



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.005/2009

Transições de fase dinâmicas, parâmetros de ordem conservados e não conservados e a transição de desconfinamento na QCD

Aline Olimpio Pereira

Orientador

Prof. Dr. Gastão Inácio Krein

Abril de 2009

Agradecimentos

Primeiramente gostaria de agradecer ao meu orientador, Prof. Gastão Krein por todos esses anos de orientação e amizade.

Agradeço também aos meus familiares e amigos, que cada um a sua maneira contribuiu diretamente para a realização de mais essa conquista.

Por fim, agradeço à FAPESP pelo suporte financeiro.

Resumo

Estudamos a evolução temporal de parâmetros de ordem conservados e não conservados empregando o formalismo das equações cinéticas semi-fenomenológicas de Ginzburg-Landau-Langevin da teoria clássica das transições de fase dinâmicas. Apresentamos uma aplicação do formalismo ao problema do desconfinamento de quarks e glúons na QCD, em que o parâmetro de ordem conservado é a densidade bariônica e o parâmetro de ordem não conservado é o *loop* de Polyakov. As equações cinéticas são resolvidas numericamente empregando um esquema semi-implícito no tempo e um método de diferenças finitas com transformada de Fourier rápida para as coordenadas espaciais. Resultados de simulações numéricas são apresentados para valores médios dos parâmetros de ordem e para as funções de estrutura.

Palavras Chaves: Fenômenos Críticos; Transições de Fase Dinâmicas; Cromodinâmica Quântica; Desconfinamento de Quarks e Glúons; Simulações Numéricas

Áreas do conhecimento: Física das Partículas Elementares e Campos; Simulações Numéricas

Abstract

We study the time evolution of conserved and nonconserved order parameters employing the formalism of the semiphenomenological Ginzburg-Landau-Langevin kinetic equations of the classical theory of dynamical phase transitions. We present an application of the formalism to the deconfinement problem of quarks and gluons in QCD, where the conserved order parameter is the baryon density and the non-conserved order parameter is the Polyakov loop. The kinetic equations are solved numerically employing a semi-implicit scheme for the time variable and a finite-difference method with fast Fourier transform for the space coordinates. Results of the numerical simulations are presented for the average values and structure functions of the order parameters.

Índice

1	Introdução	1
2	Fenômenos Críticos, Nucleação e Decomposição Espinodal	6
2.1	Fenômenos críticos	6
2.2	Modelos estocásticos	11
2.2.1	Modelo A: Sistema sem leis de conservação	11
2.2.2	Modelo B: Sistema com leis de conservação	13
2.2.3	Modelo C: Acoplamento entre parâmetros de ordem conservado e não conservado	15
2.3	Nucleação	15
2.4	Decomposição Espinodal	17
2.5	A função de estrutura e o relaxamento ao equilíbrio	22
3	Transições de Fase na QCD	25
3.1	Diagrama de fases da QCD	25
3.2	Colisões de íons pesados relativísticos	30
3.3	Transição de desconfinamento na QCD: Parâmetros de ordem	32
3.3.1	<i>Loop</i> de Polyakov	33
3.3.2	Um modelo para a energia livre de loops de Polyakov	38
3.3.3	Dinâmica da densidade bariônica próxima ao ponto crítico	41
3.3.4	Acoplamento entre <i>loop</i> de Polyakov e a densidade bariônica	44
4	Análise Numérica e Resultados de Simulações	46
4.1	Método das diferenças finitas	46
4.1.1	Equação de Ginzburg-Landau	47
4.1.2	Equação de Cahn-Hilliard	50
4.2	Resultados das simulações numéricas	52
4.2.1	Resultados para a dinâmica do <i>Loop</i> de Polyakov	54
4.2.2	Resultados para a dinâmica da densidade bariônica	59
4.2.3	Dinâmica acoplada do <i>loop</i> de Polyakov e da densidade bariônica	63

5	Conclusões e Perspectivas	67
A	<i>Coarse-graining</i>	71
B	Função de Estrutura: Estática e Dinâmica	73
C	Efeitos de Memória	81
C.1	Equação de Ginzburg-Landau	81
C.2	Equação de Cahn-Hilliard	82
	Referências	84

Capítulo 1

Introdução

A cromodinâmica quântica (QCD) [1] é a teoria fundamental das interações fortes, e faz parte do Modelo Padrão das Partículas Elementares e Interações. Esta é uma teoria de gauge local não abeliana $SU(3)$ na qual os graus de liberdade básicos são *quarks* de spin $1/2$ e *glúons* de spin 1 . Os quarks aparecem na representação 3-dimensional (fundamental) do grupo de gauge com cargas (ou cores) *vermelho*, *verde* e *azul*, e os glúons na representação 8-dimensional (adjunta) do grupo de gauge. Como uma teoria fundamental, a QCD deve ser capaz de descrever todos os aspectos da estrutura e das interações hadrônicas. Particularmente, espera-se que a partir da QCD seja possível descrever as propriedades da matéria hadrônica em condições extremas de temperatura e densidade. Este tipo de matéria estava presente nos primeiros instantes do universo, e atualmente é encontrada no interior de objetos estelares superdensos, e pode ser reproduzida em laboratório através de experimentos com colisões de íons pesados a altas energias. De particular interesse atual, tanto sob o ponto de vista do entendimento dos próprios sistemas físicos em estudo, como também para um melhor entendimento da QCD, são as mudanças de fase que podem ocorrer num sistema sob condições extremas de temperatura e densidade.

Para o estudo de sistemas hadrônicos a temperaturas muito maiores que a escala típica da QCD, $\Lambda_{\text{QCD}} \sim 200 \text{ MeV}$, é possível empregar os tradicionais e sistemáticos métodos da teoria de perturbação da teoria quântica de campos, baseados numa expansão na constante de acoplamento. Já para o estudo da estrutura e interações hadrônicas a baixas energias, como também de transições de fase, não podemos utilizar esses métodos perturbativos. Sistemas em que a densidade bariônica ρ_B é muito maior que a densidade normal da matéria estável no universo, $\rho_0 = 0.17 \text{ fm}^{-3}$, também podem ser tratados com métodos perturbativos, no entanto, os sistemas com $\rho_B \simeq \rho_0$ não são tratáveis com esses métodos. O que permite empregar a teoria de perturbação a altas temperaturas e densidades é a propriedade de *liberdade assín-*

tótica da QCD, a qual prediz que a interação entre quarks e glúons diminui a altas energias ou a curtas distâncias [2], situações essas presentes em sistemas hadrônicos a altas energias de excitação.

A única maneira conhecida para lidar com fenômenos não perturbativos da QCD a partir de primeiros princípios, de maneira sistemática e controlável, é o método da *QCD na rede* [3]. A formulação tradicional da QCD na rede é desenvolvida em termos de um formalismo Lagrangiano, através de integrais funcionais continuadas analiticamente para o espaço-tempo Euclidiano. A continuação analítica para o espaço Euclidiano torna a função geratriz da teoria quântica de campos uma quantidade análoga à função de partição da Mecânica Estatística clássica, com uma ação positivo-definida. As integrais funcionais são então discretizadas numa rede de espaço-tempo Euclidiana, tornando a QCD uma teoria com um número finito de graus de liberdade. Com isso, obtém-se uma teoria com um número finito de graus de liberdade, similar em muitos aspectos a um problema de spins clássicos, para a qual pode-se empregar os métodos tradicionais de Monte Carlo da Mecânica Estatística [4].

Em certos limites não físicos a QCD apresenta transições de fase bem estabelecidas [5]. No limite em que a massa dos quarks é infinitamente grande, a transição de desconfinamento pode ser descrita como sendo uma transição de fase com um parâmetro de ordem bem definido. Já para o limite de massas nulas, a transição quiral também pode ser caracterizada por um parâmetro de ordem. Para valores físicos das massas dos quarks, da ordem de 10 MeV para os quarks u e d e 150 MeV para o quark s , as simulações de QCD na rede sugerem que nem a transição de desconfinamento nem a quiral ocorrem no sentido de apresentarem singularidades termodinâmicas – a Ref. [6] apresenta uma revisão relativamente recente sobre o assunto. O estudo das transições de fase a temperatura finita na QCD através de simulações de QCD na rede tem se limitado, na grande maioria dos casos, às propriedades de equilíbrio do sistema. Entretanto, em sistemas reais como nas colisões de íons pesados, estas transições são na verdade governadas por uma dinâmica, ou seja, possíveis estados de equilíbrio são alcançados ao longo de uma evolução temporal através de processos fora do equilíbrio. Agora, mesmo que uma transição de fase propriamente dita não possa ser caracterizada, no sentido de que um estado de equilíbrio nunca seja alcançado, permanece a questão se podemos esperar consequências observacionais remanescentes de uma conversão de fase devido a efeitos fora do equilíbrio. Os efeitos dinâmicos provavelmente não são importantes no universo primitivo, já que o processo de resfriamento, determinado pela constante de *Hubble*, é muito lento em comparação à escala de tempo típica das interações fortes, 10^{-23} segundos. No entanto, em experimentos com colisões de íons pesados rela-

tivísticos ocorre um rápido aquecimento do sistema, onde os hádrons dos núcleos perdem sua individualidade com a ocorrência de uma possível conversão para uma fase de quarks e glúons desconfiados, seguindo-se então de um resfriamento do sistema. Essa conversão de fase provavelmente se dá através de processos fora do equilíbrio, e assim, podemos esperar alguma influência desses processos nas observações experimentais.

Uma alternativa [7, 8] às simulações de QCD na rede é uma descrição através de equações semi-fenomenológicas do tipo Ginzburg-Landau-Langevin, amplamente empregadas em problemas da Física da Matéria Condensada [9]. O uso de modelos baseados nessas equações semi-fenomenológicas se apoia na impossibilidade prática de se obter uma descrição microscópica detalhada do processo da conversão de fases numa colisão de íons pesados através do emprego dos graus de liberdade de quarks e glúons ao nível da Lagrangiana da QCD. Assim, o foco passa a ser um conjunto pequeno de variáveis semi-macroscópicas, denominados parâmetros de ordem, que, em princípio, podem ser obtidos a partir de técnicas de *coarse-graining*, em que graus de liberdade microscópicos da teoria fundamental são *integrados* em favor dessas variáveis cuja dinâmica é “lenta” em comparação aos graus de liberdade microscópicos remanescentes. As equações de movimento para os parâmetros de ordem são descritas por modelos estocásticos em que os efeitos das variáveis microscópicas remanescentes são efetivamente levados em conta através de forças randômicas. Em geral, um parâmetro de ordem pode ser conservado ou não conservado durante a sua evolução no tempo. Tradicionalmente, em problemas da Física da Matéria Condensada [9], a evolução temporal de um parâmetro de ordem conservado é descrita pela equação de Cahn-Hilliard, enquanto que para um parâmetro de ordem não conservado a equação dinâmica é a de Ginzburg-Landau.

A presente dissertação tem como objetivo estudar o problema da evolução temporal de parâmetros de ordem conservados e não conservados associados à transição de desconfinamento na QCD. O parâmetro de ordem para o caso da equação de Ginzburg-Landau estará associado ao traço do loop de Polyakov, enquanto que para a equação de Cahn-Hilliard este estará associado a densidade bariônica. Um problema interessante neste contexto é a descrição da dinâmica quando há acoplamento entre esses parâmetros de ordem [10]. Particular interessante na QCD é a influência de uma carga estritamente conservada, como a carga bariônica (integral da densidade bariônica) na dinâmica do parâmetro não conservado, de maneira similar ao acoplamento da densidade bariônica com o parâmetro de ordem associado à transição quiral [11].

O acoplamento dos parâmetros de ordem relacionados ao *loop* de Polyakov e a densidade bariônica é de particular interesse no contexto dos esforços experimen-

tais que visam detetar sinais sobre a transição de fase da QCD. Tanto argumentos teóricos como simulações de QCD na rede sugerem a existência de um ponto crítico no diagrama de fases da QCD. A uma temperatura e densidade apropriadas, a matéria pode formar uma fase mista em que gotas de plasma (matéria desconfinada) se encontram em equilíbrio com um fluido hadrônico (matéria confinada). Numa eventual possibilidade de que uma fase mista dessa natureza seja formada em colisões de íons pesados a altas energias, essa fase deve produzir flutuações observáveis. Através do estudo dessas flutuações como função de parâmetros de controle, como a energia de colisão, é possível obter informações sobre o diagrama de fases da QCD [12, 13]. Em particular, à medida que o sistema se hadroniza a fase mista pode produzir flutuações extraordinárias de número bariônico [14, 15, 16]. Flutuações de quantidades conservadas, como da carga elétrica, número bariônico e estranheza totais são observáveis ideais devido ao fato de que leis de conservação limitam a dissipação que essas cargas sofrem no processo de hadronização.

Nesse ponto é importante chamar à atenção o escopo limitado do presente estudo. Apesar de mencionarmos em vários momentos nessa dissertação que o nosso estudo aqui seja possivelmente útil para o entendimento da transição de desconfinamento no contexto das colisões de íons pesados, notamos que a situação experimental é muito mais complexa do que os modelos empregados aqui sugerem. Inicialmente, notamos que uma eventual mudança de fase deve ocorrer numa colisão dessas sobre uma região *finita* do espaço. Também, para colisões centrais, a mudança de fases provavelmente ocorre na região central desse volume finito, região onde as mais altas densidades de energia são depositadas na colisão. Ainda mais, numa situação realista, o sistema se expande e há escoamento da matéria, isto é, equações hidrodinâmicas, além das equações de Ginzburg-Landau, devem ser consideradas. Em uma situação realista como a descrita, muito provavelmente outros métodos numéricos, que não empregam condições de contorno periódicas e transformadas de Fourier, devem ser considerados. Recentemente, em um estudo exploratório, empregamos [17] o *método dos elementos finitos* [18] para a equação de Ginzburg-Landau para descrever uma conversão de fase num volume finito. Na presente dissertação *não* vamos considerar esse método, nem vamos investigar transições de fase em volumes finitos. Por outro lado, mesmo em vista dessas limitações, o presente estudo serve os propósitos de obter um melhor entendimento da dinâmica do acoplamento de parâmetros de ordem conservado e não conservado no contexto da transição de desconfinamento da QCD.

Essa dissertação está organizada da seguinte forma. No Capítulo 2 apresentamos uma breve revisão sobre fenômenos críticos, dando ênfase aos aspectos dinâmicos desses fenômenos. Discutimos alguns dos modelos dinâmicos fenomenológicos per-

tencentos ao esquema de classificação de Hohenberg e Halperin. Discutimos também os processos de nucleação e decomposição espinodal. A seguir, no Capítulo 3, apresentamos uma breve revisão sobre a transição de desconfinamento na QCD, sua relação com o plasma de quarks e glúons, e sua possível produção em experimentos com colisões de íons pesados a altas energias. Também apresentamos uma discussão sobre os parâmetros de ordem que podem ser empregados no estudo da transição de fase de desconfinamento na QCD, e apresentamos os modelos que serão empregados nessa dissertação para discutir a transição de desconfinamento na QCD. No Capítulo 4 apresentamos uma discussão sobre os métodos numéricos empregados para resolver as equações de Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard acopladas, e apresentamos os resultados das simulações efetuadas. Finalmente, no Capítulo 5, apresentamos as Conclusões e Perspectivas Futuras. A dissertação conta também com dois Apêndices. No apêndice A, discutiremos uma técnica de *coarse-graining* usualmente empregada na construção de modelos fenomenológicos para o estudo de transições de fase. No Apêndice B apresentamos um método para incluir efeitos de memória nas equações de Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard.

Capítulo 2

Fenômenos Críticos, Nucleação e Decomposição Espinodal

Neste capítulo vamos apresentar uma breve revisão sobre fenômenos críticos, dando ênfase aos aspectos dinâmicos desses fenômenos. Vamos discutir alguns dos modelos dinâmicos fenomenológicos pertencentes ao esquema de classificação de Hohenberg e Halperin [10]. Vamos discutir os processos de nucleação e decomposição espinodal, importantes no estudo do processo de restabelecimento do equilíbrio termodinâmico de um sistema após a variação muito rápida de uma variável termodinâmica externa ao sistema, como a temperatura – quando há um decréscimo acentuado e muito rápido da temperatura do sistema, diz-se que houve um *quench* de temperatura. Vamos também apresentar uma breve revisão sobre os processos de espalhamento de raios-X e de nêutrons, a partir dos quais é possível extrair informações experimentais sobre a dinâmica de uma transição de fase em sistemas de matéria condensada. Uma das quantidades que podem ser medidas experimentalmente através desses processos é a função de estrutura, que é a transformada de Fourier da função de correlação. Nestas discussões tomamos como referências principais as Refs. [9, 10].

2.1 Fenômenos críticos

Vamos iniciar a discussão considerando o diagrama de fases (muito simplificado) da água no plano pressão-temperatura (P - T), Figura 2.1. Nesse diagrama temos as três fases mais conhecidas da água separadas por linhas conhecidas como linhas de *coexistência de fases*. As linhas de coexistência indicam os valores de pressão e temperatura para o qual as fases coexistem. Note que, em um único ponto, ocorre o cruzamento entre essas linhas. Esse cruzamento determina o *ponto triplo*, ou seja, o único ponto onde as três fases do sistema coexistem. A linha de coexistência entre as fases líquida e gasosa apresenta um final bem determinado, a partir do qual, não se pode mais distinguir entre as duas fases. Esse ponto final é conhecido como

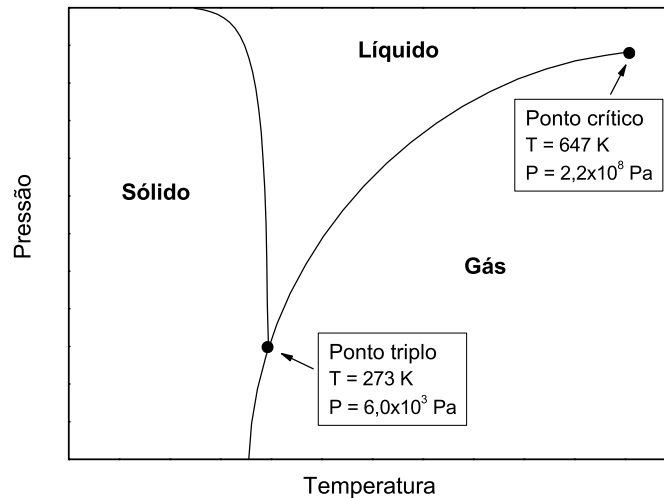


Figura 2.1: Diagrama de fases da água.

ponto crítico. Nas proximidades de um ponto crítico, as propriedades dinâmicas e estáticas de um sistema apresentam uma série de anomalias, que são o foco de estudo dos fenômenos críticos. Podemos classificar os fenômenos críticos em *estáticos* e *dinâmicos*. Os fenômenos estáticos estão relacionados às propriedades de equilíbrio do sistema. Portanto, seu estudo se baseia nas conseqüências sobre a distribuição de probabilidade de equilíbrio térmico e das configurações que caracterizam o estado do sistema. Desta maneira, ao estudarmos fenômenos críticos estáticos nos deparamos com um problema estatístico, ou seja, devemos contar as configurações do sistema. Já para os fenômenos dinâmicos, estamos interessados em processos dependentes do tempo e necessitamos conhecer a evolução temporal das configurações do sistema. Para isso, precisamos saber como as quantidades físicas mudam na presença de perturbações externas dependentes do tempo e como a distribuição de equilíbrio é alcançada. Assim, ao estudarmos fenômenos críticos dinâmicos, estamos principalmente interessados nas variações temporais das flutuações do parâmetro de ordem em grandes escalas, distâncias maiores que o comprimento de correlação do material, e de outras quantidades físicas que possuem uma dinâmica “lenta”.

Para entender melhor essa dinâmica “lenta”, vamos considerar um sistema de spins a uma temperatura muito alta $T \gg T_c$ e magnetização nula. Nessas condições o sistema se encontra na fase desordenada, na qual os spins estão desalinhados. Imaginemos agora que, *repentinamente*, a temperatura do sistema seja baixada para

$T \ll T_c$. Através desse processo de resfriamento rápido, conhecido como *quench* de temperatura, a dinâmica do sistema descreverá um processo de reordenamento do estado inicial, ou seja, os spins iniciam um processo de alinhamento buscando minimizar a energia do sistema. Esse processo de reordenamento é conhecido como dinâmica de ordenamento. A dinâmica de ordenamento desse sistema de spins se dá através da formação e do crescimento de domínios, regiões de spins alinhados com magnetização não nula. Como o estado inicial do sistema é desordenado, os domínios se encontram imersos num mar de magnetização nula. A presença deste mar faz com que a dinâmica de crescimento dos domínios seja lenta, resultando numa dinâmica lenta para a magnetização.

A dinâmica de um sistema macroscópico é consequência de sua dinâmica microscópica. No entanto, somente em situações muito raras é possível obter uma equação de movimento para o parâmetro de ordem a partir de um modelo envolvendo os graus de liberdade microscópicos. Em geral, é necessário empregar equações de movimento estocásticas contendo termos de dissipação e flutuação. Essas equações estocásticas têm origem puramente fenomenológica, mas em alguns casos (raros) elas podem ser obtidas a partir da dinâmica microscópica utilizando técnicas de *coarse-graining* - no Apêndice A será feita uma discussão dessa técnica para o caso de um parâmetro de ordem escalar.

Para entendermos melhor a origem de uma dinâmica estocástica para o parâmetro de ordem, vamos considerar um sistema formado por muitas partículas no contexto das equações da mecânica clássica formuladas em termos de parênteses de Poisson. Consideremos inicialmente, para motivar a forma das equações de movimento, uma partícula de massa m sujeita a um potencial $V(x)$. O Hamiltoniano clássico desse sistema será dado por

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (2.1)$$

Definindo a notação, $q_1 = x$ e $q_2 = p$, podemos reescrever este Hamiltoniano e obter as seguintes velocidades

$$\begin{aligned} v_1 &= \frac{dq_1}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_2} = \frac{q_2}{m} \\ v_2 &= \frac{dq_2}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_1} = -V'(q_1). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Podemos compactar essas equações de velocidades da seguinte forma

$$\frac{dq_\mu}{dt} = \sum_\nu W_{\mu\nu} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_\nu}, \quad (2.3)$$

onde μ e ν podem assumir os valores 1 e 2. Os $W_{\mu\nu}$ são os parênteses de Poisson das coordenadas q_μ dados por $W_{12} = -W_{21} = 1$ e $W_{11} = W_{22} = 0$. Lembremos que os parênteses de Poisson de duas quantidades quaisquer são definidos como

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial q_1} \frac{\partial g}{\partial q_2} - \frac{\partial f}{\partial q_2} \frac{\partial g}{\partial q_1}. \quad (2.4)$$

Generalizando, vamos considerar agora um sistema físico com muitos graus de liberdade cujo estado em qualquer instante de tempo é descrito por um conjunto completo de variáveis clássicas \tilde{Q}_μ . A evolução temporal de cada uma destas variáveis é dada através da seguinte equação determinística

$$\frac{d\tilde{Q}_\mu}{dt} = \Phi_\mu [\tilde{Q}, \tilde{h}]. \quad (2.5)$$

Nessa equação Φ_μ é uma função do conjunto de variáveis $\tilde{Q} \equiv \{\tilde{Q}_\mu\}$ no tempo t , e eventualmente, pode depender do conjunto de campos externos aplicados ao sistema $\tilde{h} \equiv \{\tilde{h}_\mu\}$. Se considerarmos que o Hamiltoniano do sistema é da forma

$$\mathcal{H}[\tilde{Q}, \tilde{h}] = \mathcal{H}_0[\tilde{Q}] - \sum_\mu \tilde{h}_\mu \tilde{Q}_\mu \quad (2.6)$$

e a Eq. (2.3) para as velocidades, temos que

$$\Phi_\mu = \sum_\nu W_{\mu\nu} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tilde{Q}_\nu}. \quad (2.7)$$

Quando o estudo de um sistema com muitos graus de liberdade torna-se complicado demais, é conveniente nos restringirmos a um subconjunto de variáveis $Q \equiv \{Q_\mu\}$ do conjunto completo \tilde{Q} , e tomar médias sobre as variáveis restantes. Desta maneira, as variáveis \tilde{Q} são “microscópicas” e as variáveis Q “macroscópicas”. Tirando uma média sobre as Eqs. (2.5) obtemos equações estocásticas, pois o valor de uma coordenada $Q_\mu(t)$ para $t > 0$ não fica completamente determinado pelos valores de Q no instante inicial $t = 0$. Assim, precisamos conhecer, em todos os instantes de tempo, a probabilidade relativa de que uma particular evolução $Q(t)$ ocorra. Podemos então, por exemplo, definir valores esperados $\langle Q(t) \rangle$, funções de correlação $\langle Q(t)Q(t') \rangle$ para todos os instantes de tempo, e tomar médias sobre todas as possíveis evoluções temporais se levarmos em conta suas respectivas probabilidades de ocorrência. Geralmente quando tratamos de fenômenos críticos dinâmicos, as variáveis Q de interesse são os parâmetros de ordem. Nos casos onde as funções de correlação $\langle Q(t)Q(t') \rangle$, e a distribuição de probabilidades $P[Q, t]$ são derivadas de um Hamiltoniano, uma série de propriedades importantes pode ser provada de maneira bastante geral [19]. Entretanto, ao considerarmos modelos estocásticos essas propriedades não podem ser

derivadas. Uma solução para esse problema é fazer com que as funções de correlação e a distribuição de probabilidades desses modelos satisfaçam essas propriedades. As condições mais importantes para isso são (vamos seguir aqui a discussão do artigo clássico de Hohemberg e Halperin [10]):

- *Equilíbrio térmico* – Para campos externos h_μ independentes do tempo, a distribuição de probabilidade de equilíbrio também é independente do tempo e possui a forma de uma distribuição de Boltzmann

$$P[Q] = P_{\text{eq}}[Q] = \frac{1}{Z} \exp \left[-\beta \left(F[Q] - \sum_i \mu_i \bar{Q}_i \right) \right], \quad (2.8)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, e

$$\exp(-\beta F[Q]) = \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}[\tilde{Q}]) \Big|_Q, \quad (2.9)$$

$$Z = \text{Tr} \exp \left[-\beta \left(F[Q] - \sum_i \mu_i \bar{Q}_i \right) \right]. \quad (2.10)$$

O traço na equação (2.9) é tomado sobre as variáveis microscópicas \tilde{Q} , tomando o cuidado de manter fixas as variáveis macroscópicas Q . Nas equações acima as quantidades \bar{Q}_i são eventuais constantes de movimento do sistema, que formam um subconjunto das variáveis $\{Q_\mu\}$. As constantes μ_i são multiplicadores de Lagrange conjugados às variáveis \bar{Q}_i e $F[Q]$ é a energia livre de Helmholtz.

- *Relaxação ao equilíbrio* – Quando os campos externos $\{h_\mu\}$ se tornam independentes do tempo após um determinado tempo t_0 , a distribuição de probabilidade $P[Q, t]$ deve relaxar, para tempos longos, para uma distribuição de equilíbrio $P_{\text{eq}}[Q]$, determinada pelos valores das constantes de movimento no tempo t_0 ;
- *Causalidade* – Na presença de um campo externo dependente do tempo $h(t')$, o valor esperado de uma quantidade física macroscópica $\langle Q_\mu(t) \rangle$ depende somente dos valores do campo externo $h(t')$ quando $t > t'$;
- *Teorema da flutuação e dissipação* – Esse teorema apresenta uma relação entre a função de correlação de equilíbrio e a função de resposta linear, que deve ser válido em todos os sistemas definidos por um Hamiltoniano. Nos modelos estocásticos exigimos que os parâmetros relacionados à dissipação e às flutuações que aparecem nas equações de movimento sejam tais que esta relação seja satisfeita no equilíbrio. Vamos desenvolver esse teorema para um sistema descrito por variáveis de campo. Suponhamos que as variáveis $Q_\mu(t)$

sejam densidades no espaço de campos e que as correspondentes densidades das variáveis conjugadas $h_\mu(t)$ sejam fontes. Então, se denotarmos os campos por $\phi(\mathbf{x}, t)$ e as fontes por $J(\mathbf{x}, t)$ podemos definir as seguintes transformadas de Fourier

$$\begin{pmatrix} \tilde{\phi}(\mathbf{k}, \omega) \\ \tilde{J}(\mathbf{k}, \omega) \end{pmatrix} = \int d^d x \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)] \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{x}, t) \\ J(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Assim, se considerarmos uma fonte J infinitesimal, podemos definir a função de resposta linear $\chi_\phi(\mathbf{k}, \omega)$ da seguinte maneira

$$\langle \tilde{\phi}(\mathbf{k}, \omega) \rangle_J = \chi_\phi(\mathbf{k}, \omega) \tilde{J}(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.12)$$

onde se supõe que o sistema está em equilíbrio quando $t = -\infty$, e que o valor médio é determinado a partir da distribuição de probabilidade $P[\phi, t]$ na presença da fonte $J(\mathbf{x}, t)$. Podemos também definir a função de correlação

$$C_\phi(\mathbf{x}, t) = \langle \phi(\mathbf{x}, t) \phi(0, 0) \rangle_{J=0} - \langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle_{J=0} \langle \phi(0, 0) \rangle_{J=0}. \quad (2.13)$$

A função de correlação a tempos iguais $\tilde{C}_\phi(\mathbf{k})$ é a transformada de Fourier de $C_\phi(\mathbf{x}, t = 0)$,

$$\tilde{C}_\phi(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{C}_\phi(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.14)$$

A partir dessas definições podemos apresentar o teorema da flutuação e dissipação, para sistemas clássicos, como

$$\tilde{C}_\phi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2k_B T}{\omega} \text{Im} \chi_\phi(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.15)$$

Quando um sistema, similar aos discutidos até aqui, é submetido a um *quench*, por exemplo de temperatura ou pressão, esse sistema inicialmente em equilíbrio, passa a se encontrar num estado de não equilíbrio. O restabelecimento do equilíbrio termodinâmico do sistema se dá através de processos de não equilíbrio muito complexos, os mais conhecidos sendo nucleação e decomposição espinodal. A seguir, vamos apresentar os modelos estocásticos importantes ao nosso estudo e discutir melhor como funcionam cada um desses processos de restabelecimento do equilíbrio.

