



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

TESE DE DOUTORAMENTO

IFT-T.004/12

**Método do Hamiltoniano Termodinamicamente Equivalente para
Sistemas de Muitos Corpos**

Nadiane Cristina Cassol Seewald

Orientador

Prof. Dr. Gastão Inácio Krein

Março de 2012

Agradecimentos

Mais uma vez os meus agradecimentos são para os meus pais, Milton e Nadir, que sempre foram um alicerce forte e me incentivaram nos estudos. Não tenho estado tão presente com vocês quanto vocês gostariam. Obrigada pela compreensão e por vocês me apoiarem em todas as minhas iniciativas e decisões. Dedico esta Tese também ao meu irmão Hamilton e à sua filha Luiza. Com certeza, este trabalho tem um pouquinho de todos vocês.

Gostaria de agradecer também, de modo muito especial, ao meu marido Álisson, que em todos estes anos de Doutorado me suportou nos momentos de cansaço, ansiedade e de estresse e que me ajudou a tornar esta longa caminhada mais agradável. Te amo muito!!!

Além deles, gostaria de dedicar esta Tese a todos das famílias Cassol e Busanello. Meus tios, primos (principalmente ao Vini, pelas longas horas de MSN que partilhamos trocando ideias e reflexões acerca da vida e pelas assessorias de informática) e minhas avós, vocês são todos muito especiais. Gostaria também de agradecer à família Losekan-Seewald que me acolheu tão bem e que me trata com tanto carinho. Obrigada a todos.

Gostaria de agradecer igualmente ao meu orientador, Prof. Dr. Gastão I. Krein, pela paciência com que conduziu este trabalho e por todos os ensinamentos transmitidos a mim ao longo do período em que trabalhamos juntos.

Um agradecimento especial também a todos do IFT que de uma forma ou de outra colaboraram para que esta Tese pudesse ser concluída. Obrigada aos meus amigos pelas conversas agradáveis (principalmente a Aline), às meninas da Secretaria pelos auxílios administrativos e ao seu Luiz, pelas longas discussões futebolísticas.

Por fim, gostaria de agradecer o inestimável apoio financeiro recebido da FAPESP durante o Doutorado através do processo 2005/03450-0.

E a todos que lerem esta Tese, deixo uma mensagem que acho muito legal porém cuja autoria, infelizmente, desconheço: ‘Ser feliz é ter os pés na terra e a cabeça nas estrelas; ser capaz de sonhar, sem medo dos sonhos, mas saber transformar os sonhos em metas. Ser feliz é ser determinado e nunca abrir mão de construir seu destino e arquitetar sua vida; não ter medo de mudanças e saber tirar proveito

delas. Saber tornar o trabalho objeto de prazer e realização pessoal. Ser feliz é estar sempre pronto a aprender e se orgulhar de absorver o novo. Ter coragem para abrir caminhos, enfrentar desafios, criar soluções, correr riscos calculados, sem medo de errar. Ser feliz é saber construir equipes e se integrar nelas. Não tomar para si o poder, mas saber compartilhá-lo. Saber estimular e fortalecer os outros, sem receio que lhe façam sombra. É saber criar em torno de si um ambiente de fé e de entusiasmo.’

Resumo

O objetivo da Tese é investigar a aplicabilidade e propor extensões do método do hamiltoniano termodinamicamente equivalente (MHTE) para sistemas de muitos corpos descritos por uma teoria de campos. Historicamente, o MHTE tem sua origem na teoria quântica de muitos corpos para descrever o fenômeno da supercondutividade. O método consiste na observação de que o hamiltoniano de um sistema pode ser diagonalizado exatamente através de uma transformação unitária quando um número finito de momentos transferidos que contribuem para a interação é levado em conta no limite termodinâmico. Essa transformação unitária depende explicitamente de funções de *gap* que podem ser determinadas através do método variacional de Gibbs. Na presente Tese, extensões do método são feitas visando aplicações em sistemas de muitos corpos em diferentes situações, tais como: transições de fase estáticas, evolução temporal de parâmetros de ordem descrita por equações dinâmicas estocásticas do tipo Ginzburg-Landau-Langevin (GLL), teorias quânticas de campos escalares relativísticos e teorias de muitos corpos para sistemas fermiônicos não relativísticos. Mostra-se, em particular, que o MHTE é um esquema de aproximação sistemático e controlável que permite incorporar acoplamentos de componentes de Fourier de parâmetros de ordem além do modo zero, da mesma forma que em teorias quânticas relativísticas ou não relativísticas ele incorpora correlações não perturbativas entre as partículas além daquelas levadas em conta pelas tradicionais aproximações de campo médio. Métodos são desenvolvidos para obtermos soluções numéricas explícitas com o objetivo de avaliar a aplicabilidade do MHTE em alguns casos específicos. Particular atenção é dedicada ao controle de divergências de Rayleigh-Jeans nas simulações numéricas de equações de GLL.

Palavras-chave: Sistemas de muitos corpos, Aproximações de campo médio, Integrais de trajetória, Transições de fase

Áreas do conhecimento: Física estatística, Teoria de partículas e campos, Física Atômica

Abstract

The general objective of the Thesis is to apply the Method of the Thermodynamically Equivalent Hamiltonian (MTEH) to many-body systems described by a field theory. Historically, the MTEH has its origins in the quantum theory of many-body systems to describe the phenomenon of superconductivity. The method is based on the observation that the Hamiltonian of the system can be diagonalized exactly with a unitary transformation when a finite number of transfer momenta of the interaction are taken into account in the thermodynamic limit. This unitary transformation depends explicitly on gap functions that can be determined with the use of the Gibbs variational principle. In the present Thesis, extensions of the method are made envisaging applications in many-body systems in different situations, like: static phase transitions, time evolution of order parameters described by dynamic stochastic Ginzburg-Landau-Langevin equations, relativistic quantum scalar field theories, and many-body theories for nonrelativistic fermionic systems. It is shown that the MTEH is a systematic and controllable approximation scheme that in the theory of phase transitions allows to incorporate Fourier modes of the order parameter beyond the zero mode, in the same way that in the relativistic and nonrelativistic theories it incorporates particle nonperturbative correlations beyond those taken into account by the traditional mean field approximation. Methods are developed to obtain explicit numerical solutions with the aim to assess the applicability of the MTEH in specific situations. Particular attention is devoted to the control of Rayleigh-Jeans ultraviolet divergences in the numerical simulations of Ginzburg-Landau-Langevin equations.

Índice

1	Introdução	1
2	O método do hamiltoniano termodinamicamente equivalente	7
2.1	Breve introdução histórica	7
2.2	Generalizações do MHTE	8
3	MHTE para transições de fase estáticas e dinâmicas	23
3.1	Equação de Ginzburg-Landau-Langevin	24
3.2	MHTE para transições de fase estáticas	29
3.2.1	Determinação das funções de <i>gap</i> $g(\mathbf{k}, \mathbf{q})$	31
3.2.2	Funções de correlação no equilíbrio	33
3.3	MHTE para transições de fase dinâmicas	38
3.4	MHTE para energias livres não locais	41
4	MHTE para teorias quânticas	45
4.1	MHTE em teorias quânticas relativísticas	46
4.2	MHTE na quantização estocástica	55
4.3	Sistemas fermiônicos não relativísticos	60
4.3.1	Sistema infinito	61
4.3.2	Sistema numa armadilha: as equações de Bogoliubov–de Gennes (BdG)	64
5	Métodos e resultados numéricos	71
5.1	Discretização da equação de GLL na rede	71
5.2	Soluções com ruído nulo	74
5.3	Soluções na presença de ruído	77
5.4	Regularização da equação de GLL	80
5.5	Contratermos para a GLL com o MHTE	93
5.6	Resultados para a quantização estocástica	94
5.7	Resultados para sistemas fermiônicos	99

6	Conclusões e perspectivas futuras	104
A	Princípio Variacional de Gibbs	107
B	Detalhes de derivações de equações do Capítulo 2	110
B.1	Diagonalização do hamiltoniano assintótico \hat{H}_a e determinação das funções de <i>gap</i>	110
B.2	Além do teorema variacional - teoria de perturbação	117
B.2.1	Discussão para o termo $\langle \hat{H}' \rangle_a$	118
B.2.2	Discussão para o termo $\langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a$	121
C	Integrais funcionais Euclideanas	124
C.1	Integrais gaussianas multidimensionais usuais	124
C.1.1	Na ausência de fonte externa	124
C.1.2	Na presença de fonte externa	126
C.2	Integrais funcionais	127
D	Sistemas fermiônicos com interações dependentes do momento	130
	Referências	138

Capítulo 1

Introdução

Fenômenos que ocorrem fora do equilíbrio termodinâmico são abundantes na natureza. Estes fenômenos vêm sendo estudados há muito tempo na Física, Química, Biologia e nas Engenharias. Na Física, em particular, estes fenômenos são de interesse nas diversas subáreas da física da matéria condensada, na física nuclear, na física das partículas elementares e na cosmologia. Um dos aspectos de maior interesse neste campo é o entendimento da evolução no tempo de transições de fase, assunto que está intimamente relacionado à questão fundamental de como comportamentos irreversíveis ao nível macroscópico surgem de uma dinâmica reversível ao nível microscópico. Este é um campo muito antigo e muito estudado no contexto de problemas de Física da Matéria Condensada [1, 2].

Por outro lado, inúmeras descobertas realizadas no contexto da cosmologia observacional e de colisões de íons pesados relativísticos têm exigido um esforço renovado no estudo de fenômenos fora do equilíbrio em sistemas de muitos corpos relativísticos. Muito progresso tem ocorrido nos últimos anos no entendimento, tanto qualitativo como quantitativo, da dinâmica de não-equilíbrio de campos quânticos relativísticos [3]. Porém, muito ainda falta ser feito nesta direção. A razão principal para o progresso mais lento no estudo da dinâmica de não-equilíbrio é a inexistência no contexto da teoria quântica de campos relativísticos de métodos de aproximação não-perturbativos que sejam ao mesmo tempo sistemáticos e controláveis.

Para sistemas em equilíbrio, a descrição mais adequada para tratar problemas não perturbativos em teorias quânticas de campos consiste em empregar os métodos da teoria de campos na rede euclidiana [4, 5, 6]. Estes métodos são de primeiros princípios e podem ser aprimorados sistematicamente, tendo como limitações somente os recursos computacionais disponíveis. Para problemas dinâmicos, estes métodos não são muito adequados por serem formulados no espaço euclidiano e, por isto, não dão acesso direto a uma dinâmica no espaço de Minkowski.

Como alternativa à formulação numa rede euclidiana, os métodos de primeiros

princípios mais empregados têm sido os de teoria de perturbações, mas estes, por sua vez, além de serem inaplicáveis a sistemas fortemente acoplados, apresentam problemas em situações de temperatura e densidade finitas, mesmo em regime de acoplamento fraco. Além disto, métodos perturbativos também apresentam problemas quando aplicados a teorias de *gauge* devido ao aparecimento de divergências infravermelhas associadas às excitações dos graus de liberdade sem massa (dos campos de *gauge*). Para um ou outro caso, torna-se necessário o emprego de algum método de ressonância de uma classe de diagramas perturbativos de maneira que seja gerada dinamicamente alguma escala de massa que venha a curar estas divergências [7]. Um dos métodos de ressonância empregado é conhecido como teoria de perturbação otimizada, também conhecida como expansão δ [8, 9]. Outros métodos que vão além de teoria de perturbação incluem as descrições baseadas em equações de transporte probabilísticas [10, 11] ou equações clássicas ou semiclássicas de natureza determinística ou estocástica para os graus de liberdade infravermelhos [12, 13].

Nesta Tese empregamos um particular esquema de aproximação não perturbativo para o estudo de sistemas em equilíbrio e transições de fase estáticas e dinâmicas, conhecido como o método do hamiltoniano termodinamicamente equivalente (MHTE) [14]. Especificamente, o objeto de estudo são sistemas macroscópicos formados por um número muito grande de partículas que interagem fortemente e a baixas temperaturas, com ênfase em fenômenos de transições de fase estáticas e dinâmicas [1] e sistemas fermiônicos [15]. Transições de fase dinâmicas ocorrem tipicamente quando um sistema que se encontra numa fase homogênea a uma temperatura acima da temperatura crítica T_c , é forçado rapidamente para um estado fora do equilíbrio com temperatura $T \ll T_c$. Flutuações térmicas no estado inicial de equilíbrio se desenvolverão e o sistema começará a se quebrar em domínios com fases diferentes. Num estágio posterior, os domínios vão se homogeneizar, e finalmente um novo estado de equilíbrio será formado.

Historicamente, o MHTE é uma técnica de aproximação que teve origem no estudo da supercondutividade. Um dos métodos mais tradicionais para a sua descrição é a aproximação Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) [16], empregada com amplo sucesso em problemas envolvendo fenômenos de condensação, como na supercondutividade em sistemas fermiônicos. Nesta aproximação, são incluídas explicitamente correlações de pareamento entre as partículas (de momentos e projeção de *spin* opostos) nos estados variacionais. Neste contexto, uma observação importante foi feita por Bogoliubov, Zubarev e Tserkovnikov (BZT) [17]: o método variacional de Gibbs aplicado para a energia livre fornece o potencial termodinâmico *grand* canônico **exato** para um hamiltoniano reduzido de BCS – neste hamiltoniano somente as interações de pareamento são permitidas, i.e. de todos os possíveis mo-

mentos transferidos num processo de interação de dois corpos, somente aqueles que caracterizam um processo de interação em que as partículas interagentes possuam momentos iguais e de sinais opostos são considerados.

Após generalizações feitas por Wentzel [14] para interações de pareamento mais gerais, tendo em vista além de aplicações em supercondutividade, aplicações também em ferromagnetismo, este método tornou-se conhecido como “método do hamiltoniano termodinamicamente equivalente” – a razão para esse nome será discutida no próximo Capítulo. Na década de noventa este método foi generalizado por Girardeau [18] para outras interações, em que os momentos transferidos incluídos, que devem ser escolhidos de maneira criteriosa para que capturem os efeitos principais do fenômeno em estudo, formam um conjunto discreto finito \mathcal{Q} . Uma vez fixado este conjunto \mathcal{Q} de momentos transferidos, o hamiltoniano do sistema pode ser diagonalizado exatamente através de uma transformação unitária linear. Esta transformação unitária depende explicitamente de funções de *gap* que podem ser determinadas através do método variacional de Gibbs. Por exemplo, para problemas envolvendo a formação de condensados, o conjunto de momentos transferidos como no hamiltoniano reduzido de BCS captura a essência do fenômeno de superfluidez.

O objetivo geral da Tese é aplicar o MHTE para sistemas de muitos corpos descritos por uma teoria de campos. Como dito anteriormente, o MHTE consiste na observação de que o hamiltoniano do sistema pode ser diagonalizado exatamente através de uma transformação unitária quando um número finito de momentos transferidos que contribuem para a interação é levado em conta. Esta transformação unitária depende explicitamente de funções de *gap* que podem ser determinadas através do método variacional de Gibbs. Especificamente, na presente Tese investigamos extensões do método visando aplicações em sistemas de muitos corpos em diferentes situações. Estas incluem transições de fase estáticas, evolução temporal de parâmetros de ordem descrita por equações estocásticas do tipo Ginzburg-Landau-Langevin (GLL), teorias quânticas de campos relativísticos e sistemas fermiônicos não relativísticos.

A aplicação do MHTE em problemas de Mecânica Estatística é o objetivo do Capítulo 3. A investigação do MHTE em transições de fase estáticas se dá no contexto de uma formulação de integrais de trajetória para a função de partição clássica de um sistema caracterizado por um parâmetro de ordem descrito por um campo dependente da posição [19]. A função de partição clássica Z é dada em termos de uma integral funcional sobre o parâmetro de ordem $\phi(\mathbf{r})$, em que a distribuição de probabilidade de equilíbrio é dada por um peso de Boltzmann:

$$Z[\phi] = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta F[\phi]}, \quad (1.1)$$

sendo que $\beta = 1/T$, T é a temperatura de equilíbrio do sistema (estamos usando aqui unidades em que a constante de Boltzmann k_B é tomada igual à unidade), e $F[\phi]$ é a energia livre do sistema - $\beta F[\phi]$ é muitas vezes chamado de hamiltoniano de Wilson-Ginzburg-Landau. Aplicamos o MHTE em $F[\phi]$, isto é, o campo ϕ será decomposto em modos de Fourier e a escolha de um conjunto \mathcal{Q} de modos de Fourier servirá para simplificar os acoplamentos não lineares ou não locais dos campos em $F[\phi]$, de maneira que a integral funcional poderá ser calculada exatamente, ou calculada através de um método de expansão. Este estudo aparece na Seção 3.2.

A aplicação do MHTE para transições de fase dinâmicas se dará no contexto das equações de GLL - uma breve revisão sobre transições de fase estáticas e dinâmicas e as equações estocásticas de GLL está feita na Introdução do Capítulo 3 e na Seção 3.1. O estudo será conduzido sem a preocupação de discutir derivações de uma equação de GLL a partir de uma dinâmica microscópica (clássica ou quântica) - a Ref. [20] é uma boa fonte de discussão sobre derivações de equações de GLL a partir de dinâmicas microscópicas. O ponto de partida para o estudo é a energia livre estática de Ginzburg-Landau tratada com o MHTE. Uma questão importante no estudo de soluções numéricas de equações estocásticas de GLL é a presença de divergências ultravioletas de Rayleigh-Jeans da teoria clássica de campos. Soluções analíticas dessas equações são possíveis somente em casos muito específicos, geralmente no contexto de aproximações que linearizam a equação (a validade dessas aproximações usualmente se restringe a tempos curtos) e métodos numéricos são necessários para obtermos soluções explícitas. Esses métodos consistem geralmente numa discretização das variáveis de campo numa rede espacial. Como será amplamente discutido nesta Tese, as divergências se manifestam através de uma grande sensibilidade das soluções numéricas ao espaçamento de rede empregado na discretização. Em vista disso, métodos de renormalização são necessários para obtermos soluções estáveis - isso será discutido no Capítulo 5, no qual desenvolveremos métodos numéricos para obtermos soluções explícitas com o objetivo de avaliar a aplicabilidade do MHTE em alguns casos específicos.

Em continuidade, no Capítulo 4 consideraremos o MHTE em teorias quânticas. Trabalharemos com teorias quânticas de campos relativísticos e teorias de muitos corpos para sistemas fermiônicos não relativísticos. Inicialmente, propomos empregar o MHTE em teorias quânticas de campos relativísticos no contexto da formulação de integrais funcionais no espaço euclidiano [21]. A formulação no espaço euclidiano de teorias quânticas de campos relativísticos é a formulação adequada em simulações numéricas de larga escala empregando métodos de Monte Carlo [6] - o caso da cromodinâmica quântica (QCD) é um exemplo. No entanto, para sistemas de muitas partículas (presença de um potencial químico), a ação no espaço euclidiano se torna

complexa e o método de Monte Carlo perde aplicabilidade. Em vista disto, a formulação de métodos de aproximação alternativos ao método de Monte Carlo é de extrema importância para problemas de muitas partículas. Conforme veremos, o MHTE pode ser um desses esquemas de aproximação alternativo, o que seria muito importante neste contexto.

Logo a seguir, formularemos o MHTE para uso no contexto do método da quantização estocástica de Parisi e Wu [22], uma vez que equações de GLL aparecem também em teorias quânticas de campos no contexto desta quantização. Este método de quantização teve seu apogeu na década de 1980 – as Refs. [23] e [24] apresentam revisões muito boas sobre os fundamentos, progressos e problemas do método durante essa década – e ainda atualmente é amplamente empregado em simulações de QCD na rede dentro de uma classe de algoritmos conhecida como “*hybrid Monte Carlo*” [6, 25]. Mais recentemente, a quantização estocástica tem recebido grande atenção [26, 27, 28] no contexto de problemas de teorias de campos com ações complexas [29, 30] (com isto os tradicionais métodos de Monte Carlo não podem ser empregados) que aparecem quando a densidade de partículas é diferente de zero, isto é, em problemas com potencial químico não nulo. No Brasil, o método da quantização estocástica também vem despertando interesse, mas no contexto do uso de uma dinâmica não Markoviana, tanto para ações reais [31] como para ações complexas [32, 33]. Estes desdobramentos recentes nos motivaram a propor o emprego do MHTE no contexto da quantização estocástica. Trata-se de uma proposta com o objetivo principal de mostrar um possível novo método de aproximação não perturbativo para essa importante classe de problemas. Resultados parciais da presente proposta aparecerão publicados na Ref. [34]. A ênfase é mais no desenvolvimento deste novo método para esses problemas do que na obtenção de resultados numéricos. Como ilustração, no Capítulo 5 apresentamos um estudo do comportamento crítico de uma teoria de campos com quebra espontânea de simetria.

Apesar do apelo pelo problema de ações complexas, não vamos, no entanto, tratar deles nesta Tese. Isso nos levaria muito além dos nossos objetivos iniciais. Entretanto, como ficará claro, a partir dos desenvolvimentos nesta Tese, o MHTE pode servir como guia para a implementação de um esquema de aproximação para problemas com ações complexas.

Uma segunda classe de problemas quânticos para a qual propomos o emprego do MHTE é a de sistemas de muitos férmions não relativísticos a baixas temperaturas. Estes sistemas são o centro das atenções atuais, principalmente sob o ponto de vista experimental no contexto de sistemas atômicos [15]. Na segunda parte do Capítulo 4, propomos empregar o MHTE para o estudo destes sistemas, em que o pareamento dos momentos e *spins* de um hamiltoniano de muitos corpos que leva

à tradicional aproximação BCS é incorporado explicitamente. Através do MHTE é possível incluir um conjunto finito de momentos \mathcal{Q} que leva a um novo esquema de aproximações em que são incorporadas correlações entre as partículas além das tradicionais correlações BCS. Esta proposta será implementada tanto para sistemas infinitos como também para sistemas aprisionados. Neste último caso, o MHTE é implementado no contexto de equações que são generalizações das tradicionais equações de Bogoliubov-de Gennes [35].

Esta Tese está distribuída da seguinte forma. No Capítulo 2 descreveremos o MHTE com base no trabalho desenvolvido por Girardeau [18]. Mostraremos que o hamiltoniano do sistema com o qual trabalharemos pode ser diagonalizado exatamente através de uma transformação unitária quando um número finito de momentos transferidos que contribuem para a interação é levado em consideração. Iniciaremos o Capítulo 3 fazendo uma revisão dos conceitos que estão relacionados a transições de fase estáticas e dinâmicas. Após, aplicaremos as ideias discutidas no Capítulo 2 para o hamiltoniano de Ginzburg-Landau para o caso de uma energia livre do tipo poço-duplo. Em seguida, generalizaremos o método para energias livres arbitrárias (não locais) e discutiremos a possibilidade de aplicação do MHTE para estes casos. No Capítulo 4 desenvolveremos o formalismo do MHTE para teorias quânticas. Discutiremos a aplicação do MHTE para sistemas relativísticos e o aplicaremos para uso no contexto da quantização estocástica de Parisi e Wu [22]. Finalizaremos o Capítulo empregando o MHTE para sistemas fermiônicos não relativísticos: aplicaremos o MHTE para o caso de um sistema fermiônico infinito e a seguir discutiremos o caso de um sistema aprisionado num potencial harmônico e cujos férmions que o compõe estão sujeitos a uma interação de contato. No Capítulo 5 apresentaremos os métodos e os resultados numéricos obtidos empregando o MHTE para as situações discutidas nos Capítulos anteriores. As Conclusões e perspectivas futuras aparecem no Capítulo 6. Esta Tese está composta também de quatro Apêndices, nos quais discutiremos alguns tópicos complementares àqueles trabalhados nos Capítulos e realizaremos as demonstrações de equações mais longas.

Capítulo 2

O método do hamiltoniano termodinamicamente equivalente

Neste capítulo discutiremos o método do hamiltoniano termodinamicamente equivalente (MHTE). Inicialmente, faremos uma breve revisão histórica. A seguir, nos guiaremos pelo trabalho da Ref. [18] de M.D. Girardeau, o qual generaliza os trabalhos originais de Bogoliubov, Zubarev e Tserkovnikov (BZT) [17] e de Wentzel [14]. Este trabalho de Girardeau serve de base para todos os outros desenvolvimentos e generalizações propostas na presente Tese. Detalhes de derivações mais elaboradas serão apresentados no Apêndice B.

2.1 Breve introdução histórica

Em 1957, uma importante observação foi feita por BZT [17]: o método variacional de Gibbs aplicado para a energia livre fornece o potencial termodinâmico *grand* canônico **exato** para um hamiltoniano reduzido de BCS. O hamiltoniano reduzido de BCS é o hamiltoniano em que somente as interações de pareamento são permitidas, i.e. de todos os possíveis momentos transferidos num processo de interação de dois corpos, somente aqueles que caracterizam um processo de interação em que as partículas interagentes possuam momentos iguais e de sinais opostos são considerados. Este método tornou-se conhecido como método do “hamiltoniano termodinamicamente equivalente” após generalizações por Wentzel [14] para interações de pareamento mais gerais, tendo em vista basicamente aplicações em supercondutividade e ferromagnetismo. Este método foi expandido por Girardeau [18] para interações não tão específicas, em que os momentos transferidos incluídos formam um conjunto discreto finito de momentos \mathcal{Q} , os quais devem ser escolhidos de maneira criteriosa para que capturem os efeitos principais do fenômeno em estudo. Obviamente, não existe uma escolha que seja universalmente boa para qualquer problema; ela deve ser estudada caso a caso. Uma vez fixado este conjunto \mathcal{Q} de momentos transferi-

dos, o hamiltoniano do sistema pode ser diagonalizado exatamente através de uma transformação unitária linear. Esta transformação unitária depende explicitamente de funções de *gap* que podem ser determinadas pelo método variacional de Gibbs.

2.2 Generalizações do MHTE

Após esta abordagem introdutória, estamos na posição de apresentar o MHTE tomando como guia a Ref. [18]. Neste *paper*, foi desenvolvido um método variacional geral para temperatura não nula a fim de aplicá-lo à mecânica estatística quântica de sólidos e fluidos.

O sistema considerado é não-relativístico, composto por partículas idênticas interagindo por meio de um potencial de dois corpos. O sistema de muitas partículas é restrito a um volume finito V , sob condições de contorno periódicas. Está sujeito a um potencial externo e considera-se apenas o caso de sistemas com uma única componente. Todos os potenciais são considerados independentes de *spin*. O tratamento matemático empregado é o formalismo de segunda quantização, baseado em operadores de campo de aniquilação, $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma)$, e de criação de partículas, $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, \sigma)$, em que \mathbf{r} indica o ponto no espaço de configuração em que a partícula está sendo destruída/criada e σ indica qual a projeção do *spin* desta partícula. Em termos desses operadores, o hamiltoniano mais geral para um sistema tal pode ser escrito como (num primeiro momento vamos supor que não há potencial externo atuando sobre nosso sistema) [21]:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, \sigma) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d^3r d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, \sigma) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', \sigma') v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', \sigma') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Os operadores de campo satisfazem as regras de (anti)comutação:

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma), \hat{\Psi}(\mathbf{r}', \sigma')]_{\pm} = 0, \quad (2.2)$$

$$[\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, \sigma), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', \sigma')]_{\pm} = 0, \quad (2.3)$$

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', \sigma')]_{\pm} = \delta_{\sigma, \sigma'} \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.4)$$

em que o sinal $+$ em \pm deve ser tomado para férmions (anticomutador) e o sinal $-$ deve ser usado para bósons (comutador).

A implementação do MHTE está baseada no hamiltoniano no espaço de momentos. Para representarmos o hamiltoniano da Eq. (2.1) neste espaço, fazemos uso da

transformada de Fourier para escrevermos os operadores de campo no espaço dos momentos:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma), \quad (2.5)$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma). \quad (2.6)$$

As transformadas inversas são:

$$\hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma), \quad (2.7)$$

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3r e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, \sigma), \quad (2.8)$$

em que empregamos

$$\int d^3r e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} = V \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \quad (2.9)$$

Utilizando as regras de (anti)comutação dadas nas Eqs. (2.2)–(2.4), não é difícil mostrar as seguintes regras de (anti)comutação para os operadores $\hat{a}(\mathbf{k}, \sigma)$ e $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma)$:

$$[\hat{a}(\mathbf{k}, \sigma), \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma')]_{\pm} = 0, \quad (2.10)$$

$$[\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma')]_{\pm} = 0, \quad (2.11)$$

$$[\hat{a}(\mathbf{k}, \sigma), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma')]_{\pm} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (2.12)$$

O próximo passo é substituímos as transformadas de Fourier dos operadores de campo na expressão para o hamiltoniano da Eq. (2.1):

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\sigma} \int d^3r \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \right] \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \int d^3r d^3r' \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \right] \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \right] \\ &\times v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'} \hat{a}(\mathbf{p}, \sigma') \right] \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}(\mathbf{q}, \sigma) \right] \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (V \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \right) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma) \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{p}} \tilde{u}(\mathbf{p} - \mathbf{k}') \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{p}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k} + \mathbf{k}' - \mathbf{p}, \sigma), \quad (2.13) \end{aligned}$$

em que $\tilde{u}(\mathbf{q})$ é a transformada de Fourier do potencial $v(\mathbf{r})$:

$$\tilde{u}(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} v(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Após uma troca de variáveis e de renomeá-las:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k},\sigma) \hat{a}(\mathbf{k},\sigma) \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma') \hat{a}(\mathbf{k}',\sigma') \hat{a}(\mathbf{k},\sigma), \end{aligned} \quad (2.15)$$

e

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \quad (2.16)$$

são as energias de partícula única. Assim, obtemos o hamiltoniano no espaço dos momentos, como queríamos.

É instrutivo calcularmos o valor esperado do hamiltoniano de interação da Eq. (2.15) no estado fundamental de um gás não interagente com um número finito de partículas N , o qual denotamos por $|F\rangle$. O estado $|F\rangle$ consiste em um produto de estados com momento \mathbf{k} e energia de partícula única $\varepsilon(\mathbf{k})$. No caso de um gás de Fermi não interagente no estado fundamental, os estados de momento estão completamente preenchidos até um valor absoluto de momento igual a k_F , o momento de Fermi. Para o caso de um gás de bósons, a situação é um pouco mais complicada: à temperatura zero, o sistema condensa (todas as N partículas ocupam o nível mais baixo de energia); para temperatura diferente de zero, as N partículas se distribuem pelos níveis de energia disponíveis de acordo com a distribuição de probabilidades do *ensemble* canônico. Em qualquer caso, a atuação dos dois operadores de aniquilação do termo de interação da Eq. (2.15) sobre $|F\rangle$ criará buracos precisamente nos estados ocupados com partículas com momentos e *spins* \mathbf{k}, σ e \mathbf{k}', σ' :

$$\begin{aligned} E_{\text{int}} &= \langle F | \hat{H}_{\text{int}} | F \rangle \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \langle F | \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma') \hat{a}(\mathbf{k}',\sigma') \hat{a}(\mathbf{k},\sigma) | F \rangle. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Para que o valor esperado na Eq. (2.17) não seja nulo, os operadores de criação deverão atuar sobre o estado com dois buracos de maneira que ele volte a ser o estado $|F\rangle$. Vamos nos concentrar apenas no gás de Fermi a temperatura zero. Há duas possibilidades distintas (diretamente ou a partir de uma troca, (anti)comutação

de operadores) destes buracos serem eliminados de maneira que o estado volte a ser $|F\rangle$ (os operadores de criação têm que “tapar” esses buracos), a saber:

$$\begin{aligned} E_{\text{int}} &= \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) [\delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \mathbf{k}} \delta_{\sigma', \sigma'} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}} \delta_{\sigma, \sigma} - \delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \mathbf{k}} \delta_{\sigma', \sigma} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'}] \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [4 \tilde{u}(0) - 2 \tilde{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})], \end{aligned} \quad (2.18)$$

Como o sistema fermiônico sobre o qual estamos atuando o hamiltoniano de interação corresponde a um sistema com um número finito de partículas, as somatórias sobre \mathbf{k} e \mathbf{k}' são limitadas superiormente, isto é, as somas vão até valores de momento $k = k_F$ e $k' = k_F$. Quando tomarmos o limite termodinâmico deste sistema, i.e.

$$V \rightarrow \infty, \quad N \rightarrow \infty, \quad \text{com } N/V \rightarrow \text{finito}, \quad (2.19)$$

teremos

$$\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int^{k_F} d^3 k \frac{V}{(2\pi)^3} \int^{k'_F} d^3 k'. \quad (2.20)$$

Como temos um fator de volume na Eq. (2.18), mostramos que $E_{\text{int}} \sim V$. Isso significa que a energia é extensiva, como é de se esperar. Para o caso de um gás de bósons, a situação é similar: a energia também é extensiva porque as integrais são limitadas, uma vez que o número de partículas a serem distribuídas nos níveis de energia do sistema é finito. Como os operadores de bósons comutam, o sinal relativo na Eq. (2.18) é positivo.

O primeiro termo da Eq. (2.18) é o termo “direto” (*forward scattering*). O segundo, é o termo de “troca” (*exchange scattering*). Em termos gráficos, essas contribuições podem ser vistas na Fig. 2.1. Os termos direto e de troca são também chamados de termos de Hartree e de Fock, respectivamente.

O termo direto significa fisicamente que no interior do sistema as partículas interagem de maneira que o momento final de cada uma delas é igual aos respectivos momentos iniciais, ou seja, elas são espalhadas para a frente, com ângulo de espalhamento igual a zero.

No caso do termo de troca, as duas partículas interagentes trocam momento, sendo que o momento final da primeira é igual ao momento inicial da segunda; ou seja, o ângulo de espalhamento não é zero. O significado disso é que no interior de um sistema de muitos corpos, nem todos os possíveis momentos transferidos da interação contribuem para a energia do sistema. Obviamente que não se está dizendo

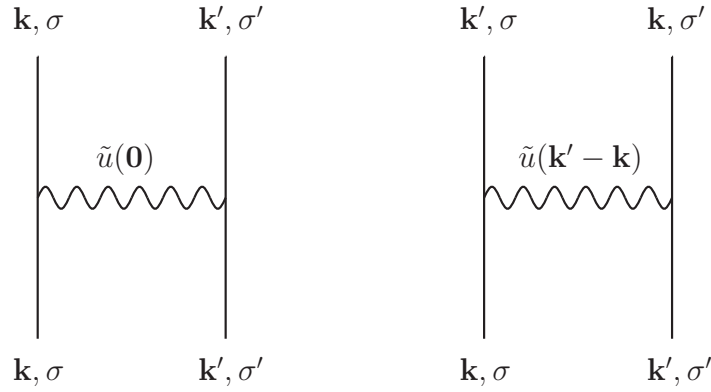


Figura 2.1: Representação pictórica das contribuições direta (gráfico da esquerda) e de troca (gráfico do direita).

que em todos os sistemas somente as duas situações ilustradas acima ocorrem. O que está sendo dito é que, de todos os possíveis momentos transferidos permitidos pela interação, somente um conjunto restrito deles desempenha papel relevante na dinâmica do sistema. Claramente, em vista da complexidade de um sistema de muitos corpos, é muito difícil saber *a priori* esse subconjunto de momentos relevantes e, portanto, a questão deve ser decidida experimentalmente.

A seguir, discutiremos o MHTE. Este é um método sistemático e controlável de restringir um subconjunto de momentos transferidos de maneira que a solução do problema para esse conjunto restrito é exata, no contexto do princípio variacional de Gibbs. O método é sistemático e controlável porque ele permite calcular a partir de primeiros princípios correções à solução do problema restrito. Vamos apresentar neste Capítulo apenas os resultados principais da discussão do trabalho de Girardeau [18]; os cálculos detalhados serão apresentados no Apêndice B.

