0$.

Para o modelo PNJL, foi escolhido $T = 50$ MeV para a temperatura de *quench*. Partimos de $T = 300$ MeV, temperatura na qual o grande potencial apresenta um mínimo global em $(\phi, \sigma) = (0, 807, 0, 0)$, ou seja, a simetria quiral é exata e o sistema está na fase desconfiada. Como já discutido, a condição inicial para a simulação do quench é a do estado de equilíbrio à temperatura anterior ao quench; contudo, a condição inicial para σ deve ser um número negativo e próximo de zero para que o sistema termalize de modo a fornecer um valor positivo para a massa constituinte, conforme argumentado na subseção anterior. Portanto, o valor inicial para este campo é o mesmo que na subseção anterior – dado por (5.7) – enquanto que para ϕ a condição inicial é

$$\phi_{i,j,k}^0 = 0,807 + 0,0807 \times (2 \times \mathbf{rand} - 1) \quad (5.12)$$

Deve-se comentar ainda sobre a estimativa dos valores numéricos de alguns parâmetros necessários para a implementação computacional das equações GLL (5.9). Seguindo a Ref. [16], usamos a estimativa $\Gamma_\sigma = 1/3 \text{ fm} \approx 1,690 \text{ GeV}^{-1}$ para as temperaturas em que estamos interessados. O parâmetro Γ_ϕ foi estimado [41] em $\Gamma_\phi \approx 0,01 \text{ GeV}^{-3}$. Por argumentos dimensionais [39, 42], estima-se $\kappa_\phi \approx N_c T_0^2 / g_s^2$ em que T_0 é a temperatura de desconfinamento na teoria de puro gauge, N_c é o número de cores e g_s é a constante de acoplamento da QCD; usando $N_c = 3$, $\alpha_s = g_s^2 / 4\pi \approx 0,3$ e $T_0 = 270 \text{ MeV}$ – retirado da Ref. [12], estima-se $\kappa_\phi \approx 0,058 \text{ GeV}^2$.

O valor de $\kappa_\sigma(T)$ é estimado a partir de sua relação com a tensão superficial $\Sigma(T)$, associada à interface entre domínios com diferentes fases de equilíbrio, calculada a partir da Teoria de Landau na aproximação de parede fina [17, 30]

$$\Sigma(T) \approx \sqrt{\kappa_\sigma(T)} \frac{|a_1(T)|^{3/2}}{|a_2(T)|} \quad (5.13)$$

em que toda a dependência de Σ com temperatura, bem como sua dimensão física, é explicitada. Os parâmetros $a_1(T)$ e $a_2(T)$ são determinados conforme discutido acima; então, (5.13) fornece uma relação direta entre $\kappa_\sigma(T)$ e $\Sigma(T)$. Usando o gráfico da Figura

6 em [43] e estimando um valor para a tensão superficial à temperatura nula, $\Sigma(T = 0)$, obtém-se um valor numérico para $\Sigma(T)$ e, por (5.13), para $\kappa_\sigma(T)$. A Ref. [43] calcula $\Sigma(T = 0) \approx 7\text{-}30 \text{ MeV}/\text{fm}^2$ considerando a aproximação de campo médio do modelo NJL para diferentes conjuntos de parâmetros m , G e Λ . Portanto, para fins de estimativa, podemos tomar $\Sigma(T = 0) = 10 \text{ MeV}/\text{fm}^2 \approx 3,894 \times 10^{-4} \text{ GeV}^3$, de onde se estima $\kappa_\sigma(T = 50 \text{ MeV}) \approx 5,1 \times 10^{-4}$.

Antes de apresentar os resultados obtidos para a dinâmica de termalização no modelo PNJL, é interessante discutir um exemplo típico de como se espera que termalização ocorra. Para isso, foi resolvido numericamente o sistema de equações GLL (5.9) tomando todos os parâmetros que a definem como números com módulo da ordem de 1 e os termos de ruído foram tomados da ordem de 0,01. Os sinais dos coeficientes foram escolhidos de forma que o potencial seja minimizado por $\tilde{\sigma} = 1$ e $\phi = 0$, pois, à temperatura de quench de $T = 50 \text{ MeV}$, é sabido das equações de *gap* (5.2) que os valores de equilíbrio são $|\sigma| = 310,207 \text{ MeV} \stackrel{(5.10)}{=} \sigma_0$, que é o fator usado para reescalar o campo σ . Usando as condições iniciais expostas mais acima, encontrou-se o gráfico da Figura 13 que descreve como os campos adimensionalizados – tomadas as médias sobre as realizações de ruído e sobre o volume – evoluem no tempo até atingir a configuração de equilíbrio da temperatura de *quench*.

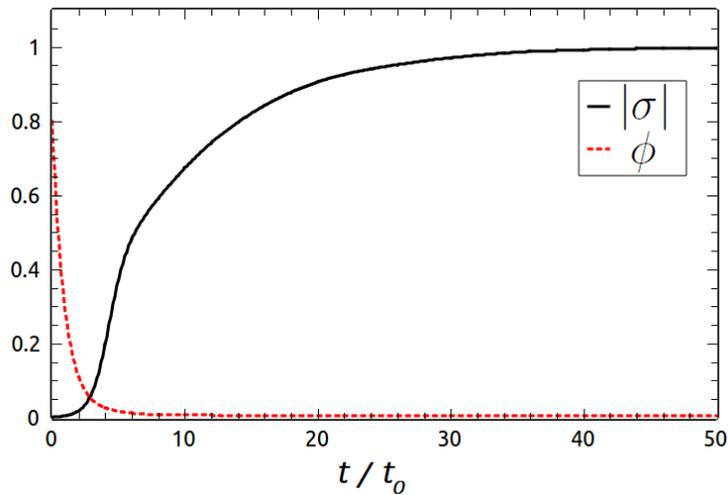


Figura 13 – Evolução temporal dos parâmetros de ordem σ e ϕ tipicamente esparada; σ é dado em unidades de seu valor de equilíbrio σ_0 para a temperatura de *quench*.

Deste gráfico, vê-se que ambos os parâmetros de ordem termalizam em intervalos de tempo da mesma ordem de grandeza. Para o conjunto particular de parâmetros tomados, obtivemos que o campo ϕ atinge o equilíbrio antes que o σ ; entretanto, variando-se os respectivos coeficientes Γ_σ e Γ_ϕ , ocasionalmente chega-se a uma situação em que σ atinge o equilíbrio antes de ϕ . Por outro lado, verifica-se que, apesar de o tempo gasto para a atingir o equilíbrio ser bastante sensível a esses dois parâmetros, o valor de equilíbrio

dos parâmetros de ordem *não* depende de Γ_σ nem de Γ_ϕ . Isso está em pleno acordo com o fato de que os valores dos parâmetros de ordem no equilíbrio dependem apenas das grandezas termodinâmicas que definem o diagrama de fases as quais, neste caso, seriam a temperatura e o potencial químico – tomado nulo. Outro modo de entender isso é através do fato de que, associada a uma equação de GLL com termos de ruído gaussianos e brancos, existe uma distribuição de probabilidades (que define a função de partição) dependente do tempo t que satisfaz a equação de Fokker-Planck de modo que no limite $t \rightarrow \infty$ a distribuição tende à de Boltzmann, definida para a temperatura de *quench*.

Tipicamente, é esperado que a termalização do campo σ se dê através da formação de domínios pois, no limite quiral, há dois valores de σ que minimizam a energia livre de Landau. Portanto, espera-se que sejam formados domínios com uma das fases de equilíbrio, cuja formação depende da tensão superficial necessária para manter o equilíbrio termodinâmico quando as duas fases são postas em contato térmico. Pudemos perceber isso para o exemplo em questão, como mostra a Figura 14.

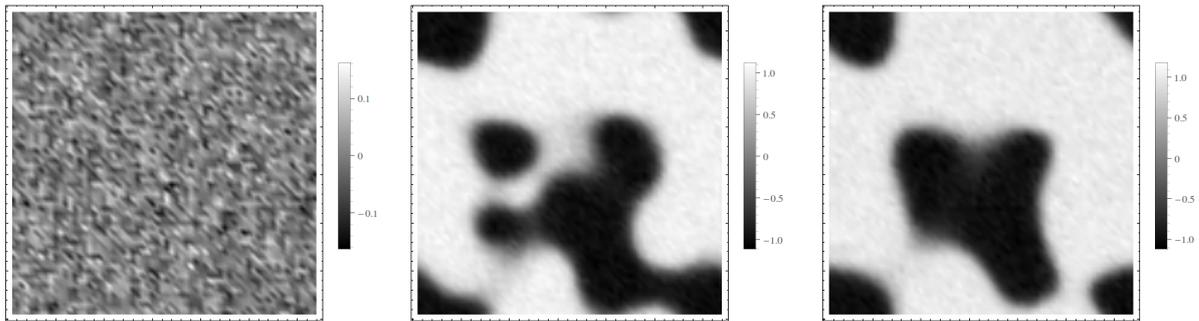


Figura 14 – Perfil típico da evolução temporal do parâmetro de ordem σ para uma temperatura de *quench* em que a simetria quiral é espontaneamente quebrada.

Ela mostra a configuração do campo $\sigma(t, \vec{r})$ ao longo de uma seção transversal do volume para três instantes de tempo do processo de termalização para uma temperatura abaixo da crítica. A discussão é bem semelhante àquela referente à Figura 11. A condição inicial é fixada em torno do valor nulo; as flutuações térmicas geram pequenas “bolhas” em que o campo é ligeiramente diferente de zero. Com o passar do tempo as bolhas crescem e formam domínios, como se vê nos dois últimos quadros de Figura 14.

É importante notar que a formação de domínios é determinada pela competição entre dois fatores. Por um lado, a tensão superficial (ou o coeficiente do termo derivativo no funcional de Landau) tende a favorecer configurações de campo que sejam suaves; ela é responsável pela formação de uma interface, parede de domínio, mecanicamente estável entre as duas fases coexistentes. Por outro, há efeitos de flutuação térmica, determinados pela temperatura, que tendem a desestabilizar a parede de domínio formada. De um modo geral, se as flutuações térmicas são suficientemente intensas, em outros termos, se a temperatura é alta o suficiente, não mais é possível a formação de paredes estáveis e,

portanto, o sistema em equilíbrio termodinâmico apresenta-se em uma das fases e não mais como duas fases coexistentes. Dessa maneira, é fácil entender porque a tensão superficial decresce com a temperatura.

Após essa breve digressão, discutiremos sobre os resultados encontrados para a dinâmica de não equilíbrio no modelo PNJL para a temperatura de 50 MeV usando as condições iniciais e os parâmetros obtidos ou estimados como discutido anteriormente. Ao contrário do esperado, verificou-se que os campos *não* termalizam para os valores de equilíbrio referentes a essa temperatura. Em particular, a média espacial e sobre as realizações de ruído do parâmetro σ oscila em torno do valor nulo ao longo da termalização enquanto que o parâmetro ϕ decresce lentamente até um valor em torno de 0,6 quando, então, parece “esperar” que σ assuma valores significativamente não nulos para que continue sua termalização até atingir o equilíbrio devido. Entretanto, como σ é essencialmente nulo até para tempos longos, o parâmetro ϕ não termaliza para o valor que se espera: $\phi = 0$.

Há duas razões para que σ oscile em torno de zero. É possível que ocorra a formação de domínios de ambas as fases de equilíbrio, mas, ao se fazer as médias sobre o volume e sobre as realizações de ruído, o resultado seja praticamente nulo. Outra possibilidade é que não haja a formação dos domínios, ou seja, que as “bolhas” formadas pelas flutuações térmicas não cresçam. Neste caso, a configuração do parâmetro de ordem é bastante inhomogênea. Portanto, neste caso o gráfico do parâmetro de ordem em função do tempo não fornece informações significativas para a dinâmica de não equilíbrio.

Para entender a dinâmica observada, obtivemos o perfil da configuração espacial de σ para diferentes instantes da termalização; o resultado encontra-se na Figura 15 abaixo. As condições iniciais e os parâmetros possuem os valores discutidos anteriormente. Não são mostradas perfis correspondentes ao *loop* de Polyakov porque, à temperatura de 50 MeV, há apenas um valor de ϕ que minimiza a energia de Landau bem como não há nenhum estado metaestável; conseqüentemente, não há a formação de domínios associados ao *loop* de Polyakov para a temperatura de *quench* escolhida⁶.

O primeiro quadro desta figura mostra o efeito das flutuações térmicas sobre a condição inicial. Entretanto, os outros dois quadros, correspondentes a instantes bem mais adiantados que os já apresentados até aqui, mostram claramente que as “bolhas” formadas pelas flutuações térmicas *não* formam domínios. Isso indica que, *para os valores dos parâmetros utilizados*, o efeito das flutuações térmicas prevalece sobre o da tensão superficial, ou seja, no caso em questão, a tensão superficial não consegue sustentar a formação de paredes de domínio frente às flutuações térmicas.

Para verificar se realmente é isso o que ocorre, calculamos a dinâmica de não equilíbrio com os mesmos parâmetros, mas com a condição inicial de $\sigma \approx 1$, que é o valor de

⁶ Neste sentido, é interessante usar a densidade bariônica para descrever a transição de fase de desconfinamento [35].

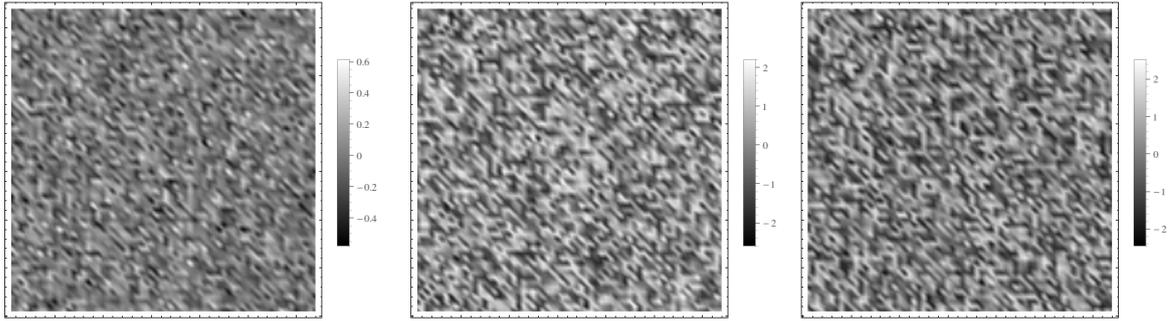


Figura 15 – Perfil da evolução temporal do parâmetro de ordem σ calculada para uma temperatura de *quench* de 50 MeV a partir de uma temperatura anterior ao *quench* de 300 MeV.

equilíbrio para σ a $T = 50$ MeV ⁷. Naturalmente, é de se esperar que o campo permaneça nessa configuração, pois ela minimiza a energia livre de Landau; contudo, verificou-se que σ varia muito rapidamente até atingir um valor praticamente nulo. Essa observação reforça a interpretação de que, para os valores dos parâmetros utilizados, a tensão superficial (ou, equivalentemente, κ_σ) é demasiadamente pequena para contrabalançar as flutuações térmicas⁸.