2.2 Modelos estocásticos

2.2.1 Modelo A: Sistema sem leis de conservação

O modelo A, às vezes chamado de modelo de Glauber ou modelo de Ginzburg-Landau dependente do tempo, é considerado o mais simples dentre os modelos de

dinâmica estocástica. Utilizamos esse modelo na descrição da dinâmica de um campo escalar $\phi(\mathbf{x}, t)$ não conservado em presença de um banho térmico de temperatura constante. Uma aplicação bem sucedida desse modelo se encontra no estudo de uma rede de spins de Ising acoplados a fônons de alta condutividade térmica em relação aos spins isolados. Nesse sistema a energia dos spins é rapidamente transferida para a rede, sendo assim uma quantidade não conservada. Desta maneira, a única variável “lenta” será o parâmetro de ordem $\phi(\mathbf{x}, t)$ – que se refere a uma média sobre um conjunto de spins, e não somente a um único spin num dado sítio. Assim, o modelo A descreve a dinâmica “lenta” de uma variável não conservada através da seguinte equação de movimento

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \phi}{\partial t} &= -\Gamma \frac{\delta \mathcal{H}_T}{\delta \phi} + \zeta(\mathbf{x}, t) \\
 &= -\Gamma \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi} + \Gamma h(\mathbf{x}, t) + \zeta(\mathbf{x}, t),
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

onde \mathcal{H}_T é o Hamiltoniano total do sistema, \mathcal{H} um Hamiltoniano fenomenológico e $h(\mathbf{x}, t)$ um campo externo conjugado a ϕ . A função $\zeta(\mathbf{x}, t)$ é uma fonte de ruído representando as forças aleatórias produzidas pelos graus de liberdade microscópicos do sistema que não são levados em conta no processo de *coarse-graining* – i.e. na definição da variável ϕ . Na maioria das aplicações físicas essa fonte de ruído é considerada uma variável randômica com as seguintes propriedades [9]

$$\begin{aligned}
 \langle \zeta(\mathbf{x}, t) \rangle &= 0 \\
 \langle \zeta(\mathbf{x}, t) \zeta(\mathbf{x}', t') \rangle &= 2T\Gamma \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'),
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

que refletem o teorema da flutuação e dissipação, onde T é a temperatura de equilíbrio.

A equação tradicional de Ginzburg-Landau é dada pela equação de movimento estocástica (2.16), onde Γ é um parâmetro que caracteriza a velocidade de transformação de fase (coeficiente de Onsager) e o Hamiltoniano \mathcal{H} é o de Ginzburg-Landau

$$\mathcal{H} = \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} (\nabla \phi)^2 + f(\phi) \right]. \tag{2.18}$$

Nesse Hamiltoniano a função $f(\phi)$ representa uma densidade de energia livre. Definindo a densidade de energia livre como sendo $f(\phi) = r\phi^2/2$ (um modelo Gaussiano) e as seguintes transformadas de Fourier

$$\begin{pmatrix} \phi(\mathbf{x}, t) \\ h(\mathbf{x}, t) \\ \zeta(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \int \frac{d\omega}{2\pi} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)] \begin{pmatrix} \tilde{\phi}(\mathbf{k}, \omega) \\ \tilde{h}(\mathbf{k}, \omega) \\ \tilde{\zeta}(\mathbf{k}, \omega) \end{pmatrix}, \tag{2.19}$$

podemos encontrar a seguinte solução para a equação de Ginzburg-Landau

$$\tilde{\phi}(\mathbf{k}, \omega) = G(\mathbf{k}, \omega) \left[\Gamma \tilde{h}(\mathbf{k}, \omega) + \tilde{\zeta}(\mathbf{k}, \omega) \right], \quad (2.20)$$

onde $G(\mathbf{k}, \omega) = [\Gamma(r + ak^2) - i\omega]^{-1}$. A partir dessa solução podemos calcular as funções de correlação e de resposta considerando ϕ como um funcional de ζ e em seguida tomando a média sobre todos os valores de ζ . Essas funções são dadas por

$$\chi_\phi(\mathbf{k}, \omega) = \Gamma G(\mathbf{k}, \omega) = \left[\chi^{-1}(\mathbf{k}) - i\frac{\omega}{\Gamma} \right]^{-1} \quad (2.21)$$

$$\tilde{C}_\phi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2T}{\Gamma} |\chi(\mathbf{k}, \omega)|^2 = \frac{2T}{\omega} \text{Im} \chi_\phi(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.22)$$

onde $\chi(\mathbf{k}) = (r + ak^2)^{-1}$ é a função de resposta estática, mais conhecida como *susceptibilidade estática*. Note que a relação entre as funções de correlação e de resposta presentes na equação (2.22) está de acordo com o teorema da flutuação e dissipação. Claramente, isso se deve às propriedades da fonte de ruído $\zeta(\mathbf{x}, t)$, descritas nas Eqs. (2.17), as quais foram especificadas de maneira que o teorema seja satisfeito.

2.2.2 Modelo B: Sistema com leis de conservação

O modelo B, também conhecido como modelo de Cahn-Hilliard, é muito semelhante ao modelo A mas, ao contrário deste, nesse modelo descrevemos a dinâmica de um campo conservado. Uma aplicação do modelo B se encontra no estudo do processo de separação de fases de uma liga binária composta pelas espécies atômicas A e B. Após sofrer um *quench*, esse sistema inicia um processo de separação de fases. Este processo dá origem a duas fases distintas, uma formada pela espécie A e a outra pela espécie B. Como a espécie A não pode ser transformada na espécie B, a integral sobre a densidade local das espécies deve ser conservada, representando assim, um parâmetro de ordem conservado que pode ter sua dinâmica descrita pelo modelo B. Neste ponto, é importante ressaltar que um parâmetro de ordem conservado é um parâmetro associado à uma densidade conservada, e portanto, satisfaz a equação da continuidade.

A equação de movimento que descreve o modelo B pode ser obtida da equação de movimento do modelo A fazendo a seguinte substituição

$$\Gamma \rightarrow -\Lambda \nabla^2, \quad (2.23)$$

*Esta substituição foi escolhida de maneira que a equação de movimento para o modelo B satisfizesse uma lei de conservação. Observe, mais adiante, que a equação de movimento do modelo B pode ser escrita na forma de uma equação de continuidade.

na equação (2.16), de maneira que

$$\begin{aligned}\frac{\partial \phi}{\partial t} &= \Lambda \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{H}_T}{\delta \phi} + \zeta(\mathbf{x}, t) \\ &= \Lambda \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi} - \Lambda \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + \zeta(\mathbf{x}, t),\end{aligned}\quad (2.24)$$

onde, novamente, \mathcal{H}_T é o Hamiltoniano total do sistema, \mathcal{H} um Hamiltoniano fenomenológico e $h(\mathbf{x}, t)$ um campo externo conjugado a ϕ . A função $\zeta(\mathbf{x}, t)$ representa uma fonte de ruído estocástico com as seguintes propriedades,

$$\begin{aligned}\langle \zeta(\mathbf{x}, t) \rangle &= 0 \\ \langle \zeta(\mathbf{x}, t) \zeta(\mathbf{x}', t') \rangle &= -2T\Lambda \nabla^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t').\end{aligned}\quad (2.25)$$

A parte determinista da equação de Cahn-Hilliard pode ser colocada na forma de uma equação da continuidade, i.e. definindo a corrente

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = -\nabla \Lambda \frac{\delta \mathcal{H}_T}{\delta \phi}, \quad (2.26)$$

podemos escrever

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}. \quad (2.27)$$

A média sobre o ruído da Eq. (2.24) também satisfaz uma equação da continuidade, na forma

$$\frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \mathbf{J}(\mathbf{x}, t) \rangle = \mathbf{0}. \quad (2.28)$$

Podemos calcular as funções de correlação e de resposta para esse modelo seguindo os mesmos passos utilizados para o modelo A. Considerando o Hamiltoniano de Ginzburg-Landau da Eq. (2.18), com uma densidade de energia Gaussiana $f(\phi) = r\phi^2/2$, e as transformadas de Fourier definidas como na Eq. (2.19), percebemos que as funções de correlação e de resposta são muito semelhantes entre os modelos, basta realizarmos a substituição $\Gamma \rightarrow \Lambda k^2$ nas equações (2.21) e (2.22). Assim, as funções de correlação e de resposta para o modelo B são dadas por

$$\chi_\phi(\mathbf{k}, \omega) = \left[\chi^{-1}(\mathbf{k}) - i \frac{\omega}{\Lambda k^2} \right]^{-1} \quad (2.29)$$

$$\tilde{C}_\phi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2T}{\Lambda k^2} \left[\chi(\mathbf{k})^{-2} - \frac{\omega^2}{\Lambda k^2} \right]^{-1} = \frac{2T}{\omega} \text{Im} \chi_\phi(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.30)$$

onde $\chi(\mathbf{k})$ é a susceptibilidade estática. Como para o modelo A, a função de correlação, equação (2.30), satisfaz o teorema da flutuação e dissipação.

2.2.3 Modelo C: Acoplamento entre parâmetros de ordem conservado e não conservado

Um parâmetro de ordem não conservado pode estar acoplado a uma densidade conservada (possivelmente não crítica), o que caracteriza a classe de universalidade dinâmica do modelo C na classificação de Hohenberg e Halperin [10]. Um exemplo pode ser o antiferromagneto anisotrópico, onde a densidade de magnetização é uma quantidade (não crítica) conservada. Nesses casos, o Hamiltoniano geralmente será um funcional do campo não conservado ϕ e da nova densidade conservada m . No caso da QCD, a densidade bariônica é um exemplo de parâmetro de ordem conservado.

As equações de movimento, garantindo a conservação de m , são

$$\begin{aligned}\frac{\partial\phi}{\partial t} &= -\Gamma\frac{\delta\mathcal{H}_T}{\delta\phi} + \zeta(\mathbf{x}, t), \\ \frac{\partial m}{\partial t} &= \Lambda_m\nabla^2\frac{\delta\mathcal{H}_T}{\delta m} + \zeta_m(\mathbf{x}, t),\end{aligned}\tag{2.31}$$

onde as fontes de ruído ζ e ζ_m apresentam as seguintes propriedades

$$\begin{aligned}\langle\zeta(\mathbf{x}, t)\rangle &= 0, \quad \langle\zeta_m(\mathbf{x}, t)\rangle = 0, \quad \langle\zeta(\mathbf{x}, t)\zeta_m(\mathbf{x}', t')\rangle = 0, \\ \langle\zeta(\mathbf{x}, t)\zeta(\mathbf{x}', t')\rangle &= 2T\Gamma\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t'), \\ \langle\zeta_m(\mathbf{x}, t)\zeta_m(\mathbf{x}', t')\rangle &= -2T\Lambda_m\nabla^2\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t').\end{aligned}\tag{2.32}$$

Em problemas de Matéria Condensada o acoplamento dos campos é da forma $\phi^2 m$, de maneira que o Hamiltoniano total \mathcal{H}_T é da forma

$$\mathcal{H}_T = \mathcal{H}_\phi + \mathcal{H}_m + \int d^d x K \phi^2 m - \int d^d x (h_\phi(\mathbf{x}, t)\phi + h_m(\mathbf{x}, t)m).\tag{2.33}$$

Os campos $h_\phi(\mathbf{x}, t)$ e $h_m(\mathbf{x}, t)$ são eventuais campos externos aplicados ao sistema. O cálculo de funções de correlação e a verificação do teorema de flutuação e dissipação prosseguem de maneira simples (para modelos Gaussianos) como nos casos anteriores.

2.3 Nucleação

Para explicar o processo de nucleação vamos considerar o modelo de Ising ferromagnético. Nesse modelo, a magnetização do sistema é um parâmetro de ordem não conservado, portanto, sua dinâmica pode ser descrita pelo Modelo A. Na Figura 2.2 apresentamos um diagrama de fases no plano campo externo-temperatura (h - T) para esse modelo. A linha de $h = 0$ para valores de temperatura menores que T_c representa uma linha de coexistência de fases, onde as duas fases de *spin-up* e *spin-down*

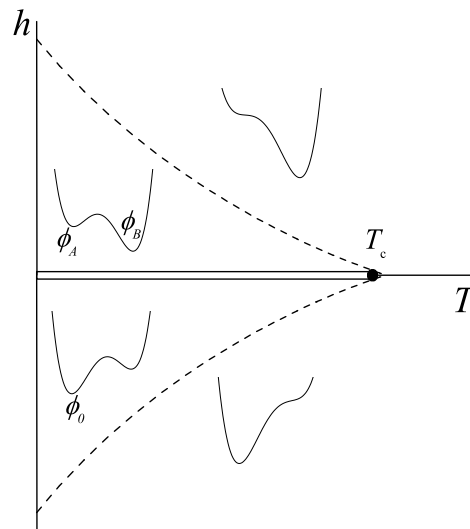


Figura 2.2: Representação esquemática da transição repentina, devido uma mudança no sinal do campo h , do modelo de Ising ferromagnético de um lado da região meta-estável para o outro. As curvas dentro desse diagrama indicam a forma da densidade de energia livre f dentro de cada uma das regiões.

coexistem. Nessa linha de coexistência, a densidade de energia livre *coarse-grained* f do sistema apresenta dois mínimos equivalentes, indicando que as duas direções da magnetização são energeticamente iguais. Contudo, se nos aproximarmos da linha de coexistência tomando o limite $h \rightarrow 0$, uma dada direção da magnetização será favorecida. Nesse diagrama, as linhas pontilhadas são conhecidas como limites de meta-estabilidade do modelo. Na região interna a essas linhas, definida como região de meta-estabilidade, a densidade de energia livre possui dois mínimos distintos, onde o de maior energia corresponde a estados meta-estáveis e o de menor energia a estados de equilíbrio. Nas regiões externas aos limites de meta-estabilidade a densidade de energia livre apresenta um único mínimo global, representando estados estáveis do sistema.

Vamos considerar agora um sistema dentro da região de meta-estabilidade com $h < 0$. Inicialmente o sistema se encontra em equilíbrio com parâmetro de ordem ϕ_0 . Se mudamos o sinal do campo h , obtemos uma mudança na curva da densidade de energia livre, de maneira que teremos um mínimo local em ϕ_A e um mínimo global em $\phi_B (> \phi_A)$. Agora, se essa inversão do campo for suficientemente rápida, o valor do parâmetro de ordem logo após a mudança manterá seu valor inicial ϕ_0 .

O valor do parâmetro de ordem meta-estável ϕ_A é muito próximo do valor de ϕ_0 , mas nunca é precisamente igual a ϕ_0 . Assim, como a curva de $f(\phi)$ apresenta uma derivada primeira não nula em $\phi = \phi_0$, em pouco tempo, o valor do parâmetro de ordem relaxa para ϕ_A seguindo a dinâmica do Modelo A. Se não houver nenhuma perturbação externa ou flutuação no sistema este permanecerá na fase meta-estável, caso contrário, após longos períodos de tempo o sistema acaba evoluindo para um estado de equilíbrio onde $\phi = \phi_B$. Por exemplo, se sujeitarmos o sistema a flutuações térmicas, essas irão favorecer a formação de pequenas regiões com fases de equilíbrio de baixa densidade de energia, se comparadas à energia da fase meta-estável onde $\phi = \phi_B$. Essas regiões, conhecidas como domínios ou núcleos, apresentam um máximo de energia para um dado valor crítico do seu raio R_c . Desta maneira, quando o raio do domínio é ligeiramente menor que R_c o sistema irá diminuir o tamanho do domínio para manter seu estado de equilíbrio, já quando o raio do domínio é ligeiramente maior o sistema reduz sua energia através de um aumento no tamanho do domínio. Portanto, se tivermos um domínio com raio ligeiramente maior que R_c , este irá crescer espontaneamente criando regiões de equilíbrio, cada vez maiores, favorecendo a fase de equilíbrio do sistema. Esse processo é conhecido como nucleação. A mudança no campo h também pode levar o sistema para fora da região meta-estável. Quando isso ocorre, a energia livre passa a apresentar um único mínimo global e o parâmetro de ordem decai de maneira rápida e homogênea para esse novo estado de equilíbrio e, assim, não haverá processo de nucleação.

Consideramos aqui um exemplo onde o parâmetro de ordem do sistema é não conservado. Nos casos onde o parâmetro de ordem é conservado, uma mudança nos campos externos deve manter essa conservação, ou seja, o sistema está limitado a ocupar apenas algumas regiões do diagrama de fases. Contudo, ainda é possível o acesso a regiões meta-estáveis, quando isso acontece o processo de nucleação é descrito da mesma forma que para um parâmetro de ordem não conservado. Concluindo, uma nucleação ocorre sempre que uma mudança repentina nos parâmetros externos (*quench*) tira o sistema de um dos lados da fase meta-estável e leva para a outra região metaestável.

2.4 Decomposição Espinodal

Quando temos um *quench* em um sistema no qual o parâmetro de ordem é conservado, por exemplo fluidos de um ou dois componentes, o problema se torna um pouco mais complexo, pois a integral do parâmetro de ordem sobre o volume deve ser constante no tempo. Essa restrição faz com que *quenches* para a região de coexistência tenham um comportamento muito interessante e complicado. Para explorarmos

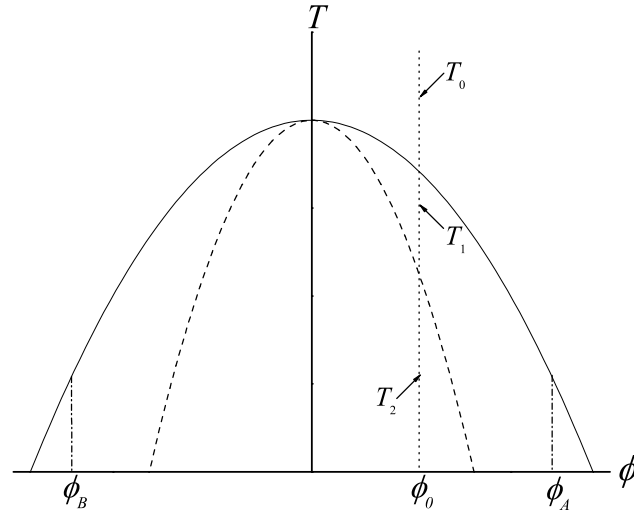


Figura 2.3: Diagrama de fase esquemático para um *quench* dentro da curva de coexistência.

melhor esse problema vamos considerar um *quench* de temperatura, com parâmetro de ordem constante $\phi = \phi_0$, de uma região com $T = T_0 > T_c$ para uma outra com $T < T_c$. Na Figura 2.3 apresentamos um diagrama de fase esquematizando esse tipo de *quench*. A linha sólida representa a curva de coexistência T_{co} , sob a qual todos os estados de equilíbrio coexistem. A linha tracejada representa a curva espinodal T_{sp} , que delimita a região de instabilidade. A área entre as duas curvas representa a região meta-estável. Para tempos longos, após o *quench*, o sistema se separa em duas regiões na qual ϕ toma os valores ϕ_A ou ϕ_B , por exemplo, para o caso de um fluido de dois componentes. Na presença do campo gravitacional, a parte mais densa, componente B, irá se depositar no fundo do recipiente deixando a menos densa A na parte de cima. Quando o *quench* é realizado para a região com $T = T_1$ o sistema se encontra em uma fase meta-estável e vai para o equilíbrio através da nucleação. Já quando o *quench* é realizado para a região com $T = T_2$, o sistema se encontra globalmente instável e o parâmetro de ordem cresce continuamente do zero.

Para entendermos melhor como funciona um *quench* dentro da curva espinodal $T = T_2$, vamos primeiro encontrar os estados que minimizam a densidade de energia livre f e que satisfazem a restrição

$$\int d^d x (\phi - \phi_0) = 0. \quad (2.34)$$

Para isso, considerando um Hamiltoniano do tipo Ginzburg-Landau, equação (2.18), vamos introduzir um multiplicador de Lagrange λ na equação de Euler-Lagrange para ϕ

$$\alpha \nabla^2 \phi = \frac{\partial f}{\partial \phi} - \lambda. \quad (2.35)$$

Considerando a restrição imposta sobre o valor de ϕ , equação (2.34), concluímos que o lado esquerdo da equação (2.35) deve ser nulo, então

$$\lambda = \left. \frac{\partial f}{\partial \phi} \right|_{\phi_0}. \quad (2.36)$$

O multiplicador de Lagrange λ definido nessa equação reflete os parâmetros externos que são responsáveis pela conservação do campo ϕ , por exemplo, em sistemas uniformes ele representa o potencial químico. Desta maneira, podemos definir uma densidade de energia livre modificada $\tilde{f} = f - \lambda\phi$. Devido à conservação do campo ϕ , podemos substituir f por \tilde{f} no Hamiltoniano do sistema

$$\mathcal{H} = \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} (\nabla \phi)^2 + \tilde{f} \right]. \quad (2.37)$$

Na teoria ϕ^4 , por exemplo, essa densidade de energia livre modificada é da forma

$$\tilde{f} = \frac{r}{2} (\phi^2 - 2\phi\phi_0) + u\phi (\phi^3 - 4\phi_0^3), \quad (2.38)$$

onde $r = b(T - T_c)$. Na Figura 2.4 apresentamos um esboço das curvas dessa densidade de energia para diferentes valores de T . Notamos que, para diferentes valores de temperatura, a função \tilde{f} sempre apresenta um extremo em $\phi = \phi_0$. Para $T = T_0$ temos um mínimo global representando um estado de equilíbrio homogêneo, quando $T = T_1$ temos um mínimo local em ϕ_0 e o sistema se encontra numa fase meta-estável, mas se $T = T_2$ esse extremo passa a ser um máximo local indicando que não existe nenhuma força para manter o valor de ϕ constante, então qualquer perturbação afetará bruscamente o sistema indicando que este se encontra numa fase de equilíbrio instável. Portanto, vemos que o sistema passa de uma fase meta-estável para uma instável em $\phi = \phi_0$ quando

$$\left. \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial \phi^2} \right|_{\phi_0} = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right|_{\phi_0} = 0. \quad (2.39)$$

Assim, podemos definir para a teoria ϕ^4 as curvas espinodal e de coexistência como

$$\begin{aligned} T_{\text{sp}}(\phi) &= T_c - \frac{12u}{b} \phi^2 \\ T_{\text{co}}(\phi) &= T_c - \frac{4u}{b} \phi^2. \end{aligned} \quad (2.40)$$

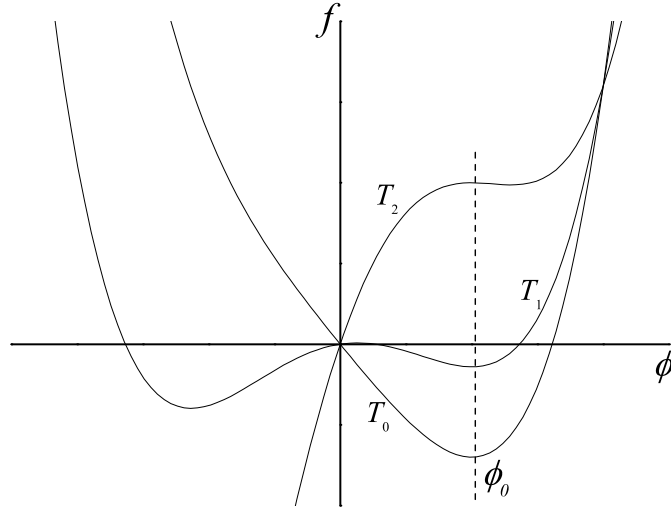


Figura 2.4: Densidade de energia livre \tilde{f} para a teoria ϕ^4 para diferentes valores de temperatura.

Vamos olhar agora para dentro da curva espinodal. Como sabemos, logo após o *quench* o valor de ϕ ainda se encontra muito próximo de seu valor inicial, então

$$\delta\phi = \phi - \phi_0 = A \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)], \quad (2.41)$$

onde o vetor número de onda \mathbf{k} é não nulo. Note que essa variação não viola a restrição imposta sobre o valor de ϕ , equação (2.34). Assim, podemos expandir \tilde{f} em torno de $\phi = \phi_0$ da seguinte maneira

$$\tilde{f}(\phi) = \tilde{f}(\phi_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right|_{\phi_0} (\phi - \phi_0)^2 + \dots \quad (2.42)$$

O termo linear em $(\phi - \phi_0)$ é nulo pois escolhemos λ de maneira que \tilde{f} tenha sempre um extremo em ϕ_0 . Substituindo a variação dada na equação (2.41) no Hamiltoniano e integrando sobre todo o espaço, encontramos que a diferença de energia relativa ao estado inicial será

$$\Delta E = \frac{VA^2}{4} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} + \alpha k^2 \right) \quad (2.43)$$

onde V é o volume do sistema. Se a curvatura de f for positiva, ΔE será positivo para todos os valores de k , mas se a curvatura for negativa, ΔE será negativo

somente quando k for menor que o valor crítico

$$k_c = \left(\frac{1}{\alpha} \left| \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right)_{\phi_0} \right| \right)^{1/2}, \quad (2.44)$$

portanto, flutuações com $k < k_c$ irão diminuir a energia livre do sistema. Essas conclusões indicam que logo após um *quench* para $T < T_c$, o sistema deverá apresentar modos com número de onda $k \leq k_c$. Sistemas que apresentam esses tipos de modos tem sua dinâmica descrita pelas equações fenomenológicas estocásticas apresentadas na seção anterior, no caso em estudo o melhor modelo pra descrever essa dinâmica é o Modelo B, pois o parâmetro de ordem é conservado. Então, desconsiderando o termo de ruído, temos que

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Lambda \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi}. \quad (2.45)$$

Agora, se considerarmos o Hamiltoniano definido na equação (2.37) e uma aproximação linear da densidade de energia livre definida na equação (2.42) obtemos a seguinte equação de movimento para o parâmetro de ordem ϕ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Lambda \left[\left. \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right|_{\phi_0} \nabla^2 \phi - \alpha \nabla^4 \phi \right]. \quad (2.46)$$

As soluções dessa equação irão apresentar modos com frequência

$$\omega(k) \equiv i\theta(k) = -i\Lambda \left[\left. \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right|_{\phi_0} k^2 + \alpha k^4 \right]. \quad (2.47)$$

Assim, se a curvatura de f for positiva, *quenches* fora da curva espinodal, os modos são exponencialmente amortecidos. Mas se a curvatura for negativa, *quenches* dentro da curva espinodal, existem valores de k para o qual a função $\theta(k)$ é positiva, ou seja, a amplitude da flutuação do parâmetro de ordem com esses modos cresce exponencialmente com $\theta(k)t$, originando assim o que conhecemos como decomposição espinodal. A aproximação linear só é válida para pequenos valores do parâmetro de ordem ϕ , portanto, esse comportamento para a solução de ϕ é esperado nos primeiros instantes de tempo após o *quench*. Esse rápido crescimento inicial do valor de ϕ é conhecido como explosão da decomposição espinodal. O processo de decomposição espinodal para um parâmetro de ordem não conservado ocorre da mesma maneira que para um parâmetro de ordem conservado, a única diferença é que o valor do parâmetro de ordem está livre de qualquer restrição. Concluindo, a decomposição espinodal é um crescimento exponencial dos modos com grandes comprimentos de onda (pequenos números de onda) que levam a um crescimento muito rápido no valor do parâmetro de ordem nos primeiros instantes de tempo após o *quench*.