Utilizando as relações de (anti)comutação dos operadores de criação e aniquilação, é possível mostrar que:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{\text{int}} &= \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \left[\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \right] \\
 &+ \frac{V}{2} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \left[\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \right] \left[\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}, \sigma'} \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \sigma') \right].
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

E, com a definição de operadores “densidade” de partículas,

$$\hat{\rho}(\mathbf{q}) \equiv \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (2.22)$$

a igualdade acima pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} &= \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) [V \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{q}) - \hat{\rho}(0)] = \hat{H}'_{\text{int}}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Vamos repetir as contas feitas anteriormente para este “novo” hamiltoniano de interação para o estado $|F\rangle$:

$$\begin{aligned} E'_{\text{int}} &= \langle F | \hat{H}'_{\text{int}} | F \rangle \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle F | \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma') | F \rangle \\ &\quad - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle F | \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) | F \rangle \\ &= \frac{1}{2V} \left[4 \tilde{u}(0) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} - 2 \sum_{\mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} \right]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Mais uma vez, para \mathbf{q} , \mathbf{k} e \mathbf{k}' quaisquer, teremos que a energia E'_{int} , no limite termodinâmico, será proporcional ao volume V do sistema, como esperado (conforme Eq. (2.20)). Porém, para o hamiltoniano de interação escrito como \hat{H}'_{int} , se restringirmos os momentos transferidos \mathbf{q} a um conjunto finito de valores, o segundo termo não mais nos fornecerá a aproximação de Fock, como anteriormente obtínhamos com \hat{H}_{int} , uma vez que para \mathbf{q} restrito, no limite termodinâmico,

$$\sum_{\mathbf{q}} \neq \frac{V}{(2\pi)^3} \int^{k_F} d^3q \quad (2.25)$$

e, assim:

$$\frac{E'_{\text{int}}}{V} \sim \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \int^{k_F} d^3k \rightarrow 0. \quad (2.26)$$

É importante lembrarmos, porém, que não perdemos o termo de *exchange*. Da forma como escrevemos \hat{H}'_{int} , após impormos a restrição sobre os momentos transferidos \mathbf{q} ,

só podemos obter mesmo o termo de Hartree, ao contrário do que obtemos quando temos o hamiltoniano de interação escrito como em \hat{H}_{int} .

Em seu trabalho Girardeau considerou um sistema sujeito a um potencial externo \tilde{u}_{ext} – aqui incluiremos este termo simplesmente por completeza da apresentação. Para este caso, o hamiltoniano é dado por:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma), \end{aligned} \quad (2.27)$$

$\sum_{\mathbf{q}}$ se refere apenas a soma sobre o tri-vetor, pois os potenciais são independentes de *spin*. Este é o hamiltoniano mais geral possível para um sistema de muitas partículas interagindo via interações de dois corpos independentes de *spin*. Se restringirmos os momentos transferidos a um subconjunto \mathcal{S} , o qual contém momentos \mathbf{q} e $\mathbf{q}' = \mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}$, poderemos escrever o hamiltoniano acima como sendo

$$\hat{H} = \hat{H}(\mathcal{S}) + \hat{H}(\mathbf{q} \notin \mathcal{S}), \quad (2.28)$$

em que

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathcal{S}) &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [\tilde{u}(\mathbf{q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma, \sigma'}] \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathbf{q}), \end{aligned} \quad (2.29)$$

e

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathbf{q} \notin \mathcal{S}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \notin \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum'_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Os termos $\tilde{u}(\mathbf{q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma, \sigma'}$ em $\hat{H}(\mathcal{S})$ correspondem, respectivamente, a espalhamentos direto e de troca. O sinal superior em $\tilde{u}(\mathbf{q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma, \sigma'}$ é usado para férmions e o inferior, para bósons. Ou seja, para férmions em que $\sigma = \sigma'$ e para potencial de dois corpos constante no espaço dos momentos (o que corresponde a interação do tipo delta no espaço de coordenadas) as contribuições direta e de troca se anulam. A linha presente no segundo somatório de $\hat{H}(\mathbf{q} \notin \mathcal{S})$ (ao longo da Tese poderemos usar outra notação para este termo, como por exemplo, \hat{H}'') indica justamente a omissão da soma dos (a) termos diretos, $\mathbf{q} \in \mathcal{S}$ e (b) dos termos de troca, $(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}) \in \mathcal{S}$.

A seguir, mostraremos que, a partir de manipulações no termo de interação do hamiltoniano mais geral escrito acima, podemos realmente obter os termos direto e de troca. Além disto, mostraremos que se quisermos incluir explicitamente termos de pareamento (relevantes por exemplo para superfluidos) do tipo BCS, poderemos obtê-los a partir do hamiltoniano mais geral, bastando apenas incluí-los explicitamente ao hamiltoniano $\hat{H}(\mathcal{S})$ descrito acima [36].

A) Termo direto (*forward scattering*):

Partimos do hamiltoniano de interação completo:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{int}} &= \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \\ &= \mp \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma').\end{aligned}\quad (2.31)$$

Vamos restringir o número de momentos transferidos \mathbf{q} de um processo direto na soma acima, e denotamos o hamiltoniano resultante por $\hat{H}_{\text{int}}^{\text{for}}$, dado explicitamente por:

$$\hat{H}_{\text{int}}^{\text{for}} \equiv \mp \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma').\quad (2.32)$$

Vamos (anti)comutar os operadores $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma')$ e $\hat{a}(\mathbf{k}, \sigma)$:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{int}}^{\text{for}} &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \left[\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \right] \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{q}) [\hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma)] [\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma')] \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{\rho}(0) + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathbf{q}).\end{aligned}\quad (2.33)$$

O primeiro termo desta expressão não precisa ser levado em consideração para escrevermos $\hat{H}(\mathcal{S})$ pois, no limite termodinâmico, este termo é independente de volume e, portanto, se anula neste limite. Para esta configuração de momentos transferidos temos, portanto:

$$\hat{H}_{\text{int}}^{\text{for}} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathbf{q}).\quad (2.34)$$

B) Termo de troca (*exchange scattering*):

Partimos novamente do hamiltoniano completo:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma). \quad (2.35)$$

De todos os termos possíveis que são do tipo *exchange*, escolhemos somente aqueles com $\sigma' = \sigma$, e a soma sobre os \mathbf{q} é restrita de maneira que, para um dado par de momentos \mathbf{k} e \mathbf{k}' , somamos somente sobre um conjunto finito de momentos transferidos $(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}) \in \mathcal{S}$. Com isto, escrevemos o hamiltoniano de interação correspondente:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}}^{\text{exc}} &\equiv \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \delta_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}) \in \mathcal{S}} \tilde{u}(\mathbf{q}) \\ &\times \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Na Fig. 2.2 indicamos o processo de troca e o momento transferido correspondente à dependência de momentos dos operadores de aniquilação e criação na Eq. (2.35).

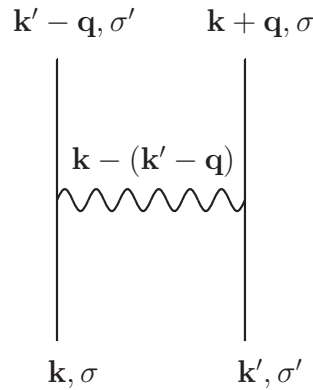


Figura 2.2: Processo de troca, $\mathbf{k} - (\mathbf{k}' - \mathbf{q})$ é o momento transferido, de acordo com os momentos que aparecem nos operadores de aniquilação e criação na Eq. (2.35).

Na sequência, para que possamos escrever convenientemente o produto de operadores de aniquilação e criação como no termo direto dado na Eq. (2.34), fazemos inicialmente uma troca de variáveis:

$$\mathbf{q}' = \mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}, \quad (2.37)$$

de maneira que podemos escrever $\hat{H}_{\text{int}}^{\text{exc}}$ como

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{\text{int}}^{\text{exc}} &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}' \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \delta_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}') \\
 &\times \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}', \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \\
 &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \delta_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
 &\times \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma). \tag{2.38}
 \end{aligned}$$

Agora, (anti)comutamos os operadores $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \sigma')$ e $\hat{a}(\mathbf{k}', \sigma')$. Assim:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{\text{int}}^{\text{exc}} &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \delta_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma) \\
 &\times [\pm \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma', \sigma'} \mp \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \sigma')] \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \\
 &= \pm \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \delta_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \\
 &\mp \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \delta_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \\
 &= \pm \frac{1}{2V} \tilde{u}(0) \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \\
 &\mp \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \delta_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}') \\
 &\times \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma). \tag{2.39}
 \end{aligned}$$

Notamos que devido à delta de Kronecker $\delta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}'}$ presente no primeiro termo desta expressão, para um dado par de momentos \mathbf{k} e \mathbf{k}' , há somente um valor de \mathbf{q} que podemos escolher, $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$. Portanto, ao usarmos a delta para eliminarmos a soma sobre e.g. \mathbf{k}' , automaticamente fica eliminada a soma sobre \mathbf{q} (pois só existe uma única possibilidade para \mathbf{q}) e obtemos então:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{\text{int}}^{\text{exc}} &= \pm \frac{1}{2V} \tilde{u}(0) \left[\sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \right] \\
 &\mp \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'} \tilde{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}') \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \\
 &\times \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma). \tag{2.40}
 \end{aligned}$$

No último termo acima, fazemos a seguinte troca de variáveis:

$$\mathbf{k}'' = \mathbf{k} - \mathbf{q}, \quad (2.41)$$

de maneira que:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}}^{\text{exc}} &= \pm \frac{1}{2V} \tilde{u}(0) \left[\sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \right] \\ &\mp \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} \delta_{\sigma, \sigma'} \tilde{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'') \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \\ &\times \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k}'', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}'' + \mathbf{q}, \sigma). \end{aligned} \quad (2.42)$$

A seguir renomeamos $\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'' \rightarrow \mathbf{k}'$, o que nos leva a:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}}^{\text{exc}} &= \pm \frac{1}{2V} \tilde{u}(0) \left[\sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \right] \\ &\mp \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'} \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma') \\ &\times \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma). \end{aligned} \quad (2.43)$$

Assim, chegamos na expressão para o termo de troca, conforme queríamos:

$$\hat{H}_{\text{int}}^{\text{exc}} = \pm \frac{1}{2} \tilde{u}(0) \left(\frac{\hat{N}}{V} \right) \mp \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'} \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \hat{\rho}^{\dagger}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathbf{q}), \quad (2.44)$$

em que $\sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ significa que nesta soma os termos $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ devem ser omitidos (porque eles já estão incluídos no termo direto). Novamente notamos que o primeiro termo desta expressão não precisa ser levado em consideração para escrevermos $\hat{H}(\mathcal{S})$ pois, no limite termodinâmico, este termo é independente de volume e, portanto, se anula neste limite. Logo:

$$\hat{H}_{\text{int}}^{\text{exc}} = \mp \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'} \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \hat{\rho}^{\dagger}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathbf{q}) \quad (2.45)$$

C) Termo de pareamento:

Partimos do hamiltoniano completo:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} &= \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}) \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \\ &\times \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma) \end{aligned} \quad (2.46)$$

obtido com o auxílio da troca de variáveis dada na Eq. (2.37). Na sequência fazemos mais uma troca de variáveis $\mathbf{k}' = \mathbf{k}'' + \mathbf{q}$ (e, a seguir, $\mathbf{k}'' \rightarrow -\mathbf{k}''$). Restringindo a configuração de momentos \mathbf{q} , definimos o hamiltoniano de BCS como:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}}^{\text{BCS}} &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}''} \tilde{u}(\mathbf{k} + \mathbf{k}'') \\ &\times \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(-\mathbf{k}'', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma') \hat{a}(-\mathbf{k}'' + \mathbf{q}, \sigma). \end{aligned} \quad (2.47)$$

Mais uma troca de variáveis, $\mathbf{q} = \mathbf{q}' - \mathbf{k} + \mathbf{k}'$, o que nos leva a:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}}^{\text{BCS}} &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \\ &\times \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(-\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma') \hat{a}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma). \end{aligned} \quad (2.48)$$

Após, fazemos $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ e trocamos \mathbf{k} por \mathbf{k}' , do que ficamos com

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}}^{\text{BCS}} &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ &\times \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(-\mathbf{k}, \sigma') \hat{a}(-\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \sigma). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Notamos que nas Eqs.(2.34), (2.45) e (2.49), os papéis desempenhados pela quantidade \mathbf{q} são completamente diferentes. Enquanto que no termo direto \mathbf{q} é o momento transferido na interação, no termo de troca o momento transferido é dado por $\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}$. Por outro lado, no hamiltoniano de BCS, \mathbf{q} desempenha o papel de momento do par de Cooper.

Como não é possível resolver exatamente um problema de muitos corpos que tem como base um hamiltoniano como o dado pela Eq. (2.27), são necessárias aproximações. No presente caso, o esquema de aproximação está baseado na Eq. (2.28). O problema consiste, essencialmente, em escolher um número finito de momentos $\mathbf{q} \in \mathcal{S}$ (número que deve ser independente do volume V no limite termodinâmico). O que deve ficar claro é que não é para todo e qualquer sistema de muitos corpos que esse esquema de aproximação se aplica. Em linhas gerais, ele se aplica para sistemas em que aproximações de campo médio de ordem zero fornecem um bom ponto de partida. Exemplos de sistemas de interesse atual são gases atômicos a baixa temperatura (bosônicos e fermiônicos), física nuclear de baixas energias e, como veremos no próximo Capítulo, problemas de transições de fase baseados na teoria de Ginzburg-Landau. Também, como será visto no Capítulo 4, o esquema de aproximação será útil na quantização semiclássica de teorias de campo no contexto do método da quantização estocástica de Parisi e Wu [22].

Na continuidade, trabalharemos um pouco mais com os termos da Eq. (2.29). Após a inserção conveniente de algumas quantidades, é possível reorganizar os termos de interação de duas partículas no hamiltoniano $\hat{H}(\mathcal{S})$ de tal modo a decompor

este hamiltoniano em duas partes: uma parte que chamaremos de assintótica, \hat{H}_a , e outra parte \hat{H}' , tal que ($\mathbf{q} = \mathcal{Q}$)

$$\hat{H}(\mathcal{S}) = \hat{H}_a + \hat{H}', \quad (2.50)$$

com

$$\begin{aligned} \hat{H}_a &= W_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{Q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \{ [w(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) + V^{-1} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathcal{Q})] \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) + h.c. \} \end{aligned} \quad (2.51)$$

em que *h.c.* indica o termo conjugado Hermitiano e

$$W_0 = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathcal{Q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}] g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \quad (2.52)$$

$$w(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} [\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \delta_{\sigma\sigma'}] g^*(\mathbf{k}', \mathcal{Q}), \quad (2.53)$$

e

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathcal{Q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}] \\ &\times [\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) - g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})] [\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q})], \end{aligned} \quad (2.54)$$

novamente o sinal superior deve ser tomado para férmions e o inferior, para bósons e

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathcal{Q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum'_{\mathcal{Q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathcal{Q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathcal{Q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathcal{Q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma). \end{aligned} \quad (2.55)$$

A linha presente no segundo somatório indica omissão da soma de (a) termos com $\mathcal{Q} \in \mathcal{S}$ [termos diretos] e (b) termos com $(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathcal{Q}) \in \mathcal{S}$ [termos de troca], conforme explicado anteriormente, e os parâmetros $g(\mathbf{k}, \mathcal{Q})$ definem funções variacionais no princípio variacional de Gibbs.

A partir de uma transformação unitária linear

$$\hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) = \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \hat{b}(\mathbf{k}', \sigma'), \quad (2.56)$$

em que $U_{kk'}$ é uma matriz unitária, é possível diagonalizar o hamiltoniano assintótico \hat{H}_a , de maneira que ele pode ser escrito como:

$$\hat{H}_a - \mu\hat{N} = W_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\omega_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{b}(\mathbf{k}, \sigma), \quad (2.57)$$

sendo que $\omega_{\mathbf{k}}$ deve ser determinado a partir de um esquema iterativo. Isto feito, utilizando o princípio variacional de Gibbs (demonstrado no Apêndice A) a partir da minimização da aproximação variacional Ω_{var} para o potencial *grand* canônico exato Ω ,

$$\Omega \leq \Omega_a + \langle \hat{H}' \rangle_a + \langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a \equiv \Omega_{var} \quad (2.58)$$

$$\Omega = -\beta^{-1} \ln \text{Tr} \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] \quad (2.59)$$

$$\langle \dots \rangle_a = \frac{\text{Tr}\{(\dots) \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu\hat{N})]\}}{\text{Tr} \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu\hat{N})]}, \quad (2.60)$$

é possível determinar as funções de teste $g(\mathbf{k}, \mathcal{Q})$:

$$\frac{\partial \Omega_{var}}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} = 0, \quad (2.61)$$

Será mostrado no Apêndice B que a condição de mínimo estabelecida acima é satisfeita no limite termodinâmico se

$$g(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) = \langle \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) \rangle_a = \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k} + \mathcal{Q}, \sigma) \rangle_a, \quad (2.62)$$

sendo que o símbolo $\langle \dots \rangle_a$ denota a média térmica com o *ensemble* assintótico.

Como será visto, a transformação unitária linear utilizada para diagonalizar o hamiltoniano \hat{H}_a depende explicitamente das funções de *gap* $g(\mathbf{k}, \mathcal{Q})$ determinadas pelo método variacional de Gibbs,

$$g(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) = \sum_{k'} U_{kk'}^* U_{k+\mathcal{Q}, k'} f_{k'} = \sum_{k'} \frac{U_{kk'}^* U_{k+\mathcal{Q}, k'}}{z^{-1} e^{\beta\omega_{k'}} \pm 1}, \quad (2.63)$$

$U_{kk'}$ é a matriz diagonalizante, $f_{k'}$ é a função distribuição de Fermi ou de Bose e $z = e^{\beta\mu}$ é a atividade absoluta.

Assim, as funções de *gap* $g(\mathbf{k}, \mathcal{Q})$, a matriz unitária $U_{kk'}$ e os autovalores $\omega_{\mathbf{k}}$ da matriz a ser diagonalizada presente em \hat{H}_a podem, em princípio, ser determinados simultaneamente a partir de um esquema de iteração autoconsistente para as equações não-lineares acopladas: (a) Dada a n -ésima aproximação $\omega_{\mathbf{k}}^{(n)}$ de $\omega_{\mathbf{k}}$ e uma aproximação correspondente $U_{kk'}^{(n)}$ para $U_{kk'}$, definimos $g^{(n)}(\mathbf{k}, \mathcal{Q})$. (b) Disto

obtemos $w^{(n)}(\mathbf{k}, \mathcal{Q})$ e assim a matriz diagonalizada. (c) Logo, determinamos ω_k e $U_{kk'}$, denotando eles por $\omega_k^{(n+1)}$ e $U_{kk'}^{(n+1)}$. (d) Retornamos ao passo (a).

Portanto, para a implementação deste esquema iterativo, é necessário uma escolha de aproximação de ordem zero. Mas, já no passo inicial, pode-se obter um resultado que, dependendo do sistema físico em questão, pode ser muito útil. Especificamente, escolhendo

$$\omega_k^{(0)} = \varepsilon(\mathbf{k}) \quad \text{e} \quad U_{kk'}^{(0)} = \delta_{kk'}, \quad (2.64)$$

obtemos os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} g^{(0)}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) &= \delta_{\mathcal{Q}0} (z^{-1} e^{\beta\varepsilon(\mathbf{k})} \pm 1)^{-1} \\ w^{(0)}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) &= (2\pi)^{-3} \delta_{\mathcal{Q}0} \sum_{\sigma'} \int d^3k' \frac{u_0 \mp u_{k'-k} \delta_{\sigma\sigma'}}{z^{-1} e^{\beta\varepsilon(\mathbf{k}')} \pm 1}. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Ou seja, com a escolha mais simples, que consiste em retermos no conjunto de momentos transferidos apenas momento transferido igual a zero, já obtemos a bem conhecida aproximação de Hartree-Fock que, em muitas situações, já é uma boa aproximação para problemas de muitos corpos.

Conforme mencionado, o nome “hamiltoniano termodinamicamente equivalente” foi cunhado por Wentzel [14] no contexto da supercondutividade em metais. Especificamente, o nome surge da seguinte observação: o hamiltoniano reduzido de BCS, Eq. (2.49) com $\mathbf{q} = 0$, H_{BCS}^{red} , pode ser escrito em termos da soma de um hamiltoniano H_0 , quadrático nos operadores de criação e aniquilação, e de um outro termo, H' , cujas contribuições se anulam no limite termodinâmico, de maneira que as propriedades termodinâmicas do problema, em princípio dadas por H_{BCS}^{red} , são dadas **exata e equivalentemente** por H_0 através do princípio variacional de Gibbs.

Na presente Tese trabalharemos com modelos com acoplamentos entre partículas (ou entre componentes de Fourier de um parâmetro de ordem) mais gerais que os do hamiltoniano reduzido de BCS. Esses acoplamentos mais gerais implicarão na presença de um termo adicional a H_0 e H' . Como consequência, as soluções dos respectivos problemas não serão mais dadas exatamente pelo termo quadrático H_0 ; haverá correções às soluções obtidas com H_0 , que são calculadas em teoria de perturbação no termo extra. Mesmo assim, continuaremos usando o termo “hamiltoniano termodinamicamente equivalente” para o método que desenvolvemos na Tese. A razão para tal é que, como será visto no transcorrer dos próximos Capítulos, o método só será útil se a aproximação de ordem zero, isto é, a solução obtida com o termo quadrático, fornecer uma aproximação razoável ao problema em estudo.

Capítulo 3

MHTE para transições de fase estáticas e dinâmicas

Neste Capítulo apresentaremos uma revisão sucinta dos conceitos relacionados a transições de fase estáticas e dinâmicas, com ênfase nas equações dinâmicas de natureza estocástica que descrevem a evolução temporal de parâmetros de ordem - as equações de Ginzburg-Landau-Langevin (GLL). Utilizaremos como referência bibliográfica principal a Dissertação desenvolvida pela aluna no seu trabalho de Mestrado, Ref. [37] e referências citadas no mesmo.

O nosso objetivo é aplicar o MHTE em problemas de Mecânica Estatística. Iniciamos investigando o MHTE em transições de fase estáticas no contexto de uma formulação de integrais de trajetória para a função de partição clássica de um sistema caracterizado por um parâmetro de ordem descrito por um campo dependente da posição. A seguir, aplicaremos o MHTE para transições de fase dinâmicas no contexto das equações de GLL. Por fim, generalizaremos o método para energias livres não locais. Começaremos este Capítulo com algumas definições [38] que serão necessárias para o melhor entendimento do que será discutido a seguir.

Pensemos, para exemplificarmos e simplificarmos a discussão, num determinado volume de água que se encontre à pressão atmosférica, a uma temperatura de 100 °C. Nestas condições, o valor da densidade da água não é único, uma vez que água líquida e vapor d'água coexistem, e estas duas fases têm densidades muito diferentes. Na verdade, há uma variedade de temperaturas e pressões para as quais há coexistência de água líquida e água na forma de vapor. Se representarmos estes pontos num gráfico 'pressão versus temperatura', obteremos uma linha (linha de **coexistência de fases**) que termina num ponto a partir do qual não é mais possível distinguir a fase líquida da fase de vapor. Este ponto é chamado de **ponto crítico**, e os fenômenos que ocorrem próximos de um ponto crítico são chamados de **fenômenos críticos**. Como a densidade da água neste caso não é univocamente determinada, ela é chamada de **parâmetro de ordem** (ϕ), por definição. Em geral, o parâmetro

de ordem extremiza uma energia livre ($F[\phi]$).

Os fenômenos de transição de fase podem ser classificados como sendo **estáticos** ou **dinâmicos**. Os fenômenos críticos estáticos estão relacionados a propriedades de equilíbrio, tais como a magnetização e calores específicos em sistemas magnéticos. Os fenômenos críticos dinâmicos referem-se a fenômenos dependentes do tempo, como tempos de relaxação e fenômenos de difusão. O fato de que uma transição de fase ocorre em equilíbrio ou fora do equilíbrio depende essencialmente de duas escalas de tempo, de resfriamento e de equalibração: se a taxa de resfriamento for (maior) menor que a de equalibração, então a transição ocorre em (não) equilíbrio.

No estudo de fenômenos críticos dinâmicos, está-se interessado principalmente 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 variam lentamente no tempo próximo ao ponto crítico como, por exemplo, flutuações de grandes comprimentos de onda (no caso de um sistema de *spins*, flutuações de *spin*) as quais têm **tempos de relaxação** muito longos - o que é conhecido como *critical slowing down* (amortecimento crítico). Existem também outros motivos para a ocorrência de tempos de relaxação mais longos, dentre os quais podemos citar leis de conservação – o motivo, neste caso, da dinâmica se tornar mais lenta é porque, em geral, deve haver transporte de matéria pelo sistema para que uma quantidade seja conservada, e isto requer um certo tempo.

3.1 Equação de Ginzburg-Landau-Langevin

Para variáveis de campo, um dos modelos estocásticos mais simples é conhecido como **Modelo A**, na nomenclatura criada por Hohenberg e Halperin [39], e amplamente empregada na literatura atual*. A equação estocástica para o campo $\phi(\mathbf{r}, t)$ (parâmetro de ordem) é dada por

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} + \zeta(\mathbf{r}, t), \quad (3.1)$$

conhecida como equação de Ginzburg-Landau-Langevin (GLL) devido à presença da função ζ . Γ é conhecido como coeficiente de Onsager, $F[\phi]$ é a energia livre de Landau e ζ é uma função estocástica, usualmente tomada na forma de ruído branco,

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0 \quad (3.2)$$

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = D \delta(t - t') \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.3)$$

*Quando a integral sobre o volume do parâmetro de ordem é conservada no tempo, temos o Modelo B, e sua dinâmica é descrita pela equação de Cahn-Hilliard.

A denominação ruído branco é feita em analogia com a decomposição espectral da luz. A cor branca é o resultado da soma de todas as cores do espectro, as quais podem ser definidas a partir de suas frequências. A presença da função delta de Dirac no tempo indica que o espectro $\zeta(t)$ contém todas as frequências com pesos iguais, pois a transformada de Fourier da função delta é igual a uma constante. Por outro lado, se no lado direito da Eq.(3.3), em vez da função delta de Dirac no tempo, aparecesse uma outra função (limitada) $g(t - t')$, o ruído seria denominado de colorido, uma vez que a transformada de Fourier de $g(t - t')$ conteria um espectro com pesos diferentes para cada frequência – o que no caso da luz levaria a uma luz colorida.

A energia livre *coarse grained* de Landau $F[\phi]$ é um funcional local do parâmetro de ordem, e seus mínimos correspondem aos estados de equilíbrio do modelo. Um dos requerimentos implícitos no uso de uma energia livre *coarse grained* para um sistema fora do equilíbrio é o de que este não se encontre muito longe do equilíbrio – de outra forma, não localidades no tempo e no espaço deveriam ser consideradas na evolução do sistema. Este requerimento implícito é, em geral, satisfeito para sistemas com uma dinâmica lenta nas escalas de tempo de equilíbrio locais.

Para motivar a forma usualmente empregada para a energia livre *coarse grained* de Landau $F[\phi]$, adotaremos a notação, e seguiremos os argumentos da Ref. [40]. Inicialmente introduzimos uma escala de comprimento l , a qual separa as regiões microscópicas locais de dinâmica rápida das regiões macroscópicas de dinâmica lenta. Assim, o sistema é dividido em regiões (células físicas elementares) de tamanho l , as quais estão centradas em torno de vetores \mathbf{r} que definem as suas posições. A escala de comprimento tem que ser muito maior do que a distância média a entre os átomos (ou outras estruturas microscópicas) do sistema, $l \gg a$, a fim de que um tratamento estatístico possa ser empregado. Um outro requerimento é que não se quer perder muita informação sobre a microscopia do sistema e, portanto, $l < \xi$, sendo ξ o comprimento de correlação do sistema. Nesta escala l , tratamos o sistema como estando em equilíbrio, pois supõe-se que ele equilibra em escalas menores do que l . O parâmetro de ordem deve variar suavemente nas escalas de comprimento maiores do que l a fim de que o sistema nestas escalas não esteja distante de seu estado de equilíbrio.

Uma vez que as células físicas elementares estão equilibradas, podemos definir as suas funções termodinâmicas de equilíbrio. Estas são obtidas a partir da função de partição para o sistema de células:

$$Z[\phi] = \overline{\sum_{\{\phi\}} \exp(-H[\phi]/k_B T)}, \quad (3.4)$$

a soma é feita sobre as configurações do parâmetro de ordem ϕ e a barra sobre o sinal de somatório indica o vínculo

$$\frac{1}{l^3} \sum_{\{\phi\} \in \text{cell } \mathbf{r}} \phi_i = \phi(\mathbf{r}). \quad (3.5)$$

Supõe-se que o comportamento de grandes comprimentos de onda do sistema possa ser descrito por uma função conhecida como energia livre de Landau $F[\phi]$, definida como

$$F[\phi] = \int d^3r f(\phi(\mathbf{r})), \quad (3.6)$$

em que f é uma função local do parâmetro de ordem e de suas derivadas. Assim, pode-se expandir esta função em torno de f_0 , a densidade de energia livre da fase uniforme, como

$$f(\phi, \nabla\phi, \dots) = f_0(\phi) + k_1(\phi) \nabla^2\phi + k_2(\phi) (\nabla\phi)^2 + \dots, \quad (3.7)$$

e, desta forma,

$$F[\phi] = \int d^3r f(\phi(\mathbf{r})) \simeq \int d^3r [f_0(\phi) + k_1(\phi) \nabla^2\phi + k_2(\phi) (\nabla\phi)^2 + \dots]. \quad (3.8)$$

Pelo teorema da divergência, temos que

$$\begin{aligned} \int d^3r \nabla \cdot (k_1(\phi) \nabla\phi(\mathbf{r})) &= \int d^3r k_1(\phi) \nabla^2\phi + \int d^3r [\nabla k_1(\phi)] \cdot (\nabla\phi) \\ &= \int_s d\vec{S} k_1(\phi) (\nabla\phi). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Impondo que $\nabla\phi$ é zero na fronteira, obtém-se

$$\int d^3r k_1(\phi) \nabla^2\phi = - \int d^3r [\nabla k_1(\phi)] \cdot (\nabla\phi). \quad (3.10)$$

Uma vez que

$$\nabla k_1(\phi) = \frac{dk_1}{d\phi} (\nabla\phi), \quad (3.11)$$

o funcional $F[\phi]$ pode ser escrito como

$$F[\phi] = \int d^3r \left\{ \frac{1}{2} \gamma (\nabla\phi)^2 + f_0(\phi) \right\}, \quad (3.12)$$

sendo que

$$\frac{1}{2} \gamma = k_2(\phi) - \frac{dk_1(\phi)}{d\phi}. \quad (3.13)$$

Um exemplo-protótipo e muito simples de energia livre da fase uniforme $f_0(\phi)$ é a de poço duplo da forma

$$f_0(\phi) = \frac{1}{2} m^2 \phi^2(\mathbf{r}) + \frac{\lambda}{4} \phi^4(\mathbf{r}). \quad (3.14)$$

Assim, a energia livre de Ginzburg-Landau, muitas vezes chamada também de Hamiltoniano de Wilson-Ginzburg-Landau (WGL), é dada por

$$F[\phi] = \int d^3r \left[\frac{1}{2} \gamma (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2(\mathbf{r}) + \frac{\lambda}{4} \phi^4(\mathbf{r}) \right]. \quad (3.15)$$

Agora, para problemas de não equilíbrio (porém não muito afastados do equilíbrio), a energia livre dinâmica, que aparece na Eq. (3.1), é tomada como sendo da mesma forma da Eq. (3.15), com $\phi(\mathbf{r})$ substituído por $\phi(\mathbf{r}, t)$. Portanto, empregando a energia livre da Eq. (3.15) na Eq. (3.1), encontramos

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma (-\gamma \nabla^2 + m^2) \phi(\mathbf{r}, t) - \Gamma \lambda \phi^3(\mathbf{r}, t) + \zeta(\mathbf{r}, t), \quad (3.16)$$

que é a renomada equação de Ginzburg-Landau-Langevin (GLL).

Conhecido um *ensemble* de soluções $\{\phi_i(\mathbf{r}, t), i = 1, \dots, N\}$ dessa equação, com N sendo o número de realizações de ruído, valores médios como função tempo $\langle \phi(\mathbf{r}, t) \rangle_N$ e funções de correlação $\langle \phi(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}', t) \rangle_N$ do parâmetro de ordem são calculados como

$$\langle \phi(\mathbf{r}, t) \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi_i(\mathbf{r}, t), \quad (3.17)$$

$$\langle \phi(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}', t) \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi_i(\mathbf{r}, t) \phi_i(\mathbf{r}', t). \quad (3.18)$$

A seguir, mostraremos [41] que, no limite de $N \rightarrow \infty$ e de $t \rightarrow \infty$, os valores médios das Eqs. (3.17) e (3.18) convergem para os valores de equilíbrio:

$$\lim_{N, t \rightarrow \infty} \langle \phi(\mathbf{r}, t) \rangle_N \equiv \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{Z[\phi]} \int \mathcal{D}\phi \phi(\mathbf{r}) e^{-\beta F[\phi]}, \quad (3.19)$$

e

$$\lim_{N, t \rightarrow \infty} \langle \phi(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}', t) \rangle_N \equiv \langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{Z[\phi]} \int \mathcal{D}\phi \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') e^{-\beta F[\phi]}, \quad (3.20)$$

com

$$Z[\phi] = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta F[\phi]}, \quad (3.21)$$

$\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann.

Começamos a demonstração a partir da probabilidade de encontrar o parâmetro de ordem numa configuração $\phi(\mathbf{r})$, que é dada por:

$$P_\phi(\{\phi(\mathbf{r})\}, t) = \langle \delta[\phi(\mathbf{r}) - \bar{\phi}(\mathbf{r}, t, \{\zeta\})] \rangle_\zeta \quad (3.22)$$

em que $\bar{\phi}(\mathbf{r}, t, \{\zeta\})$ é solução da equação de Ginzburg-Landau-Langevin. Vamos diferenciar esta expressão em relação ao tempo, do que obtemos:

$$\begin{aligned} \partial_t P_\phi(\{\phi(\mathbf{r})\}, t) &= \int d^d \mathbf{r}' \frac{\delta}{\delta \phi(\mathbf{r}')} \left\{ \Gamma \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{r}')} P_\phi(\{\phi(\mathbf{r})\}, t) \right. \\ &\quad \left. - \langle \zeta(\mathbf{r}', t) \delta[\phi(\mathbf{r}) - \bar{\phi}(\mathbf{r}, t, \{\zeta\})] \rangle_\zeta \right\} \\ &= \int d^d \mathbf{r}' \frac{\delta}{\delta \phi(\mathbf{r}')} \left\{ \Gamma \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{r}')} P_\phi(\{\phi(\mathbf{r})\}, t) + \frac{D}{2} \frac{\delta P_\phi(\{\phi(\mathbf{r})\}, t)}{\delta \phi(\mathbf{r}')} \right\}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

que é a equação de Fokker-Planck associada à equação de GLL. Para $t \rightarrow \infty$, a solução da equação de Fokker-Planck se aproxima da solução de equilíbrio

$$\partial_t P_\phi(\{\phi(\mathbf{r})\}, t) = 0, \quad (3.24)$$

a qual é dada por

$$P_\phi^{\text{eq}}(\{\phi(\mathbf{r})\}) = \frac{1}{G[\phi]} \exp\left(-\frac{2\Gamma}{D} F[\phi]\right), \quad (3.25)$$

em que

$$G[\phi] = \int \mathcal{D}\phi \exp\left(-\frac{2\Gamma}{D} F[\phi]\right), \quad (3.26)$$

Esta solução de equilíbrio deve ser a distribuição de Boltzmann. Para isto, os coeficientes D e Γ devem estar relacionados pela temperatura T ,

$$D = 2\Gamma k_B T, \quad (3.27)$$

do que obtemos

$$P_\phi^{\text{eq}}(\{\phi(\mathbf{r})\}) = \frac{1}{Z[\phi]} \exp(-\beta F[\phi]). \quad (3.28)$$

Assim, a função de ruído pode ser reescrita como:

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad (3.29)$$

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\Gamma k_B T \delta(t - t') \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.30)$$

O resultado da Eq. (3.28) claramente não é restrito à equação de GLL dada na Eq. (3.16) obtida a partir de uma energia livre na forma de poço duplo, Eq. (3.14). Esse resultado segue da Eq. (3.1) e, portanto, é da forma de $F[\phi]$.