Neste ponto é muito importante comentar que as estimativas encontradas na literatura para os parâmetros Γ_σ , Γ_ϕ , κ_σ e κ_ϕ são muito incertas e feitas em contextos e de maneiras bastante distintos. Assim, esse estudo da termalização claramente indica que as estimativas encontradas para os parâmetros não levam à termalização num tempo dentro da escala de duração de uma colisão de íons pesados. Em princípio, não há nada de errado nisso, mas é surpreendente, no sentido de que vai contra o que se acredita que a matéria passa por um estado com simetria quiral quebrada antes de hadronizar. Isto é muito interessante, pois indica que os hádrons observados e os produtos de decaimentos de outros hádrons são formados *sem passar pela fase com simetria quiral quebrada*.

No sentido de contribuir nesta questão, vamos proceder no sentido inverso: usar a dinâmica descrita pelas equações de GLL para determinar os valores desses parâmetros, fixados todos os outros. Das estimativas já apresentadas, vê-se que a ordem de grandeza do valor de $\kappa_\sigma(T = 50$ MeV) é bem menor que a dos demais parâmetros; além disso, a não formação de domínios apresentada acima sugere que esse parâmetro foi bastante subestimado. Portanto, foi realizada uma série de simulações da dinâmica de termalização do modelo PNJL à temperatura de 50 MeV usando todos os parâmetros como estimados acima e como condição inicial $\sigma = 5,5$ MeV = m_0 , mas variando o parâmetro κ_σ até encontrar um valor limiar a partir do qual há a formação de domínios. Encontramos

⁷ Por simplicidade, omitimos o símbolo \sim para designar o parâmetro adimensionalizado. Portanto, o valor de equilíbrio desse parâmetro para $T = 50$ MeV é aproximadamente um.

⁸ Obviamente, também pode-se pensar no sentido oposto: para os parâmetros utilizados, as flutuações térmicas (essencialmente os termos de ruído) são grandes demais.

como limiar o valor $\kappa_\sigma(T = 50 \text{ MeV}) \approx 0,161$ que é em torno de 300 vezes maior que o estimado mais acima; a evolução temporal do condensado quiral e do *loop* de Polyakov para a temperatura de *quench* de 50 MeV obtida com esses valores é apresentada na Figura 16. Variações no valor de κ_ϕ não mudam as conclusões significativamente.

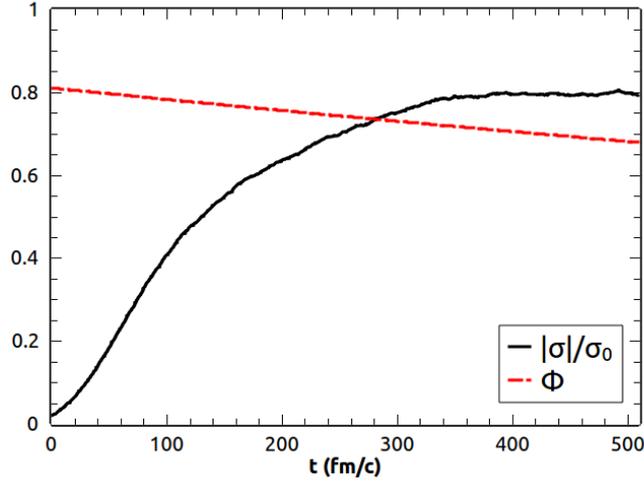


Figura 16 – Evolução temporal do condensado quiral e do *loop* de Polyakov para a temperatura de *quench* de 50 MeV e usando os valores $\kappa_\sigma = 0,161$, $\kappa_\phi = 0,058 \text{ GeV}^2$, $\Gamma_\sigma = 1,690 \text{ GeV}^{-1}$ e $\Gamma_\phi = 0,01 \text{ GeV}^{-3}$.

Esta figura mostra claramente que o κ_σ utilizado é grande o suficiente para que haja a formação de domínios. Para os parâmetros utilizados, observa-se a formação de um condensado quiral significativo após um intervalo de tempo em torno de 100 fm/c e que o condensado, após um intervalo de aproximadamente 400 fm/c, termaliza para um valor em torno de 80% do valor de equilíbrio fornecido pelas equações de *gap* para a temperatura em questão.

Pretendemos em breve complementar o presente trabalho fazendo uma análise sobre o conjunto de valores para os parâmetros Γ_σ , Γ_ϕ , κ_σ e κ_ϕ que forneçam dinâmicas de termalização compatíveis com as configurações de equilíbrio termodinâmico do modelo. Entretanto, essa é uma tarefa nada simples, pois não há como fixarmos, de antemão, nenhum desses quatro parâmetros, já que não é possível afirmar seguramente quais dessas estimativas são boas e quais são ruins. Dessa forma, espera-se que o resultado dessa análise seja a determinação de intervalos de *possíveis* valores para esses parâmetros de modo que a dinâmica descrita pelas equações GLL esteja em acordo com as propriedades de equilíbrio termodinâmico estabelecidas para o modelo.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Neste trabalho, estudamos as transições de fase quiral e de desconfinamento através do modelo efetivo de Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio para dois sabores de quarks. Além das propriedades de equilíbrio termodinâmico, analisamos a dinâmica de não equilíbrio dos parâmetros de ordem dessas transições no limite quiral do modelo, procurando entender o efeito da dinâmica da transição de desconfinamento sobre a dinâmica da transição quiral. Certamente, fenômenos de não equilíbrio são importantes para a correta descrição das colisões relativísticas de íons pesados.

No Capítulo 2 revisamos o estabelecimento da QCD bem como suas características mais importantes. De especial interesse foi a discussão da simetria quiral aproximada da QCD para os quarks leves u e d e a introdução dos modelos NJL e PNJL. O Capítulo 3 é de central importância para a dissertação. Nele revisamos as descrições termodinâmica e mecânico-estatística da matéria em equilíbrio térmico bem como descrevemos a relação entre elas a partir dos ensembles canônico e grande canônico. Em seguida, introduzimos o formalismo de integração funcional para a mecânica estatística. Em particular, demonstramos de modo claro como a função de partição se expressa como uma integral funcional tanto para sistemas quânticos com número finito de graus de liberdade quanto para uma teoria quântica de campos relativísticos (TQCR), que é o formalismo apropriado para descrever as propriedades quântico-relativísticas de partículas elementares. Usamos o campo escalar para exemplificar o caso de campos bosônicos e o campo de Dirac para o caso de campos fermiônicos. Com isso, desenvolvemos o ponto de partida para se obter a mecânica estatística de uma teoria quântica de campos.

Logo em seguida, ainda no Capítulo 3, passamos à descrição dos fenômenos críticos. A caracterização das fases de equilíbrio termodinâmico foi desenvolvida de um modo geral; em particular, discutimos como parâmetros de ordem são definidos a partir das propriedades de simetria do sistema e a relação entre parâmetros de ordem e quebra espontânea de simetria, o que permite a generalização dos conceitos relativos às transições

de fases para sistemas pouco intuitivos, como os descritos por TQCR. Feito isso, revisamos como a Teoria de Landau descreve o comportamento dos parâmetros de ordem numa transição de fase bem como foi desenvolvida a interpretação de que a energia livre de Landau determina a distribuição de probabilidades para a descrição mecânico-estatística de um sistema em que é feito o processo de *coarse-graining* para tornar tratáveis alguns graus de liberdade microscópicos. A partir disso, introduzimos a descrição da dinâmica de termalização dos parâmetros de ordem via a equação de Ginzburg-Landau-Langevin e descrevemos brevemente os processos de nucleação e decomposição espinodal. O capítulo se encerra com a discussão de por que, a partir de argumentos de simetria, o condensado quiral e o *loop* de Polyakov são tomados como legítimos parâmetros de ordem para a QCD nos limites de quarks com massas nula e infinita respectivamente.

No Capítulo 4, calculamos o grande potencial termodinâmico na aproximação de campo médio do modelo PNJL, o qual pode ser entendido como a energia livre de Landau obtida a partir de um *coarse-graining* (teoria de Landau microscópica). Motivados pelo fato de que tomar o potencial químico bariônico nulo é uma boa aproximação para as etapas mais energéticas de uma colisão relativística de íons pesados e torna a descrição mecânico-estatística mais simples – em particular, evita-se o “problema do sinal”, calculamos as equações de *gap* tomando potencial químico nulo. Também encontramos as equações de *gap* desconsiderando o *loop* de Polyakov, quando se recai no modelo NJL, para que se pudesse evidenciar as implicações do *loop* de Polyakov sobre a transição quiral.

No Capítulo 5, apresentamos os resultados numéricos para as transições de fase estudadas; as propriedades das fases de equilíbrio foram determinadas a partir das respectivas equações de *gap*. A massa constituinte dos quarks no limite quiral foi calculada em função da temperatura e observou-se uma transição de fase contínua que se mantém quando o *loop* de Polyakov é considerado, ainda que a temperatura de transição seja mais elevada neste último caso; já a transição de desconfinamento mostrou-se um *crossover* em torno da temperatura crítica da transição quiral. Em particular, verificamos boa concordância entre nossos resultados e os encontrados na literatura. Neste sentido, é interessante perceber que as descrições das propriedades de equilíbrio das transições quiral e de desconfinamento via o modelo PNJL e via QCD na rede apresentam bom acordo; isso encoraja o uso de modelos efetivos para estudar a matéria formada por quarks sob alto potencial químico bariônico (alta densidade bariônica), regime em que a QCD na rede ainda não consegue fazer previsões e que é de grande importância para o estudo de estrelas compactas.

Quanto à descrição da dinâmica de não equilíbrio, verificamos que a termalização após um quench para baixas temperaturas ocorre via a formação de domínios da fase com simetria quiral quebrada e que, como esperado, a transição é mais lenta para *quenches* a temperaturas menores. Além disso, o estudo da dinâmica de não equilíbrio do modelo PNJL mostra claramente que as estimativas encontradas na literatura para os parâmetros

Γ_σ , Γ_ϕ , κ_σ e κ_ϕ não fornecem resultados compatíveis com as propriedades de equilíbrio termodinâmico obtidas através das equações de *gap* dentro de uma escala de tempo da ordem da duração da evolução da matéria formada numa colisão de íons pesados a altas energias.

Este talvez seja o resultado mais importante da presente dissertação. Caso venha a se confirmar que o valor do parâmetro κ_σ seja da ordem dos valores obtidos atualmente com modelos esquemáticos, ele indica que os hádrons observados e os produtos de decaimentos de outros hádrons são formados a partir de um estado que *não está com a simetria quiral quebrada*. Claramente, o resultado requer estimativas mais realistas para este parâmetro.

É importante mencionar o caráter introdutório e limitado do presente trabalho, visto que uma descrição física realista das colisões de íons pesados requer não só o estudo da dinâmica de não equilíbrio, mas também de aspectos como o escoamento hidrodinâmico da matéria produzida e efeitos de volume finito para a descrição térmica de tais sistemas. Portanto, há uma vasta gama de possibilidades para continuação deste trabalho: a inclusão de equações hidrodinâmicas relativísticas para levar em conta efeitos de escoamento, considerar potenciais químicos bariônicos não nulos, a determinação das propriedades termodinâmicas indo além da aproximação de campo médio, melhorar a estimativa dos parâmetros fenomenológicos introduzidos nas equações de GLL, por exemplo, além de usar a descrição da dinâmica de não equilíbrio via equações GLL para estimar os valores dos parâmetros relevantes.

Por fim, é importante perceber que o estudo da QCD sob condições extremas de temperatura e/ou potencial químico bariônico ainda é objeto de muitas especulações, o que é característico de linhas de pesquisa em pleno desenvolvimento; isso é um aspecto positivo, pois revela um ambiente aberto ao desenvolvimento e debate de novas ideias, modelos, explicações e conceitos físicos. Também há de se observar que o estudo nessa área fornece a oportunidade de se obter uma rica e sólida formação física, pois ela envolve diversas áreas como termodinâmica, mecânica estatística, teoria de campos, hidrodinâmica, relatividade especial e física computacional.

APÊNDICE A

CONVENÇÕES E NOTAÇÕES

Neste apêndice serão expostas as convenções utilizadas nesta dissertação.

A.1 Espaço de Minkowski

No espaço de Minkowski o quadrivetor de posição *contravariante*, denotado por índice superior, é:

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z) = (ct, \vec{x}) \quad (\text{A.1})$$

em que c é a velocidade da luz no vácuo e \vec{x} é o vetor de posição usual. A partir deste, define-se o quadrivetor de posição *covariante*, denotado por índice inferior:

$$x_\mu = (x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, -x, -y, -z) = (ct, -\vec{x}) \quad (\text{A.2})$$

e forma-se a quantidade *escalar de Lorentz*:

$$(ct)^2 - \vec{x}^2 = x_\mu x^\mu \equiv x^2 \quad (\text{A.3})$$

em que foi introduzida a convenção de Einstein de somar sobre índices repetidos.

As componentes do vetor covariante são obtidas através de um tensor métrico com componentes $g_{\mu\nu}$ que podem ser dispostos numa matriz \mathbf{G} :

$$\mathbf{G} = (g_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = (g^{\mu\nu}) = \mathbf{G}^{-1} \quad (\text{A.4})$$

A equação (A.2) é escrita como:

$$x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu \quad (\text{A.5})$$

e a quantidade invariante em (A.3) é expressa como:

$$x^2 = g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu \quad (\text{A.6})$$

De um modo geral, um quadrivetor contravariante a^μ é uma lista de quatro componentes:

$$a^\mu = (a^0, a^1, a^2, a^3) = (a^0, \vec{a}) \quad (\text{A.7})$$

que possui a quantidade $(a^0)^2 - \vec{a}^2$ invariante sob transformações de Lorentz. Uma matriz de transformação Λ é uma transformação de Lorentz se satisfaz:

$$\Lambda \mathbf{G} \Lambda^T = \mathbf{G} \quad (\text{A.8})$$

Sendo a e b dois quadrivetores, a métrica induz um *produto escalar* $a \cdot b$:

$$a \cdot b = a_\mu b^\mu = g_{\mu\nu} a^\nu b^\mu \quad (\text{A.9})$$

essa quantidade é invariante sob transformações de Lorentz, sendo chamada *escalar de Lorentz*.