2.5 A função de estrutura e o relaxamento ao equilíbrio

Uma quantidade física de extrema importância no estudo das transições de fase dinâmicas é a *função de estrutura*. Além de poder ser medida diretamente em experimentos de espalhamento da matéria condensada, essa função contém informações fundamentais sobre as propriedades de não equilíbrio de um sistema. No apêndice B discutimos em detalhes a relação entre a função de estrutura e processos de espalhamento definindo as funções de estrutura estática e dinâmica. Neste nos restringimos apenas à apresentação de resultados para a densidade de partículas de um sistema, entretanto, uma generalização para outras densidades e campos dependentes do tempo pode ser feita. Assim, podemos definir a função de estrutura conjugada a uma densidade ou um campo $\phi(\mathbf{x}, t)$ como

$$\tilde{S}_\phi(\mathbf{q}, t) \equiv \int d^d r e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_\phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) = \langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}, t) \tilde{\phi}(-\mathbf{q}, t) \rangle, \quad (2.48)$$

onde C_ϕ é a função de correlação de dois pontos conjugada ao campo ϕ ,

$$C_\phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) = \langle \phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}', t) \rangle. \quad (2.49)$$

Uma característica da função de estrutura fundamental ao estudo da dinâmica de transições de fase é que esta pode fornecer informações importantes sobre a dinâmica de relaxamento para o equilíbrio de um parâmetro de ordem. Para entendermos melhor como se dá essa relação entre a função de estrutura e a dinâmica de um parâmetro de ordem vamos obter a equação de movimento para $\tilde{S}_\phi(\mathbf{q}, t)$ a partir da definição da Eq. (2.48) e da dinâmica de um parâmetro de ordem conservado – aqui vamos seguir a apresentação da Ref. [20]. Derivando a Eq. (2.48) com respeito ao tempo, chegamos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{S}_\phi(\mathbf{q}, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}, t) \tilde{\phi}(-\mathbf{q}, t) \rangle \\ &= \left\langle \frac{\partial \tilde{\phi}(\mathbf{q}, t)}{\partial t} \tilde{\phi}(-\mathbf{q}, t) \right\rangle + \left\langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \tilde{\phi}(-\mathbf{q}, t)}{\partial t} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Agora, se considerarmos que o campo ϕ é um parâmetro de ordem conservado no tempo, sabemos que sua dinâmica pode ser descrita pela Eq. (2.46), ou seja,

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \Lambda \left[\left. \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right|_{\phi_0} \nabla^2 \phi(\mathbf{x}, t) - \alpha \nabla^4 \phi(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (2.51)$$

Utilizando a transformada de Fourier para as coordenadas espaciais definida na Eq. (2.20) podemos reescrever essa equação de movimento da seguinte maneira,

$$\frac{\partial \tilde{\phi}(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \theta(q) \tilde{\phi}(\mathbf{q}, t), \quad (2.52)$$

onde $\theta(q)$ é dado pela Eq. (2.47). Substituindo essa equação de movimento para ϕ na Eq. (2.50), obtemos a seguinte equação de movimento para a função de estrutura de um parâmetro de ordem conservado no tempo

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{S}_\phi(\mathbf{q}, t)}{\partial t} &= \langle \theta(q) \tilde{\phi}(\mathbf{q}, t) \tilde{\phi}(-\mathbf{q}, t) \rangle + \langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}, t) \theta(-q) \tilde{\phi}(-\mathbf{q}, t) \rangle \\ &= 2\theta(q) \tilde{S}_\phi(\mathbf{q}, t). \end{aligned} \quad (2.53)$$

A partir dessa equação, podemos concluir que a dinâmica da função de estrutura apresenta as mesmas propriedades que a dinâmica do parâmetro de ordem e, conseqüentemente, suas soluções apresentam características muito semelhantes. Se a curvatura da densidade de energia livre f for positiva, *quenches* para fora da curva espinodal, a solução de \tilde{S}_ϕ é exponencialmente amortecida. Já se a curvatura for negativa, *quenches* para dentro da curva espinodal, existirão valores de q para o qual a função $\theta(q)$ é positiva e, assim, a solução de \tilde{S}_ϕ apresentará um crescimento exponencial. Esse crescimento exponencial está intimamente ligado ao processo de decomposição espinodal responsável pelo restabelecimento do equilíbrio de um sistema após um *quench*.

Nessa análise, consideramos uma aproximação em primeira ordem na densidade de energia livre, Eq. (2.42), portanto esse comportamento é válido somente nos primeiros instantes de tempo após o *quench*. Estudos numéricos da função de estrutura indicam que para *quenches* para dentro da curva espinodal a função de estrutura apresenta um rápido crescimento exponencial seguido de um decaimento muito rápido conforme o sistema entra em equilíbrio, formando um pico bem definido. Assim, podemos saber se a dinâmica de restabelecimento do equilíbrio se dá através do processo de decomposição espinodal somente observando a formação de um pico na função de estrutura.

Apesar de não empreendermos nenhum estudo nessa direção, é importante ressaltar que a função de estrutura também pode fornecer informações sobre os expoentes dinâmicos de um sistema. Após um *quench* sabe-se que a função de estrutura exibe um comportamento de escala muito familiar com o da teoria de escalonamento dinâmico dos fenômenos críticos (*dynamical scaling*). Esta teoria prevê que após um *quench* o sistema apresenta um comprimento de escala característico $L(t)$ associado ao tamanho típico de um domínio [21]. Geralmente, esse comprimento de escala segue uma lei de potência do tipo

$$L(t) \sim t^{1/z}, \quad (2.54)$$

onde z é conhecido como expoente de escala dinâmico. A existência de um comprimento de escala característico implica nas seguintes relações de escala para as

funções de correlação e de estrutura

$$\begin{aligned}C(\mathbf{x}, t) &= F(x/L), \\ \tilde{S}(\mathbf{q}, t) &= L^d G(qL).\end{aligned}\tag{2.55}$$

Nessas equações, a função $F(x/L)$ representa uma função de escala e a função $G(qL)$ sua transformada de Fourier. Essas relações de escala para a função de estrutura são válidas somente para longos intervalos de tempo após um *quench*. Assim, como pode ser visto nas Refs. [22], seu estudo numérico exige longos tempos de simulação.

Capítulo 3

Transições de Fase na QCD

Neste capítulo vamos apresentar uma breve discussão sobre o diagrama de fases da QCD. Iremos discutir, através de argumentos qualitativos obtidos a partir de cálculos com modelos, dados experimentais e simulações numéricas, como se chegou até a forma atual desse diagrama. Discutiremos a transição de desconfinamento na QCD apresentando sua relação com o plasma de quarks e glúons, o qual pode ser formado durante experimentos com colisões de íons pesados relativísticos. Por fim, apresentamos uma discussão sobre os parâmetros de ordem que podem ser empregados no estudo da transição de fase de desconfinamento na QCD. Nestas discussões tomamos como referências principais as Refs. [23, 24, 25, 26].

3.1 Diagrama de fases da QCD

A maneira mais conveniente de expressar as propriedades termodinâmicas de um sistema se dá através de um diagrama de fases no espaço dos parâmetros termodinâmicos. Cada ponto de um diagrama corresponde a um estado de equilíbrio termodinâmico do sistema, caracterizado por várias funções termodinâmicas, como pressão, potencial químico, densidade, etc. O diagrama de fases da QCD é definido convenientemente no plano temperatura *versus* potencial químico bariônico (T - μ_B). Esse diagrama caracteriza os estados de equilíbrio termodinâmico da matéria hadrônica, a qual é naturalmente encontrada nos núcleos atômicos e no interior de objetos estelares superdensos, como também pode ser produzida em experimentos de colisões de íons pesados relativísticos. O conhecimento atual desse diagrama de fases se deve à união de um conjunto de resultados obtidos através de cálculos com modelos, experimentos de física nuclear, simulações de QCD na rede e cálculos perturbativos no regime assintótico da QCD. Vamos descrever aqui, apresentando argumentos qualitativos, como foi realizado o processo de construção desse diagrama de fases da QCD.

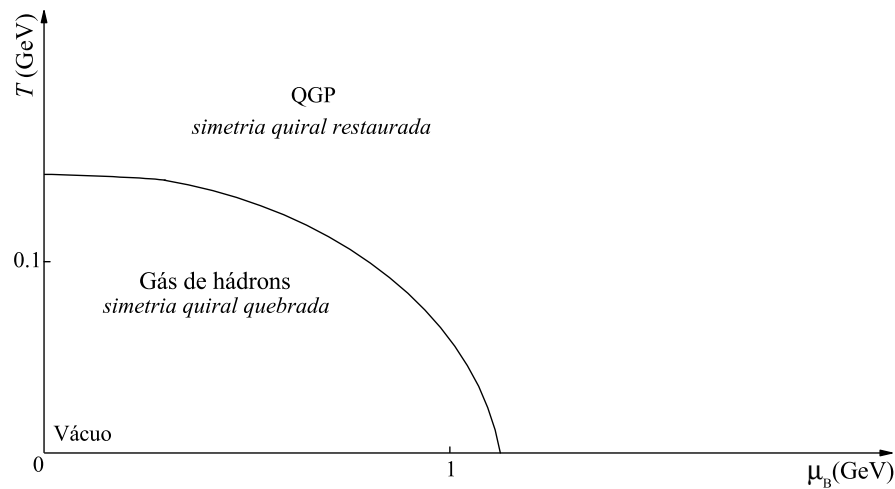


Figura 3.1: Um primeiro esboço do diagrama de fases da QCD para dois quarks sem massa determinado a partir de argumentos de simetria quiral. Figura adaptada da Ref. [23].

Na Figura 3.1 apresentamos um primeiro esboço do diagrama de fases da QCD, obtido através de argumentos baseados na simetria quiral dos sistemas hadrônicos. No limite em que a massa dos quarks u e d é nula, a Lagrangeana da QCD apresenta simetria quiral $SU(2) \times SU(2)$ para grandes valores de temperatura $T \gg \Lambda_{\text{QCD}}$ e pequenos valores de μ_B . Nessas escalas de energia, devido à propriedade de liberdade assintótica, podemos estudar as propriedades do gás de quarks e glúons (plasma de quarks e glúons – QGP) através de teorias perturbativas. Contudo, para baixos valores de T e μ_B , a simetria quiral é quebrada e a física dos sistemas hadrônicos é governada por fenômenos não-perturbativos. Desta maneira, esperamos encontrar, para uma dada temperatura $T \sim \Lambda_{\text{QCD}}$, a transição de um estado com simetria quiral quebrada para um estado de equilíbrio onde a simetria quiral é restaurada, ou seja, o diagrama de fases deve apresentar uma linha separando essas fases. A partir desses argumentos, definimos a transição de fase quiral. Entretanto, nada pode ser dito sobre a ordem dessa transição.

Pisarski e Wilczek [27], empregando argumentos de universalidade, concluem que a transição de fase para três quarks de massa nula não pode ser de segunda ordem, mas sim de primeira ordem. Por outro lado, para dois quarks sem massa, a transição pode ser tanto de segunda quanto de primeira ordem. Resultados de

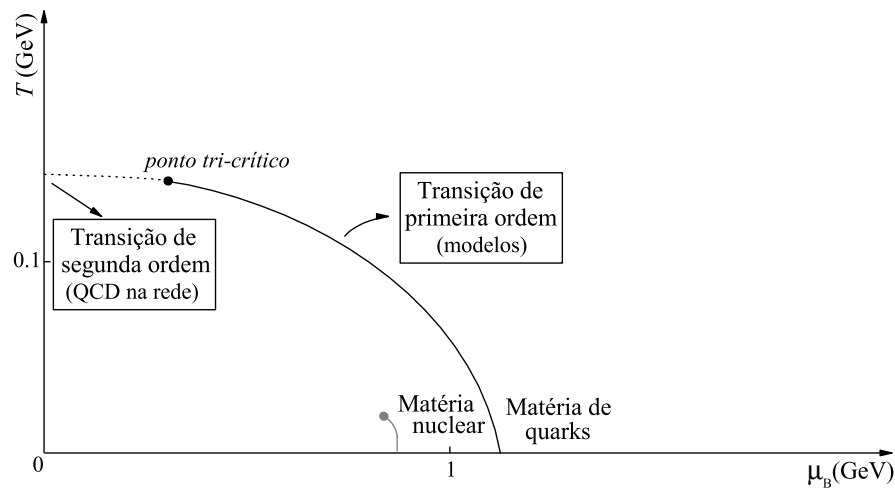


Figura 3.2: Um segundo esboço do diagrama de fases da QCD para dois quarks sem massa e um quark massivo. A linha tracejada representa a transição de segunda ordem e a linha sólida a transição de primeira ordem. Na região de baixas temperaturas a simetria quiral é quebrada na matéria nuclear. Informações sobre a estrutura da matéria para grandes valores de μ_B foram omitidos. Figura adaptada da Ref. [23].

simulações de QCD na rede e cálculos empregando modelos indicam ambas possibilidades, dependendo do valor da massa do terceiro quark (quark estranho) e/ou do potencial químico bariônico. O ponto sobre a linha da transição quiral em que a ordem da transição muda é chamado de ponto tricrítico, como mostrado na Fig. 3.2. A localização exata desse ponto é uma das grandes incógnitas da QCD com dois quarks de massa nula – nem mesmo a ordem da transição em $\mu_B = 0$ está definida, estudos mais antigos e outros recentes sugerem que ela é de segunda ordem, mas esses continuam sendo questionados [28]. Também, nada confiável pode ser dito se a transição começar como sendo de segunda ordem em $\mu_B = 0$ ela realmente muda para uma de primeira ordem. Por outro, uma grande variedade cálculos empregando modelos indicam que esse é o cenário e simulações de QCD na rede também dão suporte a um cenário desses. Avanços recentes no entendimento da QCD a baixas temperaturas e altos valores de μ_B também apontam para uma transição de primeira ordem, na região compreendida entre a matéria nuclear e matéria de quarks superdensa, possivelmente supercondutora de cor [29].

Agora, se forem considerados os valores físicos das massas dos quarks leves u e d , a situação é um pouco diferente, a transição de fase de segunda ordem, linha tracejada na Fig. 3.2, é substituída por um *crossover**. Ou seja, com uma massa finita para os quarks, não há uma simetria quiral exata e a transição entre as fases da QCD de baixa e alta temperaturas não precisa ocorrer com a existência de singularidades termodinâmicas. Simulações de QCD na rede para $\mu_B = 0$ dão suporte a esse fato. A linha da transição de primeira ordem agora termina num ponto, conhecido como o *ponto crítico da QCD*[†], como mostrado na Fig. 3.3.

A situação da QCD é muito similar ao ponto crítico da água, discutido no Capítulo 2.1. O diagrama de fases (simplificado) da água está mostrado na Fig. 2.1, onde está indicado que a transição líquido-vapor termina num ponto com pressão

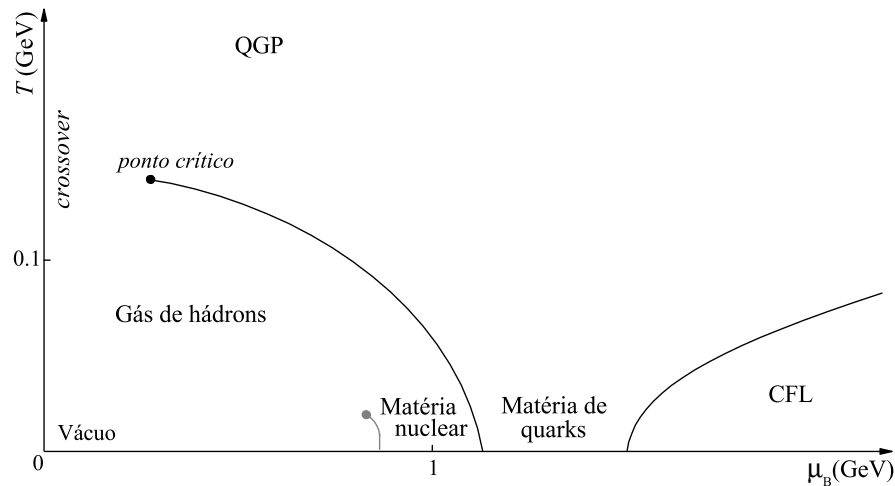


Figura 3.3: Esboço do diagrama de fases atual da QCD, definido para quarks de massa finita. Figura adaptada da Ref. [23].

*Qualquer transição de fase de segunda ordem é instável sob a variação de certos parâmetros externos ao sistema. Em alguns casos, uma variação infinitesimal no valor de algum desses parâmetros pode destruir a transição de segunda ordem. Quando isso ocorre, o sistema ainda apresenta distinção entre as duas fases, mas a transição entre elas se dá sem a presença de singularidades termodinâmicas. Esse fenômeno é conhecido como *crossover*.

[†]O ponto crítico da QCD deve ser distinguido do ponto crítico nuclear, que separa as fases líquida e gasosa da matéria nuclear – esse ponto crítico nuclear está mostrado nas Figs. 3.2 e 3.3, localizado no ponto com $\mu_B \simeq 1$ GeV e $T \simeq 10$ MeV. Quando é necessário distinguir esses pontos críticos, o primeiro é chamado de *ponto crítico quiral*.

de $P = 2.2 \times 10^8$ Pa e temperatura $T = 647$ K. Como dito lá, não há distinção qualitativa entre o vapor e o líquido além desse ponto. Na QCD, as fases coexistentes são um gás de hádrons (temperatura mais baixa) e um plasma de quarks e glúons (temperatura mais alta). Como no caso do ponto crítico da água, no ponto crítico e além dele não há distinção qualitativa entre a fase hadrônica e a de quarks e glúons. Em princípio poderia-se empregar alguma quantidade relacionada à transição de desconfinamento que poderia distinguir as duas fases. Uma dessas quantidades, apesar de não ser uma quantidade mensurável experimentalmente, é o *loop* de Polyakov, que tem sido empregado como um parâmetro de ordem para a transição de desconfinamento na teoria de gauge pura, i.e. na ausência de quarks. Logo a seguir, na Seção 3.3.1, vamos discutir esse assunto com algum detalhe mas para o momento, basta dizer que na presença de quarks essa quantidade não pode ser considerada, estritamente, como sendo uma parâmetro de ordem, nem mesmo no vácuo. No entanto, como veremos, ainda é possível empregar essa quantidade em conjunção com uma densidade conservada, a densidade bariônica, para investigar as propriedades da matéria hadrônica próxima ao ponto crítico.

Para concluir a presente discussão, mencionamos que outros estudos sobre a matéria hadrônica indicam a presença de uma transição de fase entre a matéria de quarks supercondutora de cor e a matéria conhecida como *color-flavour-locked* (CFL). Existem também, especulações sobre a existência de um *crossover* entre a matéria de quarks supercondutores e o QGP. Essas especulações aparecem indicadas na Fig. 3.3. Nesse ponto é importante reconhecer o diagrama de fases como o indicado nessa figura está longe de estar estabelecido. Em particular, como já dito, a localização precisa, ou mesmo a existência, do ponto crítico ainda é desconhecida. Sob o ponto de vista teórico, encontrar as coordenadas (T, μ_B) desse ponto consiste em calcular a função de partição da QCD e encontrar as singularidades correspondentes ao final da linha de transição quiral. No entanto, essa tarefa não é assim tão simples como pode parecer. Uma das razões, como citado anteriormente, é a natureza não perturbativa dos fenômenos que determinam a termodinâmica da QCD. Simulações de QCD na rede, presentemente, são a única maneira de tratar esses problemas diretamente a partir da QCD. No entanto, progressos nesse campo são lentos e o emprego de modelos efetivos é uma alternativa prática para fazer contato com experimentos de colisões de íons pesados a altas energias que, em última análise, têm o objetivo maior de explorar alguns aspectos do diagrama de fases da QCD. A seguir, por completeza, vamos fazer uma pequena revisão sobre esses experimentos e sua conexão com o que foi exposto até o momento.

3.2 Colisões de íons pesados relativísticos

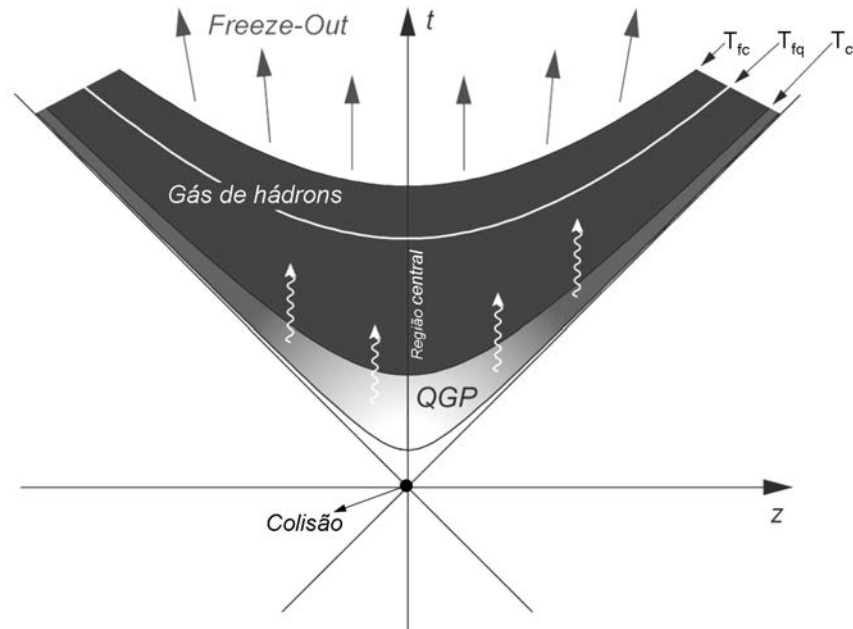


Figura 3.4: Diagrama espaço-tempo representando a evolução hidrodinâmica de um sistema formado durante uma típica colisão de íons pesados relativísticos com formação de QGP. Figura adaptada da Ref. [30].

Pesquisas experimentais sobre colisões de íons pesados relativísticos vêm sendo realizadas nos colisores *Relativistic Heavy Ion Collider* (RHIC) do BNL e em breve serão também realizadas no *Large Hadron Collider* (LHC) do CERN. A principal característica dos experimentos com colisões de íons pesados é a grande quantidade de energia que pode ser armazenada durante o processo, possibilitando a criação de matéria hadrônica sob condições de altas temperaturas e grandes energias de excitação. Portanto, espera-se que esses experimentos favoreçam o estudo do comportamento da matéria hadrônica nas proximidades do possível ponto crítico da QCD. Se durante uma colisão desse tipo quantidade suficiente de energia cinética for transformada, em temperatura o *quark gluon plasma* (QGP) será formado. O QGP é um estado da matéria hadrônica onde os quarks e glúons encontram-se desconfinados, formando um sistema (possivelmente) em equilíbrio termodinâmico, onde os graus de liberdade de cor começam a se manifestar sobre os nucleares.

Uma colisão de íons pesados relativísticos ocorre quando os núcleos presentes

em um feixe de íons se chocam com os núcleos de outro feixe. Durante esse processo os núcleos interagem entre si, e devido a essa interação, grande quantidade de energia é acumulada na região central de interação entre os feixes, conhecida como *fireball*. Nessa região de altas energias ocorre a criação de novas partículas e eventualmente a formação do QGP. Na Figura 3.4, apresentamos um diagrama espaço-tempo representando a evolução hidrodinâmica de um sistema formado durante uma típica colisão de íons pesados relativísticos com formação de QGP. Inicialmente, os feixes caminham em sentidos opostos ao longo do eixo z até interagirem no ponto de colisão. A partir daí, o sistema passa por uma rápida fase de pré-equilíbrio e ocorre a formação de QGP, fase de equilíbrio. Este, por sua vez, inicia um processo de resfriamento, através de uma expansão hidrodinâmica do sistema, até atingir a temperatura crítica T_c . Nesse estágio, ocorre uma transição da fase QGP para a fase de gás de hádrons. O sistema continua se expandindo até atingir a temperatura de *freeze-out* químico T_{fq} , onde as interações inelásticas entre as componetes hadrônicas do sistema são cessadas. Em seqüência, ocorre um *freeze-out* cinético em T_{fc} , onde as partículas criadas não trocam mais momento e evoluem até os detectores.

Assumindo então que o sistema evolui de acordo com esse diagrama espaço-tempo as fases da reação nuclear desde a colisão até a produção das partículas que serão detectadas podem ser representadas de maneira pictórica como na Figura 3.5. A reação se inicia com os dois núcleos viajando com velocidades relativísticas (panquecas de Lorentz). Nessa fase inicial há apenas os quarks e glúons confinados no interior dos núcleos. Após a colisão, os núcleos começam a interagir entre si e uma grande quantidade de energia é armazenada no centro do sistema formando a *fireball*. Inicia-se, então, o processo de criação de vários quarks e glúons devido às colisões inelásticas entre os quarks dos núcleos. Esses novos quarks e glúons passam a inte-

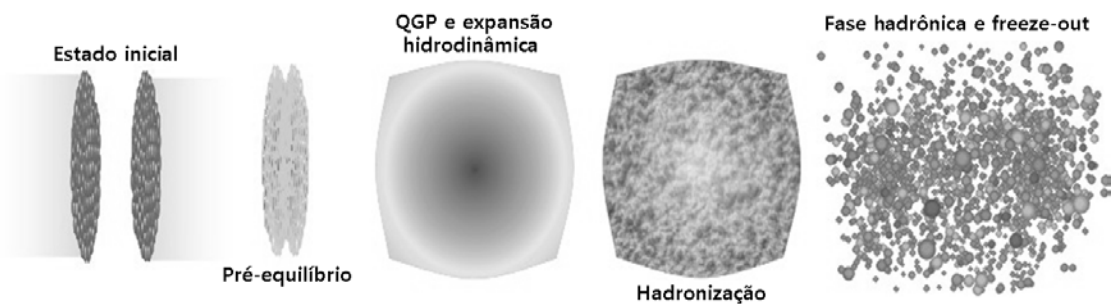


Figura 3.5: Esquema de uma colisão entre dois núcleos com velocidades relativísticas e as fases pós-colisão. Figura adaptada da Ref. [31].

ragir entre si, dando origem a fase de pré-equilíbrio do sistema. As interações entre partículas persistem até a *fireball* atingir um ponto de equilíbrio termodinâmico com a formação do QGP. O sistema criado começa a se expandir e, conseqüentemente, vai se resfriando até atingir o ponto onde ocorre uma transição de fase e o sistema inicia o processo de hadronização até que ocorra o *freeze-out* cinético, formação do gás de hádrons. A conversão da fase de pré-equilíbrio para a fase de QGP provavelmente se dá através de processos fora do equilíbrio.

A descrição detalhada de cada uma dessas etapas de uma colisão de íons pesados envolve intrincados modelos cuja conexão com a QCD, muitas vezes, não é muito clara. Na presente dissertação estamos interessados na fase em que o sistema evolui a partir da formação do ponto crítico em direção ao resfriamento, passando por uma fase mista em que tanto matéria desconfinada quanto a matéria hadrônica estão presentes no sistema. Em nosso estudo vamos nos concentrar na separação dessas fases, fazendo uso de equações cinéticas que descrevem a evolução da densidade bariônica (parâmetro de ordem conservado) e o *loop* de Polyakov que, como dito acima, na teoria de gauge pura pode ser considerado como sendo parâmetro de ordem da transição de desconfinamento. Na próxima seção, vamos motivar o uso dessa quantidade como parâmetro de ordem e, a seguir, vamos considerar um modelo efetivo para a energia livre associada a esse parâmetro de ordem.

3.3 Transição de desconfinamento na QCD: Parâmetros de ordem

No capítulo anterior, apresentamos alguns modelos estocásticos usualmente empregados no estudo das transições de fase dinâmicas. Vimos que as transições são caracterizadas por parâmetros de ordem que distinguem as fases que o sistema pode apresentar. Vamos apresentar agora, como aplicar esses modelos à transição de fase de desconfinamento na QCD e apresentar os parâmetros de ordem que caracterizam essa transição de fase.

As equações de Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard apresentadas no capítulo anterior são equações puramente difusivas e, como a maioria das equações desse tipo, violam a causalidade. Assim, em sistemas reais onde as escalas típicas de tempo microscópico são grandes se comparadas com as demais escalas de tempo, a causalidade deve ser respeitada. Por exemplo, na análise hidrodinâmica do *freeze-out* de temperatura em colisões centrais de Au-Au a 130 A GeV, o tempo típico de reação está em torno de 10-20 fm/c. Contudo, a escala típica de tempo microscópico é da ordem de 1 fm/c, indicando que a causalidade deve ser respeitada nesse tipo

de colisão [32]. Como dito anteriormente, as colisões de íons pesados relativísticos podem fornecer informações importantes sobre o ponto crítico da QCD e, como tal, é importante incorporar efeitos de memória numa descrição fenomenológica através de equações do tipo Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard, equações (2.16) e (2.24).

As Refs [32, 33] apresentam uma maneira de incluir efeitos de memória nessas equações – no Apêndice B, apresentamos uma revisão sobre esses procedimentos e discutimos rapidamente a importância dos efeitos de memória à essas equações difusivas. As Eqs. (2.16) e (2.24) são modificadas de maneira que ficam sendo

$$\tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta \mathcal{H}_T}{\delta \phi} + \zeta, \quad (3.1)$$

$$\gamma \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \Lambda \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{H}_T}{\delta \rho} + \xi, \quad (3.2)$$

onde ϕ é o parâmetro de ordem não conservado e ρ o parâmetro de ordem conservado. O acoplamento entre essas equações, Modelo C, segue a mesma forma das equações sem efeitos de memória. Deste ponto em diante, ao nos referirmos às equações de Ginzburg-Landau e de Cahn-Hilliard estaremos nos referindo às Eqs. (3.1) e (3.2) acima.