3.2 MHTE para transições de fase estáticas

Nesta Seção aplicaremos as ideias discutidas no contexto de Hamiltonianos quânticos para o caso do Hamiltoniano de Wilson-Ginzburg-Landau (ou energia livre de Ginzburg-Landau). Vamos inicialmente discutir este assunto em detalhe para o caso de uma energia livre do tipo poço duplo como dado na Eq. (3.14). Mais adiante generalizaremos o método para uma energia livre de forma arbitrária. Para tal, teremos que introduzir aproximações adicionais fisicamente motivadas para situações especiais.

O procedimento consiste em manipular a energia livre de Ginzburg-Landau como no caso do Hamiltoniano quântico. Introduzindo a transformada de Fourier $\tilde{\phi}(\mathbf{k})$

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \quad (3.31)$$

na Eq. (3.15), usando o fato de que

$$\int d^3r e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} = V \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad (3.32)$$

e que o campo $\phi(\mathbf{r})$ é real (o que implica em $\tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) = \tilde{\phi}(-\mathbf{k})$) obtemos:

$$\begin{aligned} F[\phi] &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\gamma\mathbf{k}^2 + m^2) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \\ &+ \frac{\lambda}{4V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{p}} \tilde{\phi}^*(\mathbf{p}) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{p}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Fazendo a troca de variáveis $\mathbf{p} - \mathbf{k} = \mathbf{k}'$ e renomeando variáveis, chegamos a:

$$\begin{aligned} F[\phi] &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\gamma\mathbf{k}^2 + m^2) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \\ &+ \frac{\lambda}{4V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{k}'} \tilde{\phi}^*(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Note que essa expressão é formalmente idêntica ao Hamiltoniano da teoria quântica de muitos corpos no espaço de momentos, dado pela Eq. (2.15). É importante destacar, no entanto, que no presente caso, os campos $\tilde{\phi}(\mathbf{k})$ e $\tilde{\phi}^*(\mathbf{k})$ **não são** operadores, como são $\hat{a}(\mathbf{k}, \sigma)$ e $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma)$ – e eles não dependem do índice de *spin*.

Outro ponto importante é que estamos trabalhando com um parâmetro de ordem real $\phi(\mathbf{r})$. Isto implica que não há lei de conservação associada (como conservação de carga no caso de um campo escalar complexo) e, por isto, a dinâmica é descrita pela equação de GLL, que caracteriza o modelo A dos fenômenos críticos dinâmicos [1, 2].

Uma outra implicação disso é que não há potencial químico associado. Em vista do campo $\phi(\mathbf{r})$ ser real, temos $\tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) = \tilde{\phi}(-\mathbf{k})$, como visto acima. Portanto, em princípio, não é necessário escrever a energia livre, Eq. (3.34), em termos de $\tilde{\phi}^*(\mathbf{k})$. Por fim, como será visto mais adiante, por $\phi(\mathbf{r})$ ser real, a definição das funções $\omega(\mathbf{q})$ difere de um fator numérico, em comparação com o $\omega(\mathbf{q})$ discutido no Capítulo anterior.

A seguir, em analogia com o caso da teoria quântica de muitos corpos, inicialmente definimos uma função densidade $\rho(\mathbf{q})$:

$$\rho(\mathbf{q}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{k}, \mathbf{q}). \quad (3.35)$$

Seguimos a estratégia de separar um conjunto de momentos \mathbf{q} no termo de quatro campos que leve a termos direto e de troca. Agora, como os quatro campos se acoplam localmente, isto é, a função $\tilde{u}(\mathbf{q})$ é simplesmente uma constante, os termos direto e de troca são iguais. Ainda mais, como os campos são reais, na verdade há três possíveis contribuições iguais. Isso é mais facilmente entendido empregando a linguagem de contrações de Wick - ver Apêndice C. Por exemplo, suponhamos que queremos calcular o valor médio de um produto de quatro campos (em que o peso de Boltzmann é quadrático nos campos). Para um campo complexo ϕ , com uma energia livre

$$F[\phi] = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{y} \phi^*(\mathbf{x}) M(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}), \quad (3.36)$$

temos que o valor médio do produto $\phi^*(\mathbf{x})\phi^*(\mathbf{y})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{x})$ pode ser fatorado como

$$\langle \phi^*(\mathbf{x})\phi^*(\mathbf{y})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{x}) \rangle = \underbrace{\phi^*(\mathbf{x})\phi^*(\mathbf{y})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{x})}_{\text{contração 1}} + \underbrace{\phi^*(\mathbf{x})\phi^*(\mathbf{y})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{x})}_{\text{contração 2}}, \quad (3.37)$$

e cada contração é a inversa da matriz $M(\mathbf{x} - \mathbf{y})$. Para campos reais, porém:

$$\begin{aligned} \langle \phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{x}) \rangle &= \underbrace{\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{x})}_{\text{contração 1}} + \underbrace{\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{x})}_{\text{contração 2}} \\ &\quad + \underbrace{\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{y})\phi(\mathbf{x})}_{\text{contração 3}}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Para um acoplamento na energia livre de Ginzburg-Landau como da Eq. (3.15), temos

$$\begin{aligned} \langle \phi^4(\mathbf{x}) \rangle &= \underbrace{\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})}_{\text{contração 1}} + \underbrace{\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})}_{\text{contração 2}} \\ &\quad + \underbrace{\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})}_{\text{contração 3}}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Portanto, neste caso temos um termo a mais para considerar na manipulação dos termos na energia livre de Ginzburg-Landau.

Após esta discussão, podemos então reescrever a Eq. (3.34), usando soma e subtração de termos, da seguinte maneira:

$$F[\phi] = F_0[\phi] + F'[\phi] + F''[\phi], \quad (3.40)$$

em que

$$\begin{aligned} F_0[\phi] &= W_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\gamma \mathbf{k}^2 + m^2) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \\ &+ \frac{3\lambda}{8V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [g^*(\mathbf{k}', \mathbf{q}) \rho(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \text{c.c.}], \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$F'[\phi] = \frac{3\lambda}{8V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [\rho^*(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - g^*(\mathbf{k}, \mathbf{q})] [\rho(\mathbf{k}', \mathbf{q}) - g(\mathbf{k}', \mathbf{q})], \quad (3.42)$$

$$F''[\phi] = \frac{\lambda}{4V} \sum_{\mathbf{q} \notin \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{\phi}^*(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}'), \quad (3.43)$$

sendo que

$$W_0 = -\frac{3\lambda}{8V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} g^*(\mathbf{k}, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}', \mathbf{q}). \quad (3.44)$$

3.2.1 Determinação das funções de *gap* $g(\mathbf{k}, \mathbf{q})$

Na sequência determinaremos as funções $g(\mathbf{k}, \mathbf{q})$. Para facilitar as manipulações, introduziremos a quantidade $\omega(\mathbf{q})$:

$$\omega(\mathbf{q}) = \frac{3\lambda}{2V} \sum_{\mathbf{k}} g^*(\mathbf{k}, \mathbf{q}). \quad (3.45)$$

As funções $g(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ são parâmetros numéricos que definem uma função variacional no princípio variacional de Gibbs. Por este princípio:

$$\Omega \leq \Omega_0 + \langle F'[\phi] \rangle_0 + \langle F''[\phi] \rangle_0 \equiv \Omega_{var}, \quad (3.46)$$

em que:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \exp\{-\beta F[\phi]\}, \quad (3.47)$$

$$\Omega_0 = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \exp\{-\beta F_0[\phi]\}, \quad (3.48)$$

$$\langle \dots \rangle_0 = \frac{\text{Tr}[(\dots) \exp\{-\beta F_0[\phi]\}]}{\text{Tr} \exp\{-\beta F_0[\phi]\}}. \quad (3.49)$$

Conforme demonstrado no Apêndice A, este princípio variacional pode ser usado tanto para sistemas quânticos como também para os sistemas clássicos – o que muda numa situação ou outra é o significado do traço. Por exemplo, neste caso clássico o traço sobre $\exp\{-\beta F[\phi]\}$ significa a integral funcional da Eq. (3.21). A condição necessária para termos um mínimo de Ω_{var} é dada por:

$$\frac{\partial \Omega_{var}}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathbf{q})} = 0. \quad (3.50)$$

Seguindo os mesmos passos que no caso quântico, pode-se mostrar facilmente que a contribuição de $F'[\phi]$ é desprezível em teoria de perturbação em todas as ordens, e que a contribuição do termo $F''[\phi]$ é desprezível em primeira ordem de teoria de perturbação. Assim, obtemos explicitamente:

$$\frac{\partial \Omega_{var}}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathbf{q})} = \frac{\partial \Omega_0}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathbf{q})} = 0. \quad (3.51)$$

Ou seja, isto leva à determinação das funções variacionais $g(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, de forma que:

$$\begin{aligned} g(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \frac{\text{Tr}[\rho(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \exp\{-\beta F_0[\phi(\mathbf{r})]\}]}{\text{Tr} \exp\{-\beta F_0[\phi(\mathbf{r})]\}} \\ &= \langle \rho(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \rangle_0 \\ &= \langle \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle_0. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Assim, ficamos com:

$$\omega(\mathbf{q}) = \frac{3\lambda}{2V} \sum_{\mathbf{k}} g^*(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{3\lambda}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle_0. \quad (3.53)$$

A seguir mostraremos que $\omega^*(\mathbf{q}) = \omega(-\mathbf{q})$. Sendo $\omega^*(\mathbf{q})$ dado por:

$$\omega^*(\mathbf{q}) = \frac{3\lambda}{2V} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{3\lambda}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle_0, \quad (3.54)$$

e $\omega(-\mathbf{q})$ dado por:

$$\omega(-\mathbf{q}) = \frac{3\lambda}{2V} \sum_{\mathbf{k}} g^*(\mathbf{k}, -\mathbf{q}) = \frac{3\lambda}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle_0, \quad (3.55)$$

vamos trocar $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ e usar o fato de que $\phi(\mathbf{r})$ é real, o que implica em $\tilde{\phi}(-\mathbf{k}) = \tilde{\phi}^*(\mathbf{k})$. Logo:

$$\omega(-\mathbf{q}) = \frac{3\lambda}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle_0. \quad (3.56)$$

Portanto:

$$\omega^*(\mathbf{q}) = \omega(-\mathbf{q}), \quad (3.57)$$

conforme queríamos demonstrar.

3.2.2 Funções de correlação no equilíbrio

A energia livre $F_0[\phi]$ do MHTE é quadrática nos campos, e a função de partição correspondente

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta F_0[\phi]}, \quad (3.58)$$

pode ser obtida de maneira exata. Correções são obtidas em teoria de perturbação, em que somente $F''[\phi]$ contribui para a perturbação, já que as contribuições de $F'[\phi]$ se anulam em todas as ordens em teoria de perturbação. Ainda mais, conforme dito acima, e explicado no Apêndice B, não há correção de primeira ordem em $F''[\phi]$ – as possíveis correções começam em segunda ordem de $F''[\phi]$. Como será visto logo a seguir, é muito fácil mostrar isto na linguagem de integrais funcionais que estamos empregando. Portanto, a função de partição da teoria no esquema do MHTE é dada por:

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta(F_0[\phi]+F''[\phi])} \\ &= \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta F_0[\phi]} \left[1 + \frac{1}{2} (\beta F''[\phi])^2 + \dots \right], \end{aligned} \quad (3.59)$$

em que já usamos o fato de que o termo de primeira ordem em $F''[\phi]$ não contribui. Vamos agora discutir a derivação das funções de correlação de equilíbrio da teoria. Inicialmente, partindo da expressão para $F_0[\phi]$ no espaço dos momentos:

$$F_0[\phi] = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\gamma \mathbf{k}^2 + m^2) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}) + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}} \left[\omega(\mathbf{q}) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \text{c.c.} \right] \quad (3.60)$$

escrevemos $F_0[\phi]$ no espaço de coordenadas:

$$\begin{aligned} F_0[\phi] &= \frac{1}{2V} \int d^3r \int d^3r' \sum_{\mathbf{k}} (\gamma k^2 + m^2) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \\ &+ \frac{1}{4V} \int d^3r \int d^3r' \phi(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \left[\sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \omega(\mathbf{q}) e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}'} + \text{c.c.} \right] \phi(\mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (3.61)$$

Nesta expressão não incluímos o termo W_0 da Eq. (3.41) porque ele é uma quantidade que não depende explicitamente de ϕ e, portanto, não contribui para o cálculo de funções de correlação e utilizamos a transformada inversa de $\phi(\mathbf{r})$, sendo $\phi(\mathbf{r})$ real. As somas sobre \mathbf{k} podem ser feitas trivialmente, pois

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3.62)$$

o que nos leva a:

$$\begin{aligned}
 F_0[\phi] &= \frac{1}{2} \int d^3r \phi(\mathbf{r}) (-\gamma \nabla^2 + m^2) \phi(\mathbf{r}) \\
 &+ \frac{1}{4} \int d^3r \phi(\mathbf{r}) \left[\sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \omega(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + \text{c.c.} \right] \phi(\mathbf{r}) \\
 &= \frac{1}{2} \int d^3r \phi(\mathbf{r}) (-\gamma \nabla^2 + m^2) \phi(\mathbf{r}) \\
 &+ \frac{1}{2} \int d^3r \phi(\mathbf{r}) \left[\sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \omega(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \right] \phi(\mathbf{r}), \tag{3.63}
 \end{aligned}$$

em que empregamos as igualdades $\mathbf{k}^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = -\nabla^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ e $\omega^*(\mathbf{q}) = \omega(-\mathbf{q})$ (e também admitimos que se $\mathbf{q} \in \mathcal{S}$, então $-\mathbf{q} \in \mathcal{S}$ também). Por fim, escrevemos $F_0[\phi]$ como:

$$F_0[\phi] = \frac{1}{2} \int d^3r \phi(\mathbf{r}) [-\gamma \nabla^2 + m^2 + \bar{\omega}(\mathbf{r})] \phi(\mathbf{r}), \tag{3.64}$$

sendo que definimos

$$\bar{\omega}(\mathbf{r}) \equiv \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \omega(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \tag{3.65}$$

É importante notar que $\bar{\omega}(\mathbf{r})$ **não é** a transformada de Fourier de $\omega(\mathbf{q})$ pois o conjunto \mathcal{S} contém somente um número finito de valores **discretos** de momentos, i.e. no limite termodinâmico, esse conjunto continua sendo finito.

Para obtermos as funções de correlação da teoria a partir de um funcional gerador, acoplamos uma fonte externa $J(\mathbf{r})$ ao campo ϕ e definimos, de maneira usual [6]:

$$\begin{aligned}
 Z[J] &\equiv \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta(F_0[\phi] + F''[\phi]) + \int d^3r J(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})} \\
 &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta F_0[\phi] + \int d^3r J(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})} \left[1 + \frac{1}{2} (\beta F''[\phi])^2 + \dots \right], \tag{3.66}
 \end{aligned}$$

e Z é a função de partição MHTE dada na Eq. (3.59). As funções de correlação são obtidas por diferenciação de $Z[J]$ em relação a $J(\mathbf{r})$:

$$G(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \lim_{J(\mathbf{r}) \rightarrow 0} \frac{\delta^n Z[J]}{\delta J(\mathbf{r}_1) \dots \delta J(\mathbf{r}_n)}. \tag{3.67}$$

Consideremos agora o termo de ordem zero em $F''[\phi]$ na Eq. (3.66):

$$Z_0[J] \equiv \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta F_0[\phi] + \int d^3r J(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})}, \tag{3.68}$$

Neste caso, como o integrando acima é quadrático nos campos, podemos fazer as integrais funcionais exatamente. Para tal, definimos a matriz diagonal $\mathcal{M}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$:

$$\mathcal{M}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = [-\gamma\nabla^2 + m^2 + \bar{\omega}(\mathbf{r})] \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3.69)$$

a qual permite escrever $F_0[\phi]$ como:

$$F_0[\phi] = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \phi(\mathbf{r}) \mathcal{M}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}'). \quad (3.70)$$

Com isso, podemos escrever o resultado para Z_0 da seguinte forma – ver Apêndice C:

$$Z_0 = \frac{1}{\sqrt{\det \beta \mathcal{M}}}. \quad (3.71)$$

Os fatores numéricos constantes, resultantes da integração funcional, são irrelevantes e não foram escritos.

Completando quadrados – ver Apêndice C – obtemos similarmente:

$$\int \mathcal{D}\phi e^{-\beta F_0[\phi] + \int d^3r J(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})} = \frac{1}{\sqrt{\det \beta \mathcal{M}}} e^{\frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' J(\mathbf{r}) [\beta \mathcal{M}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]^{-1} J(\mathbf{r}')}. \quad (3.72)$$

Com esses resultados, temos, portanto:

$$Z_0[J] = e^{\frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' J(\mathbf{r}) [\beta \mathcal{M}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]^{-1} J(\mathbf{r}')}. \quad (3.73)$$

A função de dois pontos, em particular, é dada por:

$$\begin{aligned} \langle \phi(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}) \rangle_0 &\equiv G_0(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \lim_{J(\mathbf{r}), J(\mathbf{r}') \rightarrow 0} \frac{\delta^2 Z_0[J]}{\delta J(\mathbf{r}) \delta J(\mathbf{r}')} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{\mathcal{M}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \\ &= G_0(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.74)$$

Agora, devido à invariância translacional, $\bar{\omega}$ é independente de \mathbf{r} – este fato ocorre somente no caso de acoplamento de contato, $\sim \lambda \phi^4$. Para mostrar a independência de \mathbf{r} , partimos da definição de $\bar{\omega}(\mathbf{r})$, Eq. (3.65), usamos a Eq. (3.53), que define $\omega(\mathbf{q})$, e nesta usamos a transformada de Fourier inversa para $\tilde{\phi}(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned} \bar{\omega}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \omega(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \frac{3\lambda}{2} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left[\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle_0 \right] \\ &= \frac{3\lambda}{2} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left[\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V} \int d^3r' \int d^3r'' e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}' - i(\mathbf{k} - \mathbf{q})\cdot\mathbf{r}''} \langle \phi(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}'') \rangle_0 \right] \\ &= \frac{3\lambda}{2} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left[\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V} \int d^3r' \int d^3r'' e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}' - i(\mathbf{k} - \mathbf{q})\cdot\mathbf{r}''} G_0(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \right], \end{aligned} \quad (3.75)$$

nesta expressão usamos a Eq. (3.74), que se segue devido à invariância translacional, escrevemos $\langle \phi(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}'') \rangle_0 = G_0(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')$. Efetuando a soma sobre \mathbf{k} , usando a Eq. (3.62), obtemos:

$$\begin{aligned}
 \bar{\omega}(\mathbf{r}) &= \frac{3\lambda}{2} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left[\frac{1}{V} \int d^3r' \int d^3r'' \delta^{(3)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} G_0(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \right] \\
 &= \frac{3\lambda}{2} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left[\frac{1}{V} \int d^3r' e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} G_0(0) \right] \\
 &= \frac{3\lambda}{2} G_0(0) \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left[\frac{1}{V} \int d^3r' e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \right] \\
 &= \frac{3\lambda}{2} G_0(0).
 \end{aligned} \tag{3.76}$$

Portanto, a matriz $\mathcal{M}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ pode ser diagonalizada exatamente via transformada de Fourier. A partir da Eq. (3.74), temos a identidade:

$$\delta^{(3)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \beta \int d^3r'' \mathcal{M}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') G_0(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}). \tag{3.77}$$

Escrevendo a série de Fourier para $G_0(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$:

$$G_0(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \tilde{G}_0(\mathbf{k}), \tag{3.78}$$

e usando a Eq. (3.62) para a delta de Dirac na Eq. (3.77), obtemos:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}' - \mathbf{r})} &= \beta \int d^3r'' \mathcal{M}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'' - \mathbf{r})} \tilde{G}_0(\mathbf{k}) \\
 &= \beta \int d^3r'' \delta^{(3)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} [\gamma \mathbf{k}^2 + m^2 + (3\lambda/2) G_0(0)] \\
 &\quad \times e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'' - \mathbf{r})} \tilde{G}_0(\mathbf{k}) \\
 &= \beta \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}' - \mathbf{r})} [\gamma \mathbf{k}^2 + m^2 + (3\lambda/2) G_0(0)] \tilde{G}_0(\mathbf{k}).
 \end{aligned} \tag{3.79}$$

Com isto, obtemos:

$$\tilde{G}_0(\mathbf{k}) = \frac{T}{\gamma \mathbf{k}^2 + m^2 + (3\lambda/2) G_0(0)}, \tag{3.80}$$

em que escrevemos $1/\beta = T$. No espaço de configuração:

$$G_0(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \frac{T}{\gamma \mathbf{k}^2 + m^2 + (3\lambda/2) G_0(0)}. \tag{3.81}$$

Esta última equação nos leva a uma equação de *gap*:

$$G_0(0) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{T}{\gamma \mathbf{k}^2 + m^2 + (3\lambda/2) G_0(0)}. \quad (3.82)$$

Convertendo a soma em uma integral, obtemos:

$$G_0(0) = T \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\gamma \mathbf{k}^2 + m^2 + (3\lambda/2) G_0(0)}. \quad (3.83)$$

Note que esta integral é divergente ultravioleta – a divergência é linear; em termos de um diagrama de Feynman, ela corresponde a um diagrama do tipo *tadpole*. O diagrama *tadpole* é o gráfico da esquerda na Fig 3.1. Como será discutido no Capítulo 5, além desta divergência, na teoria de Ginzburg-Landau em três dimensões espaciais, há ainda uma divergência logarítmica, do tipo *setting-sun*, cujo diagrama é o gráfico da direita na Fig. 3.1. Essa divergência logarítmica somente aparece na contribuição de segunda ordem de $F''[\phi]$ em teoria de perturbação. Como veremos, essas divergências terão consequências nas simulações numéricas da equação de Ginzburg-Landau na presença de ruído em uma rede. Essas divergências implicarão numa sensibilidade dos resultados em relação ao espaçamento de rede utilizado. Para obtermos resultados independentes do espaçamento da rede, a energia livre deverá ser renormalizada. Na ausência de ruído (temperatura nula), não aparecem divergências na equação de Ginzburg-Landau. Isso será assunto de discussão detalhada no Capítulo 5.

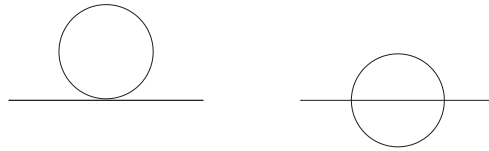


Figura 3.1: Gráficos divergentes da teoria de Ginzburg-Landau em três dimensões espaciais. O gráfico da esquerda é denominado *tadpole*; o da direita, *setting-sun*.

Correções ao resultado acima para a função de correlação podem ser obtidas a partir da Eq. (3.66). Não prosseguiremos com cálculos dessa natureza, pois nosso objetivo maior é o problema de não equilíbrio, que passaremos a discutir na próxima Seção.

Mostraremos agora que em primeira ordem $F''[\phi]$ é zero. Notamos, inicialmente,

que podemos escrever $F''[\phi]$ da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} F''[\phi] &= \frac{\lambda}{4} \int_{\mathcal{S}} d^3r \phi^4(\mathbf{r}) = \frac{\lambda}{4} \int d^3r \phi^4(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \int d^3r \bar{\omega}(\mathbf{r}) \phi^2(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{4} \int d^3r [\lambda \phi^2(\mathbf{r}) - 2\bar{\omega}(\mathbf{r})] \phi^2(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.84)$$

Usamos o símbolo $\int_{\mathcal{S}}$ para denotar a restrição sobre os momentos \mathbf{q} indicada na Eq. (3.43). O que fizemos acima foi subtrair o termo correspondente aos momentos $\mathbf{q} \in \mathcal{S}$ de maneira que em vez da integral $\int_{\mathcal{S}}$ podemos usar a integral completa, sem restrições. Fazendo uso da Eq. (3.76), podemos escrever $F''[\phi]$ como

$$F''[\phi] = \frac{\lambda}{4} \int d^3r [\phi^2(\mathbf{r}) - 3G_0(0)] \phi^2(\mathbf{r}). \quad (3.85)$$

Portanto, temos para a contribuição em primeira ordem:

$$\begin{aligned} \langle F''[\phi] \rangle_0 &= \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi F''[\phi] e^{-\beta F_0[\phi]} \\ &= \frac{\lambda}{4} \int d^3r \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi [\phi^4(\mathbf{r}) - 3G_0(0)\phi^2(\mathbf{r})] e^{-\beta F_0[\phi]}. \end{aligned} \quad (3.86)$$

Usando agora os resultados obtidos com o teorema de Wick:

$$\frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi \phi^4(\mathbf{r}) e^{-\beta F_0[\phi]} = 3G_0(0)G_0(0), \quad (3.87)$$

$$\frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi \phi^2(\mathbf{r}) e^{-\beta F_0[\phi]} = G_0(0). \quad (3.88)$$

Claramente, temos então que $\langle F''[\phi] \rangle_0 = 0$.

3.3 MHTE para transições de fase dinâmicas

Conforme discutido no início do presente Capítulo, para problemas de não equilíbrio (porém não muito afastados do equilíbrio), a energia livre a ser usada na equação de GLL é tomada como sendo da mesma forma que a energia livre de equilíbrio, mas com $\phi(\mathbf{r})$ substituído por $\Phi(\mathbf{r}, t)$ – a razão para mudarmos a notação do campo dinâmico para Φ ficará clara na discussão do próximo parágrafo. A energia livre do MHTE é composta da soma de três termos, $F[\Phi] = F_0[\Phi] + F'[\Phi] + F''[\Phi]$, como mostrado na Eq. (3.40). Como vimos, as contribuições de $F'[\Phi]$ para a função de partição se anulam em qualquer ordem de teoria de perturbação e $F''[\Phi]$ somente contribui a partir de segunda ordem. Para problemas de não equilíbrio, a energia livre a ser empregada na equação de GLL, portanto, será composta do termo $F_0[\Phi]$ e o termo $F''[\Phi]$ deverá contribuir somente a partir de segunda ordem num tratamento

perturbativo. A discussão abaixo está limitada para o caso em que $m^2 > 0$; quando $m^2 < 0$, é preciso manipular a expressão da energia livre de modo que ela reflita o fato de que o valor de equilíbrio é diferente de zero. O que estamos dizendo é que a teoria de perturbação deve ser feita próxima ao valor de equilíbrio - isso ficará um pouco mais claro adiante.

Inicialmente, antes de implementar a teoria de perturbação, escrevemos $F''[\Phi]$ como na Eq. (3.85):

$$\begin{aligned} F''[\Phi] &= \frac{\lambda}{4} \int_{\mathcal{S}} d^3r \Phi^4(\mathbf{r}, t) = \frac{\lambda}{4} \int d^3r \Phi^4(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{2} \int d^3r \bar{\omega}(\mathbf{r}, t) \Phi^2(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{1}{4} \int d^3r [\lambda \Phi^2(\mathbf{r}, t) - 2\bar{\omega}(\mathbf{r}, t)] \Phi^2(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (3.89)$$

em que explicitamos o fato de que $\bar{\omega}$ passa a depender do tempo, devido à Eq. (3.53) que define $\omega(\mathbf{q})$ em termos do parâmetro de ordem. A equação de GLL no MHTE é, portanto, dada por:

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F[\Phi]}{\delta \Phi(\mathbf{r}, t)} + \zeta(\mathbf{r}, t), \quad (3.90)$$

com $F[\Phi] = F_0[\Phi] + F''[\Phi]$. A seguir escrevemos Φ como:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) + \bar{\phi}(\mathbf{r}, t), \quad (3.91)$$

em que $\phi(\mathbf{r}, t)$ é solução da equação de GLL com a energia livre $F_0[\Phi]$, e $\bar{\phi}(\mathbf{r}, t)$ deverá ser obtido em teoria de perturbação, em que $F''[\Phi]$ é a perturbação. Tomando como condição inicial

$$\Phi(\mathbf{r}, 0) = \phi(\mathbf{r}, 0) \equiv \phi_0(\mathbf{r}), \quad (3.92)$$

temos que

$$\bar{\phi}(\mathbf{r}, 0) = 0. \quad (3.93)$$

Para organizar a série perturbativa, introduzimos um parâmetro g como:

$$F[\Phi] \rightarrow F_g[\Phi] \equiv F_0[\Phi] + \frac{g}{4} \int d^3r [\lambda \Phi^2(\mathbf{r}, t) - 2\bar{\omega}(\mathbf{r}, t)] \Phi^2(\mathbf{r}, t), \quad (3.94)$$

o qual será tomado $g = 1$ ao final dos cálculos. O parâmetro g servirá de guia na contagem de potências com que $F''[\Phi]$ contribuirá para $\bar{\phi}(\mathbf{r}, t)$. Especificamente, expandindo $\bar{\phi}(\mathbf{r}, t)$ como uma série de potências em g :

$$\begin{aligned} \bar{\phi}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{n=1} g^n \phi_n(\mathbf{r}, t) \\ &= g \phi_1(\mathbf{r}, t) + g^2 \phi_2(\mathbf{r}, t) + \dots, \end{aligned} \quad (3.95)$$

e substituindo esta expansão na Eq. (3.90), obtemos

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma [-\gamma \nabla^2 + m^2 + \bar{\omega}(\mathbf{r}, t)] \phi(\mathbf{r}, t) + \zeta(\mathbf{r}, t), \quad (3.96)$$

e

$$\frac{\partial \phi_n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma [-\gamma \nabla^2 + m^2 + \bar{\omega}(\mathbf{r}, t)] \phi_n(\mathbf{r}, t) - \Gamma D_n(\phi, \bar{\phi}), \quad (3.97)$$

e as quantidades D_n são obtidas a partir da substituição da expansão do parâmetro de ordem em potências de g na derivada funcional de F'' em relação a Φ ; os quatro primeiros termos são dados por:

$$D_1(\phi, \bar{\phi}) = \lambda \phi^3(\mathbf{r}, t) - \bar{\omega}(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t), \quad (3.98)$$

$$D_2(\phi, \bar{\phi}) = [3\lambda \phi^2(\mathbf{r}, t) - \bar{\omega}(\mathbf{r}, t)] \phi_1(\mathbf{r}, t), \quad (3.99)$$

$$D_3(\phi, \bar{\phi}) = [3\lambda \phi^2(\mathbf{r}, t) - \bar{\omega}(\mathbf{r}, t)] \phi_2(\mathbf{r}, t) + 3\lambda \phi(\mathbf{r}, t) \phi_1^2(\mathbf{r}, t), \quad (3.100)$$

$$D_4(\phi, \bar{\phi}) = [3\lambda \phi^2(\mathbf{r}, t) - \bar{\omega}(\mathbf{r}, t)] \phi_3(\mathbf{r}, t) + 3\lambda \phi_1^3(\mathbf{r}, t) \\ + 6\lambda \phi(\mathbf{r}, t) \phi_1(\mathbf{r}, t) \phi_2(\mathbf{r}, t). \quad (3.101)$$

Note que, devido ao fato de que um dado D_n depende somente das ϕ_{n-1} , as equações diferenciais para as ϕ_n são equações lineares não homogêneas. Por exemplo, as equações para $\phi_1(\mathbf{r}, t)$ e $\phi_2(\mathbf{r}, t)$ são dadas explicitamente por:

$$-\frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \phi_1(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [-\gamma \nabla^2 + m^2 + \bar{\omega}(\mathbf{r}, t)] \phi_1(\mathbf{r}, t) + [\lambda \phi^3(\mathbf{r}, t) - \bar{\omega}(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t)], \quad (3.102)$$

e

$$-\frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \phi_2(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [-\gamma \nabla^2 + m^2 + \bar{\omega}(\mathbf{r}, t)] \phi_2(\mathbf{r}, t) + [3\lambda \phi^2(\mathbf{r}, t) - \bar{\omega}(\mathbf{r}, t)] \phi_1(\mathbf{r}, t). \quad (3.103)$$

Por completeza e para encerrar esta discussão, escreveremos a Eq. (3.96) no espaço dos momentos. Especificamente, usando na Eq. (3.96) as transformadas de Fourier do parâmetro de ordem e da função de ruído:

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{\phi}(\mathbf{k}, t), \quad (3.104)$$

$$\zeta(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{\zeta}(\mathbf{k}, t), \quad (3.105)$$

facilmente obtemos:

$$\frac{\partial \tilde{\phi}(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = -\Gamma [\gamma k^2 + m^2 + 3\lambda G_0(t)/2] \tilde{\phi}(\mathbf{k}, t) + \tilde{\zeta}(\mathbf{k}, t), \quad (3.106)$$

na qual usamos o fato de que para a teoria $\lambda\phi^4$:

$$\bar{\omega}(\mathbf{r}, t) = \bar{\omega}(t) = \frac{3\lambda}{2} G_0(t) = \frac{3\lambda}{2} \langle \phi(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t) \rangle_0. \quad (3.107)$$

3.4 MHTE para energias livres não locais

Para explicar a aplicação do MHTE no contexto de fenômenos de transições de fase dinâmicas, a discussão acima foi deliberadamente feita para uma energia livre de Ginzburg-Landau da forma polinomial $f_0(\phi) = a\phi^2 + b\phi^4$, com a e b sendo constantes (em geral dependentes da temperatura). Essa energia livre obviamente leva a uma equação de GLL não linear, mas local, no sentido de que ela pode ser escrita inteiramente em termos de uma única coordenada espacial. Contudo, em inúmeras situações de interesse físico, nos defrontamos com equações de GLL com energias livres muito mais complicadas. Por exemplo, em descrições da dinâmica dissipativa de não equilíbrio de sistemas de muitos corpos através de métodos da teoria quântica de campos [20], a energia livre *coarse-grained* efetiva em geral é não local nas variáveis espaciais e apresenta memória. Isto é, a energia livre $f(\phi)$ depende de funções complicadas de ϕ envolvendo integrais sobre o espaço e o tempo – muitas vezes estas integrais são sobre funções de distribuição térmicas envolvendo auto-energias que dependem do parâmetro de ordem. Um exemplo, de muito interesse atual, são equações de Gross-Pitaevski estocásticas – os artigos da Ref. [42] foram os primeiros a derivar essas equações a partir de um Hamiltoniano microscópico que descreve a interação entre os átomos. Em geral, equações de GLL desse tipo são praticamente intratáveis numericamente se aproximações drásticas não forem feitas. O MHTE pode ajudar no tratamento sistemático dessas não localidades, como será visto a seguir.

Na presente Tese nos restringiremos a energias livres que sejam não locais no espaço. Escrevemos a energia livre de Ginzburg-Landau como

$$F[\phi] = \int d^3r \left\{ \frac{1}{2} \gamma (\nabla\phi)^2 + f_0(\phi) \right\} + U[\phi], \quad (3.108)$$

$f_0(\phi)$ foi dado na Eq. (3.14) e $U[\phi]$ é um funcional não local de ϕ . Assim, a equação de GLL pode ser escrita na forma:

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma (-\gamma\nabla^2 + m^2) \phi(\mathbf{r}, t) - \Gamma\lambda\phi^3(\mathbf{r}, t) - \Gamma \frac{\delta U[\phi]}{\delta\phi} + \zeta(\mathbf{r}, t). \quad (3.109)$$

Em geral, os termos “usuais”, proporcionais a m^2 e λ , correspondem ao potencial clássico ou de temperatura zero num tratamento de teoria quântica de campos, e $U[\phi]$ contém as correções quânticas e de temperatura finita. Por simplicidade, vamos

supor novamente que as propriedades da fonte de ruído são as de ruído branco – dadas pelas Eqs. (3.29) e (3.30). Em geral, em derivações de equações de GLL efetivas por métodos de teoria quântica de campos, a correlação de ruído é do tipo ruído colorido, e muitas vezes, é do tipo ruído multiplicativo – ruído colorido significa que a função de correlação não é uma função delta de Dirac, e ruído multiplicativo significa que a função de correlação do ruído depende do parâmetro de ordem. Neste último caso, o tratamento do MHTE deve ser adaptado consistentemente.