O operador gradiente quadrimensional

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right) \quad (\text{A.10})$$

é um vetor covariante. O vetor contravariante associado é:

$$\partial^\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right) \quad (\text{A.11})$$

A partir destes, forma-se o operador d'Alembertiano:

$$\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \quad (\text{A.12})$$

que é um operador escalar.

A.2 Matrizes de Dirac

As matrizes de Dirac são definidas pela álgebra de Clifford:

$$\{\gamma^\alpha, \gamma^\beta\} \equiv \gamma^\alpha \gamma^\beta + \gamma^\beta \gamma^\alpha = 2g^{\alpha\beta} \mathbf{1}_4; \quad \alpha, \beta = 0, \dots, 3 \quad (\text{A.13})$$

em que $\mathbf{1}_4$ é a matriz identidade 4x4. Quando necessário, escolhemos a seguinte representação para os cálculos nesta dissertação:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & \mathbf{0}_2 \\ \mathbf{0}_2 & -\mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \quad \gamma^k = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_2 & \sigma_k \\ -\sigma_k & \mathbf{0}_2 \end{pmatrix}; \quad k = 1, 2, 3 \quad (\text{A.14})$$

em que $\mathbf{1}_2$ denota a matriz identidade 2x2 e σ^k denota as matrizes de Pauli, dadas por:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.15})$$

facilmente verifica-se que as matrizes de Pauli satisfazem:

$$\{\sigma_k, \sigma_l\} = 2\delta_{kl} \mathbf{1}_2, \quad [\sigma_k, \sigma_l] = 2i\epsilon_{k,l,m} \sigma_m \quad (\text{A.16})$$

APÊNDICE B

VARIÁVEIS DE GRASSMANN

Neste apêndice, seguindo [33], introduziremos a ideia de números anticomutantes com o intuito de no Apêndice C expressar a função de partição para campos fermiônicos como uma integral funcional. Para isso, apresentaremos as propriedades de diferenciação e integração sobre tais números. Mesmo que pareça estranha, a ideia de números que anticomutam é conhecida em Matemática desde o século XIX.

Uma *álgebra de Grassmann* de dimensão n é um conjunto de números que anticomutam, chamados *variáveis ou números de Grassmann*, os quais podem ser expressos em termos de n geradores $\{\eta_i; i = 1, \dots, n\}$ que satisfazem a seguinte relação de *anticomutação*:

$$\{\eta_i, \eta_j\} = 0; \quad i, j = 1, \dots, n \quad (\text{B.1})$$

através de:

$$g = g^{(0)} + \sum_{i=1}^n g_i^{(1)} \eta_i + \sum_{i_1 < i_2} g_{i_1 i_2}^{(2)} \eta_{i_1} \eta_{i_2} + \dots + g_{12 \dots n}^{(n)} \eta_1 \eta_2 \dots \eta_n \quad (\text{B.2})$$

Desta forma, qualquer elemento g da álgebra pode ser entendido como uma função $g(\eta) = g(\eta_1, \dots, \eta_n)$ determinada pelos coeficientes $g^{(0)}, \dots, g_{1 \dots n}^{(n)}$, que são números usuais. Quando os coeficientes pertencem ao conjunto dos números reais (complexos), as variáveis de Grassmann são ditas reais (complexas).

Note-se que em cada termo de (B.2) o produto dos geradores é ordenado, caso contrário haveria uma ambiguidade de sinal em cada coeficiente. Perceba também que *não* há produtos do tipo η_1^2 ou $\eta_1 \eta_2^2 \eta_3$ pois, como caso particular de (B.1), tem-se:

$$\eta_i^2 = 0; \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{B.3})$$

Como a quantidade de termos independentes do tipo $\eta_{i_1} \eta_{i_2} \dots \eta_{i_p}$ com $i_1 < i_2 < \dots < i_p$ e $p < n$ é

$$C_{n,p} = \binom{n}{p} = \frac{n!}{p! \times (n-p)!} \quad (\text{B.4})$$

e $\sum_{p=0}^n C_{n,p} = 2^n$, são necessários 2^n coeficientes para especificar um elemento da álgebra. Tomando o caso $n = 2$ como exemplo, um elemento qualquer da álgebra é escrito como:

$$\begin{aligned} g = g(\eta_1, \eta_2) &= g^{(0)} + g_1^{(1)}\eta_1 + g_2^{(1)}\eta_2 + g_{12}^{(2)}\eta_1\eta_2 \\ &= g^{(0)} + g_1^{(1)}\eta_1 + g_2^{(1)}\eta_2 - g_{12}^{(2)}\eta_2\eta_1 \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

A derivada *à esquerda* em relação aos geradores é um operador linear definido a partir das relações:

$$\frac{\partial}{\partial \eta_i} 1 = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial}{\partial \eta_i} \eta_j = \delta_{i,j} \quad (\text{B.6})$$

para tomar a derivada de um produto de geradores, as relações de anticomutação (B.1) são usadas; por exemplo:

$$\frac{\partial}{\partial \eta_2} (\eta_1\eta_2) = \frac{\partial}{\partial \eta_2} (-\eta_2\eta_1) = -\eta_1 \quad (\text{B.7})$$

de um modo geral:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \eta_k} (\eta_{i_1}\eta_{i_2}\cdots\eta_{i_p}) &= \left(\frac{\partial \eta_{i_1}}{\partial \eta_k}\right) \eta_{i_2}\cdots\eta_{i_p} - \left(\frac{\partial \eta_{i_2}}{\partial \eta_k}\right) \eta_{i_1}\cdots\eta_{i_p} + \cdots \\ &\quad + (-1)^{p-1} \left(\frac{\partial \eta_{i_p}}{\partial \eta_k}\right) \eta_{i_1}\eta_{i_2}\cdots\eta_{i_{p-1}} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

veja que ganha-se um fator -1 a cada vez que a derivada “passa por” um gerador.

A regra do produto (B.8) fornece:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \eta_i}, \eta_j \right\} = \delta_{i,j} \quad \text{e} \quad \left\{ \frac{\partial}{\partial \eta_i}, \frac{\partial}{\partial \eta_j} \right\} = 0 \quad (\text{B.9})$$

A primeira destas expressões é obtida diretamente:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\partial}{\partial \eta_i}, \eta_j \right\} g(\eta) &= \frac{\partial}{\partial \eta_i} [\eta_j g(\eta)] + \eta_j \left(\frac{\partial}{\partial \eta_i} g(\eta) \right) \\ &= \left(\frac{\partial \eta_j}{\partial \eta_i} \right) g(\eta) - \eta_j \left(\frac{\partial g(\eta)}{\partial \eta_i} \right) + \eta_j \left(\frac{\partial}{\partial \eta_i} g(\eta) \right) \\ &= \delta_{i,j} g(\eta) \end{aligned}$$

e a segunda decorre de (sem soma sobre índices repetidos):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \eta_i} \left[\frac{\partial}{\partial \eta_j} (\eta_i \eta_j) \right] &= \frac{\partial}{\partial \eta_i} \left[\frac{\partial}{\partial \eta_j} (-\eta_j \eta_i) \right] = \frac{\partial}{\partial \eta_i} [-\eta_i] = -1 \\ \frac{\partial}{\partial \eta_j} \left[\frac{\partial}{\partial \eta_i} (\eta_i \eta_j) \right] &= \frac{\partial}{\partial \eta_j} [\eta_j] = +1 \end{aligned}$$

Como exemplo, calculamos a derivada a seguir para o elemento dado em (B.5):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \eta_1} \left(\frac{\partial g(\eta_1, \eta_2)}{\partial \eta_2} \right) &= \frac{\partial}{\partial \eta_1} \left[\frac{\partial}{\partial \eta_2} \left(g^{(0)} + g_1^{(1)}\eta_1 + g_2^{(1)}\eta_2 + g_{12}^{(2)}\eta_1\eta_2 \right) \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial \eta_1} \left[g_1^{(1)}\delta_{1,2} + g_2^{(1)}\delta_{2,2} - g_{12}^{(2)}\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial \eta_2} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial \eta_1} \left[g_2^{(1)} - g_{12}^{(2)}\eta_1 \right] = -g_{12}^{(2)} \end{aligned}$$

Como nenhum elemento possui termos quadráticos nos geradores, a derivada em relação a um *mesmo* gerador aplicada duas ou mais vezes é nula:

$$\frac{\partial^2 g(\eta)}{\partial \eta_i^2} \equiv \frac{\partial}{\partial \eta_i} \left(\frac{\partial g(\eta)}{\partial \eta_i} \right) = 0 \quad (\text{B.10})$$

Assim, a integração *não* pode ser definida como a operação inversa à diferenciação.

Contudo, a integral pode ser definida como um operador linear a partir de:

$$\int d\eta_i 1 = 0 \quad \text{e} \quad \int d\eta_i \eta_j = \delta_{i,j}; \quad i, j = 1, \dots, n \quad (\text{B.11})$$

e integrais múltiplas são interpretadas como iteradas:

$$\int d\eta_{i_1} \cdots d\eta_{i_p} g(\eta) = \int d\eta_{i_1} \left[\int d\eta_{i_2} \cdots \left[\int d\eta_{i_p} g(\eta) \right] \right] \quad (\text{B.12})$$

É notável que as definições (B.11) sejam idênticas a (B.6), portanto a *diferenciação e a integração sobre variáveis de Grassmann são equivalentes*. Dessa forma, a medida de integração no lado esquerdo de (B.12) subtende um ordenamento das integrais no lado direito.

A seguinte integral do elemento g em (B.5) é calculada como exemplo:

$$\begin{aligned} \int d\eta_2 d\eta_1 g(\eta_1, \eta_2) &= \int d\eta_2 \left[\int d\eta_1 \left(g^{(0)} + g_1^{(1)} \eta_1 + g_2^{(1)} \eta_2 + g_{12}^{(2)} \eta_1 \eta_2 \right) \right] \\ &= \int d\eta_2 \left[g^{(0)} \int d\eta_1 1 + g_1^{(1)} \int d\eta_1 \eta_1 - g_2^{(1)} \eta_2 \int d\eta_1 1 + \right. \\ &\quad \left. + g_{12}^{(2)} \left(\int d\eta_1 \eta_1 \right) \eta_2 \right] \\ &= \int d\eta_2 \left[g_1^{(1)} + g_{12}^{(2)} \eta_2 \right] = g_{12}^{(2)} \end{aligned}$$

note-se ainda a igualdade entre a derivada e a integral em:

$$\int d\eta_2 d\eta_1 g(\eta_1, \eta_2) = g_{12}^{(2)} = \frac{\partial}{\partial \eta_2} \left(\frac{\partial g(\eta_1, \eta_2)}{\partial \eta_1} \right)$$

Outra diferença marcante entre as integrais usuais e a integração sobre variáveis de Grassmann é como a integral se transforma sob mudança de variáveis. Por simplicidade, consideremos o caso $n = 1$; um elemento qualquer da álgebra se escreve – ver (B.2) – como:

$$g(\eta) = g^{(0)} + g^{(1)} \eta \quad (\text{B.13})$$

de onde se calcula a integral:

$$\int d\eta g(\eta) = g^{(1)} \quad (\text{B.14})$$

Dada a seguinte mudança de variável¹:

$$\eta = \eta(\theta) = a\theta + \sigma \quad (\text{B.15})$$

¹ Note-se que as transformações de variáveis grassmannianas só podem ser lineares devido a (B.3).

em que θ e σ são números de Grassmann e a é um número ordinário, encontra-se:

$$\int d\theta g(\eta(\theta)) = \int d\theta [g^{(0)} + g^{(1)}(a\theta + \sigma)] = g^{(1)}a = g^{(1)}\frac{d\eta}{d\theta} \quad (\text{B.16})$$

Comparando (B.16) e (B.14) escreve-se:

$$\int d\eta g(\eta) = \int d\theta \left(\frac{d\eta}{d\theta}\right)^{-1} g(\eta(\theta)) \quad (\text{B.17})$$

perceba que, para números usuais, a regra para a mudança de variáveis é diferente:

$$\int f(y) dy = \int f(y(x)) \frac{dy}{dx} dx \quad (\text{B.18})$$

A expressão (B.17) é generalizada para o caso em que a álgebra de Grassmann é de dimensão n :

$$\int d\eta_n \cdots d\eta_1 g(\eta) = \int d\theta_n \cdots d\theta_1 \left[\det\left(\frac{d\eta}{d\theta}\right)\right]^{-1} g(\eta(\theta)) \quad (\text{B.19})$$

note-se que a medida de integração se transforma com o *inverso* do determinante jacobiano.

É importante comentar sobre variáveis de Grassmann complexas, que são usadas para descrever campos fermiônicos no formalismo de integral funcional. Considere dois conjuntos disjuntos de números de Grassmann mutuamente anticomutantes $\{\eta_1, \dots, \eta_n\}$ e $\{\eta_1^*, \dots, \eta_n^*\}$:

$$\{\eta_i, \eta_j\} = \{\eta_i, \eta_j^*\} = \{\eta_i^*, \eta_j^*\} = 0; \quad i, j = 1, \dots, n \quad (\text{B.20})$$

Juntos, esses números são geradores de uma álgebra de Grassmann de dimensão $2n$. Os dois conjuntos são relacionados pela operação linear, chamada *conjugação*, definida por:

$$\begin{aligned} (\eta_i)^* &= \eta_i^* \\ (\eta_i^*)^* &= \eta_i \\ (\eta_{i_1} \eta_{i_2} \cdots \eta_{i_{p-1}} \eta_{i_p})^* &= \eta_{i_p}^* \eta_{i_{p-1}}^* \cdots \eta_{i_2}^* \eta_{i_1}^* \\ (a\eta_i)^* &= a^* \eta_i^* \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

em que a é um número complexo.