3.3.1 Loop de Polyakov

Como dito anteriormente, o desconfinamento na QCD pode ser descrito como uma transição de fase com um parâmetro de ordem bem definido no limite de quarks infinitamente pesados. Nesse limite, a QCD se torna uma teoria de gauge pura. Para explicar de maneira mais transparente o significado do *loop* de Polyakov, vamos considerar a função de partição da QED na presença de cargas externas – vamos seguir de perto a Ref. [25]. Consideremos uma distribuição de cargas externas positivas e negativas, puntiformes e estáticas, cuja densidade pode ser escrita como

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_n \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}_m), \quad (3.3)$$

onde \mathbf{x}_n representa a posição da n -ésima carga positiva e \mathbf{y}_m a posição da m -ésima carga negativa. A função de partição a uma temperatura $T = 1/\beta$ para esse sistema pode ser escrita em termos de uma integral funcional sobre os campos de gauge A_μ como

$$Z[\rho] = \int \mathcal{D}A_\mu \exp(-S_E) \exp\left(i \int dx dt \rho A_0\right), \quad (3.4)$$

onde os campos A_μ são periódicos em $0 \leq t \leq \beta$ e S_E é a ação Euclidiana

$$S_E = \frac{1}{4} \int_0^\beta dt \int dx F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \quad (3.5)$$

com $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$. Para a distribuição de cargas acima, a função de partição pode ser reescrita como

$$Z[\rho] = \int \mathcal{D}A_\mu \exp(-S_E) \prod_n \exp \left[i \int_0^\beta dt A_0(\mathbf{x}_n, t) \right] \prod_m \exp \left[-i \int_0^\beta dt A_0(\mathbf{y}_m, t) \right]. \quad (3.6)$$

Definindo a quantidade

$$L(\mathbf{x}) = \exp \left[i \int_0^\beta dt A_0(\mathbf{x}, t) \right], \quad (3.7)$$

podemos expressar a função de partição em termos de $L(\mathbf{x})$ como

$$Z[\rho] = Z[\rho = 0] \left\langle \prod_n L(\mathbf{x}_n) \prod_m L^\dagger(\mathbf{y}_m) \right\rangle. \quad (3.8)$$

O valor esperado presente na equação acima é definido como

$$\langle \mathcal{O} \rangle = Z^{-1}[\rho = 0] \int \mathcal{D}A_\mu \exp(-S_E) \mathcal{O}[A_\mu]. \quad (3.9)$$

Ou seja, a função de partição para uma distribuição de cargas elétricas estáticas na teoria de gauge pura pode ser escrita como uma função de correlação das quantidades $L(\mathbf{x}_n)$ e $L^\dagger(\mathbf{y}_m)$. A quantidade $L(\mathbf{x}_n)$ é conhecida como *loop* de Polyakov, também conhecida como *linha de Wilson*.

A partir da função de partição definida na equação (3.8), podemos encontrar uma relação entre o *loop* de Polyakov e a energia livre F . Para o estado de vácuo, ausência de cargas ($\rho = 0$), a energia livre F_0 não depende de L ,

$$F_0 = -\frac{1}{\beta} \ln Z[\rho = 0]. \quad (3.10)$$

No caso de uma única carga obtemos

$$\langle L(\mathbf{x}) \rangle = e^{-\beta(F_q - F_0)}. \quad (3.11)$$

Já para um par de cargas (uma positiva e outra negativa) estáticas $q\bar{q}$ separados por uma distância \mathbf{r} , é fácil mostrar que

$$\langle L(\mathbf{x}) L^\dagger(\mathbf{x} + \mathbf{r}) \rangle = e^{-\beta(F_{q\bar{q}}(\mathbf{r}) - F_0)}. \quad (3.12)$$

Para uma transformação de gauge genérica,

$$A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \Lambda, \quad (3.13)$$

onde Λ é uma função arbitrária, o *loop* de Polyakov L se transforma como

$$L(\mathbf{x}) \rightarrow \exp [i (\Lambda(\mathbf{x}, \beta) - \Lambda(\mathbf{x}, 0))] L(\mathbf{x}). \quad (3.14)$$

Por outro lado, para uma transformações de gauge periódica

$$\Lambda(\mathbf{x}, \beta) = \Lambda(\mathbf{x}, 0), \quad (3.15)$$

temos que o *loop* de Polyakov L é invariante para esse tipo particular de transformação de gauge.

Agora, podemos generalizar a derivação acima para uma teoria de gauge não Abelianas contendo graus de liberdade de cor $SU(N)$. Considerando agora que ρ é um operador de quarks com graus de liberdade de cor, podemos definir o *loop* de Polyakov não Abelianas como sendo

$$L(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \text{Tr} \Omega(\mathbf{x}), \quad (3.16)$$

onde

$$\Omega(\mathbf{x}) = T \exp \left[i \int_0^\beta A_0^a(\mathbf{x}, t) t^a dt \right], \quad (3.17)$$

onde T significa ordenamento no tempo, t^a são os geradores da álgebra de Lie e a representa os graus de liberdade de cor. Como para o caso Abelianas podemos estabelecer relações entre o *loop* de Polyakov e a energia livre. Para os casos de vácuo e de apenas um quark as equações (3.10) e (3.11) valem, ou seja, $\langle L(\mathbf{x}) \rangle = 0$ implica em confinamento e $\langle L(\mathbf{x}) \rangle \neq 0$ implica desconfinamento. Funções de correlação de *loops* de Polyakov na teoria não Abelianas diferem da Eq. (3.12), envolvendo energias livres referentes a diferentes representações do grupo de gauge. No entanto, a interpretação é a mesma, de que essas funções de correlação medem a energia livre como função da separação entre as cargas de cor estáticas.

Sob uma transformação de gauge não Abelianas arbitrária U , i.e.

$$A_\mu \rightarrow U A_\mu U^{-1} + i U \partial_\mu U^{-1}, \quad (3.18)$$

onde $U \in SU(N)$ e $A_\mu \equiv A_\mu^a t^a$, temos que L se transforma como

$$L(\mathbf{x}) \rightarrow \frac{1}{N} \text{Tr} U(\mathbf{x}, 0) \Omega(\mathbf{x}) U^\dagger(\mathbf{x}, \beta). \quad (3.19)$$

Portanto, analogamente ao caso Abelianas, L é invariante quando U é periódico. Agora, existe uma simetria na teoria que implica que $\langle L(\mathbf{x}) \rangle = 0$. Para ver isso, vamos fazer uma transformação de gauge $U(\mathbf{x}, t)$ sobre os campos de gauge A_μ que não seja periódica, mas satisfaça a condição

$$U(\mathbf{x}, 0) = z U(\mathbf{x}, \beta), \quad z = e^{2\pi i n/N} I, \quad (3.20)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Sob uma transformação tal, a condição de periodicidade dos campos A_μ claramente é mantida e a ação é invariante, mas L não é invariante,

pois

$$\begin{aligned} L &\rightarrow \frac{1}{N} \text{Tr} U(\mathbf{x}, 0) \Omega(\mathbf{x}) U^\dagger(\mathbf{x}, \beta) = \frac{1}{N} \text{Tr} z U(\mathbf{x}, \beta) \Omega(\mathbf{x}) U^\dagger(\mathbf{x}, \beta) \\ &= z \frac{1}{N} \text{Tr} U(\mathbf{x}, \beta) \Omega(\mathbf{x}) U^\dagger(\mathbf{x}, \beta) = z \frac{1}{N} \text{Tr} \Omega(\mathbf{x}) = z L. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Deste resultado, segue-se da definição de $\langle L(\mathbf{x}) \rangle$ que

$$\langle L(\mathbf{x}) \rangle = z \langle L(\mathbf{x}) \rangle. \quad (3.22)$$

Portanto, esse resultado implica que

$$\langle L(\mathbf{x}) \rangle = 0, \quad (3.23)$$

e, em vista da identificação com a energia livre de um quark, Eq. (3.11), segue que a teoria confina. Agora, se a simetria é quebrada espontaneamente, i.e. a ação é simétrica sob a transformação de calibre mas os estados não refletem essa simetria, $\langle L(\mathbf{x}) \rangle \neq 0$ para alguma temperatura. Também, pode-se mostrar [25] que na fase confinada, a função de correlação decai exponencialmente com a distância entre o quark e antiquark,

$$\Gamma(\mathbf{r}) \equiv \langle L(\mathbf{0}) L^\dagger(\mathbf{r}) \rangle \sim e^{-\sigma|\mathbf{r}|/T}. \quad (3.24)$$

Isso leva à interpretação da formação de um tubo de fluxo (*flux tube* ou *string*) entre o quark e o antiquark, como se fosse um “potencial” que cresce linearmente com a distância de separação, com $\sigma = \sigma(T)$ sendo a tensão na corda (*string tension*). Por outro lado, na fase de altas temperaturas, quando $\langle L(\mathbf{x}) \rangle \neq 0$, a função de correlação se comporta como

$$\Gamma(\mathbf{r}) \equiv \langle L(\mathbf{0}) L^\dagger(\mathbf{r}) \rangle \sim 1 + \frac{C}{T} \frac{e^{-m_D|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|}, \quad (3.25)$$

com m_D sendo a massa de Debye (para a teoria de gauge pura), e C uma constante que depende da constante de acoplamento. Ou seja, na fase desconfinada, o “potencial” passa a ser de curto alcance, do tipo de Yukawa.

Tecnicamente, $z = e^{2\pi i n/N} I$ é um elemento do grupo $Z(N)$, o centro do grupo[‡] $SU(N)$. Note que o que está sendo quebrado espontaneamente é uma simetria global, pois $Z(N)$ é um grupo Abelian, a simetria local, não Abelian, permanece intacta, o que está de acordo com o teorema de Elitzur [34], que estabelece que uma simetria de gauge local não pode ser quebrada espontaneamente.

Simulações de QCD pura (i.e. sem quarks) mostram exatamente isso, que para uma temperatura T maior que uma temperatura crítica T_c , $\langle L(\mathbf{x}) \rangle \neq 0$ – um dos

[‡]O centro de um grupo G , denotado em geral por $Z(G)$, é o conjunto de elementos que comuta com cada elemento de G . Isto é $Z(G) = \{z \in G | zg = gz \text{ para cada } g \in G\}$.

primeiros trabalhos a mostrar isso na teoria de gauge $SU(2)$ foi o trabalho de McLerran e Svetitsky [35]. Como conclusão, temos então que podemos usar o valor médio do *loop* de Polyakov como um parâmetro de ordem da transição de desconfinamento da QCD pura.

Quando quarks dinâmicos (i.e. não estáticos) são acoplados a férmions a temperatura finita, não há simetria $Z(N)$. Como vimos, transformações como na Eq. (3.20) não mudam as condições de contorno periódicas dos campos de gauge A_μ , mas elas não preservam as condições de contorno antiperiódicas dos campos de férmions dos quarks $\psi(\mathbf{x}, t)$. Isto é, se $\psi(\mathbf{x}, 0) = -\psi(\mathbf{x}, \beta)$, então sob transformações como na Eq. (3.20) temos que

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, 0) &\rightarrow \psi'(\mathbf{x}, 0) = U(\mathbf{x}, 0)\psi(\mathbf{x}, 0) \\ \psi(\mathbf{x}, \beta) &\rightarrow \psi'(\mathbf{x}, \beta) = U(\mathbf{x}, \beta)\psi(\mathbf{x}, \beta) = zU(\mathbf{x}, 0)\psi(\mathbf{x}, \beta) \\ &= -zU(\mathbf{x}, 0)\psi(\mathbf{x}, 0), \end{aligned} \tag{3.26}$$

ou seja, se $\psi(\mathbf{x}, 0) = -\psi(\mathbf{x}, \beta)$, sob a transformação de gauge que satisfaz a Eq. (3.20) temos que $\psi'(\mathbf{x}, 0) \neq -\psi'(\mathbf{x}, \beta)$. Como não existe simetria $Z(N)$, espera-se então que $\langle L(\mathbf{x}) \rangle \neq 0$. Ainda mais, em princípio, poderia-se esperar que o valor de $\langle L(\mathbf{x}) \rangle$ seja sempre não nulo e grande para qualquer temperatura. No entanto, não é isto que simulações recentes de QCD na rede [36] com quarks dinâmicos mostram: na verdade, os resultados mostram que não há diferenças qualitativas muito grandes entre a situação com quarks e sem quarks. Os resultados da Ref. [36] mostram que o valor médio do *loop* de Polyakov cresce de zero a um à medida que a temperatura cresce, sendo que esse crescimento é muito rápido para $T \simeq 200$ MeV.

Qualitativamente é muito simples compreender o que se passa com a presença de quarks dinâmicos na teoria [25]. Informações sobre o confinamento estão contidas nas funções de correlação de *loops* de Polyakov, as quais revelam o que acontece quando a separação entre as cargas de cor aumenta. No limite de temperatura baixa, um par $q\bar{q}$ (méson) é criado a partir do vácuo e vai “encobrir” a cor dos quarks estáticos. Isto é, à medida que a distância entre os quarks estáticos é aumentada, o tubo de fluxo eventualmente vai quebrar com a criação de um par quark-antiquark do vácuo formando novos tubos de fluxo e, assim, todos os quarks ficam permanentemente confinados. No limite de temperatura alta, o “potencial” $q\bar{q}$ é “blindado” pelos quarks, antiquarks e glúons que estão presentes no sistema a altas temperaturas. Ou seja, o tubo de fluxo deixa de existir pela blindagem. A física qualitativa nos dois regimes é a mesma, enquanto que a baixas temperaturas a linguagem hadrônica é mais adequada para descrever o fenômeno, no limite de altas temperaturas a linguagem mais adequada é em termos de quarks e glúons.

Em vista da discussão acima, o emprego de modelos efetivos para o *loop* de Polyakov mesmo na presença de quarks para investigar propriedades dinâmicas do ponto crítico da QCD parece ser justificado. Conforme já mencionado, o emprego de modelos é importante para o estudo da dinâmica de desconfinamento da QCD em vista das limitações intrínsecas da QCD na rede para estudos dessa natureza. Na próxima Seção, vamos discutir um desses modelos fenomenológicos para o potencial efetivo (energia livre) para *loops* de Polyakov a temperatura finita, o qual pode ser empregado numa equação de Ginzburg-Landau para descrever a dinâmica da transição de desconfinamento. Logo a seguir, na Seção 3.3.3, vamos discutir um modelo para a dinâmica da densidade bariônica próximo ao ponto crítico. Por fim, na Seção 3.3.4 vamos discutir o acoplamento do *loop* de Polyakov com a densidade bariônica, o que leva ao acoplamento das equações de Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard.

3.3.2 Um modelo para a energia livre de loops de Polyakov

Aqui vamos discutir um modelo particular para o potencial efetivo de *loops* de Polyakov para descrever a transição de desconfinamento. Vários modelos dessa natureza têm sido desenvolvidos recentemente [37]-[47], alguns desses direcionados ao problema do desconfinamento somente e outros considerando conjuntamente o problema da restauração da simetria quiral. Aqui nessa dissertação vamos nos restringir à classe de modelos desenvolvido nas Refs. [37, 38, 39]. Ainda mais, vamos nos restringir, por simplicidade, para o caso de uma teoria de gauge $SU(2)$ – o caso de uma teoria $SU(3)$ será comentado a seguir.

No modelo das Refs. [37, 38, 39], o potencial efetivo é construído para os autovalores do *loop* de Polyakov. Especificamente, em qualquer ponto do espaço-tempo, o *loop* de Polyakov pode ser diagonalizado e escrito da seguinte maneira

$$L = \begin{pmatrix} e^{i\pi q} & \\ & e^{-i\pi q} \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

onde $0 \leq q \leq 1$. Como vimos acima, o parâmetro de ordem é a média termodinâmica do traço do *loop* de Polyakov L na representação fundamental do grupo

$$L_F = \frac{1}{2} \text{Tr} L = \cos(\pi q) = \cos[\pi(1 - \phi)/2], \quad (3.28)$$

onde foi introduzida a quantidade ϕ , relacionada a q por $q = (1 - \phi)/2$, onde, então, $-1 \leq \phi \leq +1$. A energia livre para ϕ pode ser calculada empregando teoria de perturbação [48, 49]. Para ϕ independente da posição, o resultado para a densidade

de energia livre a uma temperatura T pode ser escrito como

$$f_{\text{pert}}(\phi) = -\frac{\pi^2 T^4}{15} + \frac{\pi^2 T^4}{12} (1 - \phi^2)^2. \quad (3.29)$$

O primeiro termo acima é a contribuição de corpo negro. Agora, para estudar a dinâmica de ϕ , é necessário incluir a sua dependência na posição para descrever a separação de fases e a formação de possíveis interfaces. A derivação para esse caso foi feita nas Refs. [50, 51]. O resultado acima se mantém, com adição de uma contribuição na forma de um gradiente e a Eq. (3.29) torna-se

$$\begin{aligned} f(\phi) &= \frac{\pi^2 T^2}{2g^2} (\nabla\phi)^2 + f_{\text{pert}} \\ &= -\frac{\pi^2 T^4}{15} + \frac{\pi^2 T^2}{2g^2} (\nabla\phi)^2 + \frac{\pi^2 T^4}{12} (1 - \phi^2)^2, \end{aligned} \quad (3.30)$$

onde g é a constante de acoplamento da QCD. A altas temperaturas, essa contribuição perturbativa não pode descrever uma transição de fase, pois $f(\phi)$ não possui mínimos na região $-1 < \phi < +1$, como pode ser facilmente verificado.

No modelo das Refs. [37, 38, 39], a possibilidade de uma transição de fase pode ser incorporada fenomenologicamente através de uma descrição de quase-partículas em que uma massa M é atribuída para os glúons, a qual vai determinar uma temperatura crítica T_d para o desconfinamento. O cálculo da contribuição de glúons massivos no limite de altas temperaturas introduz um termo extra, que chamamos de $f_{gl-mass}(\phi)$, cuja forma é dada por [38]

$$f_{gl-mass} = -\frac{M^2 T^2}{4} (1 - \phi^2). \quad (3.31)$$

Com isso, temos então que a densidade de anergia livre do modelo, f_{Polyakov} , é dada por

$$f_{\text{Polyakov}} = -\frac{\pi^2 T^4}{15} + \frac{\pi^2 T^2}{2g^2} (\nabla\phi)^2 + \frac{\pi^2 T^4}{12} (1 - \phi^2)^2 - \frac{M^2 T^2}{4} (1 - \phi^2). \quad (3.32)$$

Para deixar evidente a existência de uma transição de fase, reescrevemos a expressão acima na forma

$$f_{\text{Polyakov}} = \frac{\pi^2 T^4}{60} - \frac{T^2 M^2}{4} + \frac{\pi^2 T^2}{2g^2} (\nabla\phi)^2 - \frac{\pi^2 T^4}{6} \left(1 - \frac{3M^2}{2\pi^2 T^2}\right)^2 \phi^2 + \frac{\pi^2 T^4}{12} \phi^4. \quad (3.33)$$

Nessa forma, fica explícito que para uma temperatura $T < T_d$, onde

$$T_d^2 = \frac{3}{2\pi^2} M^2, \quad (3.34)$$

o termo proporcional a ϕ^2 troca de sinal, deixando a densidade de energia livre com um único mínimo em $\phi = 0$. Para $T > T_d$, a densidade de energia livre possui dois mínimos para $\phi_{\pm} = \pm(1 - T_d^2/T^2)^{1/2}$, e um máximo em $\phi = 0$. Para $T < T_d$, temos que o *loop* de Polyakov é $L_F = 0$, e para $T \gg T_d$, $L_F \rightarrow 1$, sendo igual a um no limite de $T \rightarrow \infty$.

Ao considerarmos a presença de quarks, a simetria $Z(N)$ é explicitamente quebrada e o valor médio do *loop* de Polyakov passa a ser finito na fase confinada. Contudo, as fases confinada e desconfinada ainda apresentam valores diferentes para L_F e uma transição pode ser caracterizada, apesar de não ser uma transição de fase no sentido estrito do termo. A contribuição de N_f quarks sem massa para a densidade de energia livre, f_{quarks} , é dada por [48]

$$f_{\text{quarks}} = \frac{N_f \pi^2 T^4}{96} (7 + 2\phi - \phi^2)(1 - \phi)^2. \quad (3.35)$$

Notamos que essa transição de fase do modelo é de segunda ordem. No caso de $SU(3)$, um modelo similar ao descrito acima, leva a uma transição (fraca) de primeira ordem. Ela é fraca no sentido que a descontinuidade na densidade de energia livre na temperatura crítica não é muito acentuada. Simulações da equação de Ginzburg-Landau para o modelo $SU(3)$ mostram [8] que nada qualitativamente diferente acontece em relação ao modelo $SU(2)$, no que se refere à termalização do sistema após um aumento rápido da temperatura, em que o sistema passa da fase confinada para a desconfinada. Por essa razão, nos limitamos na presente dissertação ao modelo $SU(2)$.

Por fim, temos então que a energia livre \mathcal{H}_{GL} do modelo é dada por (deixando de lado termos independentes de ϕ , que não contribuem para a equação de Ginzburg-Landau)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{GL} &= \int d^3x \left[\frac{\pi^2 T^2}{2g^2} (\nabla\phi)^2 - \frac{\pi^2 T^4}{6} \left(1 - \frac{T_d^2}{T^2}\right) \phi^2 + \frac{\pi^2 T^4}{12} \phi^4 \right. \\ &\quad \left. + \frac{N_f \pi^2 T^4}{96} (7 + 2\phi - \phi^2)(1 - \phi)^2 \right] \\ &= \frac{\pi^2 T^4}{3} \int d^3x \left[\frac{1}{2} \xi_\phi^2 (\nabla\phi)^2 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{T_d^2}{T^2}\right) \phi^2 + \frac{1}{4} \phi^4 \right. \\ &\quad \left. + \frac{N_f}{32} (7 + 2\phi - \phi^2)(1 - \phi)^2 \right], \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde definimos um comprimento de correlação $\xi_\phi^2 = 6/g^2 T^2$. Com isso, temos então que a equação para ϕ pode ser escrita como

$$\tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\Gamma_\phi \frac{\delta \mathcal{H}_\phi}{\delta \phi} + \zeta_\phi, \quad (3.37)$$

onde

$$\mathcal{H}_\phi = \int d^3x \left[\frac{1}{2} \xi_\phi^2 (\nabla\phi)^2 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{T_d^2}{T^2} \right) \phi + \frac{1}{4} \phi^4 + \frac{N_f}{32} (7 + 2\phi - \phi^2)(1 - \phi)^2 \right], \quad (3.38)$$

e

$$\Gamma_\phi = \frac{\pi^2 T^4}{3} \Gamma. \quad (3.39)$$

3.3.3 Dinâmica da densidade bariônica próxima ao ponto crítico

Na presente Seção vamos discutir a dinâmica da separação de fases próximo ao ponto crítico. Conforme discutido acima, tanto argumentos teóricos como simulações de QCD na rede sugerem a existência de um ponto crítico. A uma temperatura e densidade apropriadas, a matéria pode formar uma fase mista consistindo de gotas de plasma (matéria desconfiada) em equilíbrio com um fluido hadrônico (matéria confinada). Isso significa que a densidade bariônica pode ser empregada como um parâmetro de ordem. Caso seja possível formar uma fase mista dessa natureza em colisões de íons pesados a altas energias, essa fase deve produzir flutuações em observáveis dessas colisões no estágio de hadronização – ver Fig. 3.5. O estudo dessas flutuações como função de parâmetros de controle, como a energia de colisão, é possível obter informações sobre o diagrama de fases da QCD [12, 13]. Em particular, a fase mista pode produzir flutuações extraordinárias de número bariônico à medida que o sistema se hadroniza [14, 15, 16]. Flutuações de quantidades conservadas, como da carga elétrica, número bariônico e estranheza totais são observáveis ideais devido ao fato de que leis de conservação limitam a dissipação que essas cargas sofrem no processo de hadronização. A dissipação ocorre por difusão e a necessidade do emprego de equações que levem em conta de alguma forma efeitos de causalidade é importante nesse contexto, como já comentado no início da presente Seção.

Na Fig. 3.6(a) apresentamos um diagrama de fases esquemático da QCD no plano $(T-\rho)$. Após um *quench* para a região de metaestabilidade a partir do ponto crítico com densidade ρ_c , um sistema uniforme evolui para o equilíbrio através do processo de nucleação, como visto no Capítulo anterior. Nesse processo o sistema se separa em gotas a uma densidade bariônica alta ρ_q rodeadas por matéria a uma densidade ρ_h – os subíndices q e h indicam fases de quarks e de hádrons, respectivamente. Esse estado formado por regiões de densidade ρ_h e regiões de densidade ρ_q é o estado de fase mista. A descrição de um estado desse tipo pode ser feita considerando-se o Hamiltoniano de Ginzburg-Landau [26]

$$\mathcal{H}_{CH} = \int d^3x \left[\frac{\kappa}{2} (\nabla\rho)^2 + f_0 \right], \quad (3.40)$$

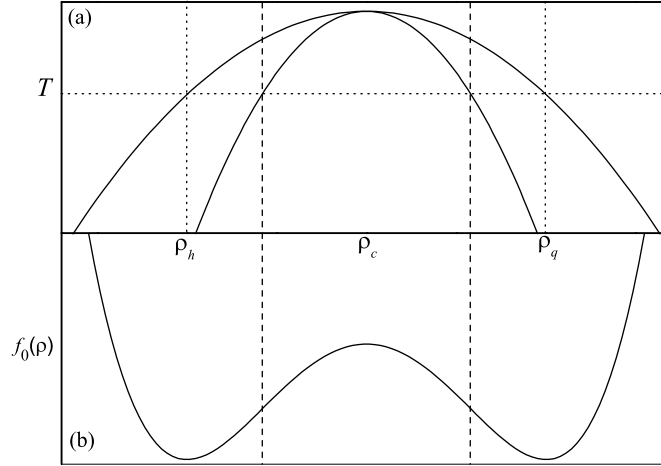


Figura 3.6: (a) Diagrama de fases esquemático no plano temperatura *versus* densidade bariônica; (b) Esboço da densidade de energia livre f_0 .

onde f_0 é uma densidade de energia livre do tipo

$$f_0 = -\frac{m^2}{2}(\rho - \rho_c)^2 + \frac{\lambda}{4}(\rho - \rho_c)^4. \quad (3.41)$$

A constante κ representa a tensão superficial de cada domínio, λ é uma constante positiva e $m^2 = m_0^2(1 - T/T_d)$. A quantidade

$$\xi = \sqrt{\kappa/m^2} \quad (3.42)$$

é o comprimento de correlação do sistema. Os valores ρ_h e ρ_q apresentados na figura 3.6(b) correspondem às densidades de equilíbrio para $T < T_d$, onde $\rho_h = \rho_c - \Delta\rho$ e $\rho_q = \rho_c + \Delta\rho$ com $\Delta\rho = \sqrt{m^2/\lambda}$.

Uma descrição puramente difusiva do processo de separação de fases de maneira que o número bariônico seja conservado é obtida com uma equação de Cahn-Hilliard da forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \Lambda \nabla^2 \left(-\kappa \nabla^2 \rho + \frac{\partial f_0}{\partial \rho} \right). \quad (3.43)$$

Para ilustrar a física difusiva descrita por essa equação, vamos considerar pequenas flutuações com comprimentos de onda $\lambda \sim 1/k$ e de amplitude $\delta\rho_k$ sobre uma configuração de matéria hadrônica a uma densidade ρ_h ,

$$\rho(\mathbf{x}) = \rho_h + \delta\rho_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad (3.44)$$

com $\delta\rho_k \ll \rho_h$. Nessas condições, o sistema encontra-se próximo ao mínimo de f_0 e, portanto,

$$f'(\rho) \simeq f'(\rho_h) + (\rho - \rho_h)f''(\rho_h) \approx f''(\rho_h)\delta\rho_k = 2m^2\delta\rho_k, \quad (3.45)$$

já que $f'(\rho_h) = 0$. Portanto, para flutuações suaves (comprimentos de onda grandes), temos que

$$\frac{\partial\delta\rho_k}{\partial t} = 2m^2\Lambda\nabla^2\delta\rho_k, \quad (3.46)$$

que é a equação da difusão, em que identificamos a constante de difusão bariônica em ρ_h como sendo $D = 2m^2\Lambda$. Portanto, difusão força o sistema para a homogeneidade toda vez que $f''(\rho) > 0$.

Agora, se consideramos um *quench* para a região de instabilidade da Fig. 3.6(a), a separação de fases se dá através do fenômeno da decomposição espinodal. Nesse processo existe uma escala de tempo τ_R caracterizando os modos mais rápidos. Consideremos agora uma pequena flutuação em torno de ρ_c , ou seja,

$$\rho = \rho_c + \delta\rho_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}. \quad (3.47)$$

Para $t \approx 0$, podemos fazer uma aproximação linear na energia livre, desprezando o termo quártico em $f_0(\rho)$, e obtemos a seguinte expressão

$$\frac{\partial\delta\rho_k}{\partial\tau} = \Lambda m^2 k^2 \left(1 - \frac{\kappa}{m^2} k^2\right) \delta\rho_k \equiv \frac{\delta\rho_k}{\tau_R}. \quad (3.48)$$

Para modos com $k^2 \leq m^2/\kappa$ as flutuações crescem exponencialmente no tempo. Esse crescimento exponencial caracteriza o processo da decomposição espinodal, como discutido no Capítulo anterior. O modo mais rápido apresenta $k_R = \sqrt{m^2/2\kappa}$, e é caracterizado pela escala de tempo $\tau_R = 8\xi^2/D$, onde ξ é o comprimento de correlação, Eq. (3.42).