A possibilidade de se aplicar o MHTE depende da forma explícita de $U[\phi]$. Um exemplo em que o método poderia ser aplicado diretamente é:

$$U[\phi] = \frac{1}{4} \int d^3r_1 \cdots d^3r_4 \mathcal{U}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \phi(\mathbf{r}_1, t) \phi(\mathbf{r}_2, t) \phi(\mathbf{r}_3, t) \phi(\mathbf{r}_4, t), \quad (3.110)$$

em que \mathcal{U} é um *kernel* que depende somente das coordenadas espaciais - não depende, em particular, dos campos ϕ . Situações físicas em que uma energia livre dessa forma aparece serão discutidas mais adiante. Para este caso, a equação de GLL seria dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= -\Gamma (-\gamma \nabla^2 + m^2) \phi(\mathbf{r}, t) - \Gamma \lambda \phi^3(\mathbf{r}, t) \\ &- \Gamma \int d^3r_2 \cdots d^3r_4 \mathcal{U}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \phi(\mathbf{r}_2, t) \phi(\mathbf{r}_3, t) \phi(\mathbf{r}_4, t) + \zeta(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3.111)$$

sendo que supusemos que a função $\mathcal{U}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)$ é simétrica sob permutações de $\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_4$.

Para sistemas invariantes sob translações espaciais,

$$\mathcal{U}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \delta^{(3)}(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) \delta^{(3)}(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2) \mathcal{U}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad (3.112)$$

a energia livre não local pode ser escrita como:

$$U[\phi] = \frac{1}{4} \int d^3r_1 d^3r_2 \mathcal{U}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \phi^2(\mathbf{r}_1) \phi^2(\mathbf{r}_2). \quad (3.113)$$

A correspondente equação de GLL toma, então, a forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= -\Gamma (-\gamma \nabla^2 + m^2) \phi(\mathbf{r}, t) - \Gamma \lambda \phi^3(\mathbf{r}, t) \\ &- \Gamma \phi(\mathbf{r}, t) \int d^3r' \mathcal{U}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \phi^2(\mathbf{r}', t) + \zeta(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.114)$$

Claramente, o termo na integral complica a solução numérica da equação pois em cada ponto do espaço e em cada instante de tempo, é necessário fazer uma integral sobre toda a rede.

Para implementarmos o MHTE, notamos que a energia livre dada na Eq. (3.113) é formalmente idêntica ao Hamiltoniano da teoria quântica de muitos corpos dado

na Eq. (2.1) – aqui, $\mathcal{U}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ é similar ao potencial de interação $v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ entre as partículas do caso quântico. Como na Seção acima, a diferença principal está no fato de que os campos $\phi(\mathbf{r})$ não são operadores, como são os campos $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$. Portanto, em vista desta analogia, podemos empregar os mesmos passos que foram feitos no caso quântico para o presente caso.

Especificamente, fazendo as mesmas manipulações que na Seção 3.2 acima, em particular manipulando os momentos como feito ao final do Capítulo 2, podemos escrever a parte quadrática nos campos de $F[\phi]$, que denotamos por $F_0^{nl}[\phi]$, como:

$$\begin{aligned} F_0^{nl}[\phi] &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\gamma \mathbf{k}^2 + m^2) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}} \left[w(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \text{c.c.} \right], \end{aligned} \quad (3.115)$$

na qual $w(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ é dado por:

$$w(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}'} \left[3\lambda + \tilde{\mathcal{U}}(\mathbf{q}) + 2\tilde{\mathcal{U}}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \right] g^*(\mathbf{k}', \mathbf{q}). \quad (3.116)$$

Obviamente, no presente caso também existem os termos similares aos equivalentes quânticos $\hat{H}(\mathbf{q} \notin \mathcal{S})$ e \hat{H}' das Eqs. (2.54) e (2.30) - não os repetimos aqui porque eles terão o mesmo tratamento que os equivalentes quânticos.

Como no caso quântico, o princípio variacional de Gibbs leva à determinação das funções variacionais $g(\mathbf{k}, \mathbf{q})$. Para o presente caso, essas funções também são dadas pela Eq. (3.52). A diferença crucial com relação a uma energia livre local do tipo $\sim \lambda \phi^4$ é que $w(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ depende também de \mathbf{k} :

$$w(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}'} \left[3\lambda + \tilde{\mathcal{U}}(\mathbf{q}) + 2\tilde{\mathcal{U}}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \right] \langle \tilde{\phi}^*(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}') \rangle_0. \quad (3.117)$$

Notamos também que além do termo direto $\tilde{\mathcal{U}}(\mathbf{q})$, como no caso de um acoplamento $\sim \lambda \phi^4$, há também um termo de troca, $\tilde{\mathcal{U}}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$. Deve ficar claro que esses termos direto e de troca **não** são de natureza quântica, eles simplesmente existem devido às duas diferentes maneiras que os termos da expansão de Fourier de $\phi^2(\mathbf{r}_1)\phi^2(\mathbf{r}_2)$ na Eq. (3.113) podem ser arranjados.

Para problemas de equilíbrio, o MHTE proporciona claramente uma enorme simplificação, pois transforma o problema não local, insolúvel analiticamente e complicadíssimo numericamente, em um problema em que a energia livre é quadrática nos campos. Essa característica torna o problema exatamente solúvel e as funções de correlação podem ser obtidas de maneira fechada. E mais do que isso: correções às soluções exatas podem ser incluídas de maneira sistemática via teoria de perturbação, como discutido nas Seções anteriores. Obviamente, na ausência de soluções

numéricas do problema não local, a única maneira de avaliar o desempenho e acuidade das aproximações obtidas pelo MHTE é comparar resultados de cálculos detalhados com dados experimentais.

A seguir, mostraremos que o MHTE também proporciona enormes simplificações no tratamento da equação de GLL do problema. Simplificações consideráveis são obtidas mesmo quando trabalhamos apenas com o termo direto com $\mathbf{q} = 0$. Para tal, procederemos como no caso anterior e usaremos a transformada de Fourier inversa para os campos $\tilde{\phi}(\mathbf{k})$. Iniciamos com a energia livre da Eq. (3.115) com $\mathbf{q} = 0$ e usando o termo direto:

$$F_0^{nl}[\phi] = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \phi(\mathbf{r}) \mathcal{M}^{nl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}'), \quad (3.118)$$

com

$$\mathcal{M}^{nl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = [-\gamma \nabla^2 + m^2 + \lambda' G_0(0)] \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3.119)$$

e

$$\lambda' = \frac{1}{2} [3\lambda + \tilde{\mathcal{U}}(0)]. \quad (3.120)$$

Claramente, o problema da não localidade fica reduzido a uma “renormalização” da constante λ . Convém lembrar que:

$$\tilde{\mathcal{U}}(0) = \frac{1}{V} \int d^3r \mathcal{U}(\mathbf{r}). \quad (3.121)$$

A equação de GLL no espaço de coordenadas fica, então, sendo dada por:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma [-\gamma \nabla^2 + m^2 + \lambda' G_0(0, t)] \phi(\mathbf{r}, t) + \zeta(\mathbf{r}, t). \quad (3.122)$$

Correções podem ser obtidas sistematicamente como no caso local, discutido na Seção acima.

Vamos encerrar o presente Capítulo neste ponto. No próximo Capítulo discutiremos a aplicação das técnicas aqui apresentadas no contexto de teorias quânticas de campos relativísticas e teorias de muitos corpos para sistemas fermiônicos não relativísticos.

Capítulo 4

MHTE para teorias quânticas

Neste Capítulo discutiremos a aplicação do MHTE para teorias quânticas. Na primeira parte deste Capítulo propomos empregar o MHTE no contexto da formulação de integrais funcionais no espaço euclidiano dessas teorias. Conforme discutido anteriormente, a formulação no espaço euclidiano de teorias quânticas de campos relativísticos, como a cromodinâmica quântica (QCD), é a formulação adequada em simulações numéricas de larga escala empregando métodos de Monte Carlo [6]. No entanto, na presença de um potencial químico (sistemas de muitas partículas), a ação no espaço euclidiano se torna complexa e o método de Monte Carlo perde aplicabilidade. Este fato é verdade tanto para teorias fermiônicas como também para teorias bosônicas. Em vista disto, a formulação de métodos de aproximação alternativos ao método de Monte Carlo é de extrema importância para problemas de muitas partículas. Conforme veremos, o MHTE pode ser um desses esquemas de aproximação alternativo, o que seria muito importante neste contexto.

A seguir, formularemos o MHTE para uso no contexto do método da quantização estocástica de Parisi e Wu [22]. Conforme dito no Capítulo 1, este método de quantização estocástica tem sido usado recentemente para tratar de problemas com ações complexas, como por exemplo sistemas de muitas partículas com um potencial químico. Em princípio, como mostrado nas Refs. [29, 30], o método da quantização estocástica pode ser aplicado a esses problemas. Porém, é preciso cautela para lidar com a existência de instabilidades na solução das equações complexas de GLL associadas ao problema [23]. Contudo, como mostrado na Ref. [26], essas instabilidades podem ser eliminadas empregando pequenos passos do parâmetro τ na evolução do sistema. Isto, no entanto, gera um custo computacional muito grande e, conseqüentemente, a necessidade de recursos computacionais que não estavam facilmente disponíveis nos anos 80.

Outro desenvolvimento recente muito importante no emprego da quantização estocástica ao problema de ações complexas foi a constatação [27] de que uma apro-

ximação de campo médio neste contexto para o problema do gás de Bose interagente a temperatura zero fornece resultados muito bons, em comparação com resultados da quantização estocástica completa, sem a aproximação de campo médio [28]. Isto significa que o MHTE, que incorpora correlações além daquelas de campo médio, pode fornecer um método de aproximação eficiente para essa classe de problemas. Dentre esses problemas, um notório é o da QCD para sistemas de muitos *quarks*, isto é, para problemas com um potencial químico bariônico diferente de zero.

Conforme já dito, nosso objetivo aqui é formular o MHTE para problemas de quantização estocástica. Não vamos, no entanto, tratar do problema de ações complexas, pois isso nos levaria muito além dos objetivos iniciais desta Tese. Entretanto, deve ficar claro que, a partir dos desenvolvimentos a seguir, a implementação do método pode ser feita de maneira similar ao que apresentaremos. Resultados parciais da presente proposta aparecerão publicados na Ref. [34].

Na terceira parte deste Capítulo, consideraremos o MHTE no contexto da teoria quântica de muitos corpos para sistemas fermiônicos não relativísticos. A discussão aqui segue a do *paper* de Girardeau [18]. Nosso interesse principal é formular o MHTE para um sistema de férmions confinados por um potencial externo (armadilha). Nossa formulação do MHTE para este problema consiste em incluir um conjunto finito de momentos \mathcal{Q} que leva a um novo esquema de aproximação em que são incorporadas correlações entre as partículas além das tradicionais correlações BCS. Com este objetivo em mente, iniciamos a discussão para um sistema infinito. Os resultados para o sistema infinito servirão de base para a implementação do MHTE para um sistema aprisionado por um potencial externo. Nossa proposta levará a um conjunto de equações que são generalizações das tradicionais equações de Bogoliubov-de Gennes [35].

4.1 MHTE em teorias quânticas relativísticas

Nesta Seção formularemos o MHTE para modelos de teorias quânticas de campos relativísticos envolvendo um campo escalar real. Especificamente, consideremos o funcional gerador de funções de Green no espaço de Minkowski [21] (vamos tomar a velocidade da luz c igual à unidade):

$$Z_M[\phi] = \int \mathcal{D}\phi e^{\frac{i}{\hbar}S_M[\phi]}, \quad (4.1)$$

em que o subíndice M indica quantidade do espaço de Minkowski, $S_M[\phi]$ é a ação:

$$S_M[\phi] = \int d^4x_M \mathcal{L}_M(\phi), \quad (4.2)$$

e a densidade lagrangiana, referente a uma partícula escalar com massa m é escrita genericamente como:

$$\mathcal{L}_M(\phi) = \frac{1}{2} [(\partial_\mu \phi)^2 - (m/\hbar)^2 \phi^2] - V(\phi), \quad (4.3)$$

em que $V(\phi)$ representa a autointeração. Antes de prosseguirmos, chamamos a atenção para uma questão importante quando se trata de colocar os fatores de \hbar corretamente. Apesar de ser prática comum dizer que na integral de Feynman a ação $S[\phi]$ é a ação clássica do problema, para que m signifique a massa da partícula e tenha as dimensões corretas, a equação de Klein-Gordon correspondente deve ser escrita como (em unidades em que $c = 1$):

$$[\partial_\mu^2 + (m/\hbar)^2] \phi = 0, \quad (4.4)$$

e, por isso, o fator \hbar no termo de massa na Eq. (4.3) – ver discussão na página 288 da Ref. [43].

A seguir, escreveremos esta ação no espaço euclidiano. Para isto, tomamos as coordenadas do espaço-tempo de Minkowski $x_M = (t, \mathbf{x}) = (x^0 = t, x^1, x^2, x^3)$ e fazemos $t \rightarrow -ix^4$, com $x^4 > 0$, o que nos leva a:

$$\begin{aligned} (\partial_\mu \phi)(\partial^\mu \phi) &= \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 - (\nabla \phi)^2 \\ &\rightarrow - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x^4} \right)^2 - (\nabla \phi)^2 \equiv -(\nabla_E \phi)^2, \end{aligned} \quad (4.5)$$

e

$$\begin{aligned} \int d^4 x_M &= \int dt \int dx^1 \int dx^2 \int dx^3 \\ &\rightarrow -i \int dx^1 \int dx^2 \int dx^3 \int dx^4 \equiv -i \int d^4 x_E, \end{aligned} \quad (4.6)$$

com $x_E \equiv x = (x^1, x^2, x^3, x^4)$. Portanto, a densidade lagrangiana pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_M(\phi) &= \frac{1}{2} \left[(\partial_\mu \phi)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{m}{\hbar} \right)^2 \phi^2 \right] - V(\phi) \\ &\rightarrow -\frac{1}{2} (\nabla_E \phi)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{m}{\hbar} \right)^2 \phi^2 - V(\phi) \equiv -\mathcal{L}_E(\phi). \end{aligned} \quad (4.7)$$

Logo, o fator $iS_M[\phi]$ que aparece no integrando da integral funcional da Eq. (4.1) pode ser escrito como

$$\begin{aligned} iS_M[\phi] &= i \int d^4 x_M \mathcal{L}_M(\phi) \\ &\rightarrow i \left(-i \int d^4 x_E \right) [-\mathcal{L}_E(\phi)] = - \int d^4 x_E \mathcal{L}_E(\phi) \equiv -S_E[\phi]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Daqui para frente, **não** vamos mais usar o subíndice E para indicar quantidades do espaço euclidiano e escrevemos o funcional gerador neste espaço como:

$$Z[\phi] = \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{\hbar} S[\phi]}. \quad (4.9)$$

Por completeza, também escreveremos explicitamente a ação no espaço euclidiano:

$$\begin{aligned} S[\phi] &= \int d^4x \left[\frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{m}{\hbar} \right)^2 \phi^2 + V(\phi) \right] \\ &= \int d^4x \left[-\frac{1}{2} \phi \nabla^2 \phi + \frac{1}{2} \left(\frac{m}{\hbar} \right)^2 \phi^2 + V(\phi) \right], \end{aligned} \quad (4.10)$$

com

$$\nabla^2 = \sum_{i=1}^4 \frac{\partial^2}{\partial (x^i)^2}. \quad (4.11)$$

Portanto, todas as manipulações feitas no Capítulo 3 que levaram à energia livre MHTE de Ginzburg-Landau podem ser feitas para a ação euclidiana $S[\phi]$ da teoria quântica de campos relativísticos.

Para introduzirmos a notação e apresentarmos o problema, discutiremos a situação mais simples de um campo escalar real com uma autointeração $V(\phi) \sim \phi^4$. A abordagem será um pouco repetitiva em alguns aspectos em relação ao problema da mecânica estatística clássica estudado anteriormente, mas julgamos necessária por completeza de apresentação e para salientar as diferenças qualitativas entre eles. Especificamente, tomaremos

$$V(\phi) = \frac{\lambda}{4} \phi^4. \quad (4.12)$$

Note que na convenção usual da teoria quântica de campos relativística [21], é tradição usar $4!$ em vez de 4 na Eq. (4.12). Aqui não seguiremos essa tradição para facilitar comparações com o que foi discutido nos Capítulos anteriores. Também, daqui pra frente usaremos unidades em que $\hbar = 1$; na Seção 4.2, voltaremos a inserir o fator \hbar .

Vamos considerar o sistema contido em um volume euclidiano V em d dimensões; vamos deixar d arbitrário por conveniência futura. Introduzimos a transformada de Fourier discreta

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{ik \cdot x} \tilde{\phi}(k), \quad (4.13)$$

k é o momento no espaço euclidiano, e $k \cdot x = k^1 x^1 + k^2 x^2 + \dots + k^d x^d$. Conforme já dito, as mesmas manipulações feitas no caso da energia livre de Ginzburg-Landau podem ser feitas na ação euclidiana acima. Essas manipulações permitem reescrever

a ação do espaço euclidiano como na Eq. (3.40), em que, obviamente, a energia livre $F[\phi]$ é substituída por $S[\phi]$. O significado do conjunto \mathcal{S} é similar ao caso da mecânica estatística, só que os momentos aqui são os momentos euclidianos em d dimensões. Portanto, podemos escrever imediatamente:

$$S[\phi] = S_0[\phi] + S'[\phi] + S''[\phi], \quad (4.14)$$

sendo que

$$\begin{aligned} S_0[\phi] &= U_0[g^*, g] + \frac{1}{2} \sum_k E(k) \tilde{\phi}^*(k) \tilde{\phi}(k) \\ &+ \frac{3\lambda}{8V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_k [g^*(k', q) \rho(k, q) + \text{c.c.}], \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$S'[\phi] = \frac{3\lambda}{8V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{k, k'} [\rho^*(k, q) - g^*(k, q)] [\rho(k', q) - g(k', q)], \quad (4.16)$$

$$S''[\phi] = \frac{\lambda}{4V} \sum_{\mathbf{q} \notin \mathcal{S}} \sum_{k, k'} \tilde{\phi}^*(k+q) \tilde{\phi}^*(k'-q) \tilde{\phi}(k) \tilde{\phi}(k'), \quad (4.17)$$

$$E(k) = k^2 + m^2 \text{ e}$$

$$\rho(k, q) = \tilde{\phi}^*(k) \tilde{\phi}(k+q), \quad (4.18)$$

$$U_0[g^*, g] = -\frac{3\lambda}{8V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{k, k'} g^*(k, q) g(k', q). \quad (4.19)$$

O princípio variacional para a determinação das funções $g(k, q)$ é formalmente igual ao discutido anteriormente. Na teoria quântica de campos relativísticos, o análogo ao potencial termodinâmico Ω é o funcional gerador de funções de Green conexas, denotado por $W[\phi]$ e relacionado ao funcional gerador $Z[\phi]$ por [21] (note que estamos usando $\hbar = 1$, e o sinal de menos abaixo é questão de conveniência):

$$W[\phi] = -\ln Z[\phi] = -\ln \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]}. \quad (4.20)$$

Com essas indentificações, temos que o princípio variacional aplicado à função $W[\phi]$, analogamente ao princípio variacional de Gibbs aplicado ao potencial Ω , é dado por:

$$W[\phi] \leq W_0[\phi] + \langle S'[\phi] \rangle_0 + \langle S''[\phi] \rangle_0 \equiv W_{var}. \quad (4.21)$$

$W[\phi]$ é o funcional gerador exato, dado em termos da ação completa da teoria $S[\phi]$ como na Eq. (4.20), com

$$W_0[\phi] = -\ln \int \mathcal{D}\phi e^{-S_0[\phi]}, \quad (4.22)$$

$$\langle \dots \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi (\dots) e^{-S_0[\phi]}, \quad (4.23)$$

e

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi e^{-S_0[\phi]}. \quad (4.24)$$

Em vista da similaridade formal entre as teorias, está claro que a contribuição de $S'[\phi]$ é desprezível para o funcional $W[\phi]$ em teoria de perturbação em todas as ordens, e a de $S''[\phi]$ é desprezível em primeira ordem; portanto: $W[\phi] \leq W_0[\phi]$. Isto significa que o funcional $W_0[\phi]$ fornece um limite superior variacional para a funcional gerador exato $W[\phi]$. Também, como no caso da mecânica estatística, a equação de *gap* para as funções $g(k, q)$ é dada por

$$\begin{aligned} g(k, q) &= \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi \rho(k, q) e^{-S_0[\phi]} \\ &= \langle \rho(k, q) \rangle_0 \\ &= \langle \tilde{\phi}^*(k) \tilde{\phi}(k+q) \rangle_0. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Portanto, temos que

$$W[\phi] = -\ln Z[\phi] = -\ln \int \mathcal{D}\phi e^{-S_0[\phi]} \left[1 + \frac{1}{2} (S''[\phi])^2 + \dots \right]. \quad (4.26)$$

Além disso, as funções de Green euclidianas de n pontos (também conhecidas como funções de Schwinger [6]), que denotaremos por $\Delta(x_1, x_2, \dots, x_n)$ para diferenciar das funções de correlação da mecânica estatística, podem ser obtidas a partir de

$$\Delta(x_1, \dots, x_n) = \lim_{J(x) \rightarrow 0} \frac{\delta^n Z[J]}{\delta J(x_1) \dots \delta J(x_n)}. \quad (4.27)$$

sendo que

$$Z[J] \equiv \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi e^{-S_0[\phi] + \int dx J(x)\phi(x)} \left[1 + \frac{1}{2} (S''[\phi])^2 + \dots \right], \quad (4.28)$$

com Z dada por:

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S_0[\phi]} \left[1 + \frac{1}{2} (S''[\phi])^2 + \dots \right]. \quad (4.29)$$

Como $S_0[\phi]$ é quadrática nos campos, Z_0 pode ser integrada exatamente:

$$Z_0 = \frac{1}{\sqrt{\det \mathcal{M}}}. \quad (4.30)$$

com

$$\mathcal{M}(x-x') = [-\nabla^2 + m^2 + (3\lambda/2) \Delta_0(0)] \delta^{(d)}(x-x'), \quad (4.31)$$

em que

$$\Delta_0(x-x') = \langle \phi(x)\phi(x') \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi \phi(x)\phi(x') e^{-S_0[\phi]}. \quad (4.32)$$

Para escrevermos o resultado dado na Eq. (4.31), fizemos uso dos resultados obtidos no Capítulo 3, em particular, das Eqs. (3.71) e (3.76). A função de Green também pode ser colocada na forma da Eq. (3.83):

$$\Delta_0(x-x') = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{e^{ik \cdot (x-x')}}{k^2 + m^2 + (3\lambda/2) \Delta_0(0)}. \quad (4.33)$$

A função de Green euclidiana pode ser calculada em teoria de perturbação, em que a perturbação é o termo $S''[\phi]$. Para implementarmos essa perturbação de maneira prática, escrevemos $S''[\phi]$ como – ver Eq. (3.85):

$$S''[\phi] = \frac{\lambda}{4} \int d^d x [\phi^2(x) - 3\Delta_0] \phi^2(x), \quad (4.34)$$

e para facilitar escrevemos $\Delta_0 = \Delta_0(0)$. Assim, a primeira correção não trivial à função de Green euclidiana $\Delta(x, x')$, que denotamos por $\Delta^{(2)}(x, x')$, pode ser calculada a partir de

$$\Delta^{(2)}(x, x') = \frac{1}{Z^{(2)}[\phi]} \int \mathcal{D}\phi \phi(x)\phi(x') \left[1 + \frac{1}{2} (S''[\phi])^2 \right] e^{-S_0[\phi]}, \quad (4.35)$$

com

$$\begin{aligned} Z^{(2)}[\phi] &= \int \mathcal{D}\phi \left[1 + \frac{1}{2} (S''[\phi])^2 \right] e^{-S_0[\phi]} = Z_0 + \frac{1}{2} \int \mathcal{D}\phi (S''[\phi])^2 e^{-S_0[\phi]} \\ &= Z_0 \left[1 + \frac{1}{2} \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi (S''[\phi])^2 e^{-S_0[\phi]} \right] \\ &= Z_0 \left[1 + \frac{1}{2} \langle (S''[\phi])^2 \rangle_0 \right], \end{aligned} \quad (4.36)$$

e claramente:

$$\langle (S''[\phi])^2 \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi (S''[\phi])^2 e^{-S_0[\phi]}. \quad (4.37)$$

Ao calcular o numerador da Eq. (4.35), surgirão contribuições desconectadas (produtos de funções de Green que não dependem nem de x , nem de x'), as quais são canceladas por contribuições que vêm do denominador $1/Z^{(2)}[\phi]$, o qual deve ser expandido consistentemente com a ordem que se está calculando, como:

$$\frac{1}{Z^{(2)}[\phi]} = \frac{1}{Z_0} \left[1 - \frac{1}{2} \langle (S''[\phi])^2 \rangle_0 \right]. \quad (4.38)$$

Com isto, temos que:

$$\begin{aligned} \Delta^{(2)}(x, x') &= \frac{1}{Z_0} \left[\int \mathcal{D}\phi \phi(x)\phi(x') e^{-S_0[\phi]} + \frac{1}{2} \int \mathcal{D}\phi \phi(x)\phi(x') (S''[\phi])^2 e^{-S_0[\phi]} \right] \\ &\quad \times \left[1 - \frac{1}{2} \langle (S''[\phi])^2 \rangle_0 \right] \\ &= \left[\Delta_0(x-x') + \frac{1}{2} \langle \phi(x)\phi(x') (S''[\phi])^2 \rangle_0 \right] \left[1 - \frac{1}{2} \langle (S''[\phi])^2 \rangle_0 \right]. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Há um único termo desconectado em $\langle \phi(x)\phi(x') (S''[\phi])^2 \rangle_0$, o qual é dado por (pelo teorema de Wick):

$$\left[\langle \phi(x)\phi(x') (S''[\phi])^2 \rangle_0 \right]_D = \Delta_0(x-x') \langle (S''[\phi])^2 \rangle_0, \quad (4.40)$$

o subíndice D significa contribuição desconectada. Então, como pode ser facilmente verificado, o termo que veio de $Z^{(2)}[\phi]$ cancela exatamente este termo e ficamos com resultado final:

$$\Delta^{(2)}(x, x') = \Delta_0(x-x') + \frac{1}{2} \left[\langle \phi(x)\phi(x') (S''[\phi])^2 \rangle_0 \right]_C, \quad (4.41)$$

e o subíndice C significa contribuições conectadas. A partir daqui, é muito fácil obter uma expressão explícita para $\Delta^{(2)}(x, x')$: ela é mais facilmente obtida usando transformadas de Fourier, como foi feito anteriormente para obter a Eq. (3.80). O resultado conterà divergências ultravioletas, as quais podem ser removidas empregando renormalização – não iremos adiante neste cálculo porque nos desviaríamos muito dos objetivos gerais da Tese.

O exercício acima deve ter deixado claro que a expansão perturbativa do MHTE **não é** a expansão perturbativa tradicional na constante de acoplamento λ . São duas as razões para tal: (1) no termo $\Delta_0\phi^2(x)$, que é subtraído da interação original $\lambda\phi^4$, a constante Δ_0 é uma função não trivial de λ – ver Eq. (4.33); (2) quando o segundo termo da Eq. (4.41) é calculado explicitamente, (devido ao teorema de Wick) ele será expresso como um produto de funções $\Delta_0(x-x')$, as quais também são funções não triviais de λ . Portanto, as correlações entre as partículas induzidas pela interação efetiva do MHTE, $S''[\phi]$, são de natureza não perturbativa – pois não são expressas como uma série de potências em λ .

Aqui é interessante notar a similaridade com o método da teoria de perturbação otimizada, também conhecida como expansão δ [8, 9]. Exemplos de aplicação desse método no contexto de modelos de campos escalares são as Ref. [44, 45] – para uma lista grande de referências, ver por exemplo as Refs. [46, 47]. Nesse método, adiciona-se e subtrai-se da lagrangiana do problema um termo quadrático nos campos, de maneira que:

$$\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L}^\delta = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 - \frac{m^2}{2} \phi^2 - \frac{\eta^2}{2} \phi^2 - \delta \left(\frac{\lambda}{4} \phi^4 - \frac{1}{2} \eta^2 \phi^2 \right), \quad (4.42)$$

η é um parâmetro que é determinado a partir de algum critério a ser definido e o termo proporcional a δ é tratado em teoria de perturbação – o parâmetro δ é usado apenas para guiar a teoria de perturbação. Ele é de natureza similar ao parâmetro g que introduzimos na Eq. (3.94), que ao final é tomado igual à unidade. É evidente que o parâmetro η é similar ao Δ_0 do MHTE. A grande questão neste método da

expansão δ é uma arbitrariedade intrínseca referente à escolha de um critério para determinar η – ver discussão na Ref. [46]. Um desses critérios é o “princípio da mínima sensibilidade” (PMS) [48], o qual propõe determinar η exigindo que alguma quantidade física, não especificada *a priori*, deve ser estacionária com relação a η , isto é, a derivada dessa quantidade com relação a η deve ser nula. Nesse sentido, o MHTE, no contexto do presente modelo $\lambda\phi^4$, é uma teoria de perturbação otimizada, em que o critério para a determinação do parâmetro Δ_0 é o princípio variacional de Gibbs, o qual fornece um limite superior rigoroso para $W[\phi]$. Um estudo interessante seria a comparação de resultados obtidos com esses dois métodos, em particular com relação a diferentes formas de aplicação do PMS [46].

Uma outra comparação interessante é com a aproximação de Hartree-Fock. Uma maneira de implementá-la, parecida com a do MHTE, é adicionar e subtrair contribuições de campo médio da interação original do modelo. No caso da teoria $\lambda\phi^4$, as contribuições de campo médio são aquelas que se obtêm contraindo dois dos quatro campos:

$$\phi^4(x) \rightarrow 6 \underbrace{\phi(x)\phi(x)} \phi^2(x) \equiv 6 \Delta_{MF}(\phi) \phi^2(x), \quad (4.43)$$

sendo

$$\Delta_{MF}(\phi) = \langle \phi^2(x) \rangle. \quad (4.44)$$

Então, podemos escrever:

$$\begin{aligned} S[\phi] &= \int d^4x \left[\frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + \frac{\lambda}{4} \phi^4 \right] \\ &= \int d^4x \left[\frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2} (m^2 + 3\lambda\Delta_{MF}(\phi)) \phi^2 + \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - 6\Delta_{MF}(\phi)) \phi^2 \right] \\ &= S_{MF}[\phi] + S_{int}[\phi], \end{aligned} \quad (4.45)$$

com

$$S_{MF}[\phi] = \int d^4x \left[\frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2} (m^2 + 3\lambda\Delta_{MF}(\phi)) \phi^2 \right], \quad (4.46)$$

$$S_{int}[\phi] = \frac{\lambda}{4} \int d^4x [\phi^2 - 6\Delta_{MF}(\phi)] \phi^2. \quad (4.47)$$

Aqui fica claro que a ideia é usar $S_{int}[\phi]$ como perturbação a $S_{MF}[\phi]$. Isto é, o funcional gerador é

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}\phi e^{-S_{MF}[\phi]} \left[1 - S_{int}[\phi] + \frac{1}{2} (S_{int}[\phi])^2 + \dots \right] \\ &= Z_{MF} \left\{ 1 - \frac{1}{Z_{MF}} \int \mathcal{D}\phi e^{-S_{MF}[\phi]} \left[S_{int}[\phi] - \frac{1}{2} (S_{int}[\phi])^2 + \dots \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.48)$$

em que

$$Z_{MF} = \int \mathcal{D}\phi e^{-S_{MF}[\phi]}. \quad (4.49)$$

A primeira observação que podemos fazer aqui é que $\langle S_{int}[\phi] \rangle_{MF}$ **não** é mais zero em primeira ordem:

$$\begin{aligned} \langle S_{int}[\phi] \rangle_{MF} &= \frac{1}{Z_{MF}} \int \mathcal{D}\phi S_{int}[\phi] e^{-S_{MF}[\phi]} \\ &= \frac{\lambda}{4} \int d^4x \frac{1}{Z_{MF}} \int \mathcal{D}\phi [\phi^2 - 6\Delta_{MF}(\phi)] \phi^2 e^{-S_{MF}[\phi]} \\ &= -\frac{3\lambda}{4} \int d^4x \Delta_{MF}(\phi) \Delta_{MF}(\phi). \end{aligned} \quad (4.50)$$

Portanto, no cálculo de uma função de correlação ou outro observável, obtido com a aproximação de Hartree-Fock, correções perturbativas devem ser incluídas a partir de primeira ordem, e não a partir de segunda ordem como no MHTE.

A segunda observação é que podemos reorganizar a série perturbativa de maneira que ela se torne idêntica à do MHTE. Para tal, é suficiente subtrair de $S_{MF}[\phi]$ da Eq. (4.46) o termo

$$\frac{3\lambda}{4} \Delta_{MF}(\phi) \int d^4x \phi^2, \quad (4.51)$$

e somá-lo no termo $S_{int}[\phi]$ da Eq. (4.47). Claramente, a ação resultante torna-se idêntica à do MHTE (porém neste caso não mais teremos a aproximação de Hartree-Fock). A determinação de Δ_{MF} pode ser obtida demandando que o termo de primeira ordem se anule.

Isto significa que o MHTE, pelo menos neste caso da teoria do campo escalar real, implementa uma ressonância de contribuições perturbativas de campo médio. No caso da teoria do campo escalar complexo com interação de contato, ambos os métodos dão o mesmo resultado. Consideremos a ação para um campo escalar complexo:

$$S[\phi^*, \phi] = \int dx [(\nabla\phi^*) \cdot (\nabla\phi) + m^2\phi^*\phi + \lambda(\phi^*\phi)]. \quad (4.52)$$

Somando e subtraindo o termo $2\lambda\phi^*\phi D_{MF}(\phi)$, com $D_{MF}(\phi) = \langle \phi^*\phi \rangle$ (mudamos a notação para enfatizar que estamos trabalhando com campos complexos), podemos reescrever $S[\phi^*, \phi]$ como:

$$S[\phi^*, \phi] = S_{MF}[\phi^*, \phi] + S_{int}[\phi^*, \phi], \quad (4.53)$$

em que

$$\begin{aligned} S_{MF}[\phi^*, \phi] &= \int dx \{(\nabla\phi^*) \cdot (\nabla\phi) + [m^2 + 2\lambda D_{MF}(\phi)] \phi^*\phi\}, \\ S_{int}[\phi^*, \phi] &= \lambda \int dx [\phi^*\phi - 2D_{MF}(\phi)] \phi^*\phi. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Portanto, pela Eq. (3.37):

$$\begin{aligned}\langle S_{int}[\phi^*, \phi] \rangle &= \lambda [\langle \phi^* \phi \phi^* \phi \rangle - 2D_{MF}(\phi) \langle \phi^* \phi \rangle] \\ &= \lambda [2 \langle \phi^* \phi \rangle \langle \phi^* \phi \rangle - 2D_{MF} \langle \phi^* \phi \rangle] = 0.\end{aligned}\quad (4.55)$$

4.2 MHTE na quantização estocástica

A observação crucial que leva à ideia da quantização estocástica de Parisi e Wu [22] é que configurações de campo com uma distribuição de probabilidade (voltamos a usar explicitamente $\hbar \neq 1$ na presente Seção)

$$P[\phi] = e^{-\frac{1}{\hbar} S[\phi]}, \quad (4.56)$$

podem ser geradas a partir das soluções de uma equação de GLL do tipo

$$\frac{\partial \phi(x, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi(x, \tau)} + \zeta(x, \tau), \quad (4.57)$$

em que a função de ruído satisfaz:

$$\langle \zeta(x, \tau) \rangle = 0, \quad (4.58)$$

$$\langle \zeta(x, \tau) \zeta(x', \tau') \rangle = 2\hbar \delta^{(d)}(x - x') \delta(\tau - \tau'). \quad (4.59)$$

Claramente, esta asserção pode ser provada de maneira idêntica àquela feita ao final da Seção 3.1, quando mostramos, via equação de Fokker-Planck, que configurações de campo com uma distribuição de probabilidade de equilíbrio de Boltzmann podem ser obtidas a partir de uma equação de GLL, com a correspondência (tomando a constante de Boltzmann k_B igual à unidade):

$$T \leftrightarrow \hbar. \quad (4.60)$$

Ou seja, a constante de Planck \hbar desempenha aqui o papel da temperatura T na mecânica estatística clássica.