A diferenciação é definida por:

$$\frac{\partial}{\partial \eta_i} 1 = 0 = \frac{\partial}{\partial \eta_i^*} 1 \quad \frac{\partial}{\partial \eta_i} \eta_j = \delta_{i,j} = \frac{\partial}{\partial \eta_i^*} \eta_j^* \quad \frac{\partial}{\partial \eta_i} \eta_j^* = 0 = \frac{\partial}{\partial \eta_i^*} \eta_j \quad (\text{B.22})$$

as relações (B.9) se tornam:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \eta_i}, \eta_j \right\} = \delta_{i,j} = \left\{ \frac{\partial}{\partial \eta_i^*}, \eta_j^* \right\} \quad \left\{ \frac{\partial}{\partial \eta_i^*}, \eta_j \right\} = 0 = \left\{ \frac{\partial}{\partial \eta_i}, \eta_j^* \right\}$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \eta_i}, \frac{\partial}{\partial \eta_j} \right\} = \left\{ \frac{\partial}{\partial \eta_i^*}, \frac{\partial}{\partial \eta_j^*} \right\} = \left\{ \frac{\partial}{\partial \eta_i^*}, \frac{\partial}{\partial \eta_j} \right\} = 0 \quad (\text{B.23})$$

Define-se a integração a partir de:

$$\int d\eta_i 1 = 0 = \int d\eta_i^* 1 \quad \int d\eta_i \eta_j = \delta_{i,j} = \int d\eta_i^* \eta_j^*; \quad (\text{B.24})$$

novamente, a integração e a diferenciação são operações equivalentes. As medida de integração em integrais múltiplas são definidas como:

$$\int d\eta^\dagger d\eta g(\eta^*, \eta) = \int d\eta_1^* d\eta_1 \cdots d\eta_n^* d\eta_n g(\eta^*, \eta) \quad (\text{B.25})$$

Perceba que os geradores η_i^* e η_i são tratados como variáveis independentes com respeito à diferenciação e à integração.

Um elemento genérico da álgebra é escrito como:

$$\begin{aligned} g = g(\eta^\dagger, \eta) &= a + \sum_{i=1}^n a_i \eta_i + \sum_{i_1 < i_2} a_{i_1 i_2} \eta_{i_1} \eta_{i_2} + \cdots + a_{12 \cdots n} \eta_1 \eta_2 \cdots \eta_n + \\ &+ \sum_{i=1}^n b_i \eta_i^* + \sum_{i_1 < i_2} b_{i_1 i_2} \eta_{i_1}^* \eta_{i_2} + \cdots + b_{12 \cdots n} \eta_1^* \eta_2^* \cdots \eta_n^* + \\ &+ \sum_{i,j=1}^n c_{ij} \eta_i^* \eta_j + \cdots + c_{12 \cdots n} \eta_1^* \eta_1 \eta_2^* \eta_2 \cdots \eta_n^* \eta_n \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

a integral do elemento acima sobre todas as variáveis é:

$$\int d\eta_1^* d\eta_1 \cdots d\eta_n^* d\eta_n g(\eta^\dagger, \eta) = -c_{12 \cdots n} \quad (\text{B.27})$$

Por fim, com o intuito de descrever campos ferminônicos, generalizamos as expressões acima para uma álgebra de Grassmann de dimensão infinita. O índice que conta os geradores da álgebra passa a ser um rótulo contínuo²:

$$\eta_i \rightarrow \eta(x) \quad \eta_i^* \rightarrow \eta^*(x) \quad (\text{B.28})$$

os geradores satisfazem as relações de anticomutação:

$$\{\eta(x), \eta(y)\} = \{\eta(x), \eta^*(y)\} = \{\eta^*(x), \eta^*(y)\} = 0 \quad (\text{B.29})$$

a derivada passa a ser funcional, as expressões abaixo generalizam (B.23):

$$\frac{\delta}{\delta \eta(x)} 1 = 0 = \frac{\delta}{\delta \eta^*(x)} 1 \quad \frac{\delta \eta(y)}{\delta \eta(x)} = \delta(x-y) = \frac{\delta \eta^*(y)}{\delta \eta^*(x)} \quad \frac{\delta \eta^*(y)}{\delta \eta(x)} = 0 = \frac{\delta \eta(y)}{\delta \eta^*(x)}$$

$$\left\{ \frac{\delta}{\delta \eta(x)}, \frac{\delta}{\delta \eta(y)} \right\} = \left\{ \frac{\delta}{\delta \eta^*(x)}, \frac{\delta}{\delta \eta^*(y)} \right\} = \left\{ \frac{\delta}{\delta \eta^*(x)}, \frac{\delta}{\delta \eta(y)} \right\} = 0 \quad (\text{B.30})$$

² No caso de nosso interesse, passa a ser um ponto no espaço-tempo.

e as regras de integração são:

$$\int d\eta(x) 1 = 0 = \int d\eta^*(x) 1 \quad \int d\eta(x) \eta(y) = \delta(x-y) = \int d\eta^*(x) \eta^*(y) \quad (\text{B.31})$$

generalizando (B.24).

No caso contínuo, um elemento qualquer da álgebra é expresso por

$$\begin{aligned} g = g[\eta^\dagger(x), \eta(x)] &= a^{(0)} + \int dx_1 a(x_1) \eta(x_1) + \int dx_1 dx_2 a(x_1, x_2) \eta(x_1) \eta(x_2) + \cdots \\ &+ \int dx_1 b(x_1) \eta^*(x_1) + \int dx_1 dx_2 b(x_1, x_2) \eta^*(x_1) \eta^*(x_2) + \cdots \\ &+ \int dx_1 dx_2 c(x_1, x_2) \eta^*(x_1) \eta(x_2) + \cdots \\ &+ \int dx_1 \cdots dx_n c(x_1, \dots, x_n) \eta^*(x_1) \eta(x_1) \cdots \eta^*(x_n) \eta(x_n) + \cdots \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

sendo entendido como um *funcional* dos geradores.

Tendo definido a integração para álgebras de Grassmann de dimensão infinita, pode-se definir integrais funcionais sobre variáveis de Grassmann, generalizando a integração funcional usual. Ao fim do Apêndice D comenta-se sobre como isso é feito.

APÊNDICE C

INTEGRAIS FUNCIONAIS E A FUNÇÃO DE PARTIÇÃO PARA TQC

Neste apêndice serão apresentadas as derivações das expressões para a função de partição que generalizam (3.42) para sistemas quânticos com n graus de liberdade sem spin e para campos quantizados; seguiremos as referências [7, 33].

C.1 Função de partição para n graus de liberdade

Considere um sistema com n graus de liberdade $\{q_i; i = 1, 2, \dots, n\}$ e dinâmica dada por uma hamiltoniana independente do tempo $H(\vec{p}, \vec{q}) \equiv H(p_1, \dots, p_n, q_1, \dots, q_n)$. Segundo a quantização canônica, os operadores posição $\{\hat{q}_i; i = 1, 2, \dots, n\}$ e momento $\{\hat{p}_i; i = 1, 2, \dots, n\}$ satisfazem as relações de comutação:

$$[\hat{q}_k, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{k,l}\hat{I}; \quad k, l = 1, \dots, n \quad (\text{C.1})$$

e seus autoestados $|\vec{q}\rangle$ e $|\vec{p}\rangle$ satisfazem:

$$\hat{q}_j |\vec{q}\rangle = q_j |\vec{q}\rangle \quad \hat{p}_j |\vec{p}\rangle = p_j |\vec{p}\rangle; \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{C.2})$$

$$\langle \vec{q}' | \vec{q} \rangle = \delta^{(n)}(\vec{q}' - \vec{q}) \quad \langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = (2\pi\hbar)^n \delta^{(n)}(\vec{p}' - \vec{p}) \quad (\text{C.3})$$

$$\hat{I} = \int dq_1 \cdots \int dq_n |\vec{q}\rangle \langle \vec{q}| \quad \hat{I} = \int \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \cdots \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| \quad (\text{C.4})$$

$$\langle \vec{q} | \vec{p} \rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{q}\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{l=1}^n p_l q_l\right) \quad (\text{C.5})$$

No ensemble canônico, a função de partição pode ser expressa por:

$$Z = \int d^n q |\vec{q}\rangle \exp\left(-\beta \hat{H}(\vec{p}, \vec{q})\right) \langle \vec{q}|; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (\text{C.6})$$

Para o cálculo de $\langle \vec{q} | \exp(-\beta \hat{H}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{q}})) | \vec{q} \rangle$ novamente o intervalo $[0, \beta]$ é particionado em N subintervalos de amplitude $\epsilon = \frac{\beta}{N}$; denotando $\hat{U}(\epsilon) = \exp(-\epsilon \hat{H}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{q}}))$:

$$\begin{aligned}
 Z &= \int d^n q \langle \vec{q} | \hat{U}(\epsilon) \hat{I}_{(N-1)} \hat{U}(\epsilon) \cdots \hat{I}_2 \hat{U}(\epsilon) \hat{I}_1 \hat{U}(\epsilon) | \vec{q} \rangle \\
 &= \int d^n q \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left\{ \int \cdots \int d^n q^{(N-1)} \cdots d^n q^{(1)} \langle \vec{q} | \hat{U}(\epsilon) | \vec{q}^{(N-1)} \rangle \langle \vec{q}^{(N-1)} | \hat{U}(\epsilon) | \vec{q}^{(N-2)} \rangle \times \right. \\
 &\quad \left. \times \cdots \langle \vec{q}^{(2)} | \hat{U}(\epsilon) | \vec{q}^{(1)} \rangle \langle \vec{q}^{(1)} | \hat{U}(\epsilon) | \vec{q} \rangle \right\} \\
 &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int d^n q \int \cdots \int d^n q^{(N-1)} \cdots d^n q^{(1)} \prod_{k=0}^{N-1} \langle \vec{q}^{(k+1)} | \hat{U}(\epsilon) | \vec{q}^{(k)} \rangle; \tag{C.7}
 \end{aligned}$$

em que $\vec{q}^{(0)} = \vec{q} = \vec{q}^{(N)}$ e o limite $\epsilon \rightarrow 0$ é tomado mantendo $N\epsilon = \beta$ finito. O elemento de matriz $\mathcal{T}^{(k)} = \langle \vec{q}^{(k+1)} | \hat{U}(\epsilon) | \vec{q}^{(k)} \rangle$ é dado por:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T}^{(k)} &= \int \frac{d^n p^{(k)}}{(2\pi\hbar)^n} \langle \vec{q}^{(k+1)} | \vec{p}^{(k)} \rangle \langle \vec{p}^{(k)} | \exp(-\epsilon \hat{H}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{q}})) | \vec{q}^{(k)} \rangle \\
 &= \int \frac{d^n p^{(k)}}{(2\pi\hbar)^n} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}^{(k)} \cdot \vec{q}^{(k+1)}\right) \langle \vec{p}^{(k)} | [\hat{I} - \epsilon \hat{H}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{q}})] | \vec{q}^{(k)} \rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\
 &= \int \frac{d^n p^{(k)}}{(2\pi\hbar)^n} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}^{(k)} \cdot \vec{q}^{(k+1)}\right) [1 - \epsilon H(\vec{p}^{(k)}, \vec{q}^{(k)})] \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}^{(k)} \cdot \vec{q}^{(k)}\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\
 &= \int \frac{d^n p^{(k)}}{(2\pi\hbar)^n} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}^{(k)} \cdot [\vec{q}^{(k+1)} - \vec{q}^{(k)}]\right) \exp[-\epsilon H(\vec{p}^{(k)}, \vec{q}^{(k)})] + \mathcal{O}(\epsilon^2)
 \end{aligned}$$

Note-se que $\vec{p}^{(k)}$ não é o momento canonicamente conjugado a \vec{q} avaliado no instante k . Portanto:

$$\begin{aligned}
 \prod_{k=0}^{N-1} \mathcal{T}^{(k)} &= \prod_{k=0}^{N-1} \left\{ \int \frac{d^n p^{(k)}}{(2\pi\hbar)^n} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}^{(k)} \cdot [\vec{q}^{(k+1)} - \vec{q}^{(k)}]\right) \exp[-\epsilon H(\vec{p}^{(k)}, \vec{q}^{(k)})] \right\} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\
 &= \left(\prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{d^n p^{(k)}}{(2\pi\hbar)^n} \right) \exp \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{i}{\hbar} \vec{p}^{(k)} \cdot (\vec{q}^{(k+1)} - \vec{q}^{(k)}) - H(\vec{p}^{(k)}, \vec{q}^{(k)}) \right] \right\} + \mathcal{O}(\epsilon^2)
 \end{aligned}$$

substituindo essa última expressão em (C.7), encontra-se:

$$\begin{aligned}
 Z &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int d^n q \left(\prod_{j=1}^{N-1} \int d^n q^{(j)} \right) \left(\prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{d^n p^{(k)}}{(2\pi\hbar)^n} \right) \times \\
 &\quad \times \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \hbar \epsilon \left[\frac{i}{\hbar} \vec{p}^{(k)} \cdot (\vec{q}^{(k+1)} - \vec{q}^{(k)}) - H(\vec{p}^{(k)}, \vec{q}^{(k)}) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

no limite em que $\epsilon \rightarrow 0$ ($N \rightarrow \infty$), escreve-se:

$$\int \mathcal{D}q_l = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=0}^{N-1} \int dq_l^{(j)} \quad \text{e} \quad \int \mathcal{D}p_l = \prod_{k=0}^{N-1} \int \frac{dp_l^{(k)}}{2\pi\hbar} \tag{C.8}$$

$$Z = \left(\prod_{l=1}^n \int_{q_l(0)=q_l(\hbar\beta)} \mathcal{D}q_l \int \mathcal{D}p_l \right) \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[i\vec{p} \cdot \frac{d\vec{q}}{d\tau} - H(\vec{p}, \vec{q}) \right] \right\}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (\text{C.9})$$

Esta é a expressão para função de partição no ensemble canônico como integral funcional que generaliza (3.42) para n graus de liberdade. Quando a hamiltoniana é quadrática nos momentos:

$$H = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2m} p_i^2 + V(q_1, \dots, q_N) \quad (\text{C.10})$$

obtém-se uma expressão que generaliza (3.51):

$$Z = \mathcal{N} \left(\prod_{i=1}^n \int_{q_i(0)=q_i(\hbar\beta)} \mathcal{D}q_i \right) \exp \left(-\frac{1}{\hbar} S_E(\beta) \right) \quad (\text{C.11})$$

em que a ação euclidiana $S_E(\beta)$ é dada por:

$$S_E(\beta) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{m}{2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{dq_i}{d\tau} \right)^2 + V(q_1, \dots, q_N) \right] \quad (\text{C.12})$$

e a constante:

$$\mathcal{N} = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\epsilon} \right)^{\frac{Nn}{2}} \quad (\text{C.13})$$

C.2 Função de partição para campos

C.2.1 Campo Escalar

Segundo a quantização canônica, os campos são operadores $\hat{\phi}(x)$ e $\hat{\pi}(x)$ que satisfazem as relações de comutação a tempos iguais

$$\begin{aligned} \left[\hat{\phi}(x^0, \vec{x}), \hat{\pi}(x^0, \vec{y}) \right] &= i\hbar\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y})\hat{I} \\ \left[\hat{\phi}(x^0, \vec{x}), \hat{\phi}(x^0, \vec{y}) \right] &= \left[\hat{\pi}(x^0, \vec{x}), \hat{\pi}(x^0, \vec{y}) \right] = 0 \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

como os operadores que representam os graus de liberdade dependem do tempo, diz-se que os campos estão na descrição de Heisenberg.