A descrição acima através da equação de Cahn-Hilliard da Eq. (3.43) é puramente difusiva e, como discutido acima, viola a causalidade. Por outro lado, a Eq. (3.1) inclui efeitos de memória e, como tal, conforme discutido na Ref. [32], repeita a causalidade para os parâmetros característicos do problema discutido aqui. No Apêndice B, apresentamos a inclusão de efeitos de memória segundo a Ref. [32]. Para a energia livre dada na Eq. (3.41), essa equação é dada por

$$\tau_\rho \frac{\partial^2\rho}{\partial t^2} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = \Lambda\nabla^2 \left[-\kappa\nabla^2\rho - m^2(\rho - \rho_c)^2 + \lambda(\rho - \rho_c)^3 \right] + \zeta_\rho. \quad (3.49)$$

A escala de tempo τ_ρ aparece no termo de memória pois é esta escala de tempo que caracteriza o processo da decomposição espinodal.

Definindo a quantidade

$$\psi = \frac{\rho - \rho_c}{\Delta\rho}, \quad (3.50)$$

podemos reescrever a Eq. (3.49) em função das constantes físicas τ_ρ , D e ξ como

$$\tau_\psi \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \frac{\partial \psi}{\partial t} = \Gamma_\psi \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{H}_\psi}{\delta \psi} + \zeta_\psi, \quad (3.51)$$

onde $\tau_\psi = \tau_\rho$ e

$$\mathcal{H}_\psi = \int d^3x \left[\frac{1}{2} \xi_\psi^2 (\nabla \psi)^2 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{T}{T_d} \right) \psi^2 + \frac{1}{4} \psi^4 \right], \quad (3.52)$$

e

$$\Gamma_\psi = \frac{D}{2}, \quad \xi_\psi^2 = \frac{\kappa}{m_0^2}. \quad (3.53)$$

Portanto, para $T < T_d$, os estados de equilíbrio são dados por $\psi = \pm 1$. O estado de equilíbrio $\psi = -1$ corresponde à densidade ρ_h e $\psi = +1$ corresponde à densidade ρ_q .

3.3.4 Acoplamento entre *loop* de Polyakov e a densidade bariônica

Um dos objetivos centrais dessa dissertação é o estudo da evolução temporal da fase mista formada no processo de resfriamento da matéria hadrônica no ponto crítico. O processo de resfriamento dessa matéria hadrônica leva à separação das fases hadrônica, em que quarks e glúons estão confinados, e de quarks e glúons desconfinados. Conforme visto acima, o *loop* de Polyakov, apesar de não ser no sentido estrito um parâmetro de ordem na presença de quarks, este caracteriza muito bem os estados confinados e não confinados da QCD. A questão interessante que se coloca é a interrelação das dinâmicas dos parâmetros de ordem relacionados à densidade bariônica (ψ) e ao confinamento (ϕ).

Em problemas da Física da Matéria Condensada, uma situação tal, de acoplamento de parâmetros de ordem conservados e não conservados, é descrita pelo modelo C [9]. Nos casos mais comuns, o acoplamento é governado por uma energia livre que contém um termo de acoplamento entre os parâmetros de ordem que é da forma densidade-densidade, dada por

$$\mathcal{H}_{\phi\psi} = K \int d^3x \phi^2 \psi, \quad (3.54)$$

onde K é uma constante que, em princípio pode depender da temperatura. Apesar de um acoplamento dessa natureza ter sua justificativa nos problemas da Física da Matéria Condensada, no problema da QCD esse acoplamento pode ser muito mais geral. Numa abordagem de uma teoria de campos efetiva (teoria de Landau), a energia livre pode ser escrita como uma série de potências dos parâmetros de ordem e suas derivadas espaciais, respeitadas as simetrias do problema. A cada termo de uma expansão tal vem associado uma constante dependente de parâmetros como a

temperatura, potenciais químicos de cargas conservadas, etc. que caracterizam a microscopia do sistema. As constantes m , λ , τ , etc que aparecem na equação de Cahn-Hilliard acima são um exemplo desses parâmetros. Portanto, em princípio, a energia livre de interação entre os parâmetros de ordem dessa expansão pode conter outros possíveis termos além daquele mostrado na Eq. (3.54). As Refs. [11, 47], que investigam respectivamente os acoplamentos entre a densidade bariônica e o condensado quiral de quarks, e do *loop* de Polyakov e condensado quiral de quarks, apresentam energias livres em que uma variedade de termos aparecem. Em alguns casos, os diferentes parâmetros de acoplamento podem ser determinados explicitamente, ou estimados de alguma forma.

Na presente dissertação, como estamos interessados nos aspectos qualitativos desse acoplamento de parâmetros de ordem, não vamos fazer nenhum esforço em trilhar essa direção de investigar as diferentes possibilidades de acoplamento. Vamos simplesmente tomar o acoplamento acima da EQ. (3.54) e investigar as consequências desse na evolução da fase mista. Como veremos, esse termo por si só, já traz resultados interessantes. Isso leva às seguintes equações acopladas

$$\tau_\phi \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\Gamma_\phi \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi} + \zeta_\phi \quad (3.55)$$

$$\tau_\psi \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \frac{\partial \psi}{\partial t} = \Gamma_\psi \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \psi} + \zeta_\psi, \quad (3.56)$$

com

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\phi + \mathcal{H}_\psi + \mathcal{H}_{\phi\psi}. \quad (3.57)$$

As propriedades das fontes de ruído são dadas por

$$\begin{aligned} \langle \zeta_\phi(\mathbf{x}, t) \rangle &= 0, \quad \langle \zeta_\psi(\mathbf{x}, t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta_\phi(\mathbf{x}, t) \zeta_\psi(\mathbf{x}', t') \rangle = 0, \\ \langle \zeta_\phi(\mathbf{x}, t) \zeta_\phi(\mathbf{x}', t') \rangle &= 2T \Gamma_\phi \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \\ \langle \zeta_\psi(\mathbf{x}, t) \zeta_\psi(\mathbf{x}', t') \rangle &= -2T \Gamma_\psi \nabla^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'). \end{aligned} \quad (3.58)$$

Capítulo 4

Análise Numérica e Resultados de Simulações

Neste capítulo vamos discutir métodos numéricos para resolver as equações de Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard. Primeiramente, considerando um esquema semi-implícito no tempo e uma expansão em série de Fourier nas coordenadas espaciais, aplicaremos o método das diferenças finitas à essas equações. Em seguida, apresentaremos resultados para a transição de desconfinamento na QCD e para o processo de conversão de fases que ocorre durante o resfriamento de um sistema hadrônico inicialmente em um banho térmico com $T = T_d$.

4.1 Método das diferenças finitas

O método das diferenças finitas é uma técnica de discretização amplamente aplicada na resolução de equações diferenciais. Este método consiste numa aproximação, obtida através de expansões em séries de Taylor, das derivadas por diferenças finitas. Uma formulação geral desta aproximação pode ser obtida considerando-se a discretização de uma variável qualquer ε pertencente ao intervalo $[a, b]$. Inicialmente particionarmos o intervalo $[a, b]$ em N pedaços de tamanho $\Delta\varepsilon$, tal que $\varepsilon = n\Delta\varepsilon$ com $n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$. A partir dessa discretização, podemos definir a forma não-simetrizada da derivada primeira de uma função qualquer $G(\varepsilon)$ como

$$\frac{\partial G(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \rightarrow G'(\varepsilon) = \frac{G(\varepsilon + \Delta\varepsilon) - G(\varepsilon)}{\Delta\varepsilon}. \quad (4.1)$$

A derivada segunda com relação a ε é definida na forma simetrizada

$$\frac{\partial^2 G(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \rightarrow G''(\varepsilon) = \frac{G'_+(\varepsilon) - G'_-(\varepsilon)}{\Delta\varepsilon}, \quad (4.2)$$

onde G'_+ é a derivada à direita do ponto e G'_- à esquerda do ponto, ou seja,

$$G'_+(\varepsilon) = \frac{G(\varepsilon + \Delta\varepsilon) - G(\varepsilon)}{\Delta\varepsilon} \quad \text{e} \quad G'_-(\varepsilon) = \frac{G(\varepsilon) - G(\varepsilon - \Delta\varepsilon)}{\Delta\varepsilon}. \quad (4.3)$$

A discretização das coordenadas espaciais e temporal das equações de Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard é feita de maneira similar à discretização da variável ε . Particionando o intervalo temporal em pedaços de tamanho Δt e discretizando as coordenadas espaciais x , y e z numa rede cúbica de espaçamento h , chegamos que

$$t = n\Delta t, \quad x = ih, \quad y = jh \quad e \quad z = kh \quad (4.4)$$

onde $n = 0, 1, 2, \dots$ e $i, j, k = 0, 1, 2, \dots, N - 1$, com N representando o número de pontos em cada uma das direções da rede cúbica. Definida essa discretização, podemos denotar os parâmetros de ordem contínuos $\phi(\mathbf{x}, t)$ e $\rho(\mathbf{x}, t)$ como ϕ_{ijk}^n e ρ_{ijk}^n , obtendo assim, uma forma discretizada para as equações de Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard.

A seguir, vamos aplicar o método das diferenças finitas às equações discretizadas de Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard seguindo a referência [33]. Assim, além de considerar as aproximações para as derivadas definidas nas equações (4.1), (4.2) e (4.3) vamos adotar também um esquema semi-implícito no tempo e uma expansão em série de Fourier nas coordenadas espaciais.

4.1.1 Equação de Ginzburg-Landau

O Hamiltoniano contendo o acoplamento entre os parâmetros de ordem conservado e não conservado, Eq. (3.57), pode ser reescrito da seguinte forma

$$\mathcal{H} = \int d^3x \left[\frac{\xi_\phi^2}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{\xi_\psi^2}{2} (\nabla\psi)^2 + f(\phi, \psi) \right], \quad (4.5)$$

onde a função $f(\phi, \psi)$ é definida como

$$\begin{aligned} f(\phi, \psi) = & -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{T_d^2}{T^2} \right) \phi^2 + \frac{1}{4} \phi^4 + \frac{N_f}{32} (7 + 2\phi - \phi^2)(1 - \phi)^2 \\ & -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{T}{T_d} \right) \psi^2 + \frac{1}{4} \psi^4 + K\phi^2\psi. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Assim, podemos reescrever a equação de Ginzburg-Landau para o *loop* de Polyakov, Eq. (3.56), como

$$\tau_\phi \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} - \Gamma_\phi \xi_\phi^2 \nabla^2 \phi + \Gamma_\phi \frac{\partial f(\phi, \psi)}{\partial \phi} - \zeta_\phi = 0. \quad (4.7)$$

Adotando a discretização das coordenadas espaciais e temporal, Eq. (4.4), e definindo as formas discretizadas de $\partial f/\partial \phi$ e ζ_ϕ como $(f'_\phi)_{ijk}^n$ e $(\zeta_\phi)_{ijk}^n$, obtemos a seguinte equação discretizada

$$\tau_\phi \frac{\partial^2 \phi_{ijk}^n}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi_{ijk}^n}{\partial t} - \Gamma_\phi \xi_\phi^2 \nabla^2 \phi_{ijk}^n + \Gamma_\phi (f'_\phi)_{ijk}^n - (\zeta_\phi)_{ijk}^n = 0. \quad (4.8)$$

A partir dessa equação discretizada podemos aplicar o método das diferenças finitas definido nas Eqs. (4.1), (4.2) e (4.3). Assim, as formas discretizadas para as derivadas temporais e para o termo referente ao Laplaciano de ϕ podem ser escritos como

$$\frac{\partial \phi_{ijk}^n}{\partial t} = \frac{\phi_{ijk}^{n+1} - \phi_{ijk}^n}{\Delta t}, \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial^2 \phi_{ijk}^n}{\partial t^2} = \frac{\phi_{ijk}^{n+1} - 2\phi_{ijk}^n + \phi_{ijk}^{n-1}}{(\Delta t)^2}, \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi_{ijk}^n &= \frac{\partial^2 \phi_{ijk}^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_{ijk}^n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi_{ijk}^n}{\partial z^2} \\ &= \frac{1}{h^2} [\phi_{i+1jk}^n + \phi_{i-1jk}^n + \phi_{ij+1k}^n + \phi_{ij-1k}^n + \phi_{ijk+1}^n + \phi_{ijk-1}^n - 6\phi_{ijk}^n]. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Agora, considerando uma expansão em série de Fourier nas coordenadas espaciais podemos expandir o parâmetro de ordem ϕ_{ijk}^n , a derivada da densidade de energia livre $(f'_\phi)_{ijk}^n$ e a fonte de ruído $(\zeta_\phi)_{ijk}^n$ da seguinte maneira

$$\phi_{ijk}^n = \sum_{rsp=0}^{N-1} a_{rsp}^n E_{rsp}(ijk), \quad (4.12)$$

$$(f'_\phi)_{ijk}^n = \sum_{rsp=0}^{N-1} (f'_\phi)_{rsp}^n E_{rsp}(ijk), \quad (4.13)$$

$$(\zeta_\phi)_{ijk}^n = \sum_{rsp=0}^{N-1} \zeta_{rsp}^n E_{rsp}(ijk), \quad (4.14)$$

onde $E_{rsp}(ijk)$ é dado por

$$E_{rsp}(ijk) = \exp \left[i \frac{2\pi}{Nh} xr + i \frac{2\pi}{Nh} ys + i \frac{2\pi}{Nh} zp \right]. \quad (4.15)$$

Como as expansões para $(f'_\phi)_{ijk}^n$ e $(\zeta_\phi)_{ijk}^n$ são semelhantes podemos juntar os dois termos e definir a seguinte expansão em série de Fourier

$$V_{ijk}^n = \Gamma_\phi (f'_\phi)_{ijk}^n - (\zeta_\phi)_{ijk}^n = \sum_{rsp=0}^{N-1} v_{rsp}^n E_{rsp}(ijk). \quad (4.16)$$

Substituindo a expansão para o parâmetro de ordem ϕ_{ijk}^n nas Eqs. (4.9) e (4.10) podemos reescrever as derivadas temporais como

$$\frac{\partial \phi_{ijk}^n}{\partial t} = \sum_{rsp=0}^{N-1} \frac{1}{\Delta t} (a_{rsp}^{n+1} - a_{rsp}^n) E_{rsp}(ijk), \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial^2 \phi_{ijk}^n}{\partial t^2} = \sum_{rsp=0}^{N-1} \frac{1}{(\Delta t)^2} (a_{rsp}^{n+1} - 2a_{rsp}^n + a_{rsp}^{n-1}) E_{rsp}(ijk). \quad (4.18)$$

O Laplaciano de ϕ_{ijk}^n definido na Eq. (4.11), é constituído por termos contendo os índices $i + 1, i - 1, j + 1, j - 1, k + 1$ e $k - 1$. Assim, para reescrevê-lo em função da expansão de ϕ_{ijk}^n , vamos trabalhar com cada um desses termos separadamente. Os termos com $i + 1$ e $i - 1$ assumem a seguinte forma

$$\begin{aligned}\phi_{i+1jk}^n &= \sum_{rsp=0}^{N-1} a_{rsp}^n \exp\left(i\frac{2\pi}{N}r\right) E_{rsp}(ijk), \\ \phi_{i-1jk}^n &= \sum_{rsp=0}^{N-1} a_{rsp}^n \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}r\right) E_{rsp}(ijk).\end{aligned}\quad (4.19)$$

Então,

$$\begin{aligned}\phi_{i+1jk}^n + \phi_{i-1jk}^n &= \sum_{rsp=0}^{N-1} a_{rsp}^n \left[\exp\left(i\frac{2\pi}{N}r\right) + \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}r\right) \right] E_{rsp}(ijk) \\ &= \sum_{rsp=0}^{N-1} a_{rsp}^n \left[2 \cos\left(\frac{2\pi}{N}r\right) \right] E_{rsp}(ijk).\end{aligned}\quad (4.20)$$

Generalizando para os demais termos obtemos que

$$\begin{aligned}\phi_{ij+1k}^n + \phi_{ij-1k}^n &= \sum_{rsp=0}^{N-1} a_{rsp}^n \left[2 \cos\left(\frac{2\pi}{N}s\right) \right] E_{rsp}(ijk), \\ \phi_{ijk+1}^n + \phi_{ijk-1}^n &= \sum_{rsp=0}^{N-1} a_{rsp}^n \left[2 \cos\left(\frac{2\pi}{N}p\right) \right] E_{rsp}(ijk).\end{aligned}\quad (4.21)$$

Portanto, o Laplaciano de ϕ_{ijk}^n pode ser escrito como

$$\nabla^2 \phi_{ijk}^n = \sum_{rsp=0}^{N-1} a_{rsp}^n \lambda_{rsp} E_{rsp}(ijk), \quad (4.22)$$

onde

$$\lambda_{rsp} = \frac{1}{h^2} \left[2 \cos\left(\frac{2\pi}{N}r\right) + 2 \cos\left(\frac{2\pi}{N}s\right) + 2 \cos\left(\frac{2\pi}{N}p\right) - 6 \right]. \quad (4.23)$$

Desta maneira, a equação de Ginzburg-Landau discretizada pode ser escrita da seguinte forma

$$\begin{aligned}\frac{\tau_\phi}{(\Delta t)^2} \sum_{rsp=0}^{N-1} \left(a_{rsp}^{n+1} - 2a_{rsp}^n + a_{rsp}^{n-1} \right) E_{rsp}(ijk) + \frac{1}{\Delta t} \sum_{rsp=0}^{N-1} \left(a_{rsp}^{n+1} - a_{rsp}^n \right) E_{rsp}(ijk) \\ - \Gamma_\phi \xi_\phi^2 \sum_{rsp=0}^{N-1} a_{rsp}^n \lambda_{rsp} E_{rsp}(ijk) + \sum_{rsp=0}^{N-1} v_{rsp}^n E_{rsp}(ijk) = 0.\end{aligned}\quad (4.24)$$

Agrupando os termos chegamos a

$$\begin{aligned}\sum_{rsp=0}^{N-1} \left\{ \left(\frac{\tau_\phi}{(\Delta t)^2} + \frac{1}{\Delta t} \right) a_{rsp}^{n+1} - \left(\frac{2\tau_\phi}{(\Delta t)^2} + \frac{1}{\Delta t} + \Gamma_\phi \xi_\phi^2 \lambda_{rsp} \right) a_{rsp}^n \right. \\ \left. + \frac{\tau_\phi}{(\Delta t)^2} a_{rsp}^{n-1} + v_{rsp}^n \right\} E_{rsp}(ijk) = 0,\end{aligned}\quad (4.25)$$

ou seja,

$$(\tau_\phi + \Delta t) a_{rsp}^{n+1} - (2\tau_\phi + \Delta t + (\Delta t)^2 \Gamma_\phi \xi_\phi^2 \lambda_{rsp}) a_{rsp}^n + \tau_\phi a_{rsp}^{n-1} + (\Delta t)^2 v_{rsp}^n = 0. \quad (4.26)$$

Essa equação fornece um esquema de iteração *explícito* no tempo. Contudo, é bem conhecido que um esquema *semi-implícito* no tempo apresenta estabilidade superior ao esquema explícito. Um esquema semi-implícito no tempo pode ser obtido a partir da Eq. (4.26), se agruparmos o termo referente ao Laplaciano de ϕ_{ijk}^n ao termo a_{rsp}^{n+1} . Assim,

$$\left(\tau_\phi + \Delta t - (\Delta t)^2 \Gamma_\phi \xi_\phi^2 \lambda_{rsp} \right) a_{rsp}^{n+1} - (2\tau_\phi + \Delta t) a_{rsp}^n + \tau_\phi a_{rsp}^{n-1} + (\Delta t)^2 v_{rsp}^n = 0. \quad (4.27)$$

Simplificando, temos que

$$a_{rsp}^{n+1} = \frac{(2\tau_\phi + \Delta t) a_{rsp}^n - \tau_\phi a_{rsp}^{n-1} - (\Delta t)^2 v_{rsp}^n}{\tau_\phi + \Delta t \left(1 - \Delta t \Gamma_\phi \xi_\phi^2 \lambda_{rsp} \right)}. \quad (4.28)$$

A equação acima fornece um esquema de iteração semi-implícito no tempo para a solução da equação de Ginzburg-Landau. Ou seja, dadas as condições iniciais para ϕ e sua derivada primeira no tempo basta iterarmos a Eq. (4.28) para obtermos a solução $\phi(\mathbf{x}, t)$.

4.1.2 Equação de Cahn-Hilliard

Considerando a forma para o Hamiltoniano definido na Eq. (3.57) e a Eq. (3.56) podemos reescrever a equação de Cahn-Hilliard para a densidade bariônica da seguinte maneira

$$\tau_\psi \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \frac{\partial \psi}{\partial t} + \Gamma_\psi \xi_\psi^2 \nabla^4 \psi - \Gamma_\psi \nabla^2 \frac{\partial f(\phi, \psi)}{\partial \psi} - \zeta_\psi = 0, \quad (4.29)$$

Adotando a discretização das coordenadas espaciais e temporal, equação (4.4), e definindo as formas discretizadas de $\partial f / \partial \psi$ e ζ_ψ como sendo $(f'_\psi)_{ijk}^n$ e $(\zeta_\psi)_{ijk}^n$ obtemos a seguinte equação de Cahn-Hilliard discretizada

$$\tau_\psi \frac{\partial^2 \psi_{ijk}^n}{\partial t^2} + \frac{\partial \psi_{ijk}^n}{\partial t} + \Gamma_\psi \xi_\psi^2 \nabla^4 \psi_{ijk}^n - \Gamma_\psi \nabla^2 (f'_\psi)_{ijk}^n - (\zeta_\psi)_{ijk}^n = 0. \quad (4.30)$$

O desenvolvimento do método das diferenças finitas para a equação de Cahn-Hilliard é muito similar ao apresentado para a equação de Ginzburg-Landau. Desta maneira, a fim de evitar repetições, vamos nos restringir apenas as diferenças entre as duas equações. Considerando uma expansão em série de Fourier nas coordenadas

espaciais, podemos expandir o parâmetro de ordem ψ_{ijk}^n , o Laplaciano de $(f'_\psi)_{ijk}^n$ e a fonte de ruído $(\zeta_\psi)_{ijk}^n$ da seguinte maneira

$$\psi_{ijk}^n = \sum_{rsp=0}^{N-1} u_{rsp}^n E_{rsp}(ijk), \quad (4.31)$$

$$\nabla^2 (f'_\psi)_{ijk}^n = \sum_{rsp=0}^{N-1} w_{rsp}^n \lambda_{rsp} E_{rsp}(ijk), \quad (4.32)$$

$$(\zeta_\psi)_{ijk}^n = \sum_{rsp=0}^{N-1} \epsilon_{rsp}^n E_{rsp}(ijk), \quad (4.33)$$

onde $E_{rsp}(ijk)$ e λ_{rsp} estão definidos nas equações (4.15) e (4.23). A expansão do Laplaciano de $(f'_\psi)_{ijk}^n$ foi definida a partir da expressão para o Laplaciano de ϕ_{ijk}^n , equação (4.22). A presença do Laplaciano de $(f'_\psi)_{ijk}^n$ na equação de Cahn-Hilliard não permite que juntemos o termo de ruído com o termo da derivada da densidade de energia livre, portanto, diferentemente da equação de Ginzburg-Landau, devemos trabalhar com cada um dos termos separadamente.

A partir da equação (4.22), podemos escrever o termo $\nabla^4 \psi_{ijk}^n$, presente na equação (4.30), como

$$\nabla^4 \psi_{ijk}^n = \nabla^2 (\nabla^2 \psi_{ijk}^n) = \sum_{rsp=0}^{N-1} u_{rsp}^n \lambda_{rsp}^2 E_{rsp}(ijk). \quad (4.34)$$

Desta maneira, considerando as equações (4.17), (4.18), (4.30), (4.32), (4.33) e (4.34), a equação de Cahn-Hilliard discretizada pode ser escrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} & \frac{\tau_\psi}{(\Delta t)^2} \sum_{rsp=0}^{N-1} (u_{rsp}^{n+1} - 2u_{rsp}^n + u_{rsp}^{n-1}) E_{rsp}(ijk) + \frac{1}{\Delta t} \sum_{rsp=0}^{N-1} (u_{rsp}^{n+1} - u_{rsp}^n) E_{rsp}(ijk) \\ & + \Gamma_\psi \xi_\psi^2 \sum_{rsp=0}^{N-1} u_{rsp}^n \lambda_{rsp}^2 E_{rsp}(ijk) - \Gamma_\psi \sum_{rsp=0}^{N-1} w_{rsp}^n \lambda_{rsp} E_{rsp}(ijk) - \sum_{rsp=0}^{N-1} \epsilon_{rsp}^n E_{rsp}(ijk) = 0. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Agrupando e simplificando os termos dessa equação, chegamos ao seguinte esquema de iteração explícito no tempo

$$\begin{aligned} & (\tau_\psi + \Delta t) u_{rsp}^{n+1} - (2\tau_\psi + \Delta t - (\Delta t)^2 \Gamma_\psi \xi_\psi^2 \lambda_{rsp}^2) u_{rsp}^n \\ & + \tau_\psi u_{rsp}^{n-1} - (\Delta t)^2 \Gamma_\psi \lambda_{rsp} w_{rsp}^n - (\Delta t)^2 \epsilon_{rsp}^n = 0. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Como comentado anteriormente, um esquema semi-implícito no tempo apresenta melhor estabilidade. Portanto, vamos agrupar o termo referente à $\nabla^4 \psi$ ao termo u_{rsp}^{n+1} . Assim,

$$u_{rsp}^{n+1} = \frac{(2\tau_\psi + \Delta t) u_{rsp}^n - \tau_\psi u_{rsp}^{n-1} + (\Delta t)^2 \Gamma_\psi \lambda_{rsp} w_{rsp}^n + (\Delta t)^2 \epsilon_{rsp}^n}{\tau_\psi + \Delta t (1 + \Delta t \Gamma_\psi \xi_\psi^2 \lambda_{rsp}^2)}. \quad (4.37)$$

A equação acima fornece um esquema de iteração semi-implícito no tempo para a solução da equação de Cahn-Hilliard. Ou seja, dadas as condições iniciais do problema, basta iterarmos essa equação para obtermos a solução $\psi(\mathbf{x}, t)$.

Descrevemos aqui a aplicação do método das diferenças finitas às equações de Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard com efeitos de memória, a partir da qual definimos esquemas de iterações semi-implícitos no tempo, equações (4.28) e (4.37). As soluções para as equações sem efeitos de memória são simplesmente obtidas definindo $\tau_\phi = \tau_\psi = 0$ nesses esquemas iterativos.

4.2 Resultados das simulações numéricas

Vamos agora apresentar resultados de simulações numéricas para as equações de Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard obtidos a partir dos esquemas iterativos definidos na seção anterior. Aplicaremos a equação de Ginzburg-Landau no estudo da dinâmica do *loop* de Polyakov durante a transição de desconfinamento na QCD. Já a equação de Cahn-Hilliard será aplicada no estudo do processo de conversão de fases que ocorre durante o resfriamento de um sistema hadrônico inicialmente em um banho térmico com $T = T_d$. Neste caso, o parâmetro de ordem apropriado é a densidade bariônica. A discussão dos resultados será dividida da seguinte maneira. Inicialmente apresentaremos resultados para o *loop* de Polyakov, discutindo os efeitos da adição de quarks ao sistema durante a transição de desconfinamento. Logo após, apresentaremos resultados para a densidade bariônica discutindo o processo de conversão de fases. Finalizaremos com um estudo sobre o processo de conversão de fases empregando o acoplamento entre a densidade bariônica e o *loop* de Polyakov.