É de extrema importância notar que $x = (x^1, \dots, x^d)$ é a coordenada do espaço euclidiano de d dimensões, e τ é um parâmetro de “tempo fictício”. Ele **não está** relacionado nem a t do espaço de Minkowski, nem a x^4 do espaço euclidiano, i.e. o parâmetro τ na equação de GLL da Eq. (4.57) não é uma quantidade física. A equação GLL da Eq. (4.57) representa um processo difusivo fictício num espaço de $(d+1)$ dimensões, em que estamos interessados somente no valor de “equilíbrio” ($\tau \rightarrow \infty$) das configurações de campo geradas por esse processo. A maneira precisa de como acontece a evolução para o “equilíbrio” das soluções da Eq. (4.57) não é de interesse físico, pois não há uma dinâmica física associada ao parâmetro τ .

Devido à perfeita similaridade formal entre a GLL da quantização estocástica e a da mecânica estatística clássica discutida no Capítulo anterior, a implementação do cálculo perturbativo do MHTE à teoria $\lambda\phi^4$ segue de maneira análoga à discutida na Seção 3.3. Em vista disso, não há muito a acrescentar aqui, principalmente quando $m^2 > 0$, isto é, na ausência de quebra espontânea de simetria. No entanto, para uso na discussão que se segue, obteremos a solução da equação de GLL para $S_0[\phi]$ somente e, a partir dela, calcularemos a função de Green de dois pontos. Especificamente, vamos resolver a equação

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi(x, \tau)}{\partial\tau} &= -\frac{\delta S_0[\phi]}{\delta\phi(x, \tau)} + \zeta(x, \tau) \\ &= -[-\nabla^2 + m^2/\hbar^2 + (3\lambda/2)\Delta_0] \phi(x, \tau) + \zeta(x, \tau), \end{aligned} \quad (4.61)$$

com $m^2 > 0$ e Δ_0 independente de τ . A integração dessa equação é mais facilmente obtível indo para o espaço dos momentos com o auxílio da transformada de Fourier do campo e do ruído:

$$\phi(x, \tau) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{ik \cdot x} \tilde{\phi}(k, \tau), \quad (4.62)$$

$$\zeta(x, \tau) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{ik \cdot x} \tilde{\zeta}(k, \tau), \quad (4.63)$$

e a equação a ser resolvida é dada então por:

$$\frac{\partial\tilde{\phi}(k, \tau)}{\partial\tau} = -[k^2 + m^2/\hbar^2 + (3\lambda/2)\Delta_0] \tilde{\phi}(k, \tau) + \tilde{\zeta}(k, \tau), \quad (4.64)$$

com

$$\langle \tilde{\zeta}(k, \tau) \rangle = 0, \quad (4.65)$$

$$\langle \tilde{\zeta}(k, \tau) \tilde{\zeta}(k', \tau') \rangle = 2\hbar (2\pi)^d \delta^{(d)}(k + k') \delta(\tau - \tau'). \quad (4.66)$$

A solução da Eq. (4.64), usando $\tilde{\phi}(k, 0) = 0$, como pode ser facilmente verificado, é dada por

$$\tilde{\phi}(k, \tau) = \int_0^\tau d\tau' e^{-[k^2 + m^2/\hbar^2 + (3\lambda/2)\Delta_0](\tau - \tau')} \tilde{\zeta}(k, \tau'). \quad (4.67)$$

De posse dessa, podemos obter a função de Green $\Delta_0(x - x')$:

$$\Delta_0(x - x') = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle \phi(x, \tau) \phi(x', \tau) \rangle. \quad (4.68)$$

Calculamos inicialmente $\langle \phi(x, \tau) \phi(x', \tau) \rangle$:

$$\begin{aligned}
 \langle \phi(x, \tau) \phi(x', \tau) \rangle &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d k'}{(2\pi)^d} e^{i(k \cdot x + k' \cdot x')} \langle \tilde{\phi}(k, \tau) \tilde{\phi}(k', \tau) \rangle \\
 &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d k'}{(2\pi)^d} e^{i(k \cdot x + k' \cdot x')} \int_0^\tau d\tau' e^{-[k^2 + m^2/\hbar^2 + (3\lambda/2)\Delta_0](\tau - \tau')} \\
 &\quad \times \int_0^{\tau'} d\tau'' e^{-[k'^2 + m^2/\hbar^2 + (3\lambda/2)\Delta_0](\tau' - \tau'')} \langle \zeta(k, \tau') \zeta(k', \tau'') \rangle \\
 &= 2\hbar \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{ik \cdot (x - x')} \int_0^\tau d\tau' e^{-2[k^2 + m^2/\hbar^2 + (3\lambda/2)\Delta_0](\tau - \tau')} \\
 &= \hbar \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{ik \cdot (x - x')} \frac{1 - e^{-2[k^2 + m^2/\hbar^2 + (3\lambda/2)\Delta_0]\tau}}{k^2 + m^2/\hbar^2 + (3\lambda/2)\Delta_0}. \tag{4.69}
 \end{aligned}$$

Portanto, a função de Green de dois pontos é dada por

$$\Delta_0(x - x') = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle \phi(x, \tau) \phi(x', \tau) \rangle = \hbar \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{e^{ik \cdot (x - x')}}{k^2 + m^2/\hbar^2 + (3\lambda/2)\Delta_0}, \tag{4.70}$$

que é idêntica (a menos dos fatores \hbar , é claro) ao resultado obtido anteriormente diretamente da integral funcional, Eq. (4.33), como esperado.

No próximo Capítulo, discutiremos algumas soluções numéricas da quantização estocástica empregando o MHTE, com interesse no comportamento crítico de uma teoria com quebra espontânea de simetria. Apesar dessas simulações se restringirem à teoria $\lambda\phi^4$, os resultados numéricos servirão para discutir algumas limitações de aplicação do MHTE que vão além deste modelo particular.

Uma potencial aplicação de grande interesse do MHTE refere-se ao emprego da quantização estocástica para gerar correções quânticas em problemas dominados pela dinâmica clássica. Esse tipo de problema é caracterizado por uma ação S tal que $S/\hbar \ll 1$. A ideia [34, 49] é tratar a dinâmica clássica exatamente, via solução exata das equações clássicas de movimento, e calcular correções quânticas via uma expansão em potências de \hbar . As correções quânticas são calculadas via quantização estocástica, e a série perturbativa em \hbar é feita via perturbação no ruído, pois $\zeta(x, \tau) \sim \hbar^{1/2}$ – ver Eq. (4.59). O MHTE, objeto da presente Tese, entra na simplificação das equações referentes às correções quânticas. A expansão em \hbar no contexto da quantização estocástica parece ser similar à *loop expansion* usual da teoria quântica de campos [21, 43] – há controvérsias a respeito [50], mas não vamos entrar nesta questão, apesar de ser muito interessante.

Esse procedimento leva a uma dupla série perturbativa, uma dada pelo MHTE e outra dada pela perturbação em \hbar . Para facilitarmos a apresentação, consideraremos a teoria do campo escalar $\lambda\phi^4$. Inicialmente, para simplificarmos a linha

de argumentação, trabalharemos apenas com a expansão em \hbar [34, 49]. A seguir, consideraremos ambas as expansões. Escrevemos a solução da Eq. (4.57) como

$$\phi(x, \tau) = \phi_{cl}(x) + \Phi(x, \tau), \quad (4.71)$$

em que $\phi_{cl}(x)$ satisfaz

$$\frac{\delta S[\phi_{cl}]}{\delta \phi_{cl}} = 0, \quad (4.72)$$

o que leva à seguinte “equação de movimento” para $\phi_{cl}(x)$

$$\nabla^2 \phi_{cl}(x) - (m/\hbar)^2 \phi_{cl}(x) - \lambda \phi_{cl}^3(x) = 0. \quad (4.73)$$

Deve ficar claro que ϕ_{cl} não depende de τ nem de ζ (que depende de \hbar via Eq. (4.59)), pois estas quantidades estão relacionados ao processo difusivo fictício. Isso significa que as correções quânticas entram via $\Phi(x, \tau)$, no limite de $\tau \rightarrow \infty$.

Observamos também que a presença de \hbar na equação clássica de movimento é devido à natureza quântica das massas das partículas [43]. Isso é evidente se pensarmos que m é a massa de um méson, por exemplo, o méson π , que é um estado ligado de quarks e glúons. Estados ligados são de natureza quântica e dependem de \hbar de maneira não trivial em geral. Portanto, é natural que a constante fundamental \hbar deva aparecer para fornecer as dimensões corretas das massas. Fatores de \hbar entram no processo de quantização (no espaço de Minkowski) através de: (1) relação de comutação entre o operador de campo $\hat{\phi}(\mathbf{x})$ e $\hat{\pi}(\mathbf{x})$, o operador momento conjugado ao campo, como $[\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\pi}(\mathbf{x}')] = i\hbar\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, e (2) o operador de evolução $\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$, sendo \hat{H} o operador hamiltoniano. Num processo de quantização canônico, o \hbar na relação de comutação leva ao fator \hbar na função de Green, como na Eq. (4.70). O \hbar no operador de evolução implica num fator $1/\hbar$ nos vértices de interação que, na formulação funcional aparece na Eq. (4.1) como $\exp(iS_{int}/\hbar)$, S_{int} é a ação que corresponde às interações. Portanto, numa expansão em potências de \hbar de uma amplitude quântica, o \hbar dividindo o fator de massa **não** deve ser levado em conta na contagem de potências [43].

A seguir, expandimos $\Phi(x, \tau)$ em uma série de potências:

$$\Phi(x, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} \Phi_n(x, \tau), \quad (4.74)$$

em que $\Phi_n(x, \tau)$ é de ordem $\hbar^{n/2}$. Substituindo a expansão na Eq. (4.57), obtemos as seguintes equações de movimento para as $\Phi_n(x, \tau)$ (escreveremos somente as

equações até a ordem três):

$$\frac{\partial \Phi_1(x, \tau)}{\partial \tau} = \nabla^2 \Phi_1(x, \tau) - [m^2/\hbar^2 + 3\lambda\phi_{cl}^2(x)] \Phi_1(x, \tau) + \zeta(x, \tau), \quad (4.75)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_2(x, \tau)}{\partial \tau} &= \nabla^2 \Phi_2(x, \tau) - [m^2/\hbar^2 + 3\lambda\phi_{cl}^2(x)] \Phi_2(x, \tau) \\ &\quad - 3\lambda\phi_{cl}(x) \Phi_1^2(x, \tau), \end{aligned} \quad (4.76)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_3(x, \tau)}{\partial \tau} &= \nabla^2 \Phi_3(x, \tau) - [m^2/\hbar^2 + 3\lambda\phi_{cl}^2(x)] \Phi_3(x, \tau) - \lambda\Phi_1^3(x, \tau) \\ &\quad - 6\lambda\phi_{cl}(x, \tau) \Phi_1(x, \tau) \Phi_2(x, \tau). \end{aligned} \quad (4.77)$$

Note que as equações para as componentes quânticas do campo são lineares. Impondo a “condição inicial” em $\tau = 0$:

$$\phi(x, 0) = \phi_{cl}(x), \quad (4.78)$$

temos que as soluções das Eqs. (4.75)-(4.77) devem ser obtidas com

$$\Phi_n(x, 0) = 0. \quad (4.79)$$

Uma classe de problemas particularmente importante em que correções quânticas a soluções clássicas são objeto de interesse em vários campos é a de modelos solitônicos. Um exemplo renomado de teoria de campos que apresenta soluções solitônicas é o modelo de *sine*-Gordon em duas dimensões, para o qual a ação no espaço euclidiano é dada por

$$S = \int d^2x \left[\frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 - \lambda \cos(g\phi) \right], \quad (4.80)$$

em que λ e g são constantes.

A característica marcante dessa classe de modelos é a forma altamente não linear da auto-interação (no caso acima, $\cos(g\phi)$). Uma expansão na forma da Eq. (4.71) levaria a

$$\begin{aligned} \cos(g\phi) &= \cos[g(\phi_{cl} + \Phi)] \\ &= \cos(g\phi_{cl}) \cos(g\Phi) - \sin(g\phi_{cl}) \sin(g\Phi) \\ &= \cos(g\phi_{cl}) \left[1 - \frac{1}{2}(g\Phi)^2 + \frac{1}{4!}(g\Phi)^4 + \dots \right] \\ &\quad - \sin(g\phi_{cl}) \left[g\Phi - \frac{1}{3!}(g\Phi)^3 + \dots \right] \\ &= \cos(g\phi_{cl}) - g \sin(g\phi_{cl}) \Phi - \frac{1}{2}g^2 \cos(g\phi_{cl}) \Phi^2 + \frac{1}{3!}g^3 \sin(g\phi_{cl}) \Phi^3 \\ &\quad + \frac{1}{4!}g^4 \cos(g\phi_{cl}) \Phi^4 + \dots \end{aligned} \quad (4.81)$$

Claramente, o MHTE poderá ajudar na linearização da equação de GLL associada, ao tratar os termos Φ^3 e Φ^4 através do método de somar e subtrair termos adequadamente, os quais serão determinados variacionalmente. Certamente, cada problema deve trazer peculiaridades que precisam ser examinadas de maneira a adaptar o método a cada situação.

Antes de finalizarmos esta Seção, notamos que para o caso de ações complexas, não será possível empregarmos o princípio variacional de Gibbs como feito com ações reais. Isto porque, para ações complexas, a Eq. (4.56) não é mais positiva, o que inviabiliza a prova feita no Apêndice A. No entanto, isso **não** implica que a estratégia de somar e subtrair termos convenientemente não possa ser feita. O que fica prejudicada é a afirmação de que estes termos levam a uma função geratriz que é um limite variacional superior ao funcional gerador exato da teoria. Um critério que provavelmente [49] pode ser útil é a exigência de que a contribuição de $S''[\phi]$ seja nula em primeira ordem em teoria de perturbação, como implica o princípio variacional de Gibbs no caso de ações reais.

Vamos parar aqui com a discussão do uso do MHTE em teorias de campos relativísticos. A seguir discutiremos o problema de um sistema de muitos férmions não relativístico.

4.3 Sistemas fermiônicos não relativísticos

Nesta Seção discutiremos o sistema de muitos férmions de *spin* 1/2 não relativísticos. Inicialmente, com o objetivo de mostrar a incorporação de correlações do tipo BCS dentro do formalismo MHTE, consideraremos um sistema infinito, invariante sob translações espaciais contínuas, em que a interação entre os férmions é de contato. A seguir, apresentaremos o problema no qual o gás de férmions de *spin*-1/2 encontra-se aprisionado por um potencial externo (armadilha) e cuja interação entre os férmions também seja de contato [51]. Uma característica importante de um sistema de férmions a baixas temperaturas é a possibilidade de formação de um *gap* no espectro de energia, característica responsável pelo fenômeno da supercondutividade em metais. Invariavelmente, na literatura esse problema tem sido resolvido no contexto de aproximações de campo médio. O objetivo principal do nosso estudo é ir além desse tipo de aproximação com a utilização do MHTE, da forma que discutimos aqui na Tese. Isso levará a uma generalização das famosas equações de Bogoliubov-de Gennes [35].

Vamos considerar o hamiltoniano de um sistema composto de férmions de massa m , em que os férmions interagem entre si através de uma interação de contato de intensidade U , $v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = U \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, e que estão aprisionados num potencial

externo $u_{\text{ext}}(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu_{\sigma} \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) \\ &+ \frac{U}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d^3r \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma),\end{aligned}\quad (4.82)$$

em que $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma)$ é o operador de campo que aniquila um férmion de *spin* 1/2, com projeção $\sigma = \uparrow$ ou $\sigma = \downarrow$, na posição \mathbf{r} . O número total de férmions do sistema é dado por $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$. Como, em geral, é possível termos assimetria no número de partículas *up* e *down* temos a presença de dois potenciais químicos, μ_{\uparrow} e μ_{\downarrow} .

4.3.1 Sistema infinito

Conforme já discutido reiteradamente nesta Tese, o MHTE consiste em reescrever o hamiltoniano no espaço dos momentos em termos de um subconjunto de momentos transferidos $\mathbf{q} \in \mathcal{S}$, em que \mathcal{S} contém um número finito $n(\mathcal{S})$ de momentos, com $n(\mathcal{S})$ independente do volume V no limite termodinâmico. Uma vez que $n(\mathcal{S})$ é restrito a um número finito, a energia livre correspondente a esse hamiltoniano restrito $\hat{H}(\mathcal{S})$ pode ser obtida de maneira exata. Para incluirmos pareamentos de férmions do tipo BCS, reescreveremos de maneira conveniente a Eq. (4.82) como:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) \\ &+ \frac{U}{2} \sum_{\sigma \neq \sigma'} \int d^3r \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma).\end{aligned}\quad (4.83)$$

Nesta Subseção, para simplificarmos, não incluiremos o potencial externo, e tomaremos $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} \equiv \mu$. É importante lembrarmos que, conforme destacado no Cap. 2, para o caso de férmions que interagem via interação de contato, quando restringimos os momentos transferidos a um subconjunto \mathcal{S} , o termo de $\sigma = \sigma'$ se anula, por isso ele não está explicitado na Eq. (4.83). O próximo passo consiste em introduzirmos operadores de campo no espaço dos momentos $\hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k}, \sigma)$ e $\hat{a}(\mathbf{k}, \sigma)$, definidos em termos da transformada de Fourier dos campos $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma)$ e $\hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma)$, como na Eq. (2.5):

$$\begin{aligned}\hat{H}(\mathcal{S}) &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} [\varepsilon(k) - \mu] \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \\ &+ \frac{U}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(\hat{\rho}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} \hat{\rho}_{\mathbf{k}'\mathbf{q}\downarrow} + \hat{\rho}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} \hat{\rho}_{\mathbf{k}'\mathbf{q}\uparrow} + \hat{\Delta}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} \hat{\Delta}_{\mathbf{k}'\mathbf{q}\uparrow} + \hat{\Delta}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} \hat{\Delta}_{\mathbf{k}'\mathbf{q}\downarrow} \right),\end{aligned}\quad (4.84)$$

sendo

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (4.85)$$

e

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} = \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma), \quad (4.86)$$

$$\hat{\Delta}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\uparrow\downarrow} = \hat{a}(-\mathbf{k}, \uparrow) \hat{a}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \downarrow) \quad \hat{\Delta}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\downarrow\uparrow} = \hat{a}(-\mathbf{k}, \downarrow) \hat{a}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \uparrow). \quad (4.87)$$

Notamos aqui que na Eq. (4.84) escrevemos um termo novo que surge de um ordenamento conveniente de *spins* e momentos do hamiltoniano original, o qual deixa explícito a possibilidade de pareamento entre os férmions. O hamiltoniano é o mesmo que o original, ele simplesmente foi reordenado de maneira a explicitar termos direto, de troca (que para este caso de potencial de contato e *spins* iguais é nulo) e de pareamento.

A aplicação do princípio variacional de Gibbs fornece, em adição às funções de *gap* tradicionais:

$$g_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} = \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} \rangle_a, \quad (4.88)$$

novas funções de *gap* tipo BCS:

$$h_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma\sigma'} = \langle \hat{\Delta}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma\sigma'} \rangle_a. \quad (4.89)$$

Como temos discutido, o hamiltoniano poder ser reescrito como a soma de três partes, $\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}' + \hat{H}''$. No cálculo da energia livre, \hat{H}' não contribui em todas as ordens em teoria de perturbação e \hat{H}'' não contribui em primeira ordem em teoria de perturbação.

Vamos trabalhar com \hat{H}_a . Devido à invariância translacional, como mostrado anteriormente, somente $\mathbf{q} = 0$ contribui para $g_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma}$. A dependência em \mathbf{q} em $h_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma\sigma'}$ descreve pares de Cooper com uma distribuição de momentos - na prática, na maioria das vezes somente $\mathbf{q} = 0$ é usado [18] e, por esta razão e também por simplicidade da discussão que se segue, consideraremos apenas $\mathbf{q} = 0$ e incluiremos as contribuições com $\mathbf{q} \notin \mathcal{S}$ em \hat{H}'' . Para esta situação de $\mathbf{q} = 0$, $\hat{\rho}_{\mathbf{k}0\sigma} = \hat{\rho}_{\mathbf{k}0\sigma}^\dagger$ e $g_{\mathbf{k}0\sigma} = g_{\mathbf{k}0\sigma}^*$. Com isto, podemos escrever \hat{H}_a como (ignoramos os fatores constantes):

$$\begin{aligned} \hat{H}_a &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon(k) - \mu + \frac{U}{V} N_{\downarrow} \right] \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \uparrow) \hat{a}(\mathbf{k}, \uparrow) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon(k) - \mu + \frac{U}{V} N_{\uparrow} \right] \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \downarrow) \hat{a}(\mathbf{k}, \downarrow) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta \hat{\Delta}_{\mathbf{k}0\uparrow\downarrow}^\dagger + \Delta^* \hat{\Delta}_{\mathbf{k}0\uparrow\downarrow} \right), \end{aligned} \quad (4.90)$$

em que escrevemos explicitamente as contribuições de $\sigma = \uparrow, \downarrow$ para conveniência futura, e definimos as quantidades:

$$N_\sigma \equiv \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'0\sigma} = \sum_{\mathbf{k}'} \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma) \rangle_a, \quad (4.91)$$

$$\Delta \equiv \frac{U}{V} \sum_{\mathbf{k}'} h_{\mathbf{k}'0\uparrow\downarrow}, \quad (4.92)$$

N_σ é o número de férmions com *spin* σ e Δ , como será visto adiante, é o *gap* de energia. Também, para simplificar a notação, fizemos uso das propriedades - que são facilmente demonstráveis a partir das Eqs. (4.87) e (4.89): $\hat{\Delta}_{\mathbf{k}0\uparrow\downarrow} = -\hat{\Delta}_{\mathbf{k}0\downarrow\uparrow}$, $\hat{\Delta}_{\mathbf{k}0\uparrow\downarrow}^\dagger = -\hat{\Delta}_{\mathbf{k}0\downarrow\uparrow}^\dagger$, $h_{\mathbf{k}0\uparrow\downarrow} = -h_{\mathbf{k}0\downarrow\uparrow}$ e $h_{\mathbf{k}0\uparrow\downarrow}^* = -h_{\mathbf{k}0\downarrow\uparrow}^*$. Note também que, devido a $\mu_\uparrow = \mu_\downarrow$, temos $N_\uparrow = N_\downarrow$.

Podemos diagonalizar \hat{H}_a utilizando a renomada transformação de Bogoliubov-Valatin:

$$\begin{aligned} \hat{a}(\mathbf{k}, \uparrow) &= u_k \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_k \hat{\beta}_{-\mathbf{k}}^\dagger, \\ \hat{a}(-\mathbf{k}, \downarrow) &= u_k \hat{\beta}_{-\mathbf{k}} - v_k \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.93)$$

em que u_k e v_k são reais, e os operadores $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ satisfazem as relações de comutação

$$\{\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \{\hat{\beta}_{\mathbf{k}}, \hat{\beta}_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (4.94)$$

e os demais comutadores se anulando. A partir das relações de anticomutação dos operadores $\hat{a}(\mathbf{k}, \sigma)$ e $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma)$ e das impostas na Eq. (4.94):

$$u_k^2 + v_k^2 = 1. \quad (4.95)$$

Além disso, como u_k e v_k são reais, é fácil mostrar que $h_{\mathbf{k}0\uparrow\downarrow}^* = h_{\mathbf{k}0\uparrow\downarrow}$. Estas últimas relações implicam que o *gap* é real: $\Delta^* = \Delta$.

Ignorando novamente os fatores constantes e levando em consideração as igualdades acima, podemos escrever a Eq. (4.90) como:

$$\begin{aligned} \hat{H}_a &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon(k) - \mu + \frac{U}{V} N_\downarrow \right] \left[u_k^2 \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + u_k v_k (\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{-\mathbf{k}}^\dagger + \hat{\beta}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}) - v_k^2 \hat{\beta}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{-\mathbf{k}} \right] \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon(k) - \mu + \frac{U}{V} N_\uparrow \right] \left[u_k^2 \hat{\beta}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{-\mathbf{k}} + u_k v_k (\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{-\mathbf{k}}^\dagger + \hat{\beta}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}) - v_k^2 \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \right] \\ &+ \Delta \sum_{\mathbf{k}} \left\{ -(u_k^2 - v_k^2) (\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{-\mathbf{k}}^\dagger + \hat{\beta}_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}) + 2 u_k v_k (\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\beta}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{-\mathbf{k}}) \right\}. \end{aligned} \quad (4.96)$$

Para o hamiltoniano \hat{H}_a ser diagonal é necessário que:

$$2 \left[\varepsilon(k) - \mu + \frac{U}{V} N_\sigma \right] u_k v_k = \Delta (u_k^2 - v_k^2). \quad (4.97)$$

Fazendo uso desta equação na Eq. (4.96), podemos escrever H_a na forma diagonal:

$$\hat{H}_a = \sum_{\mathbf{k}} \{ [\varepsilon(k) - \bar{\mu}] (u_k^2 - v_k^2) + 2\Delta u_k v_k \} (\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}}), \quad (4.98)$$

em que definimos

$$\bar{\mu} \equiv \mu - \frac{U}{V} N_\uparrow = \mu - \frac{U}{V} N_\downarrow, \quad (4.99)$$

uma vez que $N_\uparrow = N_\downarrow$ (porque $\mu_\uparrow = \mu_\downarrow$, como dito acima).

A Eq. (4.98) é o resultado final pois o hamiltoniano está na forma diagonal. Como ele é diagonal, quantidades termodinâmicas podem ser calculadas exatamente. Correções, que levem em conta $\mathbf{q} \notin \mathcal{S}$, podem ser calculadas em teoria de perturbação com o termo \hat{H}'' . Para tornar o cálculo prático, \hat{H}'' precisa ser expresso em termos dos operadores $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$. Note que o elemento novo aqui é o fato de que o MHTE oferece um esquema para implementar essa teoria de perturbação. Uma questão interessante seria investigar possíveis diferenças dessa teoria de perturbação com aquela que se obtém usando transformações canônicas, como discutido na Seção 37 do livro de Fetter e Walecka [52]. Não investigaremos este ponto nesta Tese porque está fora do escopo da mesma.

Agora, para chegarmos a resultados numéricos explícitos, é necessário obtermos as incógnitas do problema: u_k , v_k e Δ - note que as funções variacionais g podem ser expressas em termos do número de partículas. A obtenção dessas quantidades, bem como a apresentação de resultados numéricos explícitos, será objeto de análise na Seção 5.7. Com a determinação dessas incógnitas, o hamiltoniano da Eq. (4.98) pode ser escrito como

$$\hat{H}_a = \sum_{\mathbf{k}} E(k) (\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}}), \quad (4.100)$$

em que $E(k) = (\xi_k^2 + \Delta^2)^{1/2}$ e $\xi(k) = \varepsilon(k) - \bar{\mu}$.

4.3.2 Sistema numa armadilha: as equações de Bogoliubov–de Gennes (BdG)

A consideração de um potencial externo atuando no sistema, usualmente tomado na forma de um potencial do tipo oscilador harmônico, como são feitos os experimentos com átomos frios, torna inconveniente a descrição do problema no espaço dos momentos, pois a transformada de Fourier desse potencial é uma distribuição na forma de um Laplaciano da função delta de Dirac. Portanto, formularemos o problema no espaço de configuração. Nesse caso, o problema é mais facilmente tratável na forma de equações de Schrödinger não lineares – que são as tradicionais

equações de Bogoliubov–de Gennes (BdG) [35]. No entanto, deve ficar claro que não há impedimento em usarmos o espaço dos momentos, a questão é de natureza prática.

A seguir, revisaremos o formalismo das equações de BdG nos baseando no trabalho de Liu, Hu e Drummond [51]. O intuito é mostrar o quanto o MHTE pode facilitar o tratamento desse problema e motivar trabalho futuro. Vamos tomar o potencial externo que atua como uma armadilha para átomos na forma de um oscilador harmônico tridimensional, $u_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = m\omega^2 r^2/2$, em que m é a massa dos átomos e ω é a frequência da armadilha. Iniciaremos a obtenção das equações de BdG utilizando as equações de movimento de Heisenberg para os operadores de campo $\hat{\Psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}, t)$ e $\hat{\Psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}, t)$. Para o hamiltoniano (inicialmente tomaremos $\mu_{\uparrow} \neq \mu_{\downarrow}$) da Eq. (4.83), estas são dadas por

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_{\uparrow}}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu_{\uparrow} \right] \hat{\Psi}_{\uparrow} + U \hat{\Psi}_{\downarrow}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\downarrow} \hat{\Psi}_{\uparrow}, \quad (4.101)$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_{\downarrow}}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu_{\downarrow} \right] \hat{\Psi}_{\downarrow} - U \hat{\Psi}_{\uparrow}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\downarrow} \hat{\Psi}_{\uparrow}. \quad (4.102)$$

Essas equações são exatas. A aproximação de campo médio que incorpora correlações de *spin* do tipo BCS consiste em substituir os termos de autointeração por valores médios:

$$U \hat{\Psi}_{\downarrow}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\downarrow} \hat{\Psi}_{\uparrow} \Rightarrow -\Delta(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\downarrow}^{\dagger} + U n_{\downarrow}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\uparrow}, \quad (4.103)$$

$$U \hat{\Psi}_{\uparrow}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\downarrow} \hat{\Psi}_{\uparrow} \Rightarrow -\Delta(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\uparrow}^{\dagger} - U n_{\uparrow}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\downarrow}, \quad (4.104)$$

em que $\Delta(\mathbf{r}) = -U \langle \hat{\Psi}_{\downarrow}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\uparrow} \rangle$ é a função de *gap* e $n_{\sigma}(\mathbf{r}) = \langle \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\sigma} \rangle$ é a densidade de partículas de cada *spin*. Logo:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_{\uparrow}}{\partial t} = [\mathcal{H}_{\uparrow}^s - \mu_{\uparrow}] \hat{\Psi}_{\uparrow} - \Delta(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\downarrow}^{\dagger} \quad (4.105)$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_{\downarrow}}{\partial t} = [\mathcal{H}_{\downarrow}^s - \mu_{\downarrow}] \hat{\Psi}_{\downarrow} + \Delta(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\uparrow}^{\dagger} \quad (4.106)$$

com

$$\mathcal{H}_{\sigma}^s = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + U n_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}). \quad (4.107)$$

Essas equações são lineares nos operadores de campo, mas são não diagonais nos *spins*.

As equações de movimento podem ser resolvidas a partir do uso de uma transformação similar à transformação de Bogoliubov-Valatin, Eq. (4.94). Como os átomos estão numa armadilha, eles ocuparão estados de energia discretos, em vez de contínuos, como no caso de um sistema infinito. Devido a isto, a transformação equivalente à transformação de Bogoliubov-Valatin consiste em expandir o operador de campo $\hat{\Psi}_\uparrow$ ($\hat{\Psi}_\downarrow$) numa base de operadores correspondentes a estes níveis de energia discretos com *spin* \uparrow e \downarrow :

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}_\uparrow &= \sum_j [u_{j\uparrow}(\mathbf{r}) \hat{c}_{j\uparrow} e^{-iE_{j\uparrow}t/\hbar} + v_{j\downarrow}^*(\mathbf{r}) \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger e^{iE_{j\downarrow}t/\hbar}], \\ \hat{\Psi}_\downarrow^\dagger &= \sum_j [u_{j\downarrow}^*(\mathbf{r}) \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger e^{iE_{j\downarrow}t/\hbar} - v_{j\uparrow}(\mathbf{r}) \hat{c}_{j\uparrow} e^{-iE_{j\uparrow}t/\hbar}].\end{aligned}\quad (4.108)$$

Quando essas expansões são substituídas nas equações para os campos, elas levam às equações de BdG para as funções u e v :

$$\begin{bmatrix} \mathcal{H}_\sigma^s - \mu_\sigma & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -\mathcal{H}_{\bar{\sigma}}^s + \mu_{\bar{\sigma}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{j\sigma}(\mathbf{r}) \\ v_{j\sigma}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = E_{j\sigma} \begin{bmatrix} u_{j\sigma}(\mathbf{r}) \\ v_{j\sigma}(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (4.109)$$

As funções $u_{j\sigma}(\mathbf{r})$ e $v_{j\sigma}(\mathbf{r})$ são normalizadas como

$$\int d^3r [|u_{j\sigma}(\mathbf{r})|^2 + |v_{j\sigma}(\mathbf{r})|^2] = 1. \quad (4.110)$$

As expressões para as densidades de partículas e a função de *gap* são dadas por

$$n_\sigma(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_j [|u_{j\sigma}(\mathbf{r})|^2 f(E_{j\sigma}) + |v_{j\bar{\sigma}}(\mathbf{r})|^2 f(-E_{j\bar{\sigma}})], \quad (4.111)$$

$$\Delta(\mathbf{r}) = \frac{U}{2} \sum_j [v_{j\uparrow}^*(\mathbf{r}) u_{j\uparrow}(\mathbf{r}) f(E_{j\uparrow}) - u_{j\downarrow}(\mathbf{r}) v_{j\downarrow}^*(\mathbf{r}) f(-E_{j\downarrow})], \quad (4.112)$$

em que a constante 1/2 presente nas duas equações acima indica que as soluções das equações de BdG contêm energias positivas e negativas e $f(E_{j\sigma})$ e $f(-E_{j\sigma})$ são as funções distribuição de Fermi, com $\beta = 1/k_B T$:

$$f(E_{j\sigma}) = \langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \rangle = \frac{1}{\exp(\beta E_{j\sigma}) + 1}, \quad (4.113)$$

$$f(-E_{j\sigma}) = \langle \hat{c}_{j\sigma} \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \rangle. \quad (4.114)$$

Note que os autovalores de energia $E_{j\sigma}$ são medidos em relação ao potencial químico μ_σ - ver Eq. (4.109); isto significa que quando a energia do átomo na armadilha é menor que o potencial químico, $E_{j\sigma}$ é negativa, e se for maior, $E_{j\sigma}$ é positiva (energias

de buracos e de partículas [52]). Também, não é difícil mostrar que

$$E_{j\sigma} \leftrightarrow -E_{j\bar{\sigma}},$$

$$\begin{bmatrix} u_{j\sigma}(\mathbf{r}) \\ v_{j\sigma}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} -v_{j\bar{\sigma}}^*(\mathbf{r}) \\ +u_{j\bar{\sigma}}^*(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (4.115)$$

Ou seja, utilizando estas simetrias, precisamos resolver apenas a parte *up* das equações de BdG:

$$\begin{bmatrix} \mathcal{H}_\uparrow^s - \mu_\uparrow & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -\mathcal{H}_\downarrow^s + \mu_\downarrow \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_j(\mathbf{r}) \\ v_j(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = E_j \begin{bmatrix} u_j(\mathbf{r}) \\ v_j(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (4.116)$$

em que simplificamos a notação escrevendo $u_j(\mathbf{r}) = u_{j\uparrow}(\mathbf{r})$ e $v_j(\mathbf{r}) = v_{j\uparrow}(\mathbf{r})$. Com isso, podemos reescrever as expressões para as distribuições de densidades de partículas e para a função de *gap* como

$$n_\uparrow(\mathbf{r}) = \sum_j |u_j(\mathbf{r})|^2 f(E_j), \quad (4.117)$$

$$n_\downarrow(\mathbf{r}) = \sum_j |v_j(\mathbf{r})|^2 f(-E_j), \quad (4.118)$$

$$\Delta(\mathbf{r}) = U \sum_j u_j(\mathbf{r}) v_j^*(\mathbf{r}) f(E_j). \quad (4.119)$$

Note que o problema até aqui está formulado no *ensemble grand* canônico. No entanto, os experimentos são feitos com um número fixo de partículas, ou seja, o potencial químico não é fixo nos experimentos. Portanto, é necessário resolver as Eqs. (4.116)-(4.119) de forma auto-consistente, de maneira que os seguintes vínculos sejam respeitados

$$N = \int d^3r [n_\uparrow(\mathbf{r}) + n_\downarrow(\mathbf{r})], \quad (4.120)$$

$$\delta N = \int d^3r [n_\uparrow(\mathbf{r}) - n_\downarrow(\mathbf{r})]. \quad (4.121)$$

Devido a limitações computacionais, na prática se faz necessário que as somas presentes nas expressões acima sejam truncadas. É usual truncar as somas de maneira que somente estados com energia discreta menor que um dado valor E_c sejam incluídos: os níveis de energia abaixo deste *cutoff* ($|E_j| < E_c$ - *low-lying states*) são discretos, e os níveis acima deste valor ($|E_j| > E_c$ - *high-lying states*) são tomados como sendo contínuos. O critério de escolha desse *cutoff* de energia é tal que valores de corte maiores não mudam o resultado do problema.