Escolhendo-se um tempo de referência, usualmente $t = 0$, os operadores de campo na descrição de Schrödinger, $\hat{\phi}(\vec{x})$ e $\hat{\pi}(\vec{x})$, são obtidos¹:

$$\hat{\phi}(\vec{x}) = \hat{\phi}(x^0 = 0, \vec{x}) \quad \hat{\pi}(\vec{x}) = \hat{\pi}(x^0 = 0, \vec{x}) \quad (\text{C.15})$$

¹ As duas descrições serão distinguidas notacionalmente pelo argumento dos campos: quando o campo estiver na descrição de Heisenberg (Schrödinger), o argumento será o quadrivetor (vetor) posição x (\vec{x}).

por (C.14), eles satisfazem as relações de comutação:

$$\left[\hat{\phi}(\vec{x}), \hat{\pi}(\vec{y}) \right] = i\hbar\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y})\hat{I} \quad \text{e} \quad \left[\hat{\phi}(\vec{x}), \hat{\phi}(\vec{y}) \right] = [\hat{\pi}(\vec{x}), \hat{\pi}(\vec{y})] = 0 \quad (\text{C.16})$$

seus autoestados $|\phi\rangle$ e $|\pi\rangle$ satisfazem:

$$\hat{\phi}(\vec{x})|\phi\rangle = \phi(\vec{x})|\phi\rangle \quad \hat{\pi}(\vec{x})|\pi\rangle = \pi(\vec{x})|\pi\rangle \quad (\text{C.17})$$

$$\langle\phi_a|\phi_b\rangle = \delta(\phi_a - \phi_b) \quad \langle\pi_a|\pi_b\rangle = (2\pi\hbar)\delta(\pi_a - \pi_b) \quad (\text{C.18})$$

$$\hat{I} = \int d\phi|\phi\rangle\langle\phi| \quad \hat{I} = \int \frac{d\pi}{2\pi\hbar}|\pi\rangle\langle\pi| \quad (\text{C.19})$$

$$\langle\phi|\pi\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\pi \cdot \phi\right) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int \pi(\vec{x})\phi(\vec{x})d^3x\right] \quad (\text{C.20})$$

em que

$$\begin{aligned} \delta(\phi_a - \phi_b) &= \prod_{\vec{x}} \delta[\phi_a(\vec{x}) - \phi_b(\vec{x})] & \delta(\pi_a - \pi_b) &= \prod_{\vec{x}} \delta[\pi_a(\vec{x}) - \pi_b(\vec{x})] \\ \int d\phi &\equiv \prod_{\vec{x}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\phi(\vec{x}) & \int d\pi &\equiv \prod_{\vec{x}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\pi(\vec{x}) \end{aligned}$$

Note-se que, se a função $\phi_a(\vec{x})$ ($\pi_a(\vec{x})$) é autovalor de $\hat{\phi}(\vec{x})$ ($\hat{\pi}(\vec{x})$), o autoestado *não* depende da posição e é rotulado por $|\phi_a\rangle$ ($|\pi_a\rangle$); a função delta compara as funções, sendo nula sempre que seu argumento é diferente da função nula e nas relações de completeza integra-se sobre todos os autovalores, ou seja, funções $\phi(\vec{x})$ ou $\pi(\vec{x})$.

A função de partição no ensemble canônico é:

$$Z = \int \phi_a \langle\phi_a| \exp\left(-\beta\hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}]\right) |\phi_a\rangle; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (\text{C.21})$$

Particionando o intervalo $[0, \beta]$ em N subintervalos de amplitude $\epsilon = \frac{\beta}{N}$ e usando as relações de completeza (C.19) nos extremos de cada subintervalo, escreve-se:

$$\begin{aligned} \langle\phi_a| e^{-\beta\hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}]} |\phi_a\rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^N \int \frac{d\phi_i d\pi_i}{2\pi\hbar} \right) \langle\phi_a|\pi_N\rangle \langle\pi_N| \exp\left(-\epsilon\hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}]\right) |\phi_N\rangle \langle\phi_N|\pi_{N-1}\rangle \\ &\times \langle\pi_{N-1}| \exp\left(-\epsilon\hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}]\right) |\phi_{N-1}\rangle \times \cdots \\ &\times \langle\pi_2| \exp\left(-\epsilon\hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}]\right) |\phi_2\rangle \langle\phi_2|\pi_1\rangle \langle\pi_1| \exp\left(-\epsilon\hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}]\right) |\phi_1\rangle \langle\phi_1|\phi_a\rangle \end{aligned}$$

$$\langle\phi_a| e^{-\beta\hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}]} |\phi_a\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^N \int \frac{d\phi_i d\pi_i}{2\pi\hbar} \langle\pi_i| \exp\left(-\epsilon\hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}]\right) |\phi_i\rangle \langle\phi_{i+1}|\pi_i\rangle \langle\phi_1|\phi_a\rangle \right) \quad (\text{C.22})$$

em que $\phi_{N+1} = \phi_a$. Mas:

$$\langle\phi_1|\phi_a\rangle = \delta(\phi_1 - \phi_a) \quad (\text{C.23})$$

$$\langle\phi_{i+1}|\pi_i\rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int d^3x \pi_i(\vec{x})\phi_{i+1}(\vec{x})\right] \quad (\text{C.24})$$

e

$$\begin{aligned}
 \langle \pi_i | \exp \left(-\epsilon \hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}] \right) | \phi_i \rangle &= \langle \pi_i | \left(\hat{I} - \epsilon \hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}] \right) | \phi_i \rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\
 &= (1 - \epsilon H[\pi_i, \phi_i]) \langle \pi_i | \phi_i \rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\
 &= \exp(-\epsilon H[\pi_i, \phi_i]) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int d^3x \pi_i(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}) \right] + \\
 &\quad + \mathcal{O}(\epsilon^2)
 \end{aligned} \tag{C.25}$$

Substituindo (C.23), (C.24) e (C.25) em (C.22), omitindo o argumento dos campos e denotando $K_a = \langle \phi_a | e^{-\beta \hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}]} | \phi_a \rangle$:

$$\begin{aligned}
 K_a &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^N \int \frac{d\phi_i d\pi_i}{2\pi\hbar} \right) \exp \left\{ \sum_{j=1}^N \int d^3x \left[\frac{i}{\hbar} \pi_j (\phi_{j+1} - \phi_j) - \epsilon \mathcal{H}(\pi_j, \phi_j) \right] \right\} \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^N \int \frac{d\phi_i d\pi_i}{2\pi\hbar} \right) \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \sum_{j=1}^N \hbar \epsilon \int d^3x \left[i \pi_j \frac{(\phi_{j+1} - \phi_j)}{\epsilon \hbar} - \mathcal{H}(\pi_j, \phi_j) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

com $\phi_{N+1} = \phi_a = \phi_1$. Definindo as medidas de integração no limite $N \rightarrow \infty$:

$$\int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi = \left(\prod_{i=1}^N \int \frac{d\phi_i d\pi_i}{2\pi\hbar} \right) \tag{C.26}$$

escreve-se:

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_a | e^{-\beta \hat{H}[\hat{\pi}, \hat{\phi}]} | \phi_a \rangle &= \int_{\phi(0, \vec{x}) = \phi(\hbar\beta, \vec{x}) = \phi_a(\vec{x})} \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \left[i \pi(\tau, \vec{x}) \frac{\partial \phi(\tau, \vec{x})}{\partial \tau} - \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \mathcal{H}(\pi(\tau, \vec{x}), \phi(\tau, \vec{x})) \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{C.27}$$

A função de partição no ensemble canônico escrita como integral funcional é obtida substituindo (C.27) em (C.21):

$$Z = \int_{\phi(0, \vec{x}) = \phi(\hbar\beta, \vec{x})} \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \left[i \pi(\tau, \vec{x}) \frac{\partial \phi(\tau, \vec{x})}{\partial \tau} - \mathcal{H}(\pi(\tau, \vec{x}), \phi(\tau, \vec{x})) \right] \right\}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \tag{C.28}$$

De modo semelhante ao caso unidimensional discutido na Subseção 3.1.4, quando a densidade hamiltoniana depende quadraticamente do momento $\pi(x)$, a integral no momento se torna gaussiana e pode ser resolvida exatamente; isso fornece uma expressão para a função de partição como integral funcional apenas no espaço de configurações de campo.

Considere uma densidade lagrangiana da forma:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi(x) \partial^\mu \phi(x) - \frac{1}{2} \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \phi^2(x) - U(\phi) \tag{C.29}$$

em que m é a massa das partículas correspondentes. O momento canonicamente conjugado a ϕ e a densidade hamiltoniana são:

$$\begin{aligned}\pi(x) &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \phi)}(x) = \partial^0 \phi(x) \\ \mathcal{H} = \pi \partial_0 \phi - \mathcal{L} &= \frac{1}{2} \pi^2(x) + \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \phi)^2(x) + \frac{1}{2} \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \phi^2(x) + U(\phi(x))\end{aligned}\quad (\text{C.30})$$

Substituindo (C.30) em (C.28), deve-se calcular:

$$Z = \int_{\phi(0, \vec{x}) = \phi(\hbar\beta, \vec{x})} \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \left[i\pi \frac{\partial \phi}{\partial \tau} - \left(\frac{1}{2} \pi^2 + \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \phi)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \phi^2 + U(\phi) \right) \right] \right\} \quad (\text{C.31})$$

As integrais funcionais são resolvidas voltando à versão discretizada para a direção temporal e dividindo o volume espacial V em M cubos de aresta a de modo que $V = Ma$. Com isso, os campos $\phi(t, \vec{x})$ e $\pi(t, \vec{x})$ são escritos como $\phi_m^{(j)}$ e $\pi_m^{(j)}$ em que o índice rotula o tempo e o subíndice m rotula a posição espacial. Particularmente, discretizando a região espacial, a função de partição toma uma forma idêntica a (C.9):

$$\begin{aligned}Z &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\prod_{m=1}^M \int_{\phi_m(0) = \phi_m(\hbar\beta)} \mathcal{D}\phi_m \mathcal{D}\pi_m \right) \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{m=1}^M a^3 \left[i\pi_m \frac{\partial \phi_m}{\partial \tau} - \frac{1}{2} \pi_m^2 - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \left(\frac{1}{2} (\vec{\nabla} \phi_m)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \phi_m^2 + U(\phi_m) \right) \right] \right\} \\ &\stackrel{(\text{C.11})}{=} \lim_{M \rightarrow \infty} \mathcal{N} \left(\prod_{m=1}^M \int_{\phi_m(0) = \phi_m(\hbar\beta)} \mathcal{D}\phi_m \right) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_E(\beta) \right]\end{aligned}$$

com a ação euclidiana dada por:

$$S_E(\beta) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{m=1}^M a^3 \left\{ \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \phi_m}{\partial \tau} \right)^2 + (\vec{\nabla} \phi_m)^2 \right] + \frac{1}{2} \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \phi_m^2 + U(\phi_m) \right\} \quad (\text{C.32})$$

No limite do contínuo, escreve-se:

$$Z = \mathcal{N} \int_{\phi(0, \vec{x}) = \phi(\hbar\beta, \vec{x})} \mathcal{D}\phi(\tau, \vec{x}) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_E(\beta) \right] \quad (\text{C.33})$$

com

$$S_E(\beta) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \left\{ \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial \tau}(\tau, \vec{x}) \right)^2 + (\vec{\nabla} \phi(\tau, \vec{x}))^2 \right] + \frac{1}{2} \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \phi^2(\tau, \vec{x}) + U(\phi(\tau, \vec{x})) \right\} \quad (\text{C.34})$$

A generalização para n campos escalares $\{\hat{\phi}_i(x); i = 1, \dots, n\}$ é direta. A expressão (C.28) se torna:

$$Z = \left(\prod_{i=1}^n \int_{\phi_i(0, \vec{x}) = \phi_i(\beta, \vec{x})} \mathcal{D}\phi_i \mathcal{D}\pi_i \right) \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \left[i \sum_{i=1}^n \pi_i(\tau, \vec{x}) \frac{\partial \phi_i(\tau, \vec{x})}{\partial \tau} - \mathcal{H}(\pi_i(\tau, \vec{x}), \phi_i(\tau, \vec{x})) \right] \right\} \quad (\text{C.35})$$

e a (C.33) fica:

$$Z = \mathcal{N} \left(\prod_{i=1}^n \int_{\phi_i(0, \vec{x}) = \phi_i(\hbar\beta, \vec{x})} \mathcal{D}\phi_i(\tau, \vec{x}) \right) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_E(\beta) \right] \quad (\text{C.36})$$

com

$$S_E(\beta) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{\partial \phi_i}{\partial \tau}(\tau, \vec{x}) \right)^2 + \left(\vec{\nabla} \phi_i(\tau, \vec{x}) \right)^2 + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \phi_i^2(\tau, \vec{x}) \right] + U(\phi(\tau, \vec{x})) \right\} \quad (\text{C.37})$$

C.2.2 Campo fermiônico

Considere a seguinte densidade lagrangiana em unidades naturais ($\hbar = c = k_B = 1$), que são costumeiramente usadas em Física de Partículas:

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi - V(\psi^\dagger, \psi) \quad (\text{C.38})$$

em que $\psi(x)$ é um espinor de Dirac, $\bar{\psi}(x) = \psi^\dagger(x) \gamma^0$, que descreve um férmion de spin 1/2:

$$\psi(x) \equiv \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{pmatrix} \quad (\text{C.39})$$

e m é a massa das partículas correspondentes.