Em nossas simulações calculamos a média espacial dos parâmetros de ordem ϕ e ψ e suas respectivas funções de estrutura. Como visto no capítulo anterior, o parâmetro de ordem ϕ está relacionado com o *loop* de Polyakov e o parâmetro ψ representa a densidade bariônica. A média do parâmetro de ordem não conservado ϕ é definida como

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{N^3} \sum_{ijk} \phi(i, j, k), \quad (4.38)$$

onde N é o número de pontos em cada uma das direções da rede cúbica e a função $\phi(i, j, k)$ foi definida na Eq. (4.12). Para o parâmetro de ordem conservado ψ a situação é bem diferente. A conservação da densidade bariônica exige que o valor médio de ψ calculado sobre todos os pontos da rede cúbica seja constante durante toda a evolução temporal do sistema. Portanto, uma média dessa natureza não

fornecerá informação alguma sobre o processo de conversão de fases. Desta maneira, uma quantidade útil a ser calculada é a média do parâmetro de ordem ψ para cada uma das fases separadamente. Para um sistema formado por uma mistura de fases A e B , podemos definir a média do parâmetro ψ_A e ψ_B da seguinte maneira

$$\langle \psi_A(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{N_A} \sum_{ijk} \psi_A(i, j, k) \quad (4.39)$$

$$\langle \psi_B(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{N_B} \sum_{ijk} \psi_B(i, j, k), \quad (4.40)$$

onde N_A e N_B representam o números de pontos da rede cúbica para os quais $\psi = \psi_A$ e $\psi = \psi_B$ respectivamente. Essa distinção entre fases A e B pode ser feita de maneira simples para o caso que vamos investigar nessa dissertação, pois para a fase hadrônica $\psi < 0$, e para a fase de quarks $\psi > 0$. Nas Eqs. (4.38), (4.39) e (4.40), o símbolo $\langle \cdot \cdot \cdot \rangle$ representa uma média sobre pontos da rede. Contudo, quando considerarmos as fontes de ruído ζ_ϕ e ζ_ψ devemos adicionar a este uma média sobre realizações randômicas de ruído.

No cálculo da função de estrutura $\tilde{S}(\mathbf{q}, t)$ associada aos parâmetros de ordem ϕ e ψ empregamos uma média esférica do tipo [52]

$$\tilde{S}(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{n(q, \Delta q)} \sum_{q_- \leq q \leq q_+} \tilde{S}(\mathbf{q}, t), \quad (4.41)$$

onde

$$n(q, \Delta q) = \sum_{q_- \leq q \leq q_+} 1. \quad (4.42)$$

A quantidade $n(q, \Delta q)$ representa o número de pontos da rede cúbica contidos numa região esférica centrada em q com raio $\Delta q = 2\pi/L$, onde L é a dimensão de cada uma das direções da rede cúbica. Nessas equações q representa o módulo do vetor número de onda \mathbf{q} , $q_\pm = q \pm (\Delta q/2)$ e a função de estrutura \tilde{S} está definida na Eq. (2.48). A média do parâmetro de ordem e a função de estrutura são de grande importância no estudo de qualquer transição de fase, pois fornecem informações fundamentais sobre a dinâmica de relaxamento para o equilíbrio do sistema e indicam quais os fenômenos envolvidos no processo de reestabelecimento do equilíbrio.

Em todas as simulações consideramos que as derivadas primeiras no tempo dos parâmetros de ordem ϕ e ψ são nulas em $t = 0$ e a seguinte condição inicial

$$\phi_0(i, j, k) = \psi_0(i, j, k) = 0.01 + 0.005(2 * \mathbf{rand} - 1), \quad (4.43)$$

onde a variável **rand** representa um número aleatório entre 0 e 1, ou seja, iniciaremos o processo dinâmico com o sistema totalmente desconfinado.

4.2.1 Resultados para a dinâmica do *Loop* de Polyakov

Simulações para o *loop* de Polyakov foram realizadas empregando o esquema iterativo no tempo para a equação de Ginzburg-Landau discretizada, Eq. (4.28). Nessas simulações, além de considerar a condição inicial definida na Eq. (4.43), consideramos também os seguintes parâmetros: $\Delta t = 0.005$ fm/c, $L = 16$ fm, $N = 64$ e $h = 0.25$ fm.

Vimos no Capítulo anterior que o estudo dinâmico da transição de desconfinamento na QCD pode ser realizado através do estudo da dinâmica do parâmetro de ordem ϕ associado ao valor médio do *loop* de Polyakov. Inicialmente, vamos comparar resultados para as situações com e sem quarks para a energia livre, e para dois valores de temperaturas de desconfinamento.

Na Fig. 4.1 apresentamos uma comparação entre a evolução temporal do valor médio do parâmetro de ordem ϕ para um sistema com $N_f = 0$ e com $N_f = 2$, em que não foi considerada a fonte de ruído nas simulações. Os resultados foram obtidos para valores de T , g , T_d e Γ fixados na Ref. [53]. Explicitamente, seus valores são: $T_d \approx 302$ MeV, $T = 6.6T_d$ e 0.0001 fm⁻³. O valor da constante de

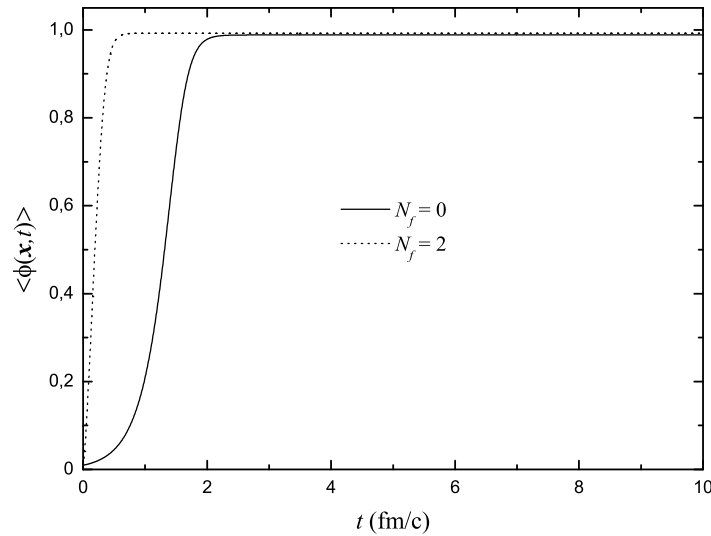


Figura 4.1: Comparação entre os valores médios do parâmetro de ordem ϕ para $N_f = 0$ e $N_f = 2$. Em ambos casos, consideramos que a temperatura de desconfinamento é $T_d \approx 302$ MeV e $T = 6.6T_d$. Não foi considerada a fonte de ruído nas simulações.

acoplamento da QCD, $g \approx 2.34$, foi retirado da Ref. [7]. Os valores para T_d , g e Γ foram extraídos de simulações de QCD – a Ref. [53] deve ser consultada para uma discussão detalhada sobre essas simulações. Uma primeira constatação a respeito dos resultados apresentados na Fig. 4.1 é a existência de um rápido crescimento do valor médio de ϕ para tempos curtos. Esse crescimento rápido evidencia a ocorrência do processo da decomposição espinodal. Uma segunda constatação é que para a curva com quarks esse crescimento é bem mais acentuado. Isso é devido à forma da energia livre para $N_f = 2$, a qual contém uma curvatura muito mais acentuada na região $0 \leq \phi \leq 1$ do que a energia livre para $N_f = 0$, como pode ser visto na Fig. 4.2.

Os resultados apresentados na Fig 4.1 foram obtidos para uma temperatura de desconfinamento T_d extraída de simulações de QCD na rede para uma teoria de gauge pura. No entanto, essas simulações mostram que a correspondente temperatura quando quarks dinâmicos são incluídos é um tanto menor. Para averiguar o efeito de um valor menor para T_d , na Fig. 4.3 mostramos resultados para $T_d = 200$ MeV, mantendo todos os outros parâmetros fixos – em princípio, os parâmetros g e Γ deveriam ser mudados também, no entanto seus valores, principalmente para Γ , não são conhecidos. Conforme pode ser visto na Fig. 4.3, não há mudanças qualitativas em relação ao caso anterior.

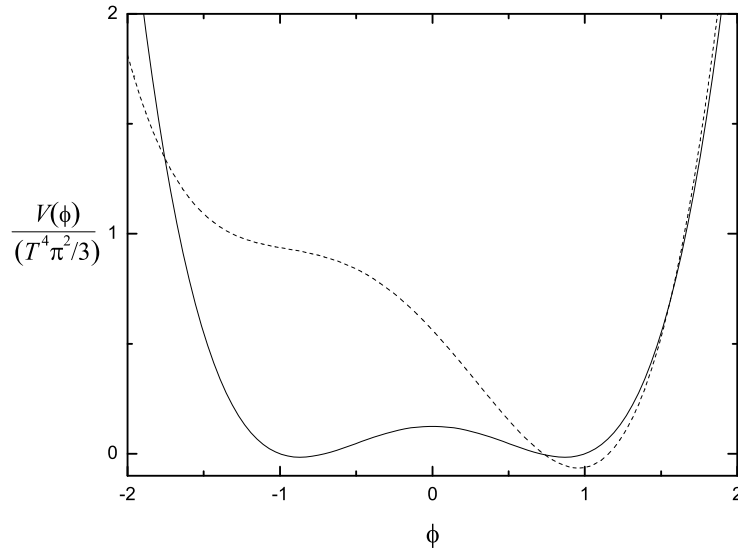


Figura 4.2: Energia livre da Eq. (3.36) (sem o termo de gradiente) para $N_f = 0$ (linha contínua) e $N_f = 2$ (linha tracejada) e $T = 2T_d$.

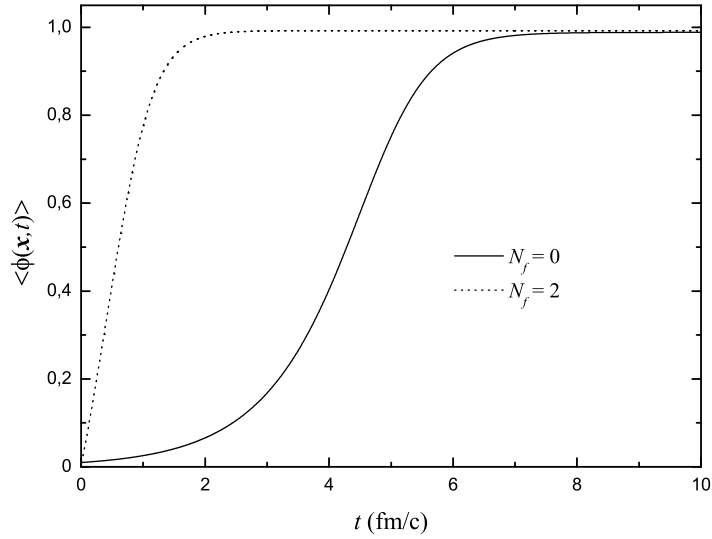


Figura 4.3: Mesmo que para a Fig. 4.1, mas para $T_d = 200 \text{ MeV}$.

Todos os resultados que serão apresentados a seguir, e até o final dessa dissertação, para o *loop* de Polyakov referem-se a $N_f = 2$ e $T_d = 200 \text{ MeV}$. Na Fig. 4.4, apresentamos resultados para a função de estrutura de ϕ calculadas para diferentes valores de q (módulo do vetor número de onda dos modos de Fourier). Como discutido na Seção 2.6, a presença de picos nessa função é a marca registrada da decomposição espinodal na transição de fase. Como esperado, para modos com pequenos valores de q , as curvas para $S_\phi(\mathbf{x}, t)$ apresentam um crescimento exponencial seguido de uma queda conforme o valor médio do *loop* de Polyakov atinge seu valor de equilíbrio, em aproximadamente $t = 2 \text{ fm}$, i.e. o sistema relaxa para o equilíbrio através do crescimento exponencial dos modos com grandes comprimentos de onda (pequenos números de onda). As curvas para modos com grandes valores de q foram omitidas pois, por não apresentarem um crescimento exponencial relaxam para o equilíbrio sem a formação de picos, o que explica a diminuição da altura dos picos conforme o valor de q aumenta.

Uma análise mais completa do problema requer a inclusão da fonte de ruído ζ_ϕ . Conforme discutido no Capítulo 2, a fonte de ruído representa os graus de liberdade microscópicos do sistema que não são levados em conta no processo de *coarse-graining*. Esse processo de *coarse-graining* significa que a descrição do sistema em termos de campos clássicos deve ser entendida como uma descrição efetiva para

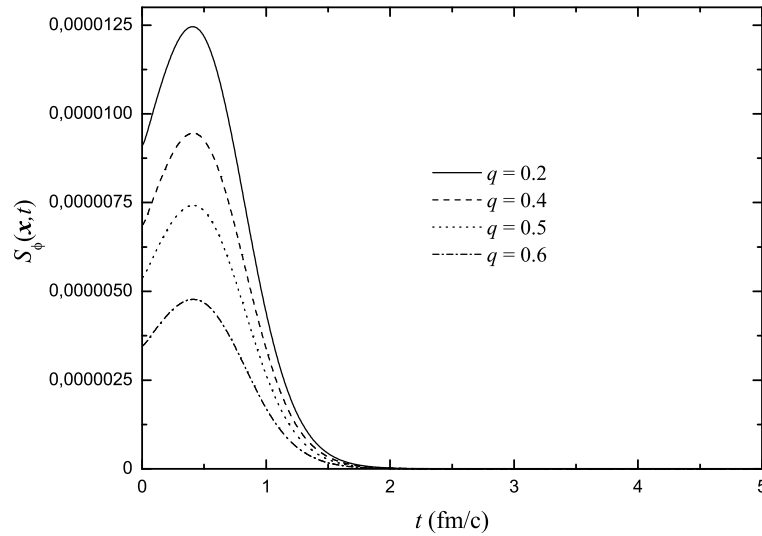


Figura 4.4: Curvas para a função de estrutura de ϕ para diferentes valores de q . Não foi considerada a fonte de ruído nas simulações.

comprimentos de onda da ordem ou maiores que o comprimento de correlação do sistema. Por outro lado, na solução numérica das equações estocásticas para os campos a discretização dessas leva à introdução de um novo parâmetro dimensional no problema, o espaçamento da rede. Por outro lado, a solução numérica de equações clássicas de campos via discretização apresenta sensibilidade ao espaçamento da rede quando esse é inadadequadamente tomado muito menor que o comprimento de correlação do problema – um estudo detalhado sobre o assunto foi realizado na Ref. [33]. Essa sensibilidade ao espaçamento da rede é reflexo da divergência ultravioleta Rayleigh-Jeans das teorias clássicas de campos [54]. Para o cálculo de quantidades de equilíbrio, essas divergências podem ser eliminadas pela adição de contratermos que renormalizam a energia livre [55]. Para problemas dinâmicos, o problema ainda não foi resolvido adequadamente. No entanto, para o cálculo de valores médios de parâmetros de ordem e funções de estrutura a partir de simulações de equações estocásticas do tipo Ginzburg-Landau, a adição de contratermos leva a resultados que, no limite de tempo infinito (i.e. no equilíbrio), são insensíveis ao espaçamento da rede. A adição de contratermos na energia livre para o modelo de loop de Polyakov considerado nessa dissertação (para $N_f = 0$) foi feita na Ref. [53].

Agora, se soluções estáveis e que convergem ao equilíbrio são obtidas para espa-

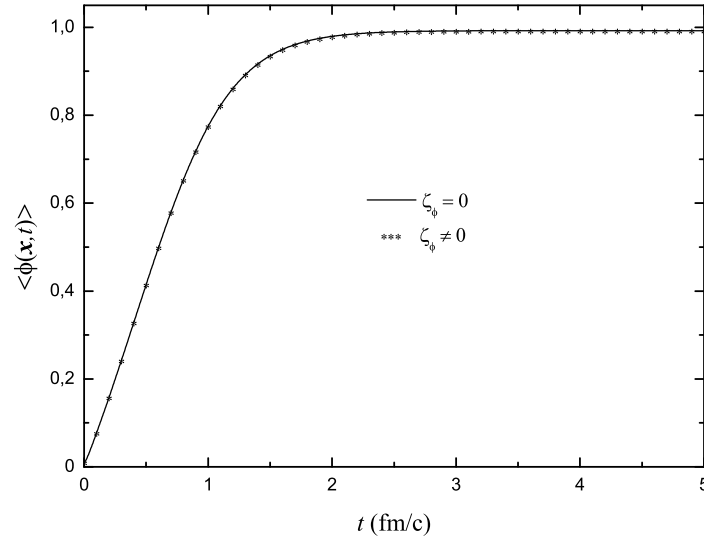


Figura 4.5: Evolução temporal do valor médio do parâmetro de ordem ϕ com e sem a inclusão da fonte de ruído ζ_ϕ . Curvas calculadas para $L = 64$ fm e $N = 64$.

çamentos de rede da ordem ou maiores que o comprimento de correlação do sistema, a adição de ruído não introduz sensibilidade ao espaçamento de rede. Ou seja, em geral, são introduzidas flutuações espúrias via ruído quando espaçamentos de rede menores que o comprimento de correlação do sistema são empregados. Em problemas de Física da Matéria Condensada essa questão da sensibilidade ao espaçamento da rede quase nunca aparece precisamente pela razão apontada, de que soluções estáveis de equilíbrio podem ser obtidas com espaçamentos de rede maiores que o comprimento de correlação dos sistemas materiais empregados.

Considerando o esquema iterativo dado pela Eq. (4.28), definimos o ruído na rede no espaço das coordenadas como

$$\zeta_\phi = \sqrt{2\Gamma T} \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} \frac{1}{h^{3/2}} \varsigma, \quad (4.44)$$

onde ς é um ruído Gaussiano, ou seja,

$$\langle \varsigma \rangle = 0 \quad e \quad \langle \varsigma^2 \rangle = 1. \quad (4.45)$$

Na Fig 4.5, apresentamos as curvas para o valor médio de ϕ sem o termo de ruído, $\zeta_\phi = 0$, e com o termo de ruído, $\zeta_\phi \neq 0$, para a equação de Ginzburg-Landau para o *loop* de Polyakov. No cálculo da curva com o termo de ruído consideramos

$L = 64$ fm e $N = 64$, o que implica num espaçamento de rede $h = 1$ fm, que é relativamente grande se comparado com o comprimento de correlação do sistema, que é da ordem de 0.2 fm. Fica evidente nessa figura que a solução com ruído converge corretamente para o equilíbrio. Ainda mais, a média sobre várias realizações de ruído leva a uma solução que é praticamente indistinguível da solução da equação determinista.

4.2.2 Resultados para a dinâmica da densidade bariônica

Nessa seção, apresentaremos resultados de simulações numéricas para o processo de conversão de fases que ocorre durante o resfriamento da matéria hadrônica a partir da temperatura crítica $T = T_d$. Realizamos a iteração da Eq. (4.37), com a condição inicial definida na Eq. (4.43) e os seguintes parâmetros de simulação: $\Delta t = 0.005$ fm/c, $L = 64$ fm e $N = 64$. Os valores dos demais parâmetros que aparecem na Eq. (4.37) foram tomados das estimativas da Ref. [26], que são dados por: $\tau_R = 1$ fm, $D = 8$ fm e $\xi = 1$ fm.

Como discutido no Capítulo anterior, durante o processo de resfriamento de um sistema hadrônico inicialmente em uma fase mista em que $\psi = 0$ ($\rho = \rho_c$) apresenta uma separação entre as fases confinada com ψ_h ($\rho = \rho_h$) e desconfiada com ψ_q ($\rho = \rho_q$). Resultados são apresentados na Fig. 4.6. Inicialmente podemos ver

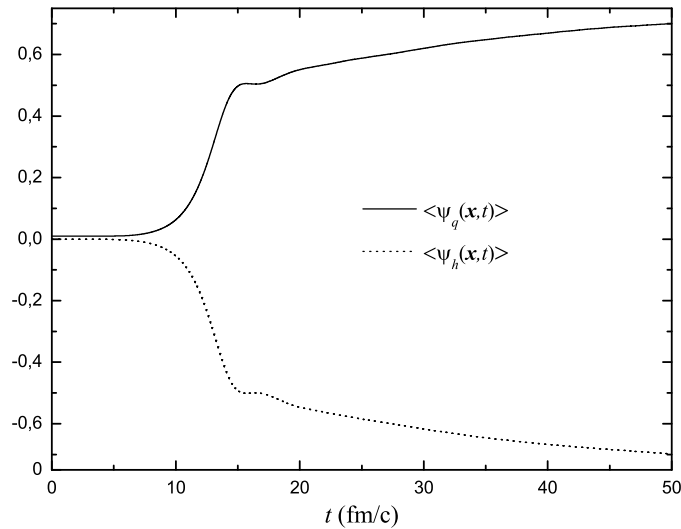


Figura 4.6: Evolução do valor médio da densidade bariônica. Não há fonte de ruído.

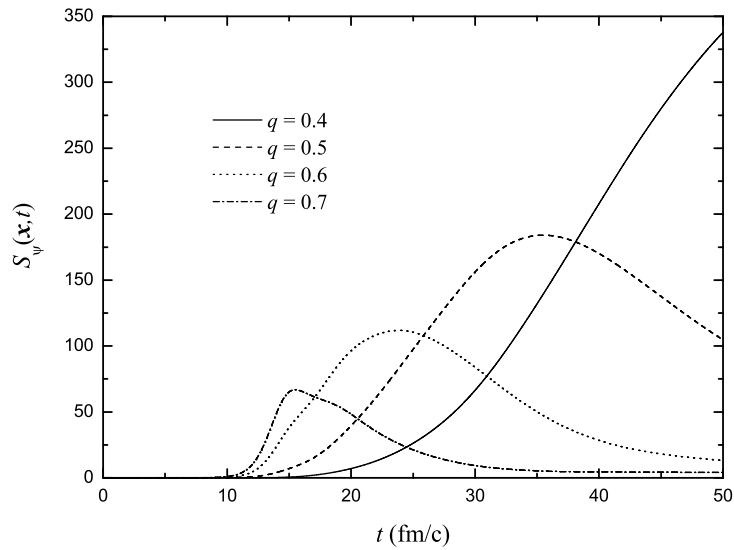


Figura 4.7: Função de estrutura para a densidade bariônica calculada para diferentes valores de q .

que as soluções para ψ_h e ψ_q têm igual módulo e são de sinais opostos, reafirmando a conservação do valor médio da densidade bariônica durante todo o processo de conversão de fases. As curvas apresentam um rápido crescimento exponencial no início da evolução temporal do sistema, indicando a presença do fenômeno da decomposição espinodal. Outro fato importante a ser notado é que durante o intervalo de tempo adotado em nossa simulação o parâmetro de ordem $\langle \psi_q \rangle$ não converge para seu valor de equilíbrio, mas apresenta um lento e constante crescimento, indicando a dinâmica muito mais lenta do processo de separação de fases, característica de uma lei de conservação.

Como o comportamento das curvas $\langle \psi_q \rangle$ e $\langle \psi_h \rangle$ é qualitativamente idêntico, o mesmo acontece com as funções de estrutura associadas a ψ_h e ψ_q . Sendo assim, vamos apresentar resultados de simulações somente para a função de estrutura de ψ_q . As curvas para a função de estrutura calculadas para diferentes valores de q estão apresentadas na Fig 4.7. Observe que igualmente ao *loop* de Polyakov existe a formação de picos confirmando a ocorrência do fenômeno da decomposição espinodal. No entanto, é importante notar que os picos presentes nessas curvas são largos e suaves, e que em alguns casos, como para $q = 0.4$, mal podemos ver a formação de um pico no intervalo de tempo adotado em nossa simulação. Esse fato indica que

para $t = 50 \text{ fm}/c$ o sistema hadrônico ainda não entrou em equilíbrio térmico e, portanto, não está completamente separado.

Uma imagem espacial do processo de conversão de fases se desenvolvendo no tempo pode ser obtida se fizermos um gráfico *density plot* para $\psi(x, y, z, t)$ para um dado valor de z . Um gráfico desses vai mostrar regiões em diferentes tons de cinza. Um gráfico desses está mostrado na Fig. 4.8, onde os tons mais claros indicam a fase desconfinada. Cada quadro representa um instantes de tempo, o primeiro representa a condição inicial randômica, indicando um sistema com densidade relativamente

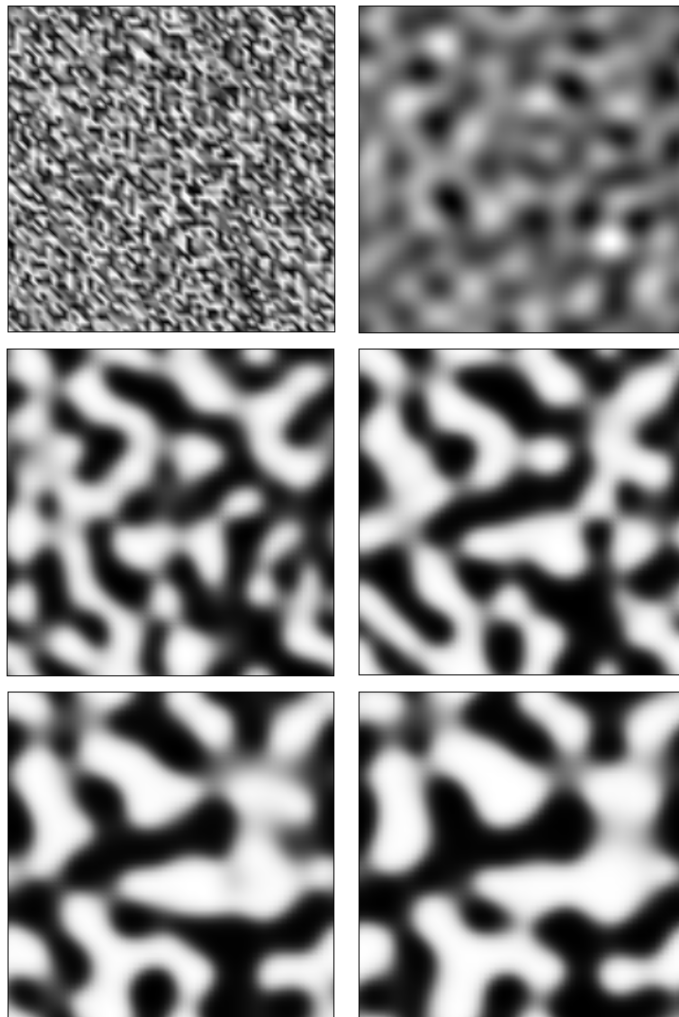


Figura 4.8: Evolução do valor médio da densidade bariônica $\psi(x, y, z, t)$ no plano $z = 0$ para diferentes instantes de tempo (o primeiro quadro representa a condição inicial). As regiões com tons mais claros são as com matéria desconfinada.

uniforme.

Para finalizar, vamos discutir a inclusão do termo de ruído na equação de Cahn-Hilliard. O procedimento para a inclusão da fonte de ruído é similar ao descrito para o *loop* de Polyakov. Vamos considerar o esquema iterativo definido na Eq. (4.37), com o ruído, desta vez, definido no espaço dos momentos [56]. A razão para considerar o ruído no espaço dos momentos é o aparecimento do Laplaciano na correlação de ruído, Eq. (3.58). No espaço dos momentos, temos então que ζ_ψ a ser empregado na Eq. (4.37) é dado por

$$\zeta_\psi = \sqrt{DTq^2} \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} \varsigma, \quad (4.46)$$

onde, novamente, ς é um ruído Gaussiano. Na Fig 4.9 comparamos os resultados para o parâmetro de ordem ψ_q com e sem o termo de ruído. Em ambas as curvas todos os parâmetros são os mesmos. O comprimento de correlação do sistema é da ordem de 1 fm e o espaçamento de rede também é de 1 fm. A análise da figura releva que a inclusão do termo de ruído não altera de maneira significativa a evolução do processo de conversão de fases, estando, portanto, de acordo com a discussão acima de que não são introduzidos modos espúrios ao se incluir flutuações de ruído quando se emprega um espaçamento de rede da ordem do comprimento de correlação.

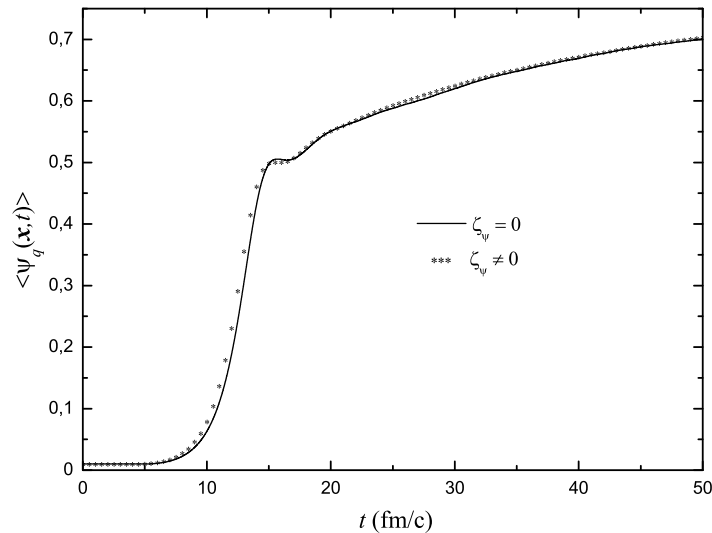


Figura 4.9: Evolução do valor médio da densidade bariônica na ausência e na presença de ruído.

4.2.3 Dinâmica acoplada do *loop* de Polyakov e da densidade bariônica

Na presente Seção vamos apresentar resultados para a dinâmica acoplada do *loop* de Polyakov e da densidade bariônica. Para a interação de acoplamento entre os campos ψ e ϕ empregamos a forma densidade-densidade dada na Eq. (3.54), onde K é um parâmetro livre. O ponto principal aqui é investigar o comportamento da dinâmica do *loop* de Polyakov frente ao processo de separação de fases. Como vimos anteriormente, a dinâmica de um parâmetro de ordem não conservado é, em geral, muito mais rápida do que a de um parâmetro de ordem sujeito a uma lei de conservação.