A solução da Eq. (4.116) para valores de energia abaixo de um determinado *cutoff* prossegue da seguinte maneira. Como estamos lidando com um sistema que está aprisionado numa armadilha de potencial do tipo oscilador harmônico tridimensional, tomaremos $j = \{nlm\}$; n é o número quântico principal, l o número quântico azimutal e m , o número quântico magnético. Vamos escrever

$$\begin{aligned} u_j(\mathbf{r}) &= \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ v_j(\mathbf{r}) &= \frac{v_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (4.122)$$

$u_{nl}(r)/r$ e $v_{nl}(r)/r$ são as funções de onda usuais e $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ são os harmônicos esféricos. Com isso, temos que

$$[\mathcal{H}_\uparrow^s(l) - \mu_\uparrow] u_{nl}(r) + \Delta(\mathbf{r}) v_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r), \quad (4.123)$$

$$[\mathcal{H}_\downarrow^s(l) - \mu_\downarrow] v_{nl}(r) - \Delta^*(\mathbf{r}) u_{nl}(r) = -E_{nl} v_{nl}(r), \quad (4.124)$$

sendo que

$$\mathcal{H}_\sigma^s(l) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + u_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + U n_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}). \quad (4.125)$$

O resultado disso é que chegamos a um hamiltoniano de partícula única com momento angular l .

Conforme dissemos no começo da discussão, nosso sistema se encontra aprisionado numa armadilha formada por um potencial do tipo oscilador harmônico tridimensional, ou seja, $u_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = u_{\text{ext}}(r) = m\omega^2 r^2/2$. Assim, a escolha natural para resolvermos as Eqs. (4.123) e (4.124) é expandir as funções $u_{nl}(r)$ e $v_{nl}(r)$ em termos das autofunções $\phi_{nl}(r)$ do hamiltoniano do oscilador harmônico tridimensional,

$$\mathcal{H}_{\text{osc}}(l) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + u_{\text{ext}}(\mathbf{r}), \quad (4.126)$$

cujos autovalores podem ser escritos como

$$\epsilon_{\alpha l} = \left(2\alpha + l + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega, \quad (4.127)$$

sendo $\alpha = 0, 1, 2, \dots$. Faremos as expansões de $u_{nl}(r)$ e de $v_{nl}(r)$ em termos das autofunções do hamiltoniano descrito na Eq. (4.126):

$$u_{nl}(r) = \sum_{\alpha} A_{nl}^{\alpha} \phi_{\alpha l}(r), \quad (4.128)$$

$$v_{nl}(r) = \sum_{\alpha} B_{nl}^{\alpha} \phi_{\alpha l}(r). \quad (4.129)$$

Utilizando estas expansões nas Eqs. (4.123) e (4.124), obtemos a matriz simétrica a ser resolvida:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_{\alpha l \uparrow} \delta_{\alpha\beta} + M_{\alpha\beta}^{\uparrow} & \Delta_{\alpha\beta} \\ \Delta_{\alpha\beta} & -\epsilon_{\alpha l \downarrow} \delta_{\alpha\beta} - M_{\alpha\beta}^{\downarrow} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{nl}^{\beta} \\ B_{nl}^{\beta} \end{bmatrix} = E_{nl} \begin{bmatrix} A_{nl}^{\alpha} \\ B_{nl}^{\alpha} \end{bmatrix}, \quad (4.130)$$

sendo que:

$$\epsilon_{\alpha l \sigma} = \epsilon_{\alpha l} - \mu_{\sigma}, \quad (4.131)$$

$$\Delta_{\alpha\beta} = \int dr \phi_{\alpha l}(r) \Delta(\mathbf{r}) \phi_{\beta l}(r), \quad (4.132)$$

$$M_{\alpha\beta}^{\uparrow} = \int dr \phi_{\alpha l}(r) U n_{\downarrow}(\mathbf{r}) \phi_{\beta l}(r), \quad (4.133)$$

$$M_{\alpha\beta}^{\downarrow} = \int dr \phi_{\alpha l}(r) U n_{\uparrow}(\mathbf{r}) \phi_{\beta l}(r). \quad (4.134)$$

Uma vez conhecidos $u_{nl}(r)$ e $v_{nl}(r)$ podemos calcular a equação de *gap* e os correspondentes números de ocupação para os estados ocupados

$$\Delta(\mathbf{r}) = U \sum_{nl} \frac{2l+1}{4\pi r^2} u_{nl}(r) v_{nl}(r) f(E_{nl}), \quad (4.135)$$

$$n_{\uparrow}(\mathbf{r}) = \sum_{nl} \frac{2l+1}{4\pi r^2} u_{nl}^2(r) f(E_{nl}), \quad (4.136)$$

$$n_{\downarrow}(\mathbf{r}) = \sum_{nl} \frac{2l+1}{4\pi r^2} v_{nl}^2(r) f(-E_{nl}). \quad (4.137)$$

Claramente, o problema é computacionalmente não muito simples, pois envolve a diagonalização de uma matriz que, dependendo do número de átomos na armadilha, pode ter dimensão muito grande. As ideias discutidas anteriormente no contexto do MHTE podem ser adaptadas para simplificar o problema. Como visto, um dos pontos fortes do MHTE é o fato de que correções ao hamiltoniano diagonalizado através de uma escolha dos momentos \mathbf{q} podem ser calculadas perturbativamente. Ainda mais, estas perturbações somente contribuem a partir de segunda ordem. Se a ordem zero do MHTE capturar os elementos físicos essenciais do problema, o MHTE então fornece um esquema sistemático e controlável. Sistemático porque teoria de perturbação é um procedimento muito bem definido e controlável porque é possível acompanhar a convergência (ou não) dos resultados à medida que ordens superiores são calculadas.

Portanto, a questão principal é a aproximação de ordem zero. Para um número razoavelmente grande de átomos na armadilha, da ordem de 10^4 átomos, a Ref. [51]

mostrou que uma aproximação de densidade local (ADL) fornece resultados muito bons, em comparação com a solução exata das equações de BdG. A ADL consiste na ideia de que para um sistema com um número grande de partículas, o sistema pode ser dividido em subsistemas localmente uniformes caracterizados por um potencial químico local $\mu(\mathbf{r}) = \mu - u_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, em que $u_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ é o potencial descrevendo a armadilha. Portanto, a solução do problema é feita diagonalizando o hamiltoniano para um dado valor do “potencial químico” $\mu(\mathbf{r})$, e o resultado final da energia, por exemplo, é a soma das energias de cada subsistema.

A implementação de uma ADL no contexto do MHTE é muito simples: cada subsistema é caracterizado por um hamiltoniano **local** $\hat{H}_a(\mathbf{r})$ dado por (por simplicidade, como anteriormente, estamos empregando $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} \equiv \mu$):

$$\hat{H}_a(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} E_k(\mathbf{r}) (\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\beta}_{\mathbf{k}}), \quad (4.138)$$

em que $E_k(\mathbf{r}) = [\xi_k^2(\mathbf{r}) + \Delta^2(\mathbf{r})]^{1/2}$, com $\xi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon(k) - \bar{\mu}(\mathbf{r})$, e $\bar{\mu}(\mathbf{r})$ é dado por

$$\bar{\mu}(\mathbf{r}) = \mu - u_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \frac{U}{V} N_{\uparrow}. \quad (4.139)$$

Com isto, a densidade total de partículas (*spin up* + *spin down*) no ponto \mathbf{r} é dado por - ver Eq. (5.123):

$$n(\mathbf{r}) = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_k^2(\mathbf{r}), \quad (4.140)$$

e $v_k(\mathbf{r})$ é dado por - ver Eq. (5.118):

$$v_k^2(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k(\mathbf{r})}{E_k(\mathbf{r})} \right). \quad (4.141)$$

O número total de partículas é

$$N = \int d^3r n(\mathbf{r}). \quad (4.142)$$

Correções aos resultados obtidos com a ADL, isto é, a inclusão dos termos com $\mathbf{q} \notin \mathcal{S}$, podem ser obtidas como discutido acima: o \hat{H}'' é expresso em termos dos operadores $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ da transformação de Bogoliubov-Valantin, o que o torna um $\hat{H}''(\mathbf{r})$, e correções são calculadas localmente para cada \mathbf{r} .

Como a ADL fornece uma boa aproximação às soluções das equações de BdG, o esquema baseado no MHTE descrito acima pode ser uma alternativa eficiente e econômica às equações de BdG. A resposta a esta questão passa pela comparação com a solução exata do problema. No entanto, esta não está disponível até o momento. Portanto, a única forma de decidir a questão é comparar as predições com os dados experimentais. Nesta Tese não faremos este estudo, vamos deixá-lo para trabalhos futuros.

Capítulo 5

Métodos e resultados numéricos

No presente Capítulo apresentaremos resultados numéricos de soluções explícitas de algumas das equações derivadas no transcorrer de Capítulos anteriores. A maior parte das discussões de resultados se concentra em simulações da equação de GLL. Essas discussões não são exaustivas, muito pelo contrário, elas deixam muito do material desenvolvido formalmente na Tese para trabalhos futuros. O objetivo principal aqui é discutir aspectos importantes sobre métodos numéricos e discutir a aplicabilidade do MHTE em situações típicas em que equações de GLL aparecem.

5.1 Discretização da equação de GLL na rede

As simulações numéricas que realizaremos são feitas discretizando-se as variáveis de tempo e espaciais, utilizando condições periódicas de contorno (CPC). Antes de discutir essa discretização, para facilitar a apresentação de resultados e lidar com o menor número possível de parâmetros livres, reescreveremos a equação de GLL em termos de quantidades adimensionais. Vamos nos concentrar aqui na classe de modelos tipo $\lambda\phi^4$, com ϕ sendo um campo real, e ruído branco. Para essa classe de modelos, a forma mais geral da equação de GLL, que aparece tanto em problemas de transições de fase e quantização estocástica é aquela dada na Eq. (3.16):

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma (-\gamma\nabla^2 + m^2) \phi(\mathbf{r}, t) - \Gamma\lambda\phi^3(\mathbf{r}, t) + \zeta(\mathbf{r}, t), \quad (5.1)$$

com o campo de ruído $\zeta(\mathbf{r}, t)$ satisfazendo a Eq. (3.29):

$$\langle\zeta(\mathbf{r}, t)\rangle = 0, \quad \langle\zeta(\mathbf{r}', t')\zeta(\mathbf{r}, t)\rangle = 2\Gamma\theta\delta(t' - t)\delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (5.2)$$

$\theta = k_B T$ para problemas de transições de fase, e $\Gamma = \gamma = 1$ e $\theta = \hbar$ para problemas de quantização estocástica. Para que o sistema físico seja estável (em ambos os tipos de problemas), é preciso que $\lambda > 0$. Quando $m^2 < 0$, temos a situação de

uma energia livre (ou ação) com duplo-poço com mínimos em $\phi = \pm\sqrt{-m^2/\lambda}$; para $m^2 > 0$, a energia livre (ou ação) tem um único mínimo, em $\phi = 0$.

A equação de GLL pode ser colocada em forma adimensional, reescalando o campo e as coordenadas t e \mathbf{r} como:

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{|m^2|}{\lambda}} \bar{\phi}(\bar{\mathbf{r}}, \bar{t}), \quad t = \frac{\bar{t}}{\Gamma|m^2|}, \quad \mathbf{r} = \sqrt{\frac{\gamma}{|m^2|}} \bar{\mathbf{r}}, \quad (5.3)$$

de modo que a equação de GLL pode ser escrita como

$$\frac{\partial \bar{\phi}(\bar{\mathbf{r}}, \bar{t})}{\partial \bar{t}} = \nabla_{\bar{\mathbf{r}}}^2 \bar{\phi}(\bar{\mathbf{r}}, \bar{t}) - \epsilon \bar{\phi}(\bar{\mathbf{r}}, \bar{t}) - \bar{\phi}^3(\bar{\mathbf{r}}, \bar{t}) + \bar{\zeta}(\bar{\mathbf{r}}, \bar{t}), \quad (5.4)$$

em que

$$\epsilon = \frac{m^2}{|m^2|} = \text{sign}(m^2), \quad (5.5)$$

e

$$\langle \bar{\zeta}(\bar{\mathbf{r}}, \bar{t}) \rangle = 0, \quad \langle \bar{\zeta}(\bar{\mathbf{r}}, \bar{t}) \bar{\zeta}(\bar{\mathbf{r}}', \bar{t}') \rangle = 2\bar{D} \delta(\bar{t} - \bar{t}') \delta^{(3)}(\bar{\mathbf{r}} - \bar{\mathbf{r}}'), \quad (5.6)$$

com

$$\bar{D} = \frac{\lambda \theta}{\sqrt{|m^2| \gamma^3}}. \quad (5.7)$$

Para não ficarmos carregando as barras nas equações que se seguem, daqui para frente, vamos removê-las de todas as quantidades, ficando com:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) - \epsilon \phi(\mathbf{r}, t) - \phi^3(\mathbf{r}, t) + \zeta(\mathbf{r}, t), \quad (5.8)$$

e

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D \delta(t - t') \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (5.9)$$

A partir dessas equações, fica claro que a dinâmica do problema (tanto de transição de fase como da quantização estocástica) depende somente de dois parâmetros, em vez de cinco: ϵ e D . O primeiro se refere ao sinal do termo de “massa”, a constante proporcional a ϕ^2 na energia livre ou ação. D é uma combinação da razão $\lambda/|m^2|$, característica do sistema, e $k_B T$ ou \hbar , que não se refere ao sistema propriamente dito, mas sim ao **mundos externo** - banho térmico ($k_B T$) ou a mecânica quântica (\hbar).

Vamos passar a discutir a discretização das equações numa rede espacial cúbica de volume $V = L^3$ e espaçamento h , $L = Nh$, em que N é o número de espaçamentos da rede. Logo, as variáveis x , y e z são dadas por

$$x = ih, \quad y = jh \quad \text{e} \quad z = kh, \quad i, j, k = 0, 1, 2, \dots, N-1. \quad (5.10)$$

A transcrição dessa discretização para dimensões espaciais diferentes de 3 é trivial: por exemplo, para duas dimensões, basta ignorar a variável z . As CPC são escritas como

$$\begin{aligned}\phi(x + Nh, y, z, t) &= \phi(x, y, z, t), \\ \phi(x, y + Nh, z, t) &= \phi(x, y, z, t), \\ \phi(x, y, z + Nh, t) &= \phi(x, y, z, t).\end{aligned}\tag{5.11}$$

A discretização da variável tempo é questão mais sutil. Na presente Tese, vamos nos limitar ao esquema explícito de Euler, o qual se mostrou suficientemente confiável para os problemas estudados. Inicialmente particionamos o intervalo temporal em n pedaços, $t = n \Delta t$ com $n = 0, 1, 2, \dots$. Com isto, o campo contínuo $\phi(x, y, z, t)$ passa a ser denotado como ϕ_{ijk}^n . O termo referente ao laplaciano é escrito usando diferenças finitas para a coordenada espacial:

$$\begin{aligned}\nabla^2 \phi(x, y, z, t) &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi(x, y, z, t) \\ \rightarrow (\nabla^2 \phi_{ijk}^n)_{discr} &\equiv \frac{1}{h^2} [\phi_{i+1jk}^n - 2\phi_{ijk}^n + \phi_{i-1jk}^n] + \frac{1}{h^2} [\phi_{ij+1k}^n - 2\phi_{ijk}^n + \phi_{ij-1k}^n] \\ &+ \frac{1}{h^2} [\phi_{ijk+1}^n - 2\phi_{ijk}^n + \phi_{ijk-1}^n] \\ &= \frac{1}{h^2} \left[\phi_{i+1jk}^n + \phi_{i-1jk}^n + \phi_{ij+1k}^n + \phi_{ij-1k}^n \right. \\ &\quad \left. + \phi_{ijk+1}^n + \phi_{ijk-1}^n - 6\phi_{ijk}^n \right].\end{aligned}\tag{5.12}$$

No esquema de Euler, a derivada temporal é escrita como

$$\frac{\partial \phi_{ijk}^n}{\partial t} = \frac{\phi_{ijk}^{n+1} - \phi_{ijk}^n}{\Delta t},\tag{5.13}$$

de maneira que a equação de GLL passa a ser

$$\phi_{ijk}^{n+1} = \phi_{ijk}^n + B(\phi_{ijk}^n, \zeta_{ijk}^n) \Delta t,\tag{5.14}$$

com

$$B(\phi_{ijk}^n, \zeta_{ijk}^n) = (\nabla^2 \phi_{ijk}^n)_{discr} - \epsilon \phi_{ijk}^n - (\phi_{ijk}^n)^3 + \zeta_{ijk}^n.\tag{5.15}$$

Sabidamente, o esquema explícito de Euler não é muito eficiente computacionalmente, pois a convergência do esquema requer $\Delta t < h^2$, como discutido na Ref. [53]. Para os nossos propósitos nesta Tese, não é necessário partir para esquemas numéricos mais sofisticados, como o que desenvolvemos na Ref. [54] e que está baseado num esquema semi-implícito e colocação de Fourier.

5.2 Soluções com ruído nulo

Há muitas situações no estudo de transições de fase em que o ruído não é importante. Uma situação típica é o de uma mudança muito rápida da temperatura externa do sistema, de maneira que o sistema inicialmente em equilíbrio a uma temperatura T muito maior que a temperatura crítica T_c do sistema passa para um estado fora do equilíbrio a uma temperatura T' muito abaixo de T_c . Isto é, subitamente o sistema sofre um *quench* de temperatura:

$$T \gg T_c \rightarrow T' \ll T_c. \quad (5.16)$$

Portanto, ao sofrer este *quench* de temperatura, o sistema encontra-se num estado de não equilíbrio a temperatura muito baixa. Como o ruído é proporcional à temperatura, $\zeta \sim \sqrt{T}$ (ver Eq. (3.29)), seu papel na evolução do sistema em direção a um novo estado de equilíbrio deve ser pouco importante, desprezível [34, 55]. Porém, como flutuações termodinâmicas estão presentes no sistema essencialmente no estado inicial, para levá-las em conta, uma média sobre condições iniciais ruidosas deve ser suficiente para obtermos os valores médios de observáveis. Nesta Seção vamos considerar resultados numéricos da equação de GLL com ruído nulo. Na próxima Seção trabalharemos com a inclusão de ruído e discutiremos problemas de instabilidades devido ao ruído.

Na presente Seção, estaremos interessados também em investigar o MHTE e convergência das correções perturbativas ditadas pelo método. Para tal, vamos considerar a situação de um *quench* de temperatura em que o sistema está inicialmente numa fase de simetria quebrada e, com a diminuição da temperatura o sistema vai para uma fase de simetria restaurada. Fisicamente tal situação ocorre na descrição do confinamento da carga de cor na cromodinâmica quântica no limite de massas dos quarks infinitamente pesadas. Especificamente, neste caso o parâmetro de ordem é o valor médio do *loop* de Polyakov - ver páginas 309-311 da Ref. [6]: na fase confinada, a temperatura abaixo de uma temperatura crítica T_c , o valor médio do parâmetro de ordem é nulo; na fase desconfiada, quando o sistema se encontra a uma temperatura acima de T_c , o valor médio do parâmetro de ordem é não nulo. Um exemplo de uma situação física real em que isto acontece é na hadronização do plasma de quarks e gluons: na expansão do plasma, que se encontra a uma temperatura maior que T_c , este evolui para um estado hadronizado em que a temperatura é bem mais baixa. Claramente isso é uma assinatura de um *quench*, pois essa transição pode não ser súbita e, obviamente, a massa dos quarks não é infinita. Para o caso de uma teoria de calibre SU(2), um modelo de energia livre para descrever esta transição é do tipo duplo-poço e a equação de GLL associada é da forma da Eq. (5.8). Resultados de

simulações desse problema podem ser encontrados na Ref. [56].

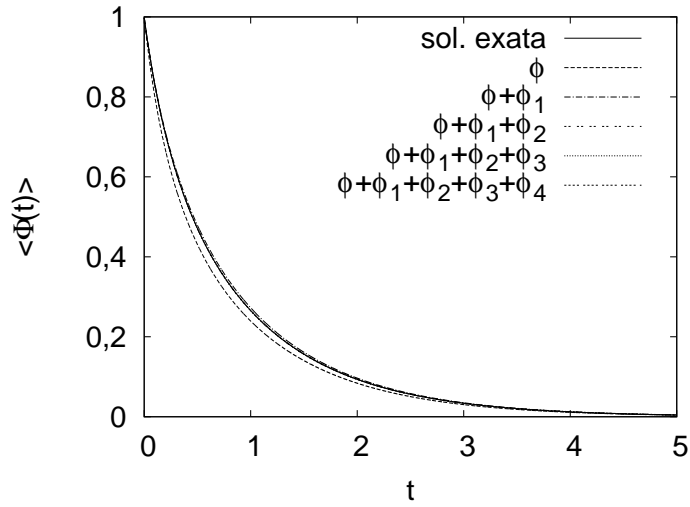


Figura 5.1: Soluções exata (Eq.(5.8)), de ordem zero (na Figura, ϕ , que é solução da Eq.(5.17)) e perturbativas (na Figura, $\phi_1 \dots \phi_4$, que são soluções da Eq.(5.18)) da equação de GLL sem ruído.

A seguir, vamos comparar resultados obtidos com a solução da equação de GLL da Eq. (5.8) e das soluções obtidas com as equações do MHTE - todas sem o campo de ruído. Na forma adimensional, as equações do MHTE são:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) - [\epsilon + \bar{\omega}(t)] \phi(\mathbf{r}, t), \quad (5.17)$$

a qual chamaremos de ‘MHTE ordem zero’, e as correções à ordem zero:

$$\frac{\partial \phi_n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla^2 \phi_n(\mathbf{r}, t) - [\epsilon + \bar{\omega}(t)] \phi_n(\mathbf{r}, t) - D_n(\phi, \bar{\phi}), \quad (5.18)$$

em que explicitamos os quatro primeiros termos em teoria de perturbação:

$$D_1(\phi, \bar{\phi}) = \phi_0^3(\mathbf{r}, t) - \bar{\omega}(t) \phi_0(\mathbf{r}, t), \quad (5.19)$$

$$D_2(\phi, \bar{\phi}) = [3\phi_0^2(\mathbf{r}, t) - \bar{\omega}(t)] \phi_1(\mathbf{r}, t), \quad (5.20)$$

$$D_3(\phi, \bar{\phi}) = [3\phi_0^2(\mathbf{r}, t) - \bar{\omega}(t)] \phi_2(\mathbf{r}, t) + 3\phi_0(\mathbf{r}, t) \phi_1^2(\mathbf{r}, t), \quad (5.21)$$

$$\begin{aligned} D_4(\phi, \bar{\phi}) &= [3\phi_0^2(\mathbf{r}, t) - \bar{\omega}(t)] \phi_3(\mathbf{r}, t) + 3\phi_1^3(\mathbf{r}, t) \\ &+ 6\phi_0(\mathbf{r}, t) \phi_1(\mathbf{r}, t) \phi_2(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (5.22)$$

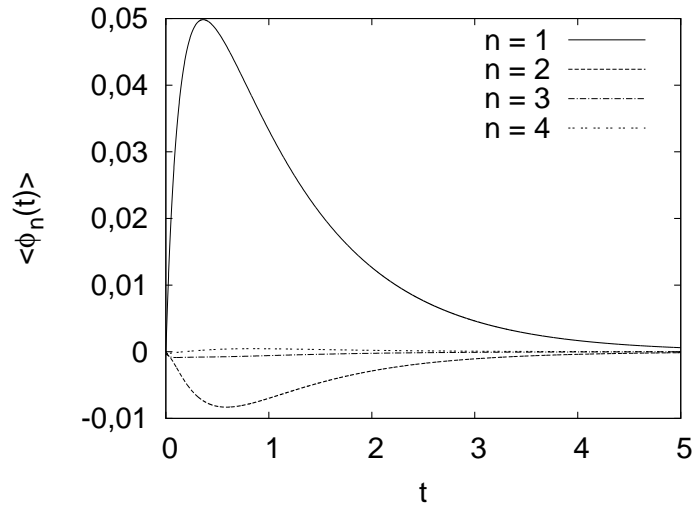


Figura 5.2: Contribuições individuais ϕ_n para o valor médio do parâmetro de ordem.

sendo que as denominaremos respectivamente de ‘primeira ordem’ ... ‘quarta ordem’. Nestas equações, $\bar{\omega}(t)$ é dado pela Eq. (3.107).

Vamos discutir resultados para a dependência temporal da média sobre o volume do parâmetro de ordem, definida como

$$\langle \phi(t) \rangle = \frac{1}{N^3} \sum_{ijk} \phi_{ijk}^n. \quad (5.23)$$

Na Fig. 5.1 estão apresentados os resultados em que $\zeta = 0$ tanto para a equação de GLL completa (exata) quanto para a equação de GLL com o MHTE em ordem zero e com o auxílio de teoria de perturbação para os casos de $D_1(\phi, \bar{\phi})$, $D_2(\phi, \bar{\phi})$, $D_3(\phi, \bar{\phi})$ e $D_4(\phi, \bar{\phi})$. Claramente, a convergência a partir da primeira ordem é excelente.

Para melhor avaliar a importância de cada contribuição perturbativa ao valor médio do parâmetro de ordem, na Fig. 5.2 mostramos cada uma das contribuições ϕ_n , com $n = 1, \dots, 4$. Como pode ser visto, a contribuição mais importante é de ϕ_1 . As contribuições de ϕ_n , com $n \geq 2$, são muito pequenas.

A discussão para situações com $m^2 < 0$ é de interesse para o caso em que a altas temperaturas o sistema se encontra no equilíbrio na fase simétrica (um único mínimo da energia livre) e a baixas temperaturas o sistema no equilíbrio pode se encontrar em um de vários mínimos equivalentes da energia livre, uma situação de quebra espontânea de simetria. Essa situação é de interesse, por exemplo, para o estudo de sistemas magnéticos na física da matéria condensada e na dinâmica da

quebra espontânea da simetria quiral na QCD. Para essas situações, as correções perturbativas não podem ser feitas empregando as equações acima. A razão é que durante a evolução do sistema para o equilíbrio a partir de uma condição inicial com $\phi \approx 0$ (fase simétrica), o parâmetro de ordem cresce de maneira a atingir o equilíbrio ($\phi \approx 1$ para o caso de uma teoria $\lambda\phi^4$ como acima), o que implica que os termos perturbativos D_n não são necessariamente pequenos. Para implementar um cálculo perturbativo para situações com quebra espontânea de simetria é necessário perturbar ao redor de um mínimo. Isso pode ser feito através de uma translação do parâmetro de ordem da forma $\phi \rightarrow \phi + \phi_0$, e ϕ_0 pode ser escolhido como sendo o valor de ϕ no mínimo do potencial original - ou do potencial efetivo, como na discussão da Seção 5.4. Uma discussão dessa natureza, apesar de muito interessante e necessária para sistemas com quebra espontânea de simetria, não irá trazer nada de novo no que se refere ao MHTE sem ruído e por isso não prosseguiremos com ela.

5.3 Soluções na presença de ruído

Na presente Seção apresentaremos resultados para a equação completa de GLL, isto é, na presença do campo de ruído e sem aproximações. Na rede, o campo de ruído com uma função de correlação de ruído branco, como dada na Eq. (5.9), é dado por

$$\zeta = \sqrt{2D} \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} \frac{1}{h^{3/2}} \xi, \quad (5.24)$$

sendo que ξ é um ruído Gaussiano:

$$\langle \xi \rangle = 0, \quad \langle \xi^2 \rangle = 1. \quad (5.25)$$

Os resultados que serão apresentados referem-se à dependência temporal da média sobre o volume do parâmetro de ordem, definida como

$$\langle \phi(t) \rangle = \frac{1}{N^3} \sum_{ijk} \bar{\phi}_{ijk}^n, \quad (5.26)$$

em que $\bar{\phi}_{ijk}^n$ é a média sobre um número N_r de realizações independentes de ruído,

$$\bar{\phi}_{ijk}^n = \frac{1}{N_r} \sum_{r=1}^{N_r} \phi_{ijk}^n, \quad (5.27)$$

e N_r é um número suficientemente grande de maneira que $\langle \phi(t) \rangle$ atinja o equilíbrio, i.e. se torne efetivamente independente do tempo. Em todas as simulações, empregamos como condição inicial

$$\phi_{ijk}^0 = 0, 1 + 0,001(1, 0 - 2 * \text{ran}), \quad (5.28)$$

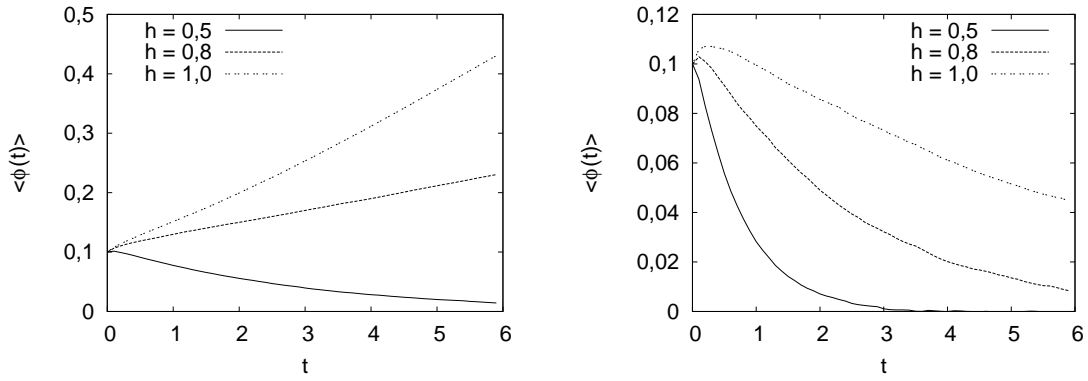


Figura 5.3: Valor médio do parâmetro de ordem em função do tempo para diferentes espaçamentos da rede para a equação de GLL Eq. (5.14). $D = 1$ para o gráfico da esquerda e $D = 2$ para o gráfico da direita.

e ran é um número aleatório gerado uniformemente entre 0 e 1 e $\Delta t = 0,001$.

Na Fig. 5.3 apresentamos os resultados para $\langle \phi(t) \rangle$ obtidos a partir da simulação da Eq. (5.14) usando condições de contorno periódicas. Estão mostrados resultados para três valores diferentes do espaçamento da rede: $h = 1, h = 0,8$ e $h = 0,5$. No gráfico da esquerda (direita), a intensidade do ruído D é tomada como sendo $D = 1$ ($D = 2$). Conforme pode ser visto na figura, as soluções apresentam uma grande e inaceitável sensibilidade ao valor do espaçamento da rede empregado.

Na Fig. 5.4 apresentamos resultados para $\langle \phi(t) \rangle$ obtidos a partir da simulação da equação de GLL correspondente a ordem zero do MHTE para o hamiltoniano de Wilson-Ginzburg-Landau (WGL):

$$\phi_{ijk}^{n+1} = \phi_{ijk}^n + B_0(\phi_{ijk}^n, \zeta_{ijk}^n) \Delta t, \quad (5.29)$$

com

$$B_0(\phi_{ijk}^n, \zeta_{ijk}^n) = (\nabla^2 \phi_{ijk}^n)_{discr} - (\epsilon + \bar{\omega}^n) \phi_{ijk}^n + \zeta_{ijk}^n, \quad (5.30)$$

em que $\bar{\omega}^n$ é o valor de $\bar{\omega}(t)$ no tempo $n\Delta t$. Novamente, observa-se a grande sensibilidade das soluções ao valor do espaçamento da rede empregado nas simulações. Como no caso acima, uma sensibilidade dessa ordem não é aceitável, pois h é simplesmente um parâmetro de discretização da equação no contínuo e, em princípio, não tem significado físico. Em problemas de matéria condensada, um valor de h muito pequeno não tem significado físico, porque naturalmente a equação de GLL no contínuo somente é válida para comprimentos de onda maiores que a distância característica, a_c , entre as partículas que compõem o material em estudo - isto significa que na decomposição em modos de Fourier do parâmetro de ordem, temos

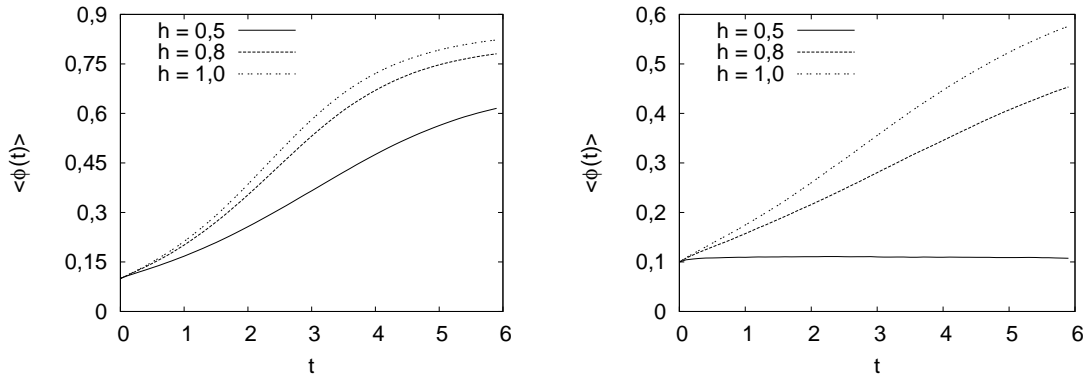


Figura 5.4: Valor médio do parâmetro de ordem em função do tempo para diferentes espaçamentos da rede para a equação de GLL na ordem zero do MHTE para o hamiltoniano de WGL. $D = 1$ para o gráfico da esquerda e $D = 2$ para o gráfico da direita.

que ter modos satisfazendo $k < 2\pi/a_c$, k é o módulo do vetor de onda dos modos de Fourier. Em princípio, conhecendo esse comprimento característico a_c , temos que ter $h > a_c$. No entanto, para obtermos soluções válidas para qualquer sistema, independente do material específico e das condições externas (ruído), é de extrema importância possuímos um método que leve a soluções independentes de h . Para problemas de teorias quânticas de campos, em que o problema é formulado no contínuo, a obtenção de resultados independentes de h é obrigatório, por princípio.