O momento canonicamente conjugado a ψ é:

$$\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \psi)}(x) = i\psi^\dagger(x) \quad (\text{C.40})$$

e a densidade hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = \pi(\partial_0 \psi) - \mathcal{L} = \psi^\dagger \gamma (-i\gamma^k \partial_k + m) \psi + V(\psi^\dagger, \psi) \quad (\text{C.41})$$

Procedendo como no caso do campo escalar², seríamos levados à seguinte expressão para a função de partição no ensemble canônico:

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}(i\psi^\dagger) \mathcal{D}\psi \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[i(i\psi^\dagger) \frac{\partial \psi}{\partial \tau} - \mathcal{H}(\psi^\dagger, \psi) \right] \right\}; \quad \beta = \frac{1}{T} \\ &= \int \mathcal{D}(\psi^\dagger) \mathcal{D}\psi \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[\psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \mathcal{H}(\psi^\dagger, \psi) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.42})$$

² Note-se que no caso do campo escalar não foi usado o fato de que os campos comutam para encontrar a representação como integral funcional para a função de partição.

em que foi usado o fato de que $\mathcal{D}(i\psi^\dagger) = \mathcal{D}(\psi^\dagger)$ pois a transformação $(i\psi^\dagger) \rightarrow \psi^\dagger$ é unitária; note-se que os campos ψ e ψ^\dagger são variáveis de integração independentes. Entretanto, no caso fermiônico, a condição de contorno é de antiperiodicidade e os campos são variáveis de Grassmann, conforme discutido a seguir.

Enquanto que os operadores de campo escalar satisfazem as regras de comutação (C.14), na quantização canônica os operadores de campo que descrevem férmions satisfazem a seguinte regra de *anticomutação* a tempos iguais:

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{\psi}_\alpha(x^0, \vec{x}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(x^0, \vec{y}) \right\} &= \hbar \delta_{\alpha,\beta} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \hat{I} \\ \left\{ \hat{\psi}_\alpha(x^0, \vec{x}), \hat{\psi}_\beta(x^0, \vec{y}) \right\} &= \left\{ \hat{\psi}_\alpha^\dagger(x^0, \vec{x}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(x^0, \vec{y}) \right\} = 0 \quad \alpha, \beta = 1, \dots, 4 \end{aligned} \quad (\text{C.43})$$

o que fornece o princípio de exclusão de Pauli. No limite $\hbar \rightarrow 0$, os operadores devem ser substituídos pelos autovalores. Dessa forma, os campos que aparecem em (C.42) devem anticomutar:

$$\left\{ \psi_\alpha(x^0, \vec{x}), \psi_\beta(x^0, \vec{y}) \right\} = \left\{ \psi_\alpha^\dagger(x^0, \vec{x}), \psi_\beta^\dagger(x^0, \vec{y}) \right\} = \left\{ \psi_\alpha(x^0, \vec{x}), \psi_\beta^\dagger(x^0, \vec{y}) \right\} = 0 \quad (\text{C.44})$$

sendo, portanto, variáveis de Grassmann, cujas propriedades são apresentadas no Apêndice B

A condição de periodicidade no caso bosônico e de antiperiodicidade no fermiônico é facilmente entendida tomando a *função de Green térmica* $G(\vec{x}, \vec{y}; \tau, 0)$, cuja definição para os operadores de campo $\hat{\Phi}(x)$ é:

$$G(\vec{x}, \vec{y}; \tau, 0) \equiv \left\langle \mathcal{T}_\tau \left(\hat{\Phi}(\tau, \vec{x}) \hat{\Phi}(0, \vec{y}) \right) \right\rangle_\beta \quad (\text{C.45})$$

em que \mathcal{T}_τ é o operador de ordenamento em tempo imaginário; para bósons:

$$\mathcal{T}_\tau \left(\hat{\Phi}(\tau_1, \vec{x}) \hat{\Phi}(\tau_2, \vec{y}) \right) = \theta(\tau_1 - \tau_2) \hat{\Phi}(\tau_1, \vec{x}) \hat{\Phi}(\tau_2, \vec{y}) + \theta(\tau_2 - \tau_1) \hat{\Phi}(\tau_2, \vec{x}) \hat{\Phi}(\tau_1, \vec{y}) \quad (\text{C.46})$$

para férmions:

$$\mathcal{T}_\tau \left(\hat{\Phi}(\tau_1, \vec{x}) \hat{\Phi}(\tau_2, \vec{y}) \right) = \theta(\tau_1 - \tau_2) \hat{\Phi}(\tau_1, \vec{x}) \hat{\Phi}(\tau_2, \vec{y}) - \theta(\tau_2 - \tau_1) \hat{\Phi}(\tau_2, \vec{x}) \hat{\Phi}(\tau_1, \vec{y}) \quad (\text{C.47})$$

e θ é a função degrau de Heaviside:

$$\theta(z) = \begin{cases} 1 & z > 0 \\ 0 & z < 0 \end{cases} \quad (\text{C.48})$$

Para o campo escalar, a função de Green térmica G_B para $\tau > 0$ satisfaz:

$$\begin{aligned} G_B(\vec{x}, \vec{y}; \tau, 0) &= Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \hat{\phi}(\tau, \vec{x}) \hat{\phi}(0, \vec{y}) \right\} = Z^{-1} \text{Tr} \left\{ \hat{\phi}(0, \vec{y}) e^{-\beta \hat{H}} \hat{\phi}(\tau, \vec{x}) \right\} \\ &= Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \left(e^{\beta \hat{H}} \hat{\phi}(0, \vec{y}) e^{-\beta \hat{H}} \right) \hat{\phi}(\tau, \vec{x}) \right\} \\ &= Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \hat{\phi}(\beta, \vec{y}) \hat{\phi}(\tau, \vec{x}) \right\} \\ &= Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \mathcal{T}_\tau \left(\hat{\phi}(\beta, \vec{y}) \hat{\phi}(\tau, \vec{x}) \right) \right\} \\ &= \left\langle \mathcal{T}_\tau \left(\hat{\phi}(\beta, \vec{y}) \hat{\phi}(\tau, \vec{x}) \right) \right\rangle_\beta = G_B(\vec{x}, \vec{y}; \tau, \beta) \end{aligned}$$

em que usamos a ciclicidade do traço e a relação $\hat{\phi}(\tau, \vec{x}) = e^{\tau\hat{H}}\hat{\phi}(0, \vec{x})e^{-\tau\hat{H}}$ que é a continuação analítica da evolução temporal para operadores de campo na descrição de Heisenberg $\hat{\phi}(t, \vec{x}) = e^{it\hat{H}}\hat{\phi}(0, \vec{x})e^{-it\hat{H}}$. Essa periodicidade da função de Green térmica faz com que a condição de contorno para os campos bosônicos na função de partição seja periódica.

Para férmions, ainda tomando $\tau > 0$:

$$\begin{aligned}
 (G_F)_{\alpha\sigma}(\vec{x}, \vec{y}; \tau, 0) &= Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}} \mathcal{T}_\tau \left(\hat{\psi}_\alpha(\tau, \vec{x}) \hat{\psi}_\sigma^\dagger(0, \vec{y}) \right) \right\} \\
 &= Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}} \hat{\psi}_\alpha(\tau, \vec{x}) \hat{\psi}_\sigma^\dagger(0, \vec{y}) \right\} = Z^{-1} \text{Tr} \left\{ \hat{\psi}_\sigma^\dagger(0, \vec{y}) e^{-\beta\hat{H}} \hat{\psi}_\alpha(\tau, \vec{x}) \right\} \\
 &= Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}} e^{\beta\hat{H}} \hat{\psi}_\sigma^\dagger(0, \vec{y}) e^{-\beta\hat{H}} \hat{\psi}_\alpha(\tau, \vec{x}) \right\} \\
 &= Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}} \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\beta, \vec{y}) \hat{\psi}_\alpha(\tau, \vec{x}) \right\} \\
 &= Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}} \left[-\mathcal{T}_\tau \hat{\psi}_\alpha(\tau, \vec{x}) \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\beta, \vec{y}) \right] \right\} \\
 &= - \left\langle \mathcal{T}_\tau \hat{\psi}_\alpha(\tau, \vec{x}) \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\beta, \vec{y}) \right\rangle = - (G_F)_{\alpha\sigma}(\vec{x}, \vec{y}; \tau, \beta)
 \end{aligned}$$

Portanto, a condição de contorno para os campos fermiônicos é que eles sejam antiperiódicos.

Após essas observações, finalmente escreve-se a função de partição para férmions como integral funcional:

$$Z = \int_{\psi(0, \vec{x}) = -\psi(\beta, \vec{x})} \mathcal{D}(\psi^\dagger) \mathcal{D}\psi \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[\psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \mathcal{H}(\psi^\dagger, \psi) \right] \right\} \quad (\text{C.49})$$

APÊNDICE D

INTEGRAIS GAUSSIANAS

Neste apêndice deseja-se demonstrar algumas integrais gaussianas que são importantes para o formalismo de integrais de trajetória, pois as integrais funcionais são calculadas via discretização, o que resulta em integrais multidimensionais.

D.1 Variáveis Reais

A integral gaussiana unidimensional é:

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{1}{2}ax^2} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{1/2}; \quad a > 0 \quad (\text{D.1})$$

que pode ser demonstrada calculando

$$\begin{aligned} I_1^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy e^{-\frac{1}{2}a(x^2+y^2)} = \int_0^{+\infty} dr \int_0^{2\pi} d\theta r e^{-\frac{1}{2}ar^2} \\ &= 2\pi \frac{1}{a} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}ar^2} d\left(\frac{1}{2}ar^2\right) = \frac{2\pi}{a} \end{aligned}$$

A partir desta, calcula-se a integral gaussiana em n dimensões:

$$I_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n e^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j} x_i a_{ij} x_j} = \int d^n x e^{-\frac{1}{2}x^T A x} \quad (\text{D.2})$$

em que a_{ij} são os elementos da matriz real A assumida simétrica ($A^T = A$) e positiva-definida, ou seja, todos os seus autovalores são positivos. Note-se que, se a matriz A possuir uma parte *antissimétrica*, esta não contribuiria para o expoente, pois $\sum_{i,j} x_i a_{ij} x_j = 0$ se $a_{ij} = -a_{ji}$.

A integral (D.2) é calculada usando um resultado bem conhecido da Álgebra Linear segundo o qual qualquer matriz simétrica real pode ser diagonalizada por uma transformação de similaridade ortogonal¹. Deste modo, existe uma matriz ortogonal O tal que a

¹ Indicamos a seção 4.7 de [44] para uma demonstração desse resultado.

matriz

$$\tilde{A} = OAO^{-1} = OAO^T \quad (\text{D.3})$$

é diagonal; portanto, os elementos de \tilde{A} são os autovalores $\{\alpha_i; i = 1, \dots, n\}$ da matriz A : $(\tilde{A})_{ij} = \alpha_i \delta_{ij}$.

Fazendo a mudança de variáveis

$$\tilde{x} = Ox \quad (\text{D.4})$$

cujo determinante jacobiano é 1 porque O é ortogonal e notando que

$$\tilde{x}^T \tilde{A} \tilde{x} = x^T O^T (OAO^T) Ox = x^T Ax$$

a integral I_n se escreve como:

$$\begin{aligned} I_n &= \int d^n \tilde{x} e^{-\frac{1}{2} \tilde{x}^T \tilde{A} \tilde{x}} = \int d^n \tilde{x} e^{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \tilde{x}_i \alpha_i \tilde{x}_i} = \prod_{i=1}^n \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{x}_i e^{-\frac{1}{2} \alpha_i (\tilde{x}_i)^2} \right] \\ &\stackrel{(\text{D.1})}{=} \prod_{i=1}^n \left(\frac{2\pi}{\alpha_i} \right)^{1/2} = (2\pi)^{n/2} (\det A)^{-1/2} \\ \therefore \int d^n x e^{-\frac{1}{2} x^T A x} &= (2\pi)^{n/2} (\det A)^{-1/2} = (2\pi)^{n/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \text{Tr} (\ln A) \right] \quad (\text{D.5}) \end{aligned}$$

pois o determinante de uma matriz é o produto de seus autovalores². A última igualdade é obtida usando a identidade:

$$\ln (\det A) = \ln \left(\prod_{i=1}^n \alpha_i \right) = \sum_{i=1}^n \ln (\alpha_i) = \text{Tr} (\ln A) \Rightarrow \det A = e^{\text{Tr} (\ln A)} \quad (\text{D.6})$$

D.2 Variáveis Complexas

É conveniente lidar com a generalização de (D.1) para o caso em que as variáveis de integração são complexas:

$$J = \int dz^* dz e^{-az^*z}; \quad a > 0 \quad (\text{D.7})$$

esta integral é resolvida expressando z em termos de suas partes real e imaginária, denotadas respectivamente por x e y :

$$z = x + iy, \quad z^* = x - iy \quad x, y \in \mathbb{R}$$

$$dz^* dz = \left| \det \begin{pmatrix} \frac{\partial z}{\partial x} & \frac{\partial z}{\partial y} \\ \frac{\partial z^*}{\partial x} & \frac{\partial z^*}{\partial y} \end{pmatrix} \right| dx dy = \left| \det \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix} \right| dx dy = 2 dx dy \quad (\text{D.8})$$

² Uma matriz $M = (m_{ij})$ qualquer pode ser escrita como a soma de uma simétrica B e uma antissimétrica C definindo os respectivos elementos de matriz $b_{ij} = \frac{m_{ij} + m_{ji}}{2}$ e $c_{ij} = \frac{m_{ij} - m_{ji}}{2}$. Portanto, se a matriz A não fosse simétrica, seria o determinante de sua parte simétrica que estaria em (D.5).

a integral J , então, se escreve como:

$$J = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy e^{-a(x^2+y^2)} \stackrel{(D.1)}{=} 2 \frac{\pi}{a}$$

$$\therefore \int dz^* dz e^{-az^*z} = \frac{2\pi}{a}; \quad a > 0 \quad (D.9)$$

A integral em n dimensões (D.2) é generalizada:

$$J_n = \int dz_1^* dz_1 \cdots dz_n^* dz_n \exp \left(- \sum_{i,j} z_i^* a_{ij} z_j \right) = \int dz_1^* dz_1 \cdots dz_n^* dz_n \exp (-z^\dagger A z) \quad (D.10)$$

nesta última, z é um vetor coluna com n entradas complexas z_i e A é uma matriz complexa assumida hermitiana ($A^\dagger = A$) e positiva-definida. Sabe-se da Álgebra Linear que uma matriz hermitiana pode ser diagonalizada por uma matriz unitária U . Assim, a matriz

$$\tilde{A} = UAU^{-1} = UAU^\dagger \quad (D.11)$$

é diagonal e seus elementos são os autovalores (reais e positivos) $\{\alpha_i; i = 1, \dots, n\}$ da matriz A .