Para fixar o valor de K , vamos empregar o princípio de ele tenha um valor “natural”, i.e. seu valor não deve ser muito diferente do valor dos outros parâmetros que aparecem no problema. O sinal de K é tomado de maneira que nas regiões onde $\psi > 0$, o valor de ϕ seja tal que $\phi \simeq 1$, i.e. nas regiões do espaço em que a matéria se encontra na fase de quarks e glúons, o *loop* de Polyakov deve estar na fase desconfinada. Para tal, tomamos $K = -0.5$.

Os resultados a seguir consideram a situação inicial em que o sistema se encontra numa temperatura igual ou superior à temperatura crítica, de maneira que a condição inicial para ψ é a mesma que nas simulações da Seção anterior e para ϕ ela é uma distribuição uniforme com $\phi = 1$. Iteramos então as equações acopladas dadas nas Eqs. (4.28) e (4.37) a partir dessas condições iniciais para uma temperatura $T = 0.5T_d$.

Na Fig. 4.10 apresentamos os resultados para os valores médios de ψ (gráfico superior) e de ϕ (gráfico inferior). Uma primeira análise dessa figura mostra que a lei de conservação é satisfeita na simulação, pois as curvas para ψ_h e ψ_q são perfeitamente simétricas. Uma outra observação é que o valor médio do campo ϕ não se comporta como no caso desacoplado. Para a presente situação de resfriamento do sistema e tempo de simulação, $\langle \phi \rangle$ já teria ido para o mínimo da energia livre que, para a presente situação (com $N_f = 2$) e sem acoplamento, é para $\phi \approx 0.26$. Portanto, nota-se que a dinâmica do campo foi *travada* pelo acoplamento com a densidade bariônica. Isto é, como a dinâmica da separação de fases é muito mais lenta devido à lei de conservação, as regiões de matéria desconfinada mudam de tamanho lentamente, e a energia livre de acoplamento desfavorece a mudança do valor de ϕ em direção a zero, como seria o caso para a situação com $K = 0$. Portanto, ao se fazer uma média sobre ϕ , são somados números que são próximos de zero nas regiões confinadas, e próximos de um, nas regiões desconfinadas. A média sobre as regiões desconfinadas leva a um valor diferente de zero para ϕ . Nota-se também que mesmo para um tempo longo de simulação, a separação de fases não se completa.

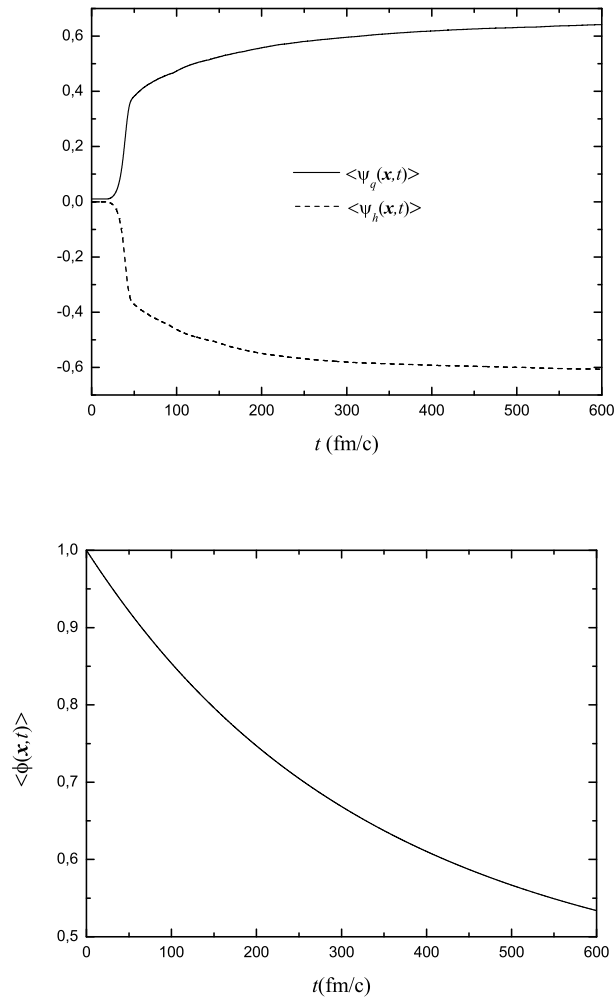


Figura 4.10: Valores médios para ψ e ϕ quando há acoplamento entre essas quantidades.

Na Fig. 4.11 está mostrado um gráfico *density plot* para $\psi(x, y, z, t)$ e $\phi(x, y, x, t)$ para $z = 0$. Os gráficos da esquerda são para ψ e os da direita para ϕ . Novamente, os tons mais claros indicam a fase desconfiada em cada caso. Nota-se nitidamente a correlação entre os valores de ψ e ϕ , as regiões claras correspondem a $\psi > 0$ e $\phi \sim 1$.

Como conclusão, os resultados mostram que a consideração da densidade bariônica conjuntamente com o *loop* de Polyakov fornece uma imagem clara do processo de separação de fases no resfriamento da matéria hadrônica a partir do ponto crítico. Há de se chamar à atenção que no caso real da matéria produzida numa colisão de íons pesados, eventualmente a matéria desconfiada terá que hadronizar, i.e. ela vai se tornar matéria confinada. A descrição desse processo final obviamente não

pode ser dentro do contexto de separação de fases. Também, conforme mencionado anteriormente, uma descrição completa do resfriamento da matéria a partir do ponto crítico deve incluir a dinâmica do condensado quiral [47, 59], como também devem ser incluídos os efeitos da expansão e do escoamento da matéria, bem como efeitos de tamanho finito do sistema.

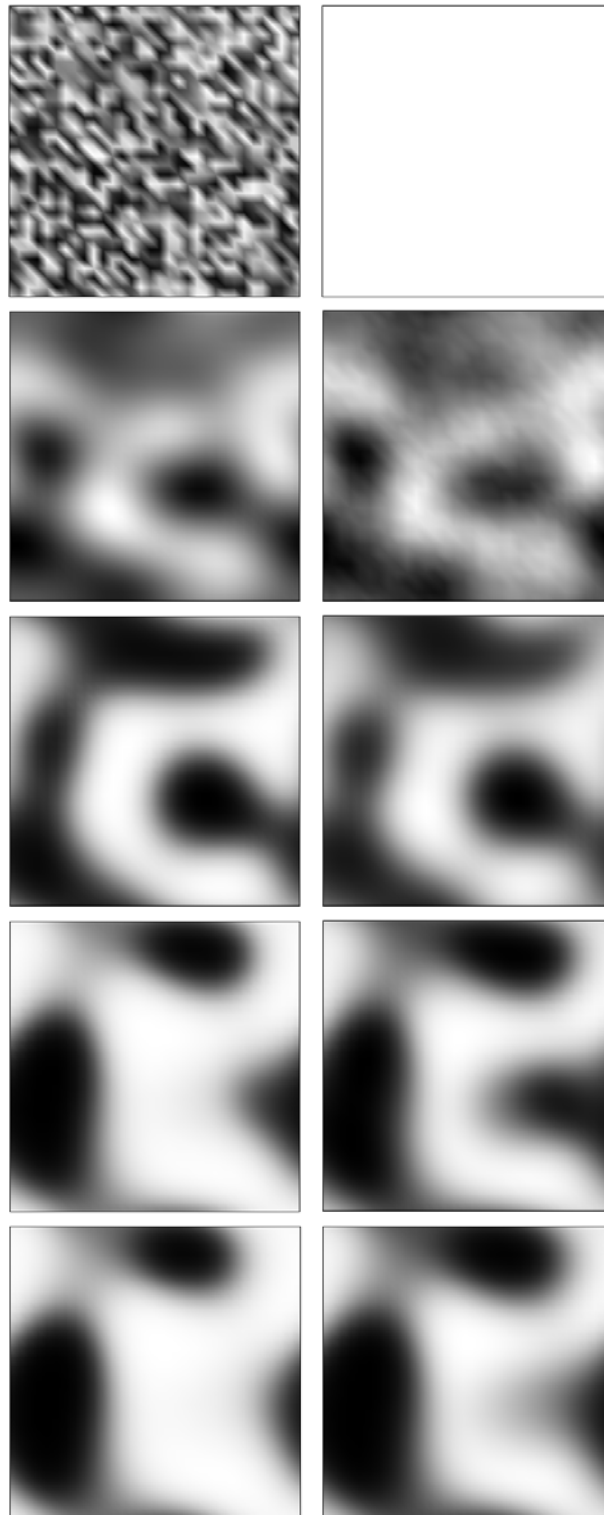


Figura 4.11: Evolução do valor médio da densidade bariônica $\psi(x, y, z, t)$ (esquerda) e do *loop* de Polyakov $\phi(x, y, x, t)$ no plano $z = 0$ para diferentes instantes de tempo. As regiões com tons mais claros são as com matéria desconfiada.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Nessa dissertação estudamos o problema acoplado das equações de Ginzburg-Landau e de Cahn-Hilliard, com uma aplicação para o caso da transição de fase de desconfinamento na QCD. O objetivo principal era obter um entendimento qualitativo sobre a interferência de uma densidade conservada, como a densidade bariônica, na dinâmica da transição de desconfinamento representada pelo Loop de Polyakov.

No Capítulo 2 apresentamos uma breve revisão sobre fenômenos críticos. Discutimos alguns conceitos importantes relacionados às transições de fase dinâmicas, dando ênfase a sistemas de Matéria Condensada. Em seguida, apresentamos os modelos fenomenológicos A, B e C. Discutimos também, os fenômenos de nucleação e decomposição espinodal, importantes no estudo do processo de restabelecimento do equilíbrio termodinâmico de um sistema após um *quench*. Apresentamos, também, uma breve discussão sobre as funções de estrutura estática e dinâmica. Nesta, mostramos que a função de estrutura é a transformada de Fourier da função de correlação densidade-densidade, e apresentamos algumas de suas propriedades importantes no estudo das transições de fase dinâmicas.

Uma breve revisão sobre o diagrama de fases da QCD foi apresentada no Capítulo 3. Discutimos, através de argumentos qualitativos, obtidos de cálculos com modelos, experimentos com matéria hadrônica e simulações numéricas, como se chegou ao conhecimento desse diagrama de fases. Discutimos a transição de desconfinamento no contexto da QCD e fizemos contato com os experimentos de colisões de íons pesados a altas energias. Discutimos de maneira sucinta os processos envolvidos durante uma colisão desse tipo apresentando um esquema de colisão entre dois núcleos com velocidades relativísticas, dando ênfase às diferentes fases da colisão e a possível formação e evolução do plasma de quarks e glúons na colisão. Por fim, discutimos a aplicação dos modelos A e B no estudo da transição de fase de desconfinamento na QCD. Revisamos os argumentos que levam à interpretação de que o Loop de Polyakov pode ser considerado como sendo um parâmetro de ordem da transição de

desconfinamento na QCD no limite de quarks infinitamente pesados, o qual satisfaz a dinâmica do modelo A. Também revisamos argumentos para o emprego da densidade bariônica como um parâmetro de ordem conservado na transição de desconfinamento, satisfazendo a dinâmica do modelo B. Posteriormente, consideramos o acoplamento do Loop de Polyakov com a densidade bariônica no contexto do modelo C. Por fim, discutimos a necessidade de incluir efeitos de memória nas equações de Ginzburg-Landau e Cahn-Hilliard, de maneira que estas passem a respeitar a causalidade.

No capítulo 4, apresentamos o método numérico das diferenças finitas utilizado na discretização das equações de Ginzburg-Landau e de Cahn-Hilliard. Definimos um esquema iterativo no tempo a partir do qual podemos estudar o problema desacoplado e acoplado para as equações com e sem efeitos de memória. Por fim, no Capítulo 5, apresentamos os resultados numéricos obtidos a partir do esquema iterativo no tempo definido no Capítulo 4. Em todos os casos discutidos calculamos o valor médio do Loop de Polyakov ϕ e da densidade bariônica ρ e as funções de estrutura conjugada a estes.

Inicialmente, apresentamos resultados qualitativos a fim de verificar as mudanças causadas pelos termos de acoplamento e pela inclusão de efeitos de memória. A discussão dos resultados qualitativos foi dividida em duas partes, uma sem os termos de ruído e outra com os termos de ruído. A primeira análise feita foi sobre as conseqüências da inclusão de efeitos de memória às equações de Ginzburg-Landau e de Cahn-Hilliard. Essa análise foi feita observando a influência do termo de derivada segunda no tempo que surge devido à inclusão de memória nessas equações. A conclusão mais importante que pode ser tirada dessa análise é que a inclusão de efeitos de memória causa um atraso na explosão que caracteriza o crescimento exponencial de um parâmetro de ordem nos estágios iniciais da sua evolução. Outra mudança a ser notada é que a inclusão de um termo de derivada segunda no tempo adiciona um caráter ondulatório às equações de Ginzburg-Landau e de Cahn-Hilliard que, na sua ausência, são puramente difusivas. Para a equação de Ginzburg-Landau as ondulações surgem para qualquer valor de τ , aumentando conforme o valor de τ aumenta. Já para a equação de Cahn-Hilliard, as oscilações só aparecem para grandes valores de γ . Essa é uma conseqüência da lei de conservação imposta ao valor do parâmetro de ordem dessa equação.

Em seguida, apresentamos resultados comparativos para as equações desacopladas e acopladas. No caso desacoplado, concluímos que a dinâmica de relaxamento para o equilíbrio do Loop de Polyakov e da densidade bariônica são totalmente independentes. Através da análise dos valores médios concluímos que a dinâmica do Loop de Polyakov é muito mais rápida que a dinâmica da densidade bariônica. O que foi

comprovado quando analisamos a função de estrutura de cada uma dessas quantidades. Para ambas quantidades as funções de estrutura apresentam picos evidenciando a ocorrência do processo de decomposição espinodal. As curvas para a função de estrutura do loop de Polyakov apresentam picos bem definidos indicando que a dinâmica para o equilíbrio é muito rápida. Já para a densidade bariônica os picos são bem mais suaves e, em alguns casos, para pequenos números de onda, mal conseguimos visualizar a formação de um pico no intervalo de tempo adotado nas simulações. Essa diferença entre a velocidade das duas dinâmicas é consequência direta da lei de conservação imposta sobre a densidade bariônica do sistema, que restringe o número de estados que o sistema pode acessar durante o processo de restabelecimento do equilíbrio. Como tanto o Loop de Polyakov quando a densidade bariônica podem ser considerados como parâmetros de ordem no estudo da transição de desconfinamento na QCD, espera-se que o acoplamento entre essas duas quantidades forneça uma descrição mais precisa sobre essa transição de fase. Assim, estudamos também o acoplamento entre essas duas quantidades. Nos primeiros instantes de tempo a dinâmica do loop de Polyakov e da densidade bariônica não apresentam grandes mudanças, estas evoluem como se não houvesse acoplamento. Após um transiente de tempo o acoplamento começa a se manifestar e a dinâmica do sistema muda. A dinâmica do loop de Polyakov passa a ser mais lenta e a dinâmica da densidade bariônica mais rápida se comparado com o caso desacoplado. As curvas para a função de estrutura do loop de Polyakov passam a apresentar picos muito mais suaves e em alguns casos não há formação de um pico propriamente dito, evidenciando uma redução de velocidade na dinâmica. Diferentemente do loop de Polyakov, a mudança nas curvas da densidade bariônica não são tão grandes, estas apresentam uma dinâmica um pouco mais rápida e, em alguns casos, para pequenos números de onda, já conseguimos indentificar a formação de um pico. Assim, concluímos que o restabelecimento do equilíbrio do sistema acoplado também se dá através do processo de decomposição espinodal, existe a formação de picos nas curvas da função de estrutura. Outro ponto a ser ressaltado é que após um determinado transiente de tempo as velocidades das dinâmicas se igualam e o sistema evolui como um todo para o equilíbrio. Nessa situação, a lei de conservação imposta à densidade bariônica passa a atuar de maneira indireta sobre o Loop de Polyakov.

Para concluir, salientamos novamente o escopo limitado do presente estudo, no que se refere a comparações com dados experimentais. Para tal, como dito anteriormente, é necessário incluir vários outros efeitos, como também, empregar uma geometria que traduza de maneira mais realista a situação experimental. Um dos efeitos mais importantes a ser considerado é o do escoamento hidrodinâmico. Também, a expansão do sistema não pode ser desconsiderada. A inclusão desses

efeitos muda a classe de universalidade dinâmica em que se insere o problema, provavelmente sendo a caracterizada pelo modelo H. Também, para a caracterização completa das transições de fase da QCD, é necessário incluir a transição quiral no problema. Essa, por sua vez, é caracterizada pelo condensado quiral que, no limte quiral, seria o parâmetro de ordem apropriado. A dinâmica do condensado quiral, por sua vez, é caracterizada pelo modelo A. Portanto, para caracterizar a evolução da matéria hadrônica altamente excitada produzida numa colisão de íons pesados a altas energias teríamos que empregar as dinâmicas do Loop de Polyakov, do condensado de quarks, da densidade bariônica, e dos modos hidrodinâmicos associados ao tensor energia-momento. Uma tarefa gigantesca e certamente difícil, mas eventualmente necessária para o entendimento de um dos mais fascinantes problemas da Física contemporânea, o confinamento dos quarks e glúons. Esperamos que o pequeno passo dado no presente trabalho seja de alguma valia nesse empreendimento.

Apêndice A

Coarse-graining

As técnicas de *coarse-graining* são utilizadas com a finalidade de se obter uma formulação da função de partição que enfatize as propriedades do parâmetro de ordem. Em outras palavras, uma função de partição que possa ser empregada no estudo tanto das transições de fase estáticas quanto dinâmicas. Seguindo a Ref. [9], vamos discutir resumidamente como obter essa função de partição e construir o Hamiltoniano *coarse-grained*.

Para obter uma função de partição que reflita as propriedades do parâmetro de ordem vamos dividir o sistema em estudo em muitas células idênticas. O tamanho dessas células deve ser muito maior que qualquer comprimento microscópico a do sistema, por exemplo, deve ser maior que o espaçamento entre as partículas ou maior que o alcance do potencial de interação entre estas. Vamos assumir que a média do parâmetro de ordem $\phi(\mathbf{x})$ sobre todas as partículas de uma célula centrada em \mathbf{x} seja representada por $\bar{\phi}(\mathbf{x})$. Assumindo que cada célula seja formada por muitas partículas, a variável $\bar{\phi}(\mathbf{x})$ pode ser tratada como uma variável contínua que pode variar de célula para célula. Esse processo de tomar médias sobre muitas partículas em um volume finito é conhecido como *coarse-graining*. Agora, se considerarmos que a energia do sistema está relacionada com uma certa configuração local do parâmetro de ordem ϕ , os estados do sistema podem ser especificados pelo valor de $\bar{\phi}$ e ter energia efetiva $\bar{\mathcal{H}}$. Assim, a função de partição passa a ser um funcional integral sobre todos os possíveis valores de $\bar{\phi}$ em todas as posições \mathbf{x} , ou seja,

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\phi} \exp \left[-\beta \left(\bar{\mathcal{H}} - \int d^d x h(\mathbf{x}) \bar{\phi}(\mathbf{x}) \right) \right], \quad (\text{A.1})$$

onde $\beta = 1/k_B T$. Em sistemas puramente clássicos, essa função de partição pode ser obtida da seguinte maneira. Introduzimos a função $\delta[\phi - \bar{\phi}]$ na expressão da função de partição clássica e tomamos $\phi = \bar{\phi}$

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\phi} \text{Tr} \prod_{\mathbf{x}} \delta[\phi - \bar{\phi}] \exp \left[-\beta \left(\mathcal{H} - \int d^d x h(\mathbf{x}) \bar{\phi}(\mathbf{x}) \right) \right], \quad (\text{A.2})$$

considerando que

$$e^{-\beta\bar{\mathcal{H}}} = \text{Tr} \prod_{\mathbf{x}} \delta[\phi - \bar{\phi}] e^{-\beta\mathcal{H}}. \quad (\text{A.3})$$

No estudo das transições de fase a diferença entre ϕ e $\bar{\phi}$ não é importante, portanto vamos utilizar a notação ϕ em todas as equações. A energia efetiva $\bar{\mathcal{H}}$ é comumente chamada de Hamiltoniano na mecânica estatística e na literatura dos fenômenos críticos, apesar de não ser função de variáveis canônicas. Esta energia efetiva também pode ser associada à ação presente na teoria quântica de campos e, portanto, ser chamada de ação em algumas literaturas. Uma vez que não estamos interessados na diferença entre $\bar{\mathcal{H}}$ e \mathcal{H} vamos utilizar a notação \mathcal{H} em todas as equações.

Uma forma fenomenológica para o Hamiltoniano \mathcal{H} pode ser obtida a partir das seguintes considerações. Inicialmente, vamos considerar que nas proximidades do ponto crítico o valor do parâmetro de ordem ϕ é pequeno e uniforme, e se $T > T_c$ o valor médio de ϕ é nulo. Nessas condições, a termodinâmica de equilíbrio é completamente determinada pelo Hamiltoniano do sistema. Assim, o Hamiltoniano deve ser um funcional de ϕ e invariante sob as transformações do grupo de simetria da fase desordenada do sistema. A partir dessas considerações, o Hamiltoniano deve ser da seguinte forma

$$\mathcal{H} = \int d^d x \left\{ \frac{c}{2} (\nabla\phi)^2 + f(\phi, T) \right\}, \quad (\text{A.4})$$

onde $f(\phi, T)$ é uma densidade de energia livre *coarse-grained*. Considerando que o valor de ϕ é pequeno podemos expandir f em potências de ϕ

$$f(\phi, T) = s\phi + r\phi^2 + w\phi^3 + u\phi^4 + \dots \quad (\text{A.5})$$

Nessa densidade de energia os coeficientes s, r, w e u podem depender da temperatura do sistema. Geralmente, os termos ímpares dessa série são desprezados por não serem invariantes sob as transformações do grupo de simetria da fase desordenada do sistema. Ao truncarmos a densidade de energia livre f devemos escolher os coeficientes de maneira que existam valores de equilíbrio para ϕ . Note que na definição de \mathcal{H} desconsideramos termos de ordem superiores em $\nabla\phi$. Essa aproximação só é válida quando as variações espaciais de ϕ são lentas no comprimento de escala microscópico a do sistema, ou seja, quando o número de onda k das flutuações do sistema é menor que o *cutoff* $\Lambda \sim 2\pi/a$. Podemos concluir então, que qualquer modelo fenomenológico carrega consigo um *cutoff* superior.

Apêndice B

Função de Estrutura: Estática e Dinâmica

Neste apêndice definiremos as funções de estrutura estática e dinâmica a partir de processos de espalhamento simples presentes na matéria condensada. A exposição a seguir está baseada na Ref. [9]. Vamos iniciar nossa discussão considerando o tipo mais simples de espalhamento, ou seja, o espalhamento de uma onda por um material formado por planos paralelos e igualmente espaçados. Por exemplo, o espalhamento de ondas de raio-X por um cristal, comumente conhecido como *espalhamento de Bragg*. Nesse, a onda incidente sofrerá difração pelo conjunto de planos, e a intensidade de espalhamento será modulada por interferências construtivas e destrutivas. Uma descrição detalhada de um espalhamento desse tipo pode ser obtida adotando-se uma descrição quântica.

Considere o espalhamento de um feixe de partículas por um sistema composto por muitos corpos (átomos, partículas, etc). Sabemos que a seção de choque pode ser determinada através do cálculo da taxa de transição entre os estados de onda plana inicial e final das partículas espalhadas. Os estados de onda plana inicial e final podem ser denotados por $|\mathbf{k}\rangle$ e $|\mathbf{k}'\rangle$, e possuem os respectivos momentos $\hbar\mathbf{k}$ e $\hbar\mathbf{k}'$. Supondo que a interação entre as partículas seja fraca, aproximação de Born, então a taxa de transição entre os estados inicial e final é proporcional módulo ao quadrado do elemento de matriz [57]

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \langle \mathbf{k} | U | \mathbf{k}' \rangle = \int d^d x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}}, \quad (\text{B.1})$$

onde $U(\mathbf{x})$ é o potencial de interação entre as partículas. Consideramos nessa equação a função de onda não normalizada $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle$ para as partículas espalhadas. Assim, a seção de choque diferencial para o vetor de onda final $|\mathbf{k}'\rangle$ é dado por

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega} \sim |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2. \quad (\text{B.2})$$

Em sistemas formados por muitos corpos, por exemplo átomos, o potencial de espalhamento é simplesmente a soma dos termos provenientes de cada um dos

átomos do sistema, ou seja,

$$U(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} U_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}), \quad (\text{B.3})$$

onde \mathbf{x}_{α} representa a posição do átomo α . Desta maneira, o elemento de matriz $M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, equação (B.1), pode ser escrito da seguinte forma

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \sum_{\alpha} \int d^d x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}}. \quad (\text{B.4})$$

Definindo a distância relativa $\mathbf{R}_{\alpha} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}$ e o vetor de onda de espalhamento $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, podemos reescrever esse elemento de matriz como

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} &= \sum_{\alpha} \int d^d R_{\alpha} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{\alpha} + \mathbf{x}_{\alpha})} U_{\alpha}(\mathbf{R}_{\alpha}) e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{R}_{\alpha} + \mathbf{x}_{\alpha})} \\ &= \sum_{\alpha} \left[\int d^d R_{\alpha} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\alpha}} U_{\alpha}(\mathbf{R}_{\alpha}) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}_{\alpha}} \right] e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{x}_{\alpha}} \\ &= \sum_{\alpha} U_{\alpha}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}}. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Nessa equação $U_{\alpha}(\mathbf{q})$, conhecido como *fator de forma atômico*, corresponde à magnitude e a direção do espalhamento de cada átomo α do sistema. Assim, a seção de choque, equação (B.2), será dada por

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega} \sim \sum_{\alpha, \alpha'} U_{\alpha}(\mathbf{q}) U_{\alpha'}^*(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{x}_{\alpha'})}. \quad (\text{B.6})$$

A equação acima representa a seção de choque para uma particular configuração do sistema, especificada pelas posições \mathbf{x}_{α} dos átomos. Se as posições dos átomos forem fixas, como deve ser em sistemas clássicos à temperatura nula, a configuração do sistema é única e essa seção de choque fornece uma boa descrição do problema. Contudo, sistemas reais podem apresentar várias configurações de átomos, pois estes podem se mover seguindo as leis da mecânica estatística [58]. Assim, para obter a seção de choque de sistemas reais devemos realizar médias sobre todas as possíveis configurações do sistema, ou seja, tomar uma média sobre ensembles da equação (B.6). Representando a média sobre ensembles por $\langle \dots \rangle$, temos que

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega} \sim \left\langle \sum_{\alpha, \alpha'} U_{\alpha}(\mathbf{q}) U_{\alpha'}^*(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{x}_{\alpha'})} \right\rangle. \quad (\text{B.7})$$

Agora, se todos os átomos do sistema forem iguais, o fator de forma atômico é idêntico para todos os átomos e, portanto, obtemos a seguinte seção de choque para o espalhamento de um sistema estatístico

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega} \sim |U(\mathbf{q})|^2 \tilde{S}(\mathbf{q}), \quad (\text{B.8})$$

onde $|U(\mathbf{q})|^2 = U_\alpha(\mathbf{q})U_\alpha^*(\mathbf{q})$ e $\tilde{S}(\mathbf{q})$ é a *função de estrutura* definida como

$$\tilde{S}(\mathbf{q}) = \left\langle \sum_{\alpha, \alpha'} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_{\alpha'})} \right\rangle. \quad (\text{B.9})$$

A equação (B.8) fornece a relação entre a função de estrutura e a seção de choque. Desta maneira, conhecendo o fator de forma atômico do sistema, podemos realizar medidas experimentais da função de estrutura em experimentos com espalhamento de partículas. O conhecimento da função de estrutura de um sistema leva ao conhecimento de sua estrutura interna, como pode ser visto na equação (B.9), esta fornece informações sobre a média das posições relativas dos átomos ou partículas de um sistema.