É importante mencionar que esta sensibilidade **não tem** origem no algoritmo empregado (de Euler) para simular a equação de GLL [57, 58]. Este problema está relacionado à catástrofe ultravioleta de Rayleigh-Jeans, muito discutida em teoria de campos clássicos: a dinâmica descrita pela equação de GLL é clássica e, portanto, não está bem definida para comprimentos de onda muito pequenos. Para discutir essas divergências, consideremos a distribuição de probabilidade de equilíbrio para as soluções do problema. Conforme visto anteriormente, a distribuição de probabilidade de configurações de campo ϕ no equilíbrio termodinâmico é dada pela distribuição de Boltzmann:

$$P_{\phi}^{\text{eq}}(\{\phi(\mathbf{r})\}) = \frac{1}{Z[\phi]} e^{-\beta F[\phi]}, \quad (5.31)$$

e a função de partição é dada pela integral de trajetória

$$Z[\phi] = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta F[\phi]}, \quad (5.32)$$

com $\beta = 1/k_B T$, T é a temperatura e k_B é a constante de Boltzmann. Valores médios de equilíbrio de observáveis $\mathcal{O}(\phi)$ são calculados como

$$\langle \mathcal{O}(\phi) \rangle = \frac{1}{Z[\phi]} \int \mathcal{D}\phi \mathcal{O}(\phi) e^{-\beta F[\phi]}. \quad (5.33)$$

Em geral, o cálculo de $\langle \mathcal{O}(\phi) \rangle$ se defronta com a dificuldade de que aparecem divergências ultravioletas; um exemplo que já encontramos na presente Tese no Capítulo 3 foi o cálculo da função de correlação de dois pontos, Eq. (3.83). O mesmo valor médio $\langle \mathcal{O}(\phi) \rangle$, como foi visto na Seção 3.1, pode também ser calculado a partir de soluções da equação de GLL correspondente à energia livre $F[\phi]$ como:

$$\langle \mathcal{O}(\phi) \rangle = \lim_{N, t \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}(\phi_i), \quad (5.34)$$

e $N \rightarrow \infty$ significa na prática um número muito grande de simulações com diferentes realizações de ruído, e $t \rightarrow \infty$ significa um tempo de simulação grande o suficiente de maneira que as soluções sejam efetivamente independentes de t . Na presença de ruído, os modos com comprimentos de onda longos e curtos se misturam no processo de termalização de uma simulação, o que leva a resultados dependentes do espaçamento de rede.

Esta sensibilidade a h pode ser eliminada a partir da adição de contratermos apropriados ao potencial, garantindo um correto comportamento dos comprimentos de onda curtos da teoria discretizada. Discutiremos isto detalhadamente a seguir.

5.4 Regularização da equação de GLL

Nesta Seção derivaremos os contratermos que devem ser adicionados à equação de GLL completa para que os resultados não sejam dependentes do espaçamento de rede utilizado. A derivação a seguir foi publicada na Ref. [57]. Nesta referência mostramos que o método pode também ser empregado em equações de GLL na presença de ruído multiplicativo, e não somente no caso de ruído aditivo, como o que estamos trabalhando na presente Tese.

Conforme já discutimos, a equação de GLL completa é dada por

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} + \zeta(\mathbf{r}, t), \quad (5.35)$$

em que $F[\phi]$ é a energia livre de Landau ou hamiltoniano de Ginzburg-Landau. O hamiltoniano de WGL do tipo poço duplo é dado pela Eq. (3.15) (vamos tomar $\gamma = 1$, por simplicidade):

$$F[\phi] = \int d^3r \left[\frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + \frac{\lambda}{4} \phi^4 \right]. \quad (5.36)$$

Como visto, a distribuição de probabilidade de equilíbrio para configurações de campo que são soluções da equação de GLL completa escrita acima é dada por

$$P_{\phi}^{\text{eq}}(\{\phi(\mathbf{r})\}) = \frac{1}{Z[\phi]} \exp(-\beta F[\phi]), \quad (5.37)$$

a função de partição é dada pela integral de trajetória

$$Z[\phi] = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta F[\phi]} = \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]}, \quad (5.38)$$

com $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann e $S[\phi] = \beta F[\phi]$ é a ação euclidiana – a notação em termos de uma ação surge no contexto de uma teoria quântica de campos. Na derivação a seguir intercambiaremos $F[\phi]$ e $S[\phi]$ repetidamente, de acordo com a conveniência. Demonstramos que as soluções de equilíbrio das equações de GLL, após a média sobre diferentes realizações de ruído, é equivalente à média calculada a partir da função de partição clássica,

$$\langle \phi(r) \rangle = \frac{1}{Z[\phi]} \int \mathcal{D}\phi \phi(r) e^{-\beta F[\phi]}. \quad (5.39)$$

Também vimos que esta integral funcional é divergente no ultravioleta e, por este motivo, obtivemos os resultados mostrados na Seção anterior dependentes do espaçamento de rede utilizado. Vamos mostrar que a adição de contratermos a $F[\phi]$ eliminará estas divergências. Ou seja, o que faremos é o seguinte: modificaremos $F[\phi]$ pela adição de contratermos e usaremos este potencial modificado nas futuras simulações com as equações de GLL completa. Na Seção seguinte discutiremos como os contratermos que devem ser adicionados ao potencial da equação de GLL derivada com o MHTE podem ser obtidos.

Iniciaremos a derivação dos contratermos com a teoria descrita no contínuo e, logo após, faremos sua discretização na rede. O modelo em três dimensões é super-renormalizável perturbativamente, isto é, somente dois gráficos de Feynman na expansão perturbativa (em potências de λ) são divergentes. Portanto, conhecendo a dependência em h desses dois termos, é possível renormalizar o modelo completamente. Por esta razão, obteremos em teoria de perturbação o potencial efetivo do modelo. Para tal, como dito anteriormente, para o caso de $m^2 < 0$, é necessário implementar a teoria de perturbação ao redor de um dos mínimos do potencial. Especificamente, dada $S[\phi]$, podemos construir uma nova ação euclidiana $S[\phi_0, \phi]$ a partir de um *shift* no campo, de modo que

$$\phi(\mathbf{r}) \rightarrow \phi(\mathbf{r}) + \phi_0 \quad (5.40)$$

em que ϕ_0 é constante e será determinado a seguir. O potencial efetivo $\mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0]$ (energia livre macroscópica, que é a energia livre *bare* adicionada de correções térmicas)

pode ser escrito em termos da função de partição da seguinte forma:

$$V \mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0] = -\frac{1}{\beta} \ln Z[\phi + \phi_0], \quad (5.41)$$

e V é o volume tridimensional. O campo constante ϕ_0 é determinado pela minimização do potencial efetivo:

$$\frac{d\mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0]}{d\phi_0} = 0. \quad (5.42)$$

Com o *shift* no campo,

$$e^{-\beta V \mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0]} = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta F[\phi + \phi_0]}. \quad (5.43)$$

Calcularemos a quantidade $F[\phi + \phi_0]$ em detalhes. Inicialmente, notamos que:

$$\begin{aligned} F[\phi + \phi_0] &= \int d^3r \left\{ \frac{1}{2} [\nabla(\phi + \phi_0)]^2 + \frac{1}{2} m^2(\phi + \phi_0)^2 + \frac{\lambda}{4} (\phi + \phi_0)^4 \right\} \\ &= \int d^3r \left\{ \frac{1}{2} [(\nabla\phi)^2 + 2(\nabla\phi) \cdot (\nabla\phi_0) + (\nabla\phi_0)^2] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} m^2 [\phi^2 + 2\phi\phi_0 + \phi_0^2] + \frac{\lambda}{4} [\phi^4 + 4\phi^3\phi_0 + 6\phi^2\phi_0^2 + 4\phi\phi_0^3 + \phi_0^4] \right\} \\ &= \int d^3r \left[\frac{1}{2} m^2 \phi_0^2 + \frac{\lambda}{4} \phi_0^4 \right] + \int d^3r \left[m^2 \phi_0 + \lambda \phi_0^3 \right] \phi \\ &\quad + \int d^3r \left[\frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 + \left(\frac{m^2}{2} + \frac{3\lambda}{2} \phi_0^2 \right) \phi^2 \right] + \int d^3r \frac{\lambda}{4} [\phi^4 + 4\phi^3\phi_0] \\ &= V \mathcal{V}[\phi_0] + F[\phi, \phi_0] + F_2[\phi, \phi_0] + F_1[\phi, \phi_0], \end{aligned} \quad (5.44)$$

em que $\mathcal{V}[\phi_0]$ é o potencial clássico do problema com que estamos trabalhando, $F[\phi, \phi_0]$ contém termos lineares em ϕ , $F_2[\phi, \phi_0]$ contém termos quadráticos em ϕ e $F_1[\phi, \phi_0]$ contém termos cúbicos e quárticos em ϕ . Vamos inserir isto na Eq. (5.43):

$$\begin{aligned} e^{-\beta V \mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0]} &= \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta \{V \mathcal{V}[\phi_0] + F[\phi, \phi_0] + F_2[\phi, \phi_0] + F_1[\phi, \phi_0]\}} \\ &= e^{-\beta V \mathcal{V}[\phi_0]} \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi, \phi_0] - S_2[\phi, \phi_0] - S_1[\phi, \phi_0]}. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Desde o começo poderíamos ter inserido uma fonte externa J ao nosso sistema, que se acoplaria linearmente ao campo ϕ . Com isto, ficaria claro que os termos lineares em ϕ presentes na expressão acima podem ser desprezados, uma vez que sempre é

possível redefinirmos uma fonte externa J' tal que todos os termos proporcionais a ϕ presentes nesta expressão fossem englobados nesta nova definição. Como ao final dos cálculos tomamos $J = 0$, estes termos podem ser desprezados. Assim:

$$e^{-\beta V \mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0]} = e^{-\beta V \mathcal{V}[\phi_0]} \int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]} e^{-S_1[\phi, \phi_0]}. \quad (5.46)$$

É possível provar [59] que esta expressão supõe que apenas os gráficos conexos e irreduzíveis a uma partícula (1PI) são os que nos interessam. Dando prosseguimento aos cálculos, usaremos a igualdade $\ln(ab) = \ln a + \ln b$:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0] &= \mathcal{V}[\phi_0] - \frac{1}{\beta V} \ln \int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]} e^{-S_1[\phi, \phi_0]} \\ &= \mathcal{V}[\phi_0] - \frac{1}{\beta V} \ln \langle e^{-S_1[\phi, \phi_0]} \rangle - \frac{1}{\beta V} \ln \int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]}, \end{aligned} \quad (5.47)$$

em que

$$\langle e^{-S_1[\phi, \phi_0]} \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]} e^{-S_1[\phi, \phi_0]}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]}}. \quad (5.48)$$

Calcularemos agora o segundo e terceiro termos do lado direito (LD) da Eq. (5.47). Começaremos pelo terceiro termo:

$$\frac{1}{\beta V} \ln \int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]} = \frac{1}{\beta V} \ln \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\beta \int d^3r \left[\frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{M^2}{2} \phi^2 \right] \right\}, \quad (5.49)$$

sendo $M^2 = m^2 + 3\lambda\phi_0^2$. Usando o fato de que $\int d^3r (\nabla\phi)^2 = -\int d^3r \phi \nabla^2 \phi$, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta V} \ln \int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]} &= \frac{1}{\beta V} \ln \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ \beta \int d^3r \left[\frac{1}{2} \phi \nabla^2 \phi - \frac{1}{2} M^2 \phi^2 \right] \right\} \\ &= \frac{1}{\beta V} \ln \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ \frac{1}{2} \int d^3r \phi \left[\beta (\nabla^2 - M^2) \right] \phi \right\} \\ &= \frac{1}{\beta V} \ln \left\{ \det \left[\beta (\nabla^2 - M^2) \right] \right\}^{-1/2} \\ &= -\frac{T}{2V} \ln \det \left[\beta (\nabla^2 - M^2) \right]. \end{aligned} \quad (5.50)$$

É possível mostrar que $\ln \det A = \text{Tr} \ln A$. Portanto:

$$\frac{1}{\beta V} \ln \int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]} = -\frac{T}{2V} \text{Tr} \ln \left[\beta (\nabla^2 - M^2) \right]. \quad (5.51)$$

Usando as propriedades de que $\ln(ab) = \ln(a) + \ln(b)$ e de que $\text{Tr}(c + d) = \text{Tr}(c) + \text{Tr}(d)$, chegamos a:

$$\frac{1}{\beta V} \ln \int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]} = \frac{T}{2V} \text{Tr} \ln T - \frac{T}{2V} \text{Tr} \ln (\nabla^2 - M^2). \quad (5.52)$$

No limite termodinâmico de $V \rightarrow \infty$, o primeiro termo do LD desta expressão vai a zero. No espaço dos momentos, o segundo termo pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta V} \ln \int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]} &= -\frac{T}{2V} \left[\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \right] \ln(k^2 + M^2) \\ &= -\frac{T}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \ln(k^2 + M^2) \\ &= -\frac{T}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \ln \tilde{G}^{-1}[\mathbf{k}^2]. \end{aligned} \quad (5.53)$$

Esta quantidade divergente fornece um gráfico do tipo *tadpole*. Na sequência calcularemos o segundo termo do LD da Eq.(5.47):

$$\frac{1}{\beta V} \ln \langle e^{-S_1[\phi, \phi_0]} \rangle = \frac{1}{\beta V} \ln \left\{ \frac{\int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]} e^{-S_1[\phi, \phi_0]}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-S_2[\phi, \phi_0]}} \right\}. \quad (5.54)$$

Anteriormente mostramos que

$$S_2[\phi, \phi_0] = \frac{\beta}{2} \int d^3r \phi [-\nabla^2 + M^2] \phi. \quad (5.55)$$

Pode-se mostrar também que

$$S_I[\phi, \phi_0] = \beta \int d^3r \left[-\kappa \phi^3 + \frac{\lambda}{4} \phi^4 \right], \quad (5.56)$$

em que $\kappa = -\lambda\phi_0$. Na sequência faremos um *rescaling* nos campos ($\phi \rightarrow \phi/\sqrt{\beta}$) a fim de eliminarmos o fator dimensional β de S_2 :

$$\frac{1}{\beta V} \ln \langle e^{-S_1[\phi, \phi_0]} \rangle = \frac{T}{V} \ln S_{\log}. \quad (5.57)$$

e

$$S_{\log} = \frac{\int \mathcal{D}\phi \exp \left[-\frac{1}{2} \int d^3r \phi (-\nabla^2 + M^2) \phi \right] \exp \left[- \int d^3r \left(-\frac{\kappa}{\sqrt{\beta}} \phi^3 + \frac{\lambda}{4\beta} \phi^4 \right) \right]}{\int \mathcal{D}\phi \exp \left[-\frac{1}{2} \int d^3r \phi (-\nabla^2 + M^2) \phi \right]}. \quad (5.58)$$

Em S_{\log} , expandiremos a exponencial que contém a interação, $e^{-S_I[\phi, \phi_0]}$, em série de Taylor, $e^x = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \dots$ (os demais termos desta série não interessam porque ou são finitos ou são redutíveis a uma partícula):

$$\begin{aligned} S_{\log} = & 1 + \frac{\kappa}{\sqrt{\beta}} \int d^3r \langle \phi^3(\mathbf{r}) \rangle - \frac{\lambda}{4\beta} \int d^3r \langle \phi^4(\mathbf{r}) \rangle + \frac{\kappa^2}{2\beta} \int d^3r d^3r' \langle \phi^3(\mathbf{r}) \phi^3(\mathbf{r}') \rangle \\ & - \frac{\kappa\lambda}{4\beta\sqrt{\beta}} \int d^3r d^3r' \langle \phi^3(\mathbf{r}) \phi^4(\mathbf{r}') \rangle + \frac{\lambda^2}{32\beta^2} \int d^3r d^3r' \langle \phi^4(\mathbf{r}) \phi^4(\mathbf{r}') \rangle. \end{aligned} \quad (5.59)$$

Mas, usando série de Taylor para a função logarítmica, $\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \dots$ (somente o primeiro termo desta série nos interessará, os demais termos novamente ou são finitos ou são redutíveis a uma partícula). Os termos proporcionais a $\langle \phi^3(\mathbf{r}) \rangle$ e $\langle \phi^3(\mathbf{r}) \phi^4(\mathbf{r}') \rangle$ são nulos, uma vez que temos uma integral do produto de uma função par (função exponencial em que os campos aparecem quadraticamente) com uma função ímpar (ϕ^3). Com isto, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta V} \ln \langle e^{-S_I[\phi, \phi_0]} \rangle = & -\frac{\lambda T^2}{4V} \int d^3r \langle \phi^4(\mathbf{r}) \rangle + \frac{T^2 \kappa^2}{2V} \int d^3r d^3r' \langle \phi^3(\mathbf{r}) \phi^3(\mathbf{r}') \rangle \\ & + \frac{\lambda^2 T^3}{32V} \int d^3r d^3r' \langle \phi^4(\mathbf{r}) \phi^4(\mathbf{r}') \rangle. \end{aligned} \quad (5.60)$$

Os três termos são divergentes. O primeiro fornece um gráfico do tipo *tadpole* (linearmente divergente):

$$-\frac{\lambda T^2}{4V} \int d^3r \langle \phi^4(\mathbf{r}) \rangle = -\frac{3\lambda T^2}{4} \int \frac{d^3k d^3q}{(2\pi)^6} \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2]. \quad (5.61)$$

O segundo termo fornece um gráfico do tipo *setting-sun*:

$$\frac{T^2 \kappa^2}{2V} \int d^3r d^3r' \langle \phi^3(\mathbf{r}) \phi^3(\mathbf{r}') \rangle = \frac{\lambda^2 T^2}{2} \phi_0^2 6 H[\phi_0], \quad (5.62)$$

em que

$$H[\phi_0] = \frac{1}{6V} \int d^3r d^3r' \langle \phi^3(\mathbf{r}) \phi^3(\mathbf{r}') \rangle. \quad (5.63)$$

Usando o teorema de Wick,

$$\begin{aligned} H[\phi_0] = & \frac{1}{6V} \int d^3r d^3r' \langle \phi^3(\mathbf{r}) \phi^3(\mathbf{r}') \rangle \\ = & \frac{1}{6V} \int d^3r d^3r' \left\{ 9 \langle \phi^2(\mathbf{r}) \rangle \langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle \langle \phi^2(\mathbf{r}') \rangle + 6 \langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle^3 \right\}. \end{aligned} \quad (5.64)$$

Como o primeiro termo desta expressão nos fornece um gráfico que é redutível a uma partícula, não nos interessa para o cálculo do potencial efetivo. Assim, ficamos apenas com:

$$\begin{aligned} H[\phi_0] &= \frac{1}{V} \int d^3r d^3r' \langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle^3 \\ &= \frac{1}{V} \int d^3r d^3r' \langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle \langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle \langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Fazendo a transformada de Fourier de cada função de correlação:

$$\begin{aligned} H[\phi_0] &= \frac{1}{V} \int d^3r d^3r' \int \frac{d^3k d^3p d^3q}{(2\pi)^9} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{p}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \\ &= \frac{1}{V} \int \frac{d^3k d^3p d^3q}{(2\pi)^9} \left\{ \int d^3r e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{p}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} \right\} \\ &\quad \times \left\{ \int d^3r' e^{i(-\mathbf{k}-\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}'} \right\} \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{p}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \\ &= \frac{1}{V} \int \frac{d^3k d^3p d^3q}{(2\pi)^9} \left\{ (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{k} + \mathbf{p} + \mathbf{q}) \right\}^2 \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{p}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \\ &= \frac{1}{V} \int \frac{d^3k d^3q}{(2\pi)^3} \left[\delta^{(3)}(0) \right] \tilde{G}[(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2] \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \\ &= \frac{1}{V} \int \frac{d^3k d^3q}{(2\pi)^3} \left[\frac{V}{(2\pi)^3} \right] \tilde{G}[(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2] \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \\ &= \int \frac{d^3k d^3q}{(2\pi)^6} \tilde{G}[(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2] \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2]. \end{aligned} \quad (5.66)$$

Logo:

$$\frac{T^2 \kappa^2}{2V} \int d^3r d^3r' \langle \phi^3(\mathbf{r}) \phi^3(\mathbf{r}') \rangle = 3\lambda^2 T^2 \phi_0^2 \int \frac{d^3k d^3q}{(2\pi)^6} \tilde{G}[(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2] \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \quad (5.67)$$

O terceiro termo da Eq.(5.60) é dado por

$$\begin{aligned} \int d^3r d^3r' \langle \phi^4(\mathbf{r}) \phi^4(\mathbf{r}') \rangle &\sim \int d^3r d^3r' \left[\langle \phi^2(\mathbf{r}) \rangle^2 \langle \phi^2(\mathbf{r}') \rangle^2 \right. \\ &\quad \left. + \langle \phi^2(\mathbf{r}) \rangle \langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle \langle \phi^2(\mathbf{r}') \rangle + \langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle^4 \right] \end{aligned} \quad (5.68)$$

O primeiro termo do LD desta expressão é desconectado e o segundo, é redutível a uma partícula. Logo, não nos interessam. Assim, ficamos com:

$$\int d^3r d^3r' \langle \phi^4(\mathbf{r}) \phi^4(\mathbf{r}') \rangle \sim V \int \frac{d^3k d^3q d^3p}{(2\pi)^9} \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \tilde{G}[\mathbf{p}^2] \tilde{G}[(\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{p})^2] \quad (5.69)$$

que é linearmente divergente. Inserindo as expressões (5.61), (5.67) e (5.69) na Eq. (5.60), obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta V} \ln \langle e^{-S_1[\phi, \phi_0]} \rangle &= -\frac{3\lambda T^2}{4} \int \frac{d^3 k d^3 q}{(2\pi)^6} \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \\ &+ 3\lambda^2 T^2 \phi_0^2 \int \frac{d^3 k d^3 q}{(2\pi)^6} \tilde{G}[(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2] \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \\ &+ \alpha \frac{\lambda^2 T^3}{32} \int \frac{d^3 k d^3 q d^3 p}{(2\pi)^9} \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \tilde{G}[\mathbf{p}^2] \tilde{G}[(\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{p})^2] \end{aligned} \quad (5.70)$$

α é uma constante de proporcionalidade. Inserindo (5.53) e (5.70) na Eq. (5.47) obtemos a seguinte expressão para o potencial efetivo:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0] &= \mathcal{V}[\phi_0] + \frac{T}{2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \ln \tilde{G}^{-1}[\mathbf{k}^2] + \frac{3\lambda T^2}{4} \int \frac{d^3 k d^3 q}{(2\pi)^6} \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \\ &- 3\lambda^2 T^2 \phi_0^2 \int \frac{d^3 k d^3 q}{(2\pi)^6} \tilde{G}[(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2] \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \\ &- \alpha \frac{\lambda^2 T^3}{32} \int \frac{d^3 k d^3 q d^3 p}{(2\pi)^9} \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \tilde{G}[\mathbf{p}^2] \tilde{G}[(\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{p})^2]. \end{aligned} \quad (5.71)$$

A fim de verificarmos quais destas quantidades divergentes contribuirão efetivamente para o cálculo dos contratermos do potencial, vamos escrever uma série de Taylor para o potencial efetivo em torno de $\phi_0 = 0$:

$$\mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0] = \mathcal{V}_{\text{eff}}[0] + \phi_0 \mathcal{V}'_{\text{eff}}[0] + \frac{\phi_0^2}{2} \mathcal{V}''_{\text{eff}}[0] + \dots \quad (5.72)$$

Apenas estes termos da série contribuem, uma vez que, conforme é possível ver na Eq.(5.71), se tivermos derivadas de ordens superiores, obteremos apenas quantidades finitas, as quais não nos interessam para o cálculo dos termos divergentes. O primeiro termo do LD da expressão acima nos fornecerá quantidades que não dependem de ϕ_0 e que, portanto, não nos interessam. Por definição (ver Eq. (5.42)), $\mathcal{V}'_{\text{eff}}[0] = 0$. Assim:

$$\mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0] = \frac{\phi_0^2}{2} \mathcal{V}''_{\text{eff}}[0]. \quad (5.73)$$

Ou seja, somente os termos proporcionais a ϕ_0^2 são divergentes. Assim, a parte divergente do potencial efetivo é obtida a partir de:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0]}{d\phi_0^2} &= 3\lambda T \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \tilde{G}[\mathbf{k}^2] - 6\lambda^2 T^2 \int \frac{d^3 k d^3 q}{(2\pi)^6} \tilde{G}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}[\mathbf{q}^2] \tilde{G}[(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2] \\ &= 3\lambda T I_{\text{div}}[\phi_0] - 6\lambda^2 T^2 H_{\text{div}}[\phi_0], \end{aligned} \quad (5.74)$$

em que $I_{\text{div}}[\phi_0]$ e $H_{\text{div}}[\phi_0]$ são, respectivamente, as partes divergentes do gráfico *tadpole* obtido da integral funcional de S_2 e vinda do gráfico *setting-sun*. Como as equações de GLL são simuladas em uma rede cúbica, para calcularmos estas duas quantidades, $I_{\text{div}}[\phi_0]$ e $H_{\text{div}}[\phi_0]$, usaremos também a rede.

Consideramos uma rede de volume $V = L^3$, em que $L = Nh$, h é o espaçamento da rede e N é o número de espaçamentos (divisões) da rede. Como o sistema é tridimensional, $i = 1, 2, 3$, as coordenadas x_i dos sítios da rede são tais que $0 \leq x_i \leq h(N - 1)$. Para calcularmos $I_{\text{div}}[\phi_0]$ e $H_{\text{div}}[\phi_0]$, precisamos saber como o propagador $\tilde{G}[\mathbf{k}^2]$ é escrito na rede. Para calculá-lo, porém, precisamos conhecer a forma como algumas quantidades são escritas na rede. Uma delas é o laplaciano:

$$\nabla^2 \phi(x, y, z) = \frac{\partial^2 \phi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, y, z)}{\partial z^2}. \quad (5.75)$$

Usando diferenças finitas para a coordenada espacial, temos:

$$\begin{aligned} \nabla_{\text{rede}}^2 \phi(x, y, z) &= \frac{1}{h^2} \left[\phi(x + h, y, z) - 2\phi(x, y, z) + \phi(x - h, y, z) \right] \\ &+ \frac{1}{h^2} \left[\phi(x, y + h, z) - 2\phi(x, y, z) + \phi(x, y - h, z) \right] \\ &+ \frac{1}{h^2} \left[\phi(x, y, z + h) - 2\phi(x, y, z) + \phi(x, y, z - h) \right]. \end{aligned} \quad (5.76)$$

Impondo condições de contorno periódicas nos campos:

$$\begin{aligned} \phi(x + Nh, y, z) &= \phi(x, y, z) \\ \phi(x, y + Nh, z) &= \phi(x, y, z) \\ \phi(x, y, z + Nh) &= \phi(x, y, z), \end{aligned} \quad (5.77)$$

é possível mostrar que os momentos permitidos na rede formam uma zona de Brillouin, a qual denotaremos por \mathcal{B} , sendo que

$$k_i = \frac{2\pi}{Nh} n_i, \quad n_i = 0, 1, 2, \dots, N - 1. \quad (5.78)$$

Podemos calcular a transformada de Fourier $\tilde{F}(\mathbf{k})$ de uma função $F(\mathbf{r}) = F(x, y, z)$:

$$\tilde{F}(\mathbf{k}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{r}). \quad (5.79)$$

Na rede:

$$\tilde{F}_{\text{rede}}(\mathbf{k}) = h^3 \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} F_{\text{rede}}(\mathbf{r}). \quad (5.80)$$

A transformada inversa é dada por

$$F_{\text{rede}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{F}_{\text{rede}}(\mathbf{k}). \quad (5.81)$$

Poderíamos derivar o potencial efetivo na rede desde o começo; a ação euclidiana é dada, na rede, por:

$$S_{\text{rede}}[\phi] = \beta h^3 \sum_{\mathbf{r}} \left(-\frac{1}{2} \phi \nabla_{\text{rede}}^2 \phi + \frac{1}{2} M^2 \phi^2 \right) \quad (5.82)$$

e $M^2 = m^2 + 3\lambda\phi_0^2$. Repetindo, na rede, os procedimentos feitos no contínuo, chegaríamos a expressões de *tadpole* e *setting-sun* divergentes, como as encontradas acima, só que em vez de integrais sobre momentos, teríamos somas sobre os momentos pertencentes à zona de Brillouin. Calcularemos a expressão para o propagador na rede, $\tilde{G}_{\text{rede}}[\mathbf{k}^2]$

$$h^3 \sum_{\mathbf{z}} \left[(-\nabla_{\text{rede}}^2 + M^2)_{\mathbf{r},\mathbf{z}} \frac{1}{h^3} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{z}} \right] G_{\text{rede}}(\mathbf{z} - \mathbf{r}') = \frac{1}{h^3} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} \quad (5.83)$$

Inserindo a expressão para a transformada inversa de $G_{\text{rede}}(\mathbf{z} - \mathbf{r}')$ e para a função delta de Dirac no discreto,

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{z}} \left[(-\nabla_{\text{rede}}^2 + M^2)_{\mathbf{r},\mathbf{z}} \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{z})} \right] \left[\frac{1}{N^3 h^3} \sum_{\mathbf{k}' \in \mathcal{B}} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{z} - \mathbf{r}')} G_{\text{rede}}[\mathbf{k}'^2] \right] \\ = \frac{1}{h^3} \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \end{aligned} \quad (5.84)$$

Mas, usando a expressão para o laplaciano na rede derivada acima,

$$\begin{aligned} \nabla_{\text{rede}}^2 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{z}} &= \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{z}}}{h^2} \left[-6 + (e^{ik_x h} + e^{-ik_x h}) + (e^{ik_y h} + e^{-ik_y h}) + (e^{ik_z h} + e^{-ik_z h}) \right] \\ &= \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{z}}}{h^2} 2 \left[-3 + \cos(k_x h) + \cos(k_y h) + \cos(k_z h) \right] \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{z}} 2h^{-2} \sum_{i=1}^3 \left[-1 + \cos(k_i h) \right] = -e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{z}} 4h^{-2} \sum_{i=1}^3 \sin^2 \left(\frac{k_i h}{2} \right) \end{aligned} \quad (5.85)$$

Assim:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \sum_{\mathbf{k}' \in \mathcal{B}} \left\{ \frac{4}{h^2} \left[\sum_{i=1}^3 \sin^2 \left(\frac{k_i h}{2} \right) + \left(\frac{Mh}{2} \right)^2 \right] \right\}_{\mathbf{r},\mathbf{z}} \left[\sum_{\mathbf{z}} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{z}} \right] e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')} \tilde{G}_{\text{rede}}[\mathbf{k}'^2] \\ = \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \end{aligned} \quad (5.86)$$

Ou seja:

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \left\{ \frac{4}{h^2} \left[\sum_{i=1}^3 \sin^2 \left(\frac{k_i h}{2} \right) + \left(\frac{Mh}{2} \right)^2 \right] \tilde{G}_{\text{rede}}[\mathbf{k}^2] \right\} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (5.87)$$

e, portanto:

$$\tilde{G}_{\text{rede}}[\mathbf{k}^2] = \frac{h^2}{4} \frac{1}{d(n_1, n_2, n_3)}, \quad (5.88)$$

em que

$$d(n_1, n_2, n_3) = \sum_{i=1}^3 \sin^2 \left(\frac{\pi}{N} n_i \right) + \left(\frac{Mh}{2} \right)^2. \quad (5.89)$$

Para derivarmos a expressão para o propagador na rede, usamos as seguintes relações:

$$\delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} = \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (5.90)$$

$$\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}')} . \quad (5.91)$$

Com isto, podemos voltar à Eq. (5.74) para calcularmos as expressões dos diagramas *tadpole* e *setting-sun* na rede.

$$I[\phi_0] = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \tilde{G}_{\text{rede}}[\mathbf{k}^2]. \quad (5.92)$$

Podemos substituir a somatória em momentos por somatórias em n_i :

$$I[\phi_0] = \frac{1}{(Nh)^3} \sum_{n_i=0}^{N-1} \frac{h^2}{4} \frac{1}{d(n_1, n_2, n_3)} = \frac{1}{4hN^3} \sum_{n_i=0}^{N-1} \frac{1}{d(n_1, n_2, n_3)}. \quad (5.93)$$

Para o diagrama *setting-sun*,

$$\begin{aligned} H[\phi_0] &= \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{B}} \tilde{G}_{\text{rede}}[\mathbf{k}^2] \tilde{G}_{\text{rede}}[\mathbf{q}^2] \tilde{G}_{\text{rede}}[(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2] \\ &= \frac{1}{(Nh)^6} \sum_{n_i=0}^{N-1} \sum_{m_i=0}^{N-1} \frac{h^2}{4} \frac{1}{d(n_1, n_2, n_3)} \frac{h^2}{4} \frac{1}{d(m_1, m_2, m_3)} \\ &\quad \times \frac{h^2}{4} \frac{1}{d(n_1 + m_1, n_2 + m_2, n_3 + m_3)} \\ &= \frac{1}{64N^6} \sum_{n_i, m_i=0}^{N-1} \frac{1}{d(n_1, n_2, n_3)} \frac{1}{d(m_1, m_2, m_3)} \\ &\quad \times \frac{1}{d(n_1 + m_1, n_2 + m_2, n_3 + m_3)}. \end{aligned} \quad (5.94)$$

As expressões nas Eqs. (5.93) e (5.94) apresentam partes finitas e partes divergentes. Para calcularmos os contratermos, nos interessam as partes divergentes

destas expressões, $I_{\text{div}}[\phi_0]$ e $H_{\text{div}}[\phi_0]$. Para determinarmos estas quantidades, inicialmente regularizamos as integrais divergentes (na rede, o regularizador utilizado é o espaçamento da rede h). Desta forma, conseguimos integrar e com isso podemos separar as partes divergentes (que dependerão do regularizador utilizado) das partes finitas.