Fazendo a mudança de variáveis

$$\tilde{z} = Uz \quad (D.12)$$

que deixa invariante a medida de integração em (D.10), pois o módulo do determinante de uma matriz unitária é 1 e usando:

$$\tilde{z}^\dagger \tilde{A} \tilde{z} = z^\dagger U^\dagger (UAU^\dagger) Uz = z^\dagger A z \quad (D.13)$$

escreve-se³:

$$\begin{aligned} J_n &= \int d\tilde{z}_1^* d\tilde{z}_1 \cdots d\tilde{z}_n^* d\tilde{z}_n \exp \left(-\tilde{z}^\dagger \tilde{A} \tilde{z} \right) = \int d\tilde{z}_1^* d\tilde{z}_1 \cdots d\tilde{z}_n^* d\tilde{z}_n \exp \left(- \sum_{i=1}^n \alpha_i \tilde{z}_i^* \tilde{z}_i \right) \\ &= \prod_{i=1}^n \left[\int d\tilde{z}_i^* d\tilde{z}_i \exp \left(-\alpha_i \tilde{z}_i^* \tilde{z}_i \right) \right] \stackrel{(D.9)}{=} \prod_{i=1}^n \left(\frac{2\pi}{\alpha_i} \right) = (2\pi)^n (\det A)^{-1} \end{aligned}$$

$$\therefore \int dz_1^* dz_1 \cdots dz_n^* dz_n \exp (-z^\dagger A z) = (2\pi)^n (\det A)^{-1} = (2\pi)^n (\det A)^{-1} \exp [-\text{Tr} (\ln A)] \quad (D.14)$$

³ Toda matriz complexa pode ser decomposta como a soma de uma hermitiana e uma anti-hermitiana; contudo, a parte anti-hermitiana não contribui para o expoente em (D.10). Portanto, caso a matriz não fosse hermitiana, o determinante em (D.14) seria o da parte hermitiana da matriz A .

D.3 Variáveis de Grassmann

Nesta subseção, o objetivo é deduzir a expressão para integrais gaussianas para variáveis de Grassmann complexas formando uma álgebra de dimensão finita. A generalização para dimensão infinita é o que permitirá o cálculo da integral funcional para variáveis de Grassmann.

Primeiramente, numa álgebra gerada por η^* e η , consideremos a exponencial:

$$\exp(-\eta^*\eta) = 1 - \eta^*\eta \quad (\text{D.15})$$

que é calculada usando a expansão em série de Taylor. Perceba que, devido às relações de anticomutação, a expansão possui apenas termos lineares nos geradores.

A integral gaussiana para variáveis de Grassmann complexas⁴ mais simples é:

$$\int d\eta^* d\eta \exp(-\eta^*\eta) = \int d\eta^* d\eta 1 - \int d\eta^* d\eta \eta^*\eta = \int d\eta^* d\eta \eta\eta^* = 1 \quad (\text{D.16})$$

A fim de generalizar para álgebras de dimensão $2n$, consideremos o caso $n = 2$. A álgebra é definida pelas regras de anticomutação:

$$\{\eta_i, \eta_j\} = \{\eta_i^*, \eta_j^*\} = \{\eta_i, \eta_j^*\} = 0; \quad i, j = 1, 2 \quad (\text{D.17})$$

η passa a ser um vetor coluna com duas entradas:

$$\eta = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \eta^\dagger \eta = \begin{pmatrix} \eta_1^* & \eta_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} = \eta_1^* \eta_1 + \eta_2^* \eta_2 \quad (\text{D.18})$$

e a exponencial:

$$\begin{aligned} \exp(-\eta^\dagger \eta) &= 1 - (\eta_1^* \eta_1 + \eta_2^* \eta_2) + \frac{1}{2} (\eta_1^* \eta_1 + \eta_2^* \eta_2)^2 \\ &= 1 - (\eta_1^* \eta_1 + \eta_2^* \eta_2) + \eta_1 \eta_1^* \eta_2 \eta_2^* \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

Portanto:

$$\int d\eta^\dagger d\eta \exp(-\eta^\dagger \eta) = \int d\eta_1^* d\eta_1 d\eta_2^* d\eta_2 [1 - (\eta_1^* \eta_1 + \eta_2^* \eta_2) + \eta_1 \eta_1^* \eta_2 \eta_2^*] = 1 \quad (\text{D.20})$$

Consideremos, agora, a seguinte mudança de variáveis:

$$\eta = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{pmatrix} = M\theta \quad \eta^* = \begin{pmatrix} \eta_1^* \\ \eta_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{11} & N_{12} \\ N_{21} & N_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1^* \\ \theta_2^* \end{pmatrix} = N\theta^* \quad (\text{D.21})$$

⁴ A integração sobre variáveis de Grassmann é definida no Apêndice B.

e expressemos o produto $\eta_2 \eta_2^* \eta_1 \eta_1^*$ em termos de $\theta_2 \theta_2^* \theta_1 \theta_1^*$:

$$\begin{aligned}
 \eta_2 \eta_2^* \eta_1 \eta_1^* &= (M_{21} \theta_1 + M_{22} \theta_2) (N_{21} \theta_1^* + N_{22} \theta_2^*) (M_{11} \theta_1 + M_{12} \theta_2) (N_{11} \theta_1^* + N_{12} \theta_2^*) \\
 &= (M_{21} \theta_1 + M_{22} \theta_2) [N_{21} \theta_1^* (M_{11} \theta_1 + M_{12} \theta_2) N_{12} \theta_2^* + \\
 &\quad + N_{22} \theta_2^* (M_{11} \theta_1 + M_{12} \theta_2) N_{11} \theta_1^*] \\
 &= M_{21} \theta_1 N_{21} \theta_1^* M_{12} \theta_2 N_{12} \theta_2^* + M_{21} \theta_1 N_{22} \theta_2^* M_{12} \theta_2 N_{11} \theta_1^* + \\
 &\quad + M_{22} \theta_2 N_{21} \theta_1^* M_{11} \theta_1 N_{12} \theta_2^* + M_{22} \theta_2 N_{22} \theta_2^* M_{11} \theta_1 N_{11} \theta_1^* \\
 &= [M_{21} M_{12} N_{21} N_{12} - M_{21} M_{12} N_{22} N_{11}] \theta_2 \theta_2^* \theta_1 \theta_1^* + \\
 &\quad + [-M_{22} M_{11} N_{21} N_{12} + M_{22} M_{11} N_{22} N_{11}] \theta_2 \theta_2^* \theta_1 \theta_1^* \\
 &= [-M_{21} M_{12} (\det N) + M_{22} M_{11} (\det N)] \theta_2 \theta_2^* \theta_1 \theta_1^* \\
 &= (\det M) (\det N) \theta_2 \theta_2^* \theta_1 \theta_1^*
 \end{aligned}$$

$$\therefore \eta_2 \eta_2^* \eta_1 \eta_1^* = (\det MN) \theta_2 \theta_2^* \theta_1 \theta_1^* \quad (\text{D.22})$$

Para avaliar como a medida de integração $d\eta_1^* d\eta_1 d\eta_2^* d\eta_2$ se transforma sob a mudança de variáveis (D.21), usaremos o fato de que a própria definição de integral sobre variáveis de Grassmann fornece:

$$\int d\eta_1^* d\eta_1 d\eta_2^* d\eta_2 \eta_2^* \eta_2 \eta_1^* \eta_1 = 1 = \int d\theta_1^* d\theta_1 d\theta_2^* d\theta_2 \theta_2^* \theta_2 \theta_1^* \theta_1 \quad (\text{D.23})$$

Mas, substituindo (D.22), tem-se:

$$\int d\eta_1^* d\eta_1 d\eta_2^* d\eta_2 (\det MN) \theta_2 \theta_2^* \theta_1 \theta_1^* = \int d\theta_1^* d\theta_1 d\theta_2^* d\theta_2 \theta_2^* \theta_2 \theta_1^* \theta_1 \quad (\text{D.24})$$

de onde se conclui:

$$d\eta_1^* d\eta_1 d\eta_2^* d\eta_2 = (\det MN)^{-1} d\theta_1^* d\theta_1 d\theta_2^* d\theta_2 = (\det MN)^{-1} d\theta^\dagger d\theta \quad (\text{D.25})$$

Finalmente, aplicando a mudança de variáveis (D.21) à integral (D.20) e usando (D.25), encontra-se:

$$1 = \int d\eta^\dagger d\eta \exp(-\eta^\dagger \eta) = (\det MN)^{-1} \int d\theta^\dagger d\theta \exp(-\theta^\dagger N^T M \theta)$$

como $\det(MN) = \det(N^T M)$, a expressão acima fornece, denotando $A = N^T M$:

$$\int d\theta^\dagger d\theta \exp(-\theta^\dagger A \theta) = \det A \quad (\text{D.26})$$

esta é a integral gaussiana desejada para $n = 2$.

A generalização para álgebra com n qualquer é simples. As relações de anticomutação (D.17) ficam:

$$\{\eta_i, \eta_j\} = \{\eta_i^*, \eta_j^*\} = \{\eta_i, \eta_j^*\} = 0; \quad i, j = 1, \dots, n \quad (\text{D.27})$$

a integral (D.20) se torna:

$$I = \int d\eta^\dagger d\eta \exp(-\eta^\dagger \eta) = \int d\eta_1^* d\eta_1 \cdots d\eta_n^* d\eta_n \exp[-(\eta_1^* \eta_1 + \cdots + \eta_n^* \eta_n)] \quad (\text{D.28})$$

claramente vê-se que o único termo da expansão da exponencial que possui contribuição não nula para a integral é o que tem o produto de *todos* os geradores apenas uma vez; explicitamente, o termo é

$$\frac{1}{n!} [-(\eta_1^* \eta_1 + \cdots + \eta_n^* \eta_n)]^n = (-1)^n (\eta_n^* \eta_n \cdots \eta_2^* \eta_2 \eta_1^* \eta_1)$$

pois há $n!$ modos de dispor os n “pares” $\eta_i^* \eta_i$ num produto de n fatores e todos fornecem o mesmo resultado porque (D.27) implica a comutação:

$$[(\eta_i^* \eta_i), (\eta_j^* \eta_j)] = 0$$

com isso, a integral I fica:

$$\begin{aligned} I &= \int d\eta_1^* d\eta_1 \cdots d\eta_n^* d\eta_n (-1)^n (\eta_n^* \eta_n \cdots \eta_2^* \eta_2 \eta_1^* \eta_1) \\ &= \int d\eta_1^* d\eta_1 \cdots d\eta_n^* d\eta_n (-1)^n (-1)^n (\eta_n \eta_n^* \cdots \eta_2 \eta_2^* \eta_1 \eta_1^*) = 1 \\ &\therefore \int d\eta_1^* d\eta_1 \cdots d\eta_n^* d\eta_n \exp(-\eta^\dagger \eta) = 1 \end{aligned} \quad (\text{D.29})$$

Introduzindo a seguinte mudança de variáveis

$$\eta = M\theta \quad \eta^* = N\theta^* \quad (\text{D.30})$$

encontra-se, por exemplo:

$$\begin{aligned} \eta_1 \eta_2 \cdots \eta_n &= \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n \cdots \sum_{j_n=1}^n M_{1j_1} M_{2j_2} \cdots M_{nj_n} \theta_{j_1} \theta_{j_2} \cdots \theta_{j_n} \\ &= \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n \cdots \sum_{j_n=1}^n \varepsilon_{j_1 j_2 \cdots j_n} M_{1j_1} M_{2j_2} \cdots M_{nj_n} \theta_1 \theta_2 \cdots \theta_n \\ &= (\det M) \theta_1 \theta_2 \cdots \theta_n \end{aligned} \quad (\text{D.31})$$

em que $\varepsilon_{j_1 j_2 \cdots j_n}$ é definido por⁵:

$$\varepsilon_{j_1 j_2 \cdots j_n} = \begin{cases} +1 & \text{se } (j_1, j_2, \dots, j_n) \text{ é uma permutação } \textit{par} \text{ de } (1, 2, \dots, n) \\ -1 & \text{se } (j_1, j_2, \dots, j_n) \text{ é uma permutação } \textit{ímpar} \text{ de } (1, 2, \dots, n) \\ 0 & \text{qualquer outro caso} \end{cases} \quad (\text{D.32})$$

⁵ A permutação (j_1, j_2, \dots, j_n) é dita par (ímpar) se pode ser obtida fazendo um número par (ímpar) de trocas entre elementos adjacentes da sequência $(1, 2, \dots, n)$. Por exemplo, a permutação $(2, 1, 3)$ é ímpar e a $(2, 3, 1)$ é par.

e, de modo semelhante:

$$\eta_1^* \eta_2^* \cdots \eta_n^* = (\det N) \theta_1^* \theta_2^* \cdots \theta_n^* \quad (\text{D.33})$$

$$\therefore \eta_n \eta_n^* \cdots \eta_2 \eta_2^* \eta_1 \eta_1^* = (\det MN) \theta_n \theta_n^* \cdots \theta_2 \theta_2^* \theta_1 \theta_1^* \quad (\text{D.34})$$

Usando (D.34) em:

$$\int d\eta_1^* d\eta_1 \cdots d\eta_n^* d\eta_n \eta_n \eta_n^* \cdots \eta_1 \eta_1^* = 1 = \int d\theta_1^* d\theta_1 \cdots d\theta_n^* d\theta_n \theta_n \theta_n^* \cdots \theta_1 \theta_1^* \quad (\text{D.35})$$

encontra-se

$$d\eta_1^* d\eta_1 \cdots d\eta_n^* d\eta_n = (\det MN)^{-1} d\theta_1^* d\theta_1 \cdots d\theta_n^* d\theta_n \quad (\text{D.36})$$

Aplicando a mudança de variáveis (D.30) em (D.29) e usando (D.36), escreve-se:

$$1 = \int d\eta_1^* d\eta_1 \cdots d\eta_n^* d\eta_n \exp(-\eta^\dagger \eta) = (\det MN)^{-1} \int d\theta_1^* d\theta_1 \cdots d\theta_n^* d\theta_n \exp(-\theta^\dagger N^T M \theta) \quad (\text{D.37})$$

Finalmente, definindo $A = N^T M$ e notando que $(\det MN) = (\det N^T M)$, chega-se à expressão para a integral gaussiana n-dimensional para variáveis de Grassmann complexas:

$$\int d\theta^\dagger d\theta \exp(-\theta^\dagger A \theta) = \int d\theta_1^* d\theta_1 \cdots d\theta_n^* d\theta_n \exp(-\theta^\dagger A \theta) = \det A \quad (\text{D.38})$$

que é a expressão desejada.