Ao realizarmos estudos teóricos ou numéricos dos processos de espalhamento encontramos algumas dificuldades na determinação da função de estrutura a partir das equações (B.8) e (B.9). Portanto, é útil relacionar essa função com outras quantidades físicas mais simples de serem calculadas. É bem conhecido na literatura dos fenômenos críticos que a função de estrutura é simplesmente a transformada de Fourier da função de correlação [9, 21]. Sendo assim, vamos verificar que a função definida na equação (B.9) é a transformada de Fourier da função de correlação para a densidade partículas de um sistema. A densidade de partículas por unidade de volume de um sistema na posição \mathbf{x} do espaço é definida da seguinte maneira

$$n(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha). \quad (\text{B.10})$$

Funções de correlação para essa densidade podem ser definidas como sendo a média sobre ensembles do valor de $n(\mathbf{x})$ em diferentes pontos do espaço, a mais importante de todas é a correlação de dois pontos

$$C_{nn}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle n(\mathbf{x})n(\mathbf{x}') \rangle = \left\langle \sum_{\alpha, \alpha'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha) \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_{\alpha'}) \right\rangle. \quad (\text{B.11})$$

Reescrevendo a equação (B.9) podemos facilmente mostrar que $\tilde{S}(\mathbf{q})$ é a transformada de Fourier de $C_{nn}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$. Primeiramente, separamos as somatórias dessa equação

$$\tilde{S}(\mathbf{q}) = \left\langle \sum_{\alpha, \alpha'} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_{\alpha'})} \right\rangle = \left\langle \sum_{\alpha} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_\alpha} \sum_{\alpha'} e^{-i(-\mathbf{q})\mathbf{x}_{\alpha'}} \right\rangle. \quad (\text{B.12})$$

Em seguida, considerando as propriedades da função $\delta(\mathbf{x})$ podemos definir as exponenciais presentes na equação acima como

$$e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} = \int d^d x' \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}'}, \quad (\text{B.13})$$

e, conseqüentemente, obter

$$\begin{aligned}
 \tilde{S}(\mathbf{q}) &= \left\langle \int d^d x \left(\sum_{\alpha} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}) \right) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} \int d^d x' \left(\sum_{\alpha'} \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_{\alpha'}) \right) e^{-i(-\mathbf{q})\mathbf{x}'} \right\rangle \\
 &= \left\langle \int d^d x n(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} \int d^d x' n(\mathbf{x}') e^{-i(-\mathbf{q})\mathbf{x}'} \right\rangle \\
 &= \langle n(\mathbf{q}) n(-\mathbf{q}) \rangle \\
 &= \langle |n(\mathbf{q})|^2 \rangle.
 \end{aligned} \tag{B.14}$$

Na última equação, $n(\mathbf{q})$ representa a transformada de Fourier de $n(\mathbf{x})$. Portanto, mostramos que a função de estrutura é a transformada de Fourier da função de correlação. Contudo, devemos notar que $C_{nn}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ só pode ser obtida através da transformada inversa de $\tilde{S}(\mathbf{q})$ se $C_{nn}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ for uma função da distância relativa $\mathbf{r} = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$.

A discussão apresentada até aqui se restringiu a processos de espalhamentos estáticos, no caso espalhamento por raio-X. Em experimentos com espalhamentos desse tipo a energia das partículas espalhadas não é monitorada e, portanto, podemos medir a função de estrutura estática. Em experimentos com espalhamentos inelásticos a mudança na energia das partículas espalhadas é importante e deve ser monitorada. Assim, podemos medir a função de estrutura dependente do tempo. A fim de definir a relação entre a seção de choque e a função de estrutura vamos considerar o caso particular do espalhamento inelástico de um feixe de nêutrons com spin 1/2 e massa m_n por um sistema formado por muitos corpos. Inicialmente, o sistema se encontra num estado $|\lambda\rangle$ com energia E_{λ} e o feixe incidente num estado de onda plana $|\mathbf{k}s\rangle = |\mathbf{k}\rangle|s\rangle$ com momento $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ e spin s . Na ausência de um campo magnético externo a energia do feixe de nêutrons no estado $|\mathbf{k}s\rangle$ é dada por $E = \hbar^2 k^2 / 2m_n$. Vamos supor que cada nêutron do feixe incidente está confinado numa caixa de volume V e se encontra no estado de função de onda normalizado

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}}{\sqrt{V}}. \tag{B.15}$$

Considerando a regra de ouro de Fermi [57], a taxa de transição entre o estado misto inicial $|\mathbf{k}s\lambda\rangle = |\mathbf{k}s\rangle|\lambda\rangle$ e o estado misto final $|\mathbf{k}'s'\lambda'\rangle$ é dada por

$$W_{\mathbf{k}s\lambda \rightarrow \mathbf{k}'s'\lambda'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \mathbf{k}s\lambda | U | \mathbf{k}'s'\lambda' \rangle \right|^2 \delta(E + E_{\lambda} - E' - E_{\lambda'}), \tag{B.16}$$

onde U é o potencial de interação entre os nêutrons do feixe e os constituintes do sistema. Como não estamos interessados nos estados $|\lambda\rangle$ e $|\lambda'\rangle$ do sistema vamos realizar uma soma sobre todos os possíveis estados considerando a probabilidade de ocorrência p_{λ} , assim,

$$W_{\mathbf{k}s \rightarrow \mathbf{k}'s'} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\lambda, \lambda'} p_{\lambda} W_{\mathbf{k}s\lambda \rightarrow \mathbf{k}'s'\lambda'}. \tag{B.17}$$

Se o sistema estiver em equilíbrio térmico $p_\lambda = Z^{-1} \exp(-\beta E_\lambda)$ para o ensemble canônico ou $p_\lambda = \Xi^{-1} \exp[-\beta(E_\lambda - \mu N_\lambda)]$ para o ensemble grande canônico, onde N_λ é o número de constituintes do sistema no estado λ . Se existirem N nêutrons no estado $|\mathbf{k}s\rangle$ então, o número de nêutrons espalhados por segundo com estado final $|\mathbf{k}'s'\rangle$ é $NW_{\mathbf{k}s \rightarrow \mathbf{k}'s'}$. O número total de nêutrons espalhados com todos os possíveis estados finais com spin s' é igual ao fluxo incidente de nêutrons Φ vezes a seção de choque total

$$\Phi\sigma_{tot} = N \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}s \rightarrow \mathbf{k}'s'} = NV \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} W_{\mathbf{k}s \rightarrow \mathbf{k}'s'}. \quad (\text{B.18})$$

Como o fluxo de nêutrons é dado pelo número de nêutrons incidentes por volume vezes a velocidade dos nêutrons chegamos que a velocidade dos nêutrons incidentes é $\Phi V/N$. A integral em \mathbf{k} presente na equação (B.18) pode ser transformada em uma integral sobre E' e sobre o ângulo sólido Ω se considerarmos que

$$d^3k' = k'^2 dk' d\Omega = \frac{m_n}{\hbar^2} k' dE' d\Omega. \quad (\text{B.19})$$

Assim, a seção de choque diferencial será dada por

$$\left. \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{s \rightarrow s'} = \frac{m_n^2 k'}{\hbar^3 k} \frac{V^2}{(2\pi)^3} W_{\mathbf{k}s \rightarrow \mathbf{k}'s'}. \quad (\text{B.20})$$

Observe que a equação (B.16) contem o produto entre quatro funções de onda normalizadas, portanto, esta é proporcional a V^{-2} . Desta maneira, a seção de choque é independentente do volume de normalização e pode ser reescrita como

$$\left. \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{s \rightarrow s'} = \frac{k'}{k} \frac{m_n^2}{(2\pi\hbar^2)^2} \sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda \left| \langle \mathbf{k}s\lambda | U | \mathbf{k}'s'\lambda' \rangle \right|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega), \quad (\text{B.21})$$

onde, agora, $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{x})$ e $\hbar\omega = E - E'$ é a energia transferida de cada nêutron para o sistema. Nos casos onde os graus de liberdade de spins não são importantes, podemos somar sobre todos os estados de spin considerando a probabilidade de ocorrência p_s

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} \frac{m_n^2}{(2\pi\hbar^2)^2} \sum_{\lambda\lambda's's'} p_\lambda p_s \left| \langle \mathbf{k}s\lambda | U | \mathbf{k}'s'\lambda' \rangle \right|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega). \quad (\text{B.22})$$

Vamos supor agora, que o sistema em questão é constituído por átomos. O potencial de interação entre um átomo α do sistema na posição \mathbf{x}_α e os nêutrons do feixe incidente é dado por

$$U_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha) = \frac{2\pi\hbar}{m_n} b_\alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha) \equiv a_\alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha), \quad (\text{B.23})$$

onde b_α é o comprimento de espalhamento do átomo α . Assim, o potencial de interação do sistema com o feixe de nêutrons é

$$U = \sum_{\alpha} U_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}) = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}). \quad (\text{B.24})$$

Para esse potencial de interação, os elementos de matriz $\langle \mathbf{k}s\lambda | U | \mathbf{k}'s'\lambda' \rangle$ que aparecem na seção de choque diferencial definida na equação (B.22) são dados por

$$\langle \mathbf{k}s\lambda | U | \mathbf{k}'s'\lambda' \rangle = \delta_{ss'} \sum_{\alpha} \langle \lambda | a_{\alpha} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}} | \lambda' \rangle, \quad (\text{B.25})$$

onde $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$. Considerando as seguintes identidades

$$\delta(E_{\lambda} - E_{\lambda'} + \hbar\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d(t-t')}{2\pi\hbar} e^{(i/\hbar)(E_{\lambda} - E_{\lambda'} + \hbar\omega)(t-t')} \quad (\text{B.26})$$

$$\langle \lambda | f(\mathbf{x}_{\alpha}(t)) | \lambda' \rangle = \langle \lambda | f(\mathbf{x}_{\alpha}) | \lambda' \rangle e^{(i/\hbar)(E_{\lambda} - E_{\lambda'})t}, \quad (\text{B.27})$$

a seção de choque pode ser reescrita como

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{2\pi\hbar k} \sum_{\lambda, \lambda'} \int d(t-t') e^{i\omega(t-t')} \quad (\text{B.28})$$

$$\times \left[p_{\lambda} \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \lambda | b_{\alpha} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t)} | \lambda' \rangle \langle \lambda' | b_{\alpha'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha'}(t')} | \lambda \rangle \right]. \quad (\text{B.29})$$

Os estados $|\lambda'\rangle$ formam um conjunto completo no espaço dos estados do sistema, ou seja,

$$\sum_{\lambda'} |\lambda'\rangle \langle \lambda'| = 1. \quad (\text{B.30})$$

Além disso, o valor esperado de equilíbrio de qualquer operador O do sistema é dado por

$$\langle O \rangle = \sum_{\lambda'} p_{\lambda'} \langle \lambda' | O | \lambda' \rangle. \quad (\text{B.31})$$

Com isso, podemos escrever a seção de choque (B.29) como sendo

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{2\pi\hbar k} \int d(t-t') e^{i\omega(t-t')} \langle \sum_{\alpha, \alpha'} b_{\alpha} b_{\alpha'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha'}(t')} \rangle. \quad (\text{B.32})$$

O grau de liberdade que determina o tipo do isótopo do átomo α pertencente ao sistema é dinamicamente desacoplado dos outros graus de liberdade, como por exemplo a posição. Assim, a média presente na Eq. (B.32) pode ser escrita como a soma da média sobre $b_{\alpha} b_{\alpha'}$ vezes a média $\langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha'}(t')} \rangle$, então

$$F = \sum_{\alpha\alpha'} \overline{b_{\alpha} b_{\alpha'}} \langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha'}(t')} \rangle, \quad (\text{B.33})$$

onde $F = \langle \sum_{\alpha, \alpha'} b_{\alpha} b_{\alpha'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha'}(t')} \rangle$. Se o sistema possui N_1 átomos do isótopo 1 e N_2 átomos do isótopo 2, a probabilidade de um átomo em \mathbf{x}_{α} ser do isótopo i é N_i/N onde o índice i pode assumir os valores 1 e 2 e $N = N_1 + N_2$. Observe que esta probabilidade não depende do átomo α , portanto, a constante b_{α} é estatisticamente independente de $b_{\alpha'}$ para $\alpha \neq \alpha'$. Logo,

$$\overline{b_{\alpha} b_{\alpha'}} = \overline{b}^2 \delta_{\alpha\alpha'} + |\overline{b}|^2 (1 - \delta_{\alpha\alpha'}), \quad (\text{B.34})$$

e a média F assume a seguinte forma

$$F = |\overline{b}|^2 \langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha'}(t')} \rangle + [\overline{b}^2 - |\overline{b}|^2] \langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t')} \rangle. \quad (\text{B.35})$$

Podemos agora, decompor a equação (B.32) em dois termos, um é a seção de choque coerente e o outro a seção de choque incoerente

$$\left. \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{coe} = \frac{\sigma_{coe}}{4\pi} \frac{k'}{2\pi\hbar k} \int \sum_{\alpha\alpha'} d(t-t') e^{i\omega(t-t')} \langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha'}(t')} \rangle, \quad (\text{B.36})$$

$$\left. \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{inc} = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi} \frac{k'}{2\pi\hbar k} \int \sum_{\alpha} d(t-t') e^{i\omega(t-t')} \langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t')} \rangle, \quad (\text{B.37})$$

onde $\sigma_{coe} = 4\pi|\overline{b}|^2$ e $\sigma_{inc} = 4\pi[\overline{b}^2 - |\overline{b}|^2]$. De maneira análoga ao caso estático, podemos definir a função de correlação dependente do tempo como

$$C_{nn}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') = \langle n(\mathbf{x}, t) n(\mathbf{x}', t') \rangle. \quad (\text{B.38})$$

Como estamos interessados apenas em Hamiltonianos independentes do tempo, todas as médias termodinâmicas são invariantes por translações temporais, logo $\langle n(\mathbf{x}, t) \rangle = \langle n(\mathbf{x}) \rangle$ e $C_{nn}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t')$ depende somente da diferença $t - t'$. Assim, se

$$C_{nn}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{i\omega(t-t')} C_{nn}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t'), \quad (\text{B.39})$$

temos que

$$\langle n(\mathbf{x}, \omega) n(\mathbf{x}', \omega') \rangle = C_{nn}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega') 2\pi\delta(\omega + \omega'). \quad (\text{B.40})$$

Podemos agora reescrever a seção de choque coerente como

$$\left. \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{coe} = \frac{\sigma_{coe}}{4\pi} \frac{k'}{2\pi\hbar k} \frac{V}{2\pi\hbar} C_{nn}(\mathbf{q}, \omega), \quad (\text{B.41})$$

onde

$$\begin{aligned} C_{nn}(\mathbf{q}, \omega) &= \int d(t-t') e^{i\omega(t-t')} \tilde{S}_{nn}(\mathbf{q}, t, t') \\ &= \frac{1}{V} \int d^3x d^3x' \int d(t-t') e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{i\omega(t-t')} C_{nn}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\alpha\alpha'} \langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_{\alpha'}(t')} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

Nessa equação \tilde{S}_{nn} é a função de estrutura dinâmica. Para escrever a seção de choque incoerente de maneira análoga a que foi para a seção de choque coerente, vamos definir a função de auto correlação

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') = \sum_{\alpha} \langle \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}(t)) \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_{\alpha}(t')) \rangle. \quad (\text{B.43})$$

Então a seção de choque incoerente fica

$$\left. \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{inc} = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi} \frac{k'}{2\pi\hbar k} C(\mathbf{q}, \omega), \quad (\text{B.44})$$

onde a função de auto correlação $C(\mathbf{q}, \omega)$ é a transformada de Fourier de (B.43), e pode ser escrita em termos da função de estrutura dinâmica como

$$C(\mathbf{q}, \omega) = \int d(t - t') e^{i\omega(t-t')} \tilde{S}_{nn}(\mathbf{q}, t, t'). \quad (\text{B.45})$$

Neste nos restringimos apenas à apresentação de resultados para a densidade de partículas de um sistema, entretanto, uma generalização para outras densidades e campos dependentes do tempo pode ser feita. Assim, podemos definir a função de estrutura conjugada a uma densidade ou um campo $\phi(\mathbf{x}, t)$ como

$$\tilde{S}_{\phi}(\mathbf{q}, t) \equiv \int d^d r e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_{\phi}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) = \langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}, t) \tilde{\phi}(-\mathbf{q}, t) \rangle, \quad (\text{B.46})$$

onde C_{ϕ} é a função de correlação de dois pontos conjugada ao campo ϕ ,

$$C_{\phi}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) = \langle \phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}', t) \rangle. \quad (\text{B.47})$$

Apêndice C

Efeitos de Memória

Equações como as de Ginzburg-Landau e de Cahn-Hilliard descrevem processos difusivos caracterizados por eventos de espalhamento microscópico. A equação de difusão, em particular, descreve a situação limite onde o tempo entre sucessivos eventos de espalhamento é infinitesimalmente pequeno. Assim, essas equações não respeitam a causalidade. Em sistemas reais, eventos de espalhamento ocorrem em intervalos de tempo finitos. Desta maneira, equações difusivas apresentam sérios problemas ao descrever situações físicas reais. Para solucionar esse problema, incorporamos efeitos de memória às equações difusivas. Neste Apêndice, vamos incluir efeitos de memória às equações de Ginzburg-Landau e de Cahn-Hilliard através de funções de memória [33, 32, 59].

C.1 Equação de Ginzburg-Landau

A equação de Ginzburg-Landau, equação (2.16) sem o termo de ruído, é dada por

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\phi}, \quad (\text{C.1})$$

onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano de Ginzburg-Landau definido na equação (2.18). Efeitos de memória podem ser introduzidos nessa equação através de uma função de memória $W(t-t')$ como

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\Gamma \int_0^t dt' W(t-t') \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\phi}. \quad (\text{C.2})$$

A função de memória $W(t-t')$ deve ser caracterizada por um tempo de decaimento finito τ , de maneira que no limite de $\tau \rightarrow 0$ devemos obter a equação de Ginzburg-Landau sem efeitos de memória. Assim, por simplicidade, podemos considerar a seguinte função

$$W(t-t') = \frac{1}{\tau} \exp\left[-\frac{(t-t')}{\tau}\right]. \quad (\text{C.3})$$

Substituindo essa função na equação (C.2), derivando ambos os lados em relação ao tempo e considerando a seguinte regra de Leibniz

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \int_{g(\beta)}^{h(\beta)} f(x, \beta) dx = \int_{g(\beta)}^{h(\beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} f(x, \beta) dx + f[h(\beta), \beta] \frac{dh(\beta)}{d\beta} - f[g(\beta), \beta] \frac{dg(\beta)}{d\beta}, \quad (\text{C.4})$$

chegamos à seguinte expressão para a equação de Ginzburg-Landau com efeitos de memória

$$\tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi}. \quad (\text{C.5})$$

Como no caso da equação sem efeitos de memória, podemos adicionar à essa equação uma fonte de ruído representando as forças aleatórias produzidas pelos graus de liberdade microscópicos do sistema.

C.2 Equação de Cahn-Hilliard

A equação de Cahn-Hilliard, equação (2.24) sem termo de ruído, é uma equação difusiva que descreve a evolução temporal de um parâmetro de ordem conservado. Portanto, essa equação pode ser reescrita na forma de uma equação de continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (\text{C.6})$$

onde \mathbf{J} é uma corrente irreversível do tipo

$$\mathbf{J} = -\Lambda \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \rho}. \quad (\text{C.7})$$

Novamente, \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema. A fim de incluir efeitos de memória nesta equação, vamos redefinir a corrente \mathbf{J} como sendo

$$\mathbf{J} = - \int_0^t dt' \int d^d x' \mathcal{M}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') \nabla_{\mathbf{x}'} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \rho}, \quad (\text{C.8})$$

onde \mathcal{M} é uma função de memória. Esta função é caracterizada por um tempo de decaimento γ , de maneira que no limite de $\gamma \rightarrow 0$ devemos obter a equação de Cahn-Hilliard sem efeitos de memória. Por simplicidade, vamos considerar a seguinte função de memória

$$\mathcal{M}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \frac{\Lambda}{\gamma} \exp \left[-\frac{(t - t')}{\gamma} \right] \delta^{(d)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (\text{C.9})$$

Substituindo essa função de memória na corrente \mathbf{J} e derivando em relação ao tempo chegamos à seguinte equação

$$\gamma \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} = -\mathbf{J} - \Lambda \nabla \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \rho}. \quad (\text{C.10})$$

Agora, considerando a equação de continuidade e a equação (C.10) para a corrente \mathbf{J} , chegamos à seguinte expressão para a equação de Cahn-Hilliard com efeitos de memória

$$\gamma \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \Lambda \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \rho}. \quad (\text{C.11})$$

Analogamente à equação de Ginzburg-Landau com efeitos de memória, podemos adicionar à essa equação uma fonte de ruído representando as forças aleatórias presentes no sistema.

Estudos feitos sobre a inclusão de efeitos de memória nas equações de Ginzburg-Landau e de Cahn-Hilliard podem ser encontrados nas seguintes referências [32, 59]. Estes estudos indicam que a inclusão de efeitos de memória à essas equações causa um atraso na explosão da decomposição espinodal. Por exemplo, na referência [59] foi mostrado que a inclusão de efeitos de memória pode apresentar conseqüências dramáticas no problema da restauração da simetria quiral em colisões de íons pesados, pois o atraso pode ser tão grande que não haverá tempo suficiente para tal explosão ser observada numa colisão como essa. Conseqüências ainda mais dramáticas foram apresentadas na referência [32]. Nesta foi mostrado que para uma colisão de íons pesados relativísticos onde o parâmetro de ordem é conservado os efeitos de memória podem causar um atraso substancial no processo de conversão de fases.

Referências

- [1] T. Muta, *Foundations of quantum chromodynamics* (World Scientific, 1987).
- [2] D.J. Gross e F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. **30**, 1343 (1973); H.D. Politzer, Phys. Rev. Lett. **30**, 1346 (1973).
- [3] I. Montvay e G. Münster, *Quantum fields on a lattice* (Cambridge University Press, 1994).
- [4] M.E.J Newman e G.T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, 1999); D.P. Landau e K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Cambridge University Press, 2000).
- [5] F. Karsch, Lect. Notes Phys. **583**, 209 (2002).
- [6] M. Stephanov, Pos (LAT2006) 024.
- [7] T. R. Miller e M.C. Ogilvie, Phys. Lett. B **488**, 313 (2002).
- [8] E.S. Fraga, G. Krein e A.J. Mizher, Phys. Rev. D **76**, 034501 (2007).
- [9] P. M. Chaikin e T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, 1995).
- [10] P. C. Hohenberg e B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
- [11] B. Berdnikov e K. Rajagopal, Phys. Rev. D **61**, 105017 (2000), D. T. Son e M. A. Stephanov, Phys. Rev. D **70**, 056001 (2004).
- [12] M. A. Stephanov, K. Rajagopal and E. V. Shuryak, Phys. Rev. Lett. **81**, 4816 (1998) [arXiv:hep-ph/9806219].
- [13] M. A. Stephanov, K. Rajagopal and E. V. Shuryak, Phys. Rev. D **60**, 114028 (1999) [arXiv:hep-ph/9903292].
- [14] S. Gavin, arXiv:nucl-th/9908070.

- [15] Y. Hatta and M. A. Stephanov, Phys. Rev. Lett. **91**, 102003 (2003) [Erratum-
ibid. **91**, 129901 (2003)] [arXiv:hep-ph/0302002].
- [16] C. Sasaki, B. Friman and K. Redlich, Phys. Rev. Lett. **99**, 232301 (2007)
[arXiv:hep-ph/0702254].
- [17] G. Krein, J.M. Machado e A.O. Pereira, Comp. Phys. Comm. **180**, 564 (2009).
- [18] H.R. Schwarz, *Finite Element Methods* (Academic Press, 1988); P.P. Silvester
e R.L. Ferrari, *Finite Elements for Electrical Engineers* (Cambridge University
Press, 1990).
- [19] R. Kubo, M. Toda e N. Hashitsume, *Statistical Physics II: Nonequilibrium
Statistical Mechanics* (Springer Series in Solid-State Sciences, vol 31, Springer
Verlag, 2003).
- [20] B. A. Berg, H. Meyer-Ortmanns e A. Velytsky, Phys. Rev. D **70**, 054505
(2004).
- [21] A. J. Bray, Adv. Phys. **43**, 357 (1994).
- [22] J. Zhu, L. Chen, J. Shen and V. Tikare, Phys. Rev. E **60**, 4 (1999); A.
Chakrabarti, R. Toral e J.D. Gunton, Phys. Rev. E **47**, 5 (1993).
- [23] M. Stephanov, Pos (LAT2006) 024; Nucl. Phys. A **642** 90 (1998); Prog. Theor.
Phys. Suppl. **153**, 139 (2004); Int. J. Mod. Phys. A **20**, 4387 (2005).
- [24] Rafael Derradi de Souza, *Produção térmica de partículas em colisões nucleares
relativísticas*, Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Julho de 2008; Geraldo
M. S. Vasconcelos, *Produção de estranheza em colisões de íons pesados rela-
tivísticos*, Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Maio de 2008.
- [25] B. Svestitsky, Phys. Rep. **132**, 1 (1986).
- [26] D. Bower e S. Gavin, Phys. Rev. C **64**, 051902 (2001).
- [27] R. D. Pisarski e F. Wilczek, Phys. Rev. D **29**, 338 (1984).
- [28] U. Heller, PoS (LAT2006) 011.
- [29] M. Alford, PoS (LAT2006) 001.
- [30] B. I. B. Abelev, *Multi-strange baryon correlations at RHIC*, Tese de Doutora-
mento, Yale University, Maio de 2007.

- [31] R. Sahoo, *Transverse energy measurements and fluctuation studies in ultra-relativistic heavy ion collisions*, Tese de Doutorado, Utkal University, Abril de 2007.
- [32] T. Koide, G. Krein e Rudnei O. Ramos, Phys. Lett. B **636**, 96 (2006).
- [33] Nadiane C. Cassol-Seewald, *Um estudo sobre transições de fase dinâmicas e equações estocásticas de Ginzburg-Landau-Langevin*, Dissertação de Mestrado, IFT, Março de 2006.
- [34] S. Elitzur, Phys. Rev. D **12**, 3978 (1975).
- [35] L. McLerran e B. Svetitsky, Phys. Rev. D **24**, 450 (1981).
- [36] M. Cheng, N. H. Christ, S. Datta, J. van der Heide, C. Jung, F. Karsch, O. Kaczmarek, E. Laermann, R. D. Mawhinney, C. Miao, P. Petreczky, K. Petrov, C. Schmidt, W. Soeldner e T. Umeda, Phys. Rev. D **77**, 014511 (2008).
- [37] T. R. Miller and M. C. Ogilvie, Phys. Lett. B **488**, 313 (2000) [arXiv:hep-lat/0004004].
- [38] P. N. Meisinger, T. R. Miller and M. C. Ogilvie, Phys. Rev. D **65**, 034009 (2002) [arXiv:hep-ph/0108009].
- [39] P. N. Meisinger, M. C. Ogilvie and T. R. Miller, Phys. Lett. B **585**, 149 (2004) [arXiv:hep-ph/0312272].
- [40] E. Megias, E. Ruiz Arriola and L. L. Salcedo, Phys. Rev. D **74**, 065005 (2006) [arXiv:hep-ph/0412308].
- [41] A. Dumitru, J. Lenaghan and R. D. Pisarski, Phys. Rev. D **71**, 074004 (2005) [arXiv:hep-ph/0410294].
- [42] D. Diakonov and M. Oswald, Phys. Rev. D **70**, 105016 (2004) [arXiv:hep-ph/0403108].
- [43] R. D. Pisarski, Phys. Rev. D **74**, 121703 (2006) [arXiv:hep-ph/0608242].
- [44] K. Fukushima, Phys. Lett. B **591**, 277 (2004) [arXiv:hep-ph/0310121].
- [45] C. Ratti, M. A. Thaler and W. Weise, Phys. Rev. D **73**, 014019 (2006) [arXiv:hep-ph/0506234].
- [46] B. J. Schaefer, J. M. Pawłowski and J. Wambach, Phys. Rev. D **76**, 074023 (2007) [arXiv:hep-ph/0704.3234].

- [47] E. Fraga and A. Mocsy, *Braz. J. Phys.* **37**, 281 (2007) [arXiv:hep-ph/0701102].
- [48] N. Weiss, *Phys. Rev. D* **24**, 475 (1981).
- [49] N. Weiss, *Phys. Rev. D* **25**, 2667 (1982).
- [50] T. Bhattacharya, A. Gocksch, C. Korthals Altes and R. D. Pisarski, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 998 (1991).
- [51] T. Bhattacharya, A. Gocksch, C. Korthals Altes and R. D. Pisarski, *Nucl. Phys. B* **383**, 497 (1992) [arXiv:hep-ph/9205231].
- [52] J. D. Gunton, R. Toral e A. Chakrabarti, *Phys. Scr.* **T33**, 12 (1990).
- [53] E. S. Fraga, G. Krein e A. J. Mizher, *Phys. Rev. D* **76**, 034501 (2007).
- [54] G. Parisi, *Statistical Field Theory* (Addison-Wesley, 1988).
- [55] J. Borrill e M. Gleiser, *Nucl. Phys. B* **483**, 416 (1997); L. M. A. Bettencourt, S. Habib e G. Lythe, *Phys. Rev. D* **60**, 105039 (1999); C. J. Gagne e M. Gleiser, *Phys. Rev. E* **61**, 3483 (2000); L. M. A. Bettencourt, K. Rajagopal, e J. V. Steele, *Nucl. Phys. A* **693**, 825 (2001).
- [56] E. Reister, M. Müller e K. Binder, *Phys. Rev. E* **64**, 041804 (2001).
- [57] A. F. R. Piza, *Notas de Mecânica Quântica*(EDUSP, 2003)
- [58] S. Salinas, *Introdução à Física Estatística*(EDUSP, 2005)
- [59] E. S. Fraga e G. Krein, *Phys. Lett. B* **614**, 181 (2005).