O caso em que a dimensão é infinita é obtido fazendo o índice dos geradores ser contínuo. Dessa forma, a expressão acima é generalizada, tornando-se uma integral funcional:

$$\int \mathcal{D}\theta^\dagger(x) \mathcal{D}\theta(x) \exp\left(-\int dx dy \theta^\dagger(x) A(x, y) \theta(y)\right) = \det A \quad (\text{D.39})$$

note-se que a medida de integração funcional é entendida como o limite:

$$\int \mathcal{D}\theta^\dagger(x) \mathcal{D}\theta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int d\theta_1^* d\theta_1 \cdots d\theta_n^* d\theta_n \quad (\text{D.40})$$

De fato, é a expressão (D.39) que se usa para calcular as integrais funcionais gaussianas sobre campos fermiônicos no Capítulo 4.

APÊNDICE E

MÉTODOS DAS DIFERENÇAS FINITAS

Estamos particularmente interessados em resolver numericamente o sistema de equações (4.59) pois assim se obtém a evolução temporal dos parâmetros de ordem durante a termalização do sistema; para isso, o método das diferenças finitas descrito a seguir é utilizado.

Como caso mais simples, considere uma função de uma única variável $f(\lambda)$ definida num intervalo fechado $[\alpha, \beta]$ e suponha que desejamos obtê-la numericamente (resolvendo computacionalmente uma equação diferencial, por exemplo).

A primeira coisa a se fazer é *discretizar o seu intervalo de definição*, ou seja, faz-se uma partição de seu domínio; é mais simples dividir o intervalo em N subintervalos de mesma amplitude $\Delta\lambda$:

$$\Delta\lambda = \frac{\beta - \alpha}{N} \Rightarrow \lambda_n = \alpha + n\Delta\lambda; \quad n = 0, 1, \dots, N \quad (\text{E.1})$$

com isso, a função é *numericamente* entendida como uma lista de $N + 1$ valores f_n :

$$f(x) \equiv \{f_n \mid f_n = f(\lambda_n), n = 0, \dots, N\} \quad (\text{E.2})$$

o que será denotado por $f_n \equiv f(\lambda)$.

Após isso, deve-se definir numericamente as derivadas da função, pois estamos interessados em resolver uma equação diferencial. Algumas formas de definir a primeira derivada são:

$$f'_+(\lambda) \equiv \frac{f(\lambda + \Delta\lambda) - f(\lambda)}{\Delta\lambda} \quad (\text{E.3})$$

$$f'_-(\lambda) \equiv \frac{f(\lambda) - f(\lambda - \Delta\lambda)}{\Delta\lambda} \quad (\text{E.4})$$

naturalmente motivadas pelas definições das derivadas à direita e à esquerda, respectivamente; note-se que $\Delta\lambda > 0$. A partir destas, é definida a segunda derivada:

$$f''(\lambda) \equiv \frac{f'_+(\lambda) - f'_-(\lambda)}{\Delta\lambda} = \frac{f(\lambda + \Delta\lambda) + f(\lambda - \Delta\lambda) - 2f(\lambda)}{(\Delta\lambda)^2} \quad (\text{E.5})$$

como as equações que desejamos resolver são de segunda ordem, não precisamos definir derivadas superiores.

Neste trabalho, queremos resolver o sistema de equações GLL (4.59); cada uma delas pode ser escrita na forma:

$$\frac{\partial \Theta_a}{\partial \tilde{t}}(\tilde{t}, \vec{r}) = \kappa_a \tilde{\nabla}^2 \Theta_a(\tilde{t}, \vec{r}) - \mathcal{F}_a(\phi(\tilde{t}, \vec{r}), \tilde{\sigma}(\tilde{t}, \vec{r})) + \tilde{\xi}_a(\tilde{t}, \vec{r}); \quad a = \phi, \tilde{\sigma} \quad (\text{E.6})$$

em que a identifica o campo ϕ ou $\tilde{\sigma}$:

$$\Theta_\phi \equiv \phi \quad \Theta_{\tilde{\sigma}} \equiv \tilde{\sigma}$$

portanto, devemos definir o método das diferenças finitas para funções de várias variáveis. Por simplicidade, neste capítulo será omitido o símbolo \sim para denotar as grandezas adimensionalizadas.

O domínio dos campos é particionado segundo uma rede anisotrópica, pois direção temporal é discretizada em N_t subintervalos de tamanho Δt enquanto que as direções espaciais são discretizadas segundo uma rede cúbica com N_e pontos em cada direção e espaçamento h :

$$t = n\Delta t \quad n = 0, 1, \dots, N_t \quad (\text{E.7})$$

$$x = ih \quad y = jh \quad z = kh \quad i, j, k = 0, 1, \dots, N_e - 1 \quad (\text{E.8})$$

com isso, os campos são numericamente definidos como $(\Theta_a)_{i,j,k}^n \equiv \Theta_a(t, \vec{r})$, explicitamente:

$$\sigma_{i,j,k}^n \equiv \sigma(t, \vec{r}) \quad \phi_{i,j,k}^n \equiv \phi(t, \vec{r}) \quad (\text{E.9})$$

Para a derivada temporal, é escolhida a definição que generaliza (E.3):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Theta_a}{\partial t}(t, \vec{r}) &\equiv \frac{\Theta_a(t + \Delta t, \vec{r}) - \Theta_a(t, \vec{r})}{\Delta t} \\ \therefore \left(\frac{\partial \Theta_a}{\partial t} \right)_{i,j,k}^n &\equiv \frac{(\Theta_a)_{i,j,k}^{n+1} - (\Theta_a)_{i,j,k}^n}{\Delta t} \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

e o laplaciano segue (E.5):

$$\begin{aligned} \nabla^2 \Theta_a(t, \vec{r}) &\equiv \frac{\Theta_a(t, x+h, y, z) + \Theta_a(t, x-h, y, z) - 2\Theta_a(t, x, y, z)}{h^2} + \\ &+ \frac{\Theta_a(t, x, y+h, z) + \Theta_a(t, x, y-h, z) - 2\Theta_a(t, x, y, z)}{h^2} + \\ &+ \frac{\Theta_a(t, x, y, z+h) + \Theta_a(t, x, y, z-h) - 2\Theta_a(t, x, y, z)}{h^2} \\ (\nabla^2 \Theta_a)_{i,j,k}^n &\equiv \frac{1}{h^2} \left[(\Theta_a)_{i+1,j,k}^n + (\Theta_a)_{i-1,j,k}^n + (\Theta_a)_{i,j+1,k}^n + (\Theta_a)_{i,j-1,k}^n + \right. \\ &\left. + (\Theta_a)_{i,j,k+1}^n + (\Theta_a)_{i,j,k-1}^n - 6(\Theta_a)_{i,j,k}^n \right] \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

REFERÊNCIAS

- 1 CHENG P. T. LI, L. F. *Gauge theory of elementary particles physics*. New York: Oxford University Press, 1984.
- 2 MUTA, T. *Foundations of Quantum Chromodynamics*. Singapore: World Scientific, 2010.
- 3 KOGUT, J. B.; STEPHANOV, M. A. *The Phases of Quantum Chromodynamics: From confinement to extreme environments*. New York: Cambridge University Press, 2004.
- 4 SHURYAK, E. V. *The QCD vacuum, hadrons and superdense matter*. Singapore: World Scientific, 2004.
- 5 MONTVAY, I.; MÜNSTER, G. *Quantum Fields on a Lattice*. New York: Cambridge University Press, 1994.
- 6 DÜRR, S. et al. Ab initio determination of light hadron masses. *Science*, **322**, n. 5905, p. 1224–1227, (2008).
- 7 KAPUSTA, J. I.; GALE, C. *Finite-Temperature Field Theory Principles and Applications*. New York: Cambridge University Press, 2006.
- 8 CHENG, M. et al. QCD equation of state with almost physical quark masses. *Phys. Rev. D*, **77**, p. 014511, (2008).
- 9 DETAR, C. E.; HELLER, U. M. QCD thermodynamics from the lattice. *Eur. Phys. J. A*, **41**, p. 405–437, (2009).
- 10 SOUZA, R. D. de. *Produção Térmica de Partículas em Colisões Nucleares Relativísticas*. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, 2008.
- 11 WONG, C.-Y. *Introduction to high-energy heavy ion collisions*. Singapore: World Scientific, 1994.
- 12 RATTI, C.; THALER, M. A.; WEISE, W. Phases of QCD: Lattice thermodynamics and a field theoretical model. *Phys. Rev. D*, **73**, p. 014019, (2006).
- 13 CHAIKIN, P. M.; LUBENSKY, T. C. *Principles of condensed matter physics*. New York: Cambridge University Press, 1995.

- 14 GOLDENFELD, N. *Lectures on phase transitions and the renormalization group*. USA: Addison-Wesley, 1992.
- 15 FRAGA, E.; KREIN, G. Can dissipation prevent explosive decomposition in high-energy heavy ion collisions? *Physics Letters B*, **614**, p. 181 – 186, (2005).
- 16 NAHRGANG, M.; LEUPOLD, S.; BLEICHER, M. Equilibration and relaxation times at the chiral phase transition including reheating. *Physics Letters B*, **711**, p. 109 – 116, (2012).
- 17 SINGH, A.; PURI, S.; MISHRA, H. Domain growth in chiral phase transitions. *Nuclear Physics A*, **864**, p. 176 – 202, (2011).
- 18 SINGH, A.; PURI, S.; MISHRA, H. Kinetics of phase transitions in quark matter. *Europhysics Letters*, **102**, p. 52001, (2013).
- 19 ATTANASIO, F. *Numerical study of the Ginzburg-Landau-Langevin equation: Coherent structures and noise perturbation theory*. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Física Teórica, Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", 2013.
- 20 GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Elementary Particles*. New York: John Wiley, 1987.
- 21 ALGARIN, F. E. S. *Dressed Perturbation Theory for the Quark Propagator*. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Física Teórica, Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", 2013.
- 22 NAMBU, Y.; JONA-LASINIO, G. Dynamical model of elementary particles based on an analogy with superconductivity. I. *Phys. Rev.*, **122**, p. 345–358, (1961).
- 23 NAMBU, Y.; JONA-LASINIO, G. Dynamical model of elementary particles based on an analogy with superconductivity. II. *Phys. Rev.*, **124**, p. 246–254, (1961).
- 24 AITCHISON, I. J. R.; HEY, A. J. G. *Gauge Theories in Particle Physics vol.2*. Londres: IOP, 2004.
- 25 BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Microscopic theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, **106**, p. 162–164, (1957).
- 26 GOLDSTONE, J. Field theories with "superconductor"solutions. *Il Nuovo Cimento*, **XIX**, (1961).
- 27 GOLDSTONE, J.; SALAM, A.; WEINBERG, S. Broken symmetries. *Phys. Rev.*, **127**, p. 965–970, (1962).
- 28 SVETITSKY, B. Symmetry aspects of finite-temperature confinement transitions. *Physics Reports*, **132**, n. 1, p. 1 – 53, (1986).
- 29 CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. Second edition. Singapore: John Wiley, 1985.
- 30 BELLAC, M. L.; MORTESSAGNE, F.; BATROUNI, G. G. *Equilibrium and non-equilibrium Statistical Thermodynamics*. New York: Cambridge University Press, 2004.

- 31 COHEN-TANNOUDJU, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum Mechanics*. Singapoure: John Wiley, 2005.
- 32 BELLAC, M. L. *Thermal Field theory*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- 33 GREINER, W.; REINHARDT, J. *Field Quantization*. New York: Springer, 1996.
- 34 DYSON, F. J.; LENARD, A. Stability of matter I. *Journal of Mathematical Physics*, **8**, p. 423, (1967).
- 35 PEREIRA, A. O. *Transições de fase dinâmicas, parâmetros de ordem conservados e não conservados e a transição de desconfinamento na QCD*. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Física Teórica, Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", 2009.
- 36 MCLERRAN, L. D.; SVETITSKY, B. Quark liberation at high temperature: A monte carlo study of SU(2) gauge theory. *Phys. Rev. D*, **24**, (1981).
- 37 SILVESTER, J. R. Determinants of block matrices. *The Mathematical Gazette*, **84**, n. 501, p. pp. 460–467, (2000).
- 38 FUKUSHIMA, K. Chiral effective model with the polyakov loop. *Physics Letters B*, **591**, n. 3–4, p. 277 – 284, (2004).
- 39 MINTZ, B. W. et al. Phase diagram and surface tension in the three-flavor polyakov-quark-meson model. *Phys. Rev. D*, **87**, p. 036004, (2013).
- 40 KARSCH, F.; LAERMANN, E.; PEIKERT, A. Quark mass and flavour dependence of the QCD phase transition. *Nuclear Physics B*, **605**, p. 579 – 599, (2001).
- 41 FRAGA, E. S.; KREIN, G.; MIZHER, A. J. Langevin dynamics of the pure SU(2) deconfining transition. *Phys. Rev. D*, **76**, p. 034501, (2007).
- 42 SCAVENIUS, O.; DUMITRU, A.; LENAGHAN, J. T. The K/ π ratio from condensed polyakov loops. *Phys. Rev. C*, **66**, p. 034903, (2002).
- 43 PINTO, M. B.; KOCH, V.; RANDRUP, J. Surface tension of quark matter in a geometrical approach. *Phys. Rev. C*, **86**, p. 025203, (2012).
- 44 BYRON, J. F. W.; FULLER, R. W. *Mathematics of classical and quantum physics*. New York: Dover, 1992.

ÍNDICE

- aproximação de campo médio, 50
- bárion, 2
- condensado quirial, 45
- confinamento, 5
- cor, 5
- Eightfold-Way, 2
- energia livre de Helmholtz, 17, 22, 35
- ensemble
 - canônico, 21
 - grande canônico, 22
- frequências de Matsubara, 52
- função de partição, 20
 - e energia livre de Landau, 40
 - ensemble canônico, 21
 - ensemble grande canônico, 22
 - integral funcional, 25
 - para campo escalar, 29
 - para campo férmionico, 29
- Goldstone
 - bóson de, 12
 - Teorema de, 12
- grande potencial termodinâmico, 17, 23
- grandeza
 - extensiva, 30
 - intensiva, 30
 - macroscópica, 16
- hádrons, 2
- méson, 2
- macroestado, 17, 18
- microestado, 18
- núcleon, 1
- parâmetro de ordem, 33
- Polyakov
 - loop de, 14, 15, 46
- quarks
 - modelo de, 3
 - sabores, 3, 5
- quenched, 42, 43, 60
- simetria, 7
 - exata, 9
 - quebra dinâmica de, 12
 - quebra espontânea de, 33, 35, 39, 67, 72
- temperatura crítica, 33
- termalização, 40, 41, 44
- valor médio termodinâmico, 23
- variáveis termodinâmicas, 16