As partes divergentes das somas em (5.93) e (5.94) podem ser isoladas nos limites de $N \rightarrow \infty$ e $h \rightarrow 0$ ($Nh = \text{constante}$). No limite de $N \rightarrow \infty$, a soma na Eq. (5.93) pode ser convertida em uma integral,

$$\begin{aligned} I[\phi_0] &= \frac{1}{4hN^3} \int_0^\pi \left(\frac{N}{\pi}\right)^3 \frac{d^3x}{\sum_i \sin^2 x_i + (Mh/2)^2} \\ &= \frac{1}{4h\pi^3} \int_0^\pi \frac{d^3x}{\sum_i \sin^2 x_i + (Mh/2)^2}. \end{aligned} \quad (5.95)$$

No limite de $h \rightarrow 0$,

$$I_{\text{div}}[\phi_0] = \frac{1}{4h\pi^3} \int_0^\pi \frac{d^3x}{\sum_i \sin^2 x_i} = \frac{\Sigma}{4\pi h}, \quad (5.96)$$

e

$$\Sigma = \frac{1}{\pi^2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d^3x}{\sum_i \sin^2 x_i} \simeq 3,1759. \quad (5.97)$$

A seguir calculamos a parte divergente do gráfico de *setting-sun* na rede, Eq. (5.94):

$$\begin{aligned} H[\phi_0] &= \frac{1}{64N^6} \sum_{n_i, m_i=0}^{N-1} \frac{1}{d(n_1, n_2, n_3)} \frac{1}{d(m_1, m_2, m_3)} \\ &\quad \times \frac{1}{d(n_1 + m_1, n_2 + m_2, n_3 + m_3)}. \end{aligned} \quad (5.98)$$

No limite de $N \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} H[\phi_0] &= \frac{1}{64N^6} \left(\frac{N}{\pi}\right)^6 \int_0^\pi d^3x d^3y \frac{1}{\sum_i \sin^2 x_i + (Mh/2)^2} \frac{1}{\sum_i \sin^2 y_i + (Mh/2)^2} \\ &\quad \times \frac{1}{\sum_i \sin^2[(x_i + y_i)] + (Mh/2)^2}. \end{aligned} \quad (5.99)$$

No limite de $h \rightarrow 0$,

$$H_{\text{div}}[\phi_0] = \frac{1}{64\pi^6} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d^3x d^3y \frac{1}{\sum_i \sin^2 x_i} \frac{1}{\sum_i \sin^2 y_i} \frac{1}{\sum_i \sin^2[(x_i + y_i)]} \quad (5.100)$$

É possível mostrar [60] que

$$H_{\text{div}}[\phi_0] = \frac{1}{16\pi^2} \left[\ln \left(\frac{6}{h\mu} \right) + \zeta \right], \quad (5.101)$$

em que μ é a escala de renormalização e $\zeta \simeq 0,09$. Assim, para a Eq. (5.74) obtemos:

$$\frac{d^2 \mathcal{V}_{\text{eff}}[\phi_0]}{d\phi_0^2} = 3\lambda T \frac{\Sigma}{4\pi h} - 6\lambda^2 T^2 \left\{ \frac{1}{16\pi^2} \left[\ln \left(\frac{6}{h\mu} \right) + \zeta \right] \right\}. \quad (5.102)$$

Logo, é necessária a adição dos seguintes contratermos ao potencial original do problema [57, 58]:

$$\mathcal{V}_{\text{CT}}[\phi] = \left\{ -\frac{3\lambda T \Sigma}{4\pi h} + \frac{3\lambda^2 T^2}{8\pi^2} \left[\ln \left(\frac{6}{h\mu} \right) + \zeta \right] \right\} \frac{\phi^2}{2}. \quad (5.103)$$

A adição do contratermo ao hamiltoniano de WGL original implica que o coeficiente de ϕ^2 , m^2 , é na verdade um parâmetro *bare*, no mesmo sentido que são *bare* os parâmetros de uma lagrangiana de uma teoria quântica de campos (massas e constantes de acoplamento). O coeficiente de ϕ^2 , após a adição do contratermo, é a quantidade física, experimental; ela é dependente da escala de renormalização μ . Uma vez fixado experimentalmente numa escala μ_0 esse coeficiente de ϕ^2 , ele é conhecido em qualquer outra escala μ' através de equações do grupo de renormalização [19]. Não vamos ir além nessa discussão, para os objetivos desta Tese, vamos simplesmente reescalar a equação de GLL como anteriormente, tomar $\mu = 1$, e mostrar que os resultados são independentes de h - outra escolha de μ não vai ser visível em nossas simulações porque o termo de *tadpole* domina a divergência logarítmica (em que μ entra).

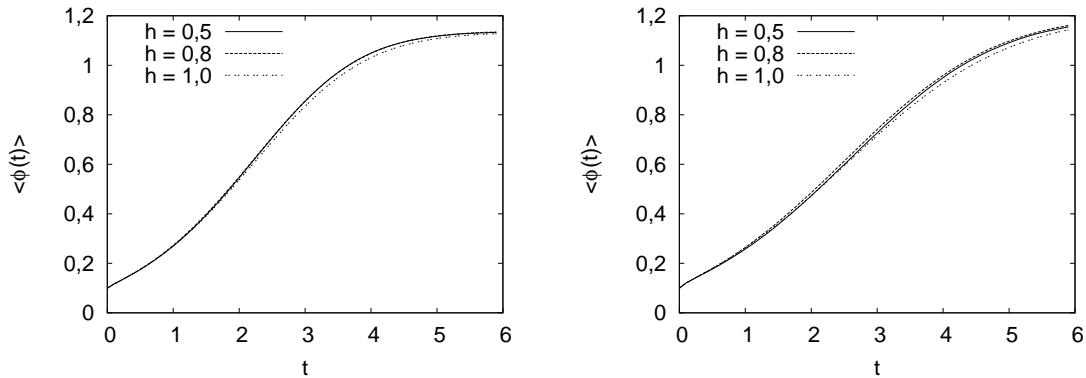


Figura 5.5: Valor médio do parâmetro de ordem em função do tempo para diferentes espaçamentos da rede para a equação de GLL completa na presença de contratermos para $D = 1$ (gráfico da esquerda) e $D = 2$ (gráfico da direita).

A equação de GLL com os contratermos pode ser expressa em termos de quantidades adimensionais como anteriormente, de maneira que os únicos parâmetros

livres (com $\mu = 1$) são ϵ e D . Os resultados para $\langle\phi(t)\rangle$, com $\epsilon = -1$ e dois valores de D , estão apresentados na Fig. 5.5. Claramente, os resultados são independentes de h . É possível perceber que, tanto no caso com $D = 1$ quanto para o caso de $D = 2$, os resultados para os diferentes espaçamentos de rede convergem e estabilizam no valor de $\langle\phi\rangle \approx 1,15$. O valor de equilíbrio de $\langle\phi(t)\rangle$ não é a unidade, como no caso sem ruído. Isto é devido ao fato de que à temperatura finita, $D \neq 0$, o mínimo da energia livre com as correções térmicas não corresponde ao mínimo da energia livre *bare* $F[\phi]$, como deveria realmente acontecer.

5.5 Contratermos para a GLL com o MHTE

Para este caso, a equação de GLL obtida com o auxílio do MHTE é quadrática. Sendo assim, o único gráfico divergente é um *tadpole*. Com isto, o contratermo a ser utilizado é proporcional à temperatura e dado por,

$$\mathcal{V}_{\text{CT}}[\phi] = - \left\{ C \frac{T}{h} \right\} \frac{\phi^2}{2} \quad (5.104)$$

O fator numérico C difere do caso anterior porque a integral do *tadpole* é diferente no presente caso; em vez de M^2 no denominador do integrando da Eq. (5.95), temos $\bar{M}^2 = M^2 + (3\lambda/2)G_0(0)$. Como $G_0(0)$ é divergente para $h \rightarrow 0$, pois ele é um *tadpole*, temos que $(h\bar{M})^2$ não vai a zero, como no caso de $(hM)^2$ - o produto $(h\bar{M})^2$ é uma constante. Portanto, no presente caso:

$$\begin{aligned} I_{\text{MHTE}}[\phi_0] &= \frac{1}{4hN^3} \int_0^\pi \left(\frac{N}{\pi} \right)^3 \frac{d^3x}{\sum_i \sin^2 x_i + (\bar{M}h/2)^2} \\ &= \frac{1}{4h\pi^3} \int_0^\pi \frac{d^3x}{\sum_i \sin^2 x_i + (\bar{M}h/2)^2}. \end{aligned} \quad (5.105)$$

Note que \bar{M} é proporcional a I_{MHTE} , portanto, essa é uma equação auto-consistente para I_{MHTE} . A determinação de D somente pode ser feita numericamente - determinamos C automaticamente de maneira que, no equilíbrio as soluções da GLL sejam independentes de h . Os resultados obtidos estão apresentados na Fig. 5.6.

A Fig. 5.6 também nos fornece informações sobre a qualidade da aproximação de ordem zero do MHTE: vemos que o parâmetro de ordem no MHTE equilibra por volta de $\langle\phi(t)\rangle \simeq 1$, enquanto que o valor “exato”, mostrado na Fig. 5.5, é $\langle\phi(t)\rangle \simeq 1,15$. Isto significa que o MHTE em ordem zero subestima o parâmetro de ordem em 15%. Para calcular correções perturbativas a esta ordem zero é necessário reformular o problema como na Seção anterior: é preciso perturbar ao redor de um mínimo da energia livre.

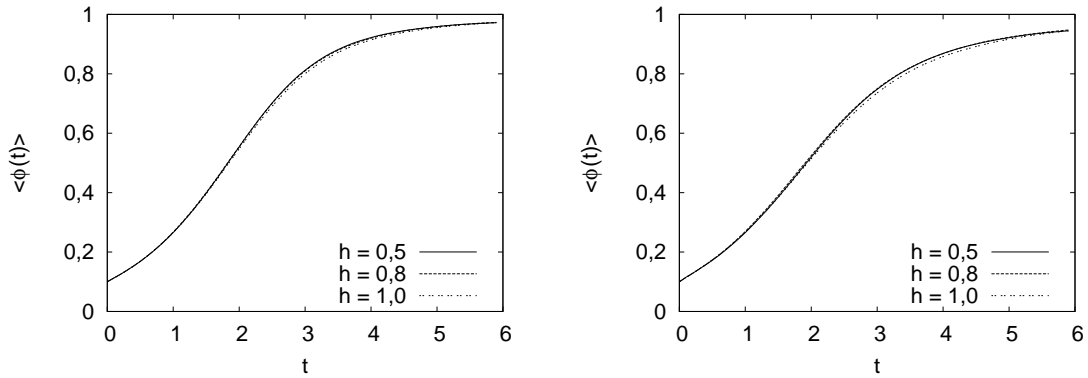


Figura 5.6: Valor médio do parâmetro de ordem em função do tempo para diferentes espaçamentos da rede para a equação de GLL obtida a partir do MHTE em ordem zero na presença de contratermos. $D = 1$ para o gráfico da esquerda e $D = 2$ para o gráfico da direita.

5.6 Resultados para a quantização estocástica

Vamos apresentar resultados para a quantização estocástica da teoria do campo escalar real com autointeração $\lambda\phi^4$ e com quebra espontânea de simetria, i.e. $m^2 < 0$ na Eq. (4.10). Nosso interesse maior aqui é discutir a aplicabilidade do MHTE no estudo do comportamento crítico da teoria. O ponto crítico da teoria é determinado como sendo o valor de $D \equiv D_c$ a partir do qual $\langle \phi \rangle = 0$, de maneira que para $D > D_c$, temos $\langle \phi \rangle = 0$ e para $D < D_c$, $\langle \phi \rangle \neq 0$. Note que apesar de $m^2 < 0$, o valor esperado no vácuo do campo pode ser igual a zero devido a flutuações quânticas; para o campo clássico (sem as flutuações quânticas), temos que no estado de mínima energia o valor do campo sempre é diferente de zero, com $\phi = \pm(-m^2/\lambda)^{1/2}$.

A determinação precisa de D_c é muito custosa computacionalmente, pois o número de realizações de ruído deve ser muito grande. Em virtude disso, e como nossos objetivos na presente Tese estão mais voltados para aspectos qualitativos do que quantitativos, vamos nos restringir a duas dimensões. Além de servir nossos propósitos de mostrar problemas com o MHTE, existem na literatura resultados robustos de simulações de Monte Carlo para a teoria $\lambda\phi^4$ em duas dimensões [61].

Como visto anteriormente, para ações quadráticas, o único gráfico divergente é um *tadpole*. Em duas dimensões, o *tadpole* apresenta divergência logarítmica da forma (em quantidades adimensionais):

$$\mathcal{V}_{\text{CT}}[\phi] = - \left[\frac{C_2}{4} \ln \left(\frac{1}{h^2} \right) \right] \frac{\phi^2}{2}, \quad (5.106)$$

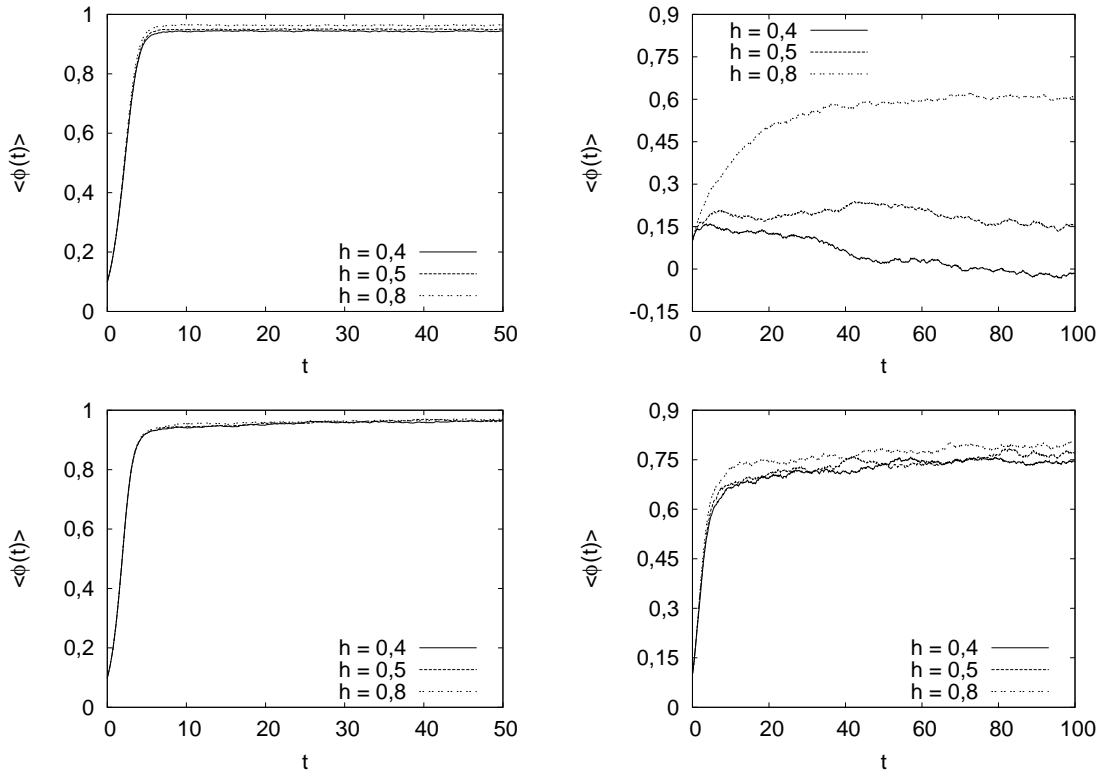


Figura 5.7: Valor médio do parâmetro de ordem em função do tempo obtido a partir da equação de GLL em duas dimensões para $\epsilon = -1$ e diferentes espaçamentos de rede, sem o emprego do contratermo. Gráficos superiores: equação de GLL completa, para $D = 0,1$ (gráfico superior esquerdo) e $D = 0,6$ (gráfico superior direito). Gráficos inferiores: equação de GLL obtida com o MHTe em ordem zero, para $D = 0,1$ (gráfico inferior esquerdo) e $D = 0,6$ (gráfico inferior direito).

e C_2 é uma constante.

Vamos nos concentrar na dependência temporal da média sobre o volume bidimensional do parâmetro de ordem:

$$\langle \phi(t) \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{ij} \bar{\phi}_{ij}^n, \quad (5.107)$$

$\bar{\phi}_{ij}^n$ é a média sobre um número N_r de realizações independentes de ruído,

$$\bar{\phi}_{ij}^n = \frac{1}{N_r} \sum_{r=1}^{N_r} \phi_{ij}^n. \quad (5.108)$$

Em todas as simulações, fizemos uma média sobre 20 realizações de ruído, ou seja,

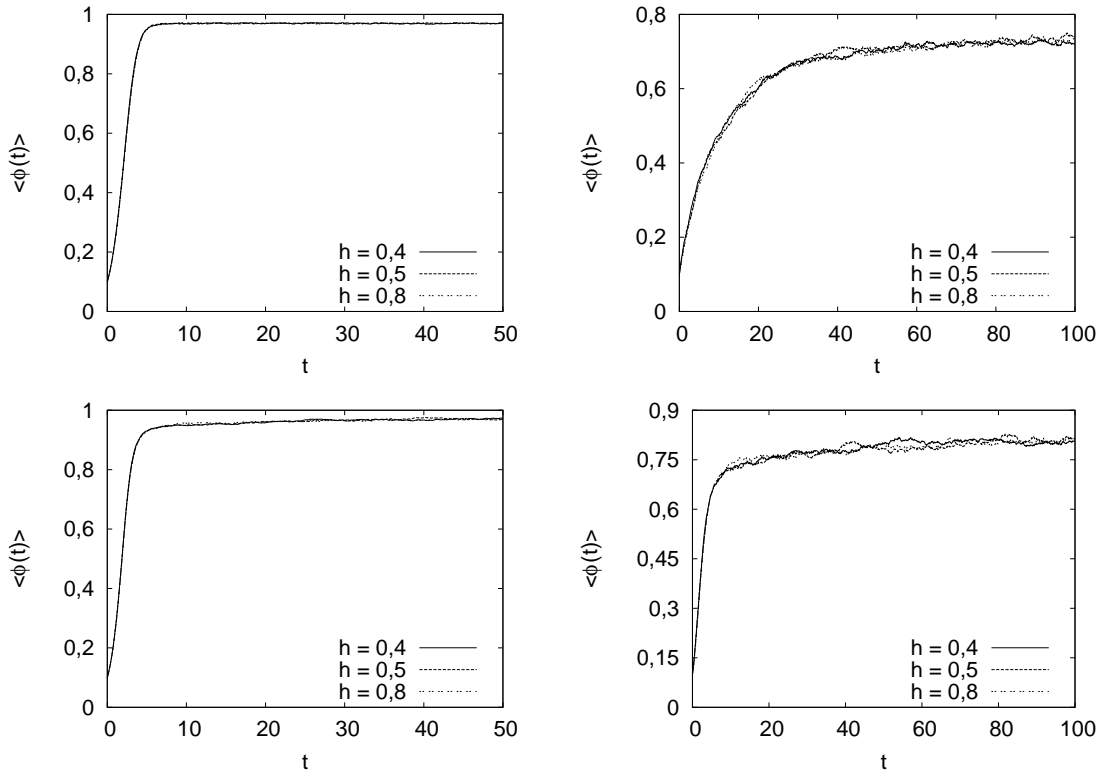


Figura 5.8: Valor médio do parâmetro de ordem em função do tempo obtido a partir da equação de GLL em duas dimensões para $\epsilon = -1$ e diferentes espaçamentos de rede, na presença do contratermo. Gráficos superiores: equação de GLL completa, para $D = 0,1$ (gráfico superior esquerdo) e $D = 0,6$ (gráfico superior direito). Gráficos inferiores: equação de GLL obtida com o MHTE em ordem zero, para $D = 0,1$ (gráfico inferior esquerdo) e $D = 0,6$ (gráfico inferior direito).

$N_r = 20$ e empregamos como condição inicial,

$$\phi_{ij}^0 = 0,1 + 0,001(1,0 - 2 * \text{ran}), \quad (5.109)$$

ran é um número aleatório gerado uniformemente entre 0 e 1. Um aspecto importante aqui é que para determinar D_c , o valor de Δt deve ser substancialmente menor que para o caso de três dimensões. Especificamente, é necessário que $\Delta t = 0,0001$. Claramente, um valor pequeno de Δt implica em um tempo de simulação mais longo, o que é muito custoso computacionalmente quando aliado à necessidade de um número muito grande de realizações de ruído.

Os resultados obtidos sem e com o contratermo estão apresentados nas Figs. 5.7 e 5.8, para dois valores de ruído: $D = 0,1$ e $D = 0,6$. Os valores de D empregados

são relativamente baixos, em comparação com aqueles usados em três dimensões, porque valores muito maiores de D estão próximos ao valor crítico D_c , como será visto logo a seguir. Claramente, a Fig. 5.7 mostra que os resultados dependem do espaçamento da rede, principalmente para o caso de ruído maior. Com a adição do contratermo da Eq. (5.106), os resultados mostrados na Fig. 5.8, tanto para a equação de GLL completa e a obtida com o MHTE em ordem zero, estabilizam.

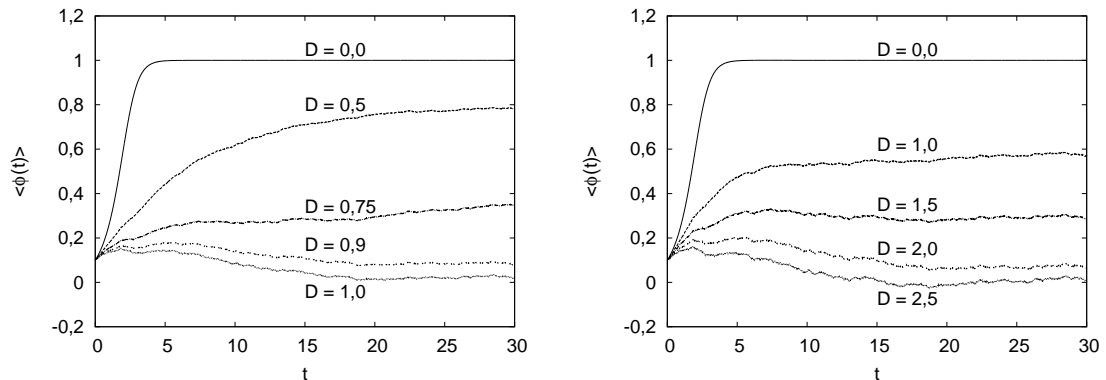


Figura 5.9: Valor médio do parâmetro de ordem em função do tempo para diferentes valores de D na presença do contratermo. Gráfico da esquerda: equação de GLL completa. Gráfico da direita: equação de GLL obtida com o MHTE em ordem zero.

Para os valores de ruído empregados, notamos que o MHTE em ordem zero fornece uma excelente aproximação à solução exata da GLL. Como pode ser visto nos gráficos da esquerda da Fig. 5.8, que são obtidos com $D = 0, 1$, a solução obtida para $\langle \phi(t) \rangle$ com o MHTE é praticamente indistinguível da solução obtida com a equação completa. No caso dos gráficos da direita, que correspondem a $D = 0, 6$, a diferença entre os valores de equilíbrio de $\langle \phi(t) \rangle$ obtidos com a equação completa e a do MHTE diferem entre si em aproximadamente 10%.

A seguir vamos procurar o valor crítico de D empregando a equação de GLL completa e a do MHTE. Vamos tomar como condição inicial em ambos os casos

$$\phi_{ij}^0 = 0, 1 + 0, 001 (1, 0 - 2 * \text{ran}). \quad (5.110)$$

Verificamos através de várias simulações que outras condições iniciais levam aos mesmos valores de equilíbrio, como deveria ser.

Inicialmente, na Fig. 5.9 mostramos $\langle \phi(t) \rangle$ para diferentes valores de D . A figura mostra que à medida que D aumenta, o valor de equilíbrio de $\langle \phi(t) \rangle$ tende a zero,

como é de se esperar. No entanto, os valores de D para os quais $\langle \phi(t) \rangle \simeq 0$ no caso da equação de GLL completa e da obtida com o MHTE em ordem zero diferem substancialmente.

O valor de D em termos dos parâmetros do modelo é dado na Eq. (5.7). Para a ação da Eq. (4.10), D é dado por

$$D = \hbar \frac{\lambda}{\sqrt{|m^2|/\hbar^2}}. \quad (5.111)$$

Resultados de simulações de Monte Carlo empreendidas na Ref. [61] mostram que para $\lambda = 1$, o valor crítico de m^2 é aproximadamente $m^2 = -1,27$ (em unidades em que $\hbar = 1$); o que nos leva a um valor crítico de $D_c \simeq 0,89$. De posse dos poucos valores de D empregados para gerar a Fig. 5.9, podemos plotar o valor de equilíbrio de $\langle \phi \rangle$, que denotamos por $\langle \phi \rangle_{eq}$, como função de D . Os resultados de $\langle \phi \rangle_{eq}$ como função de D estão mostrados na Fig. 5.10.

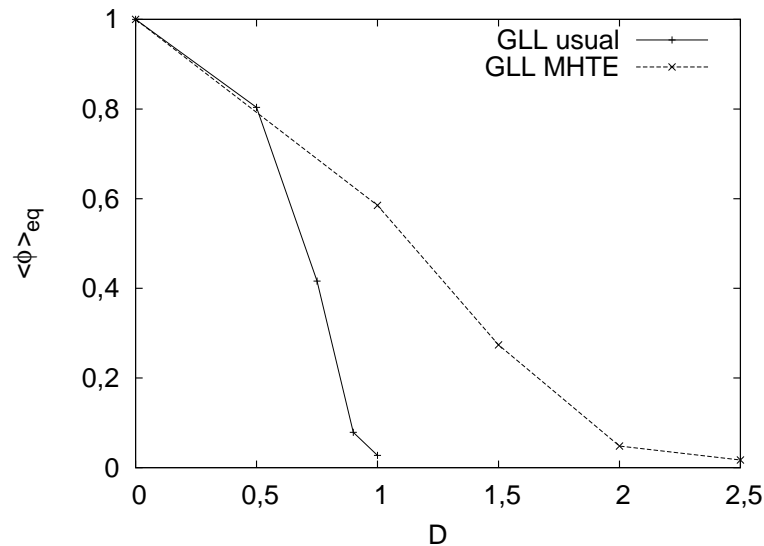


Figura 5.10: Valor de equilíbrio do parâmetro de ordem em função de D obtido com a equação de GLL completa (linha sólida) e a do MHTE (linha tracejada).

Claramente, enquanto que a equação de GLL completa fornece um valor para D_c muito próximo daquele obtido com simulações de Monte Carlo, o MHTE fornece um valor para D_c que é superior ao dobro do valor de Monte Carlo. É certo que não foi feito um estudo exaustivo da dependência dos resultados com relação ao número de realizações de ruído e diferentes tamanhos de rede (nesta Tese empregamos um comprimento $L = 32$). Este último aspecto é muito importante, porque a

determinação de um ponto crítico requer algum método de extrapolação de resultados para tamanho de rede infinito. No entanto, os resultados preliminares obtidos indicam que possivelmente o MHTE em ordem zero não fornece uma boa aproximação para a determinação do comportamento crítico do modelo. A questão não está fechada e mais estudos precisam ser empreendidos, principalmente no que se refere ao tamanho de rede e a inclusão de correções perturbativas à ordem zero do MHTE.

5.7 Resultados para sistemas fermiônicos

Nesta Seção apresentaremos resultados para o sistema de muitos férmions não relativístico. O objetivo aqui é tão somente ilustrar como prosseguiria um estudo mais completo para caso do sistema confinado por uma armadilha, considerando inicialmente o caso de um sistema infinito.

Vamos definir [52, 62]

$$\xi(k) = \varepsilon(k) - \bar{\mu}, \quad (5.112)$$

em que

$$\bar{\mu} = \mu - \frac{U}{V} \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'0\uparrow}. \quad (5.113)$$

Vamos também definir

$$\Delta = \frac{U}{V} \sum_{\mathbf{k}'} h_{\mathbf{k}'0\uparrow\downarrow}. \quad (5.114)$$

Ou seja, para a diagonalização de \hat{H}_a temos

$$2 \xi(k) u_k v_k = (u_k^2 - v_k^2) \Delta. \quad (5.115)$$

Multiplicaremos esta expressão por Δ/u_k^2 . Definindo uma nova quantidade

$$E(k) = \sqrt{\xi^2(k) + \Delta^2}, \quad (5.116)$$

e garantindo que a energia apresenta um mínimo (em \hat{H}_a diagonalizado), obtemos

$$u_k = \frac{v_k \Delta}{E(k) - \xi(k)}. \quad (5.117)$$

Assim é possível concluir que

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi(k)}{E(k)} \right), \quad (5.118)$$

e

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi(k)}{E(k)} \right). \quad (5.119)$$

Vamos calcular Δ levando em consideração que \hat{H}_a já está diagonalizado e que $T = 0$:

$$\Delta = -\frac{U}{V} \sum_{\mathbf{k}} u_k v_k = -\frac{U}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{2E(k)}. \quad (5.120)$$

Ou seja, no limite termodinâmico, a equação a ser resolvida é dada por:

$$-\frac{1}{U} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E(k)}. \quad (5.121)$$

Porém, como temos duas quantidades (incógnitas) que queremos calcular (Δ e $\bar{\mu}$), precisamos resolver mais uma equação [15]. Resolveremos simultaneamente a equação para o número de partículas (a qual está diretamente relacionada ao potencial químico do sistema):

$$\begin{aligned} N &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle 0 | \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) | 0 \rangle \\ &= 2 \sum_{\mathbf{k}} v_k^2. \end{aligned} \quad (5.122)$$

No limite termodinâmico,

$$n = \frac{N}{V} = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_k^2. \quad (5.123)$$

Para grandes momentos, porém, a Eq. (5.121) diverge linearmente. O procedimento usual é renormalizar o potencial de modo que U é expresso em termos de um observável do espalhamento no espaço livre. No presente caso de interação de contato, o observável relevante é o comprimento de espalhamento, a . O comprimento de espalhamento a está relacionado à intensidade da interação U por [15]:

$$\frac{1}{U} = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \frac{m}{\hbar^2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2}. \quad (5.124)$$

Note que a integral também é divergente, da mesma forma que a integral na Eq. (5.121). A interpretação da renormalização da interação é entendida da seguinte maneira: a transformada de Fourier do potencial de contato é igual a uma constante para todos os valores de momento relevantes ao problema. Porém, para aqueles valores em que a integral diverge, esta constante tende a zero de modo que a integral divergente possa cancelar exatamente a divergência presente na Eq. (5.121), resultando em

um potencial finito para quaisquer valores de momento. Vamos então inserir a Eq. (5.124) na Eq. (5.121):

$$-\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{2E(k)} - \frac{1}{2\varepsilon(k)} \right]. \quad (5.125)$$

Vamos reescrever as Eqs. (5.123) e (5.125) em função da energia de Fermi e do momento de Fermi, dados para um gás de Fermi não interagente a temperatura nula respectivamente por $E_F = \hbar^2 k_F^2/2m$ e $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$. Começamos pela Eq. (5.125):

$$-\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{2E(k)} - \frac{1}{2\varepsilon(k)} \right], \quad (5.126)$$

a qual pode ser reescrita como

$$-\frac{1}{a} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk k^2 \left\{ \frac{1}{\Delta} \frac{1}{\sqrt{[(\hbar^2 k^2/2m\Delta) - \bar{\mu}/\Delta]^2 + 1}} - \frac{1/\Delta}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m\Delta}} \right\}. \quad (5.127)$$

Fazendo a troca de variáveis $k' = (\hbar^2/2m\Delta)^{1/2} k$, obtemos:

$$-\frac{1}{a} = \frac{2}{\pi} \sqrt{\Delta} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_0^\infty dk k^2 \left\{ \frac{1}{\sqrt{[k^2 - \bar{\mu}/\Delta]^2 + 1}} - \frac{1}{k^2} \right\}. \quad (5.128)$$

Ou seja:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{k_F a} &= \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{\Delta}{E_F}} \int_0^\infty dk k^2 \left\{ \frac{1}{\sqrt{[k^2 - \bar{\mu}/\Delta]^2 + 1}} - \frac{1}{k^2} \right\} \\ &= \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{\Delta}{E_F}} I_1 \left(\frac{\bar{\mu}}{\Delta} \right). \end{aligned} \quad (5.129)$$

De modo semelhante podemos trabalhar com a Eq. (5.123):

$$n = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_k^2, \quad (5.130)$$

$$1 = \frac{3}{2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{3/2} \frac{1}{E_F^{3/2}} \int_0^\infty dk k^2 \left\{ 1 - \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m\Delta} - \frac{\bar{\mu}}{\Delta}}{\sqrt{[(\hbar^2 k^2/2m\Delta) - \bar{\mu}/\Delta]^2 + 1}} \right\}. \quad (5.131)$$

Repetindo a troca de variáveis feita anteriormente, chegamos a:

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{3}{2} \left(\frac{\Delta}{E_F} \right)^{3/2} \int_0^\infty dk k^2 \left\{ 1 - \frac{k^2 - \frac{\bar{\mu}}{\Delta}}{\sqrt{[k^2 - \bar{\mu}/\Delta]^2 + 1}} \right\} \\ &= \frac{3}{2} \left(\frac{\Delta}{E_F} \right)^{3/2} I_2 \left(\frac{\bar{\mu}}{\Delta} \right). \end{aligned} \quad (5.132)$$

Nas Eqs. (5.129) e (5.132), as quantidades $I_1\left(\frac{\bar{\mu}}{\Delta}\right)$ e $I_2\left(\frac{\bar{\mu}}{\Delta}\right)$ são dadas respectivamente por:

$$I_1(y) = \int_0^\infty dx x^2 \left\{ \frac{1}{\sqrt{(x^2 - y)^2 + 1}} - \frac{1}{x^2} \right\} \quad (5.133)$$

e

$$I_2(y) = \int_0^\infty dx x^2 \left\{ 1 - \frac{x^2 - y}{\sqrt{(x^2 - y)^2 + 1}} \right\}. \quad (5.134)$$

Ou seja, as equações a serem resolvidas são as seguintes:

$$-\frac{1}{k_F a} = \frac{2}{\pi} \left(\frac{2}{3 I_2\left(\frac{\bar{\mu}}{\Delta}\right)} \right)^{1/3} I_1\left(\frac{\bar{\mu}}{\Delta}\right) \quad (5.135)$$

e

$$\frac{\Delta}{E_F} = \left(\frac{2}{3 I_2\left(\frac{\bar{\mu}}{\Delta}\right)} \right)^{2/3}. \quad (5.136)$$

A Eq. (5.135) pode ser invertida para obtermos $\bar{\mu}/\Delta$ como função do comprimento de espalhamento a . A seguir inserimos o resultado de $\bar{\mu}/\Delta$ na Eq. (5.136) para obtermos o *gap* Δ . Os resultados obtidos estão apresentados na Fig. 5.11.

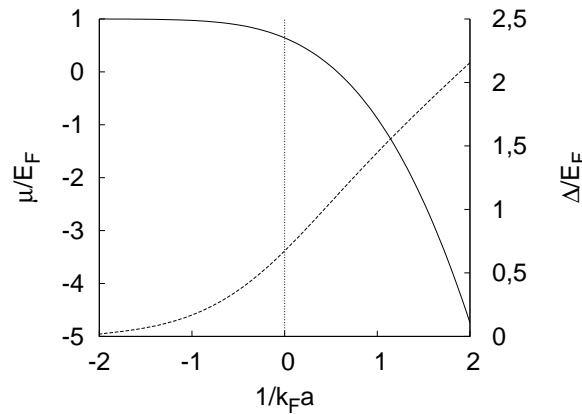


Figura 5.11: Potencial químico (linha cheia) e *gap* de energia (curva pontilhada) como função do parâmetro $1/k_F a$. O valor para o qual $1/k_F a = 0$ está indicado por uma linha vertical pontilhada.

A figura mostra a transição de um estado BCS para um de condensação de Bose-Einstein. O limite de interação atrativa fraca, $k_F a \rightarrow 0_-$, temos o domínio BCS da

formação de pares de Cooper fracamente ligados. No limite $k_F a \rightarrow 0_+$ há forte atração e a formação de pares fortemente ligados, o que leva à condensação desses pares (condensação de Bose-Einstein). Não vamos prosseguir com esta discussão, nem vamos discutir correções perturbativas a estes resultados que podem ser calculadas de maneira sistemática com o MHTE. Uma investigação desta natureza requer um estudo detalhado, o que está fora dos objetivos da presente Tese. No entanto, é importante notar que o MHTE é um método que pode ser muito útil também no estudo de gases quânticos, já que muito da fenomenologia destes sistemas é dominada pelo campo médio.

Capítulo 6

Conclusões e perspectivas futuras

Nesta Tese desenvolvemos um esquema de aproximação inspirado no método do hamiltoniano termodinamicamente equivalente (MHTE) para o estudo de sistemas com muitos graus de liberdade que interagem fortemente, com ênfase em transições de fase estáticas, evolução temporal de parâmetros de ordem descrita por equações dinâmicas estocásticas do tipo Ginzburg-Landau-Langevin (GLL), teorias quânticas de campos escalares relativísticos e teorias de muitos corpos para sistemas fermiônicos não relativísticos. O MHTE teve origem histórica no estudo da supercondutividade por Bogoliubov, Zubarev e Tserkovnikov (BZT) [17] e no trabalho de Wentzel [14] no contexto de superfluidos. O objetivo principal da Tese foi adequar a aplicação das ideias do MHTE para sistemas de muitos corpos descritos por uma teoria de campos. A base do MHTE consiste no uso de um número finito de momentos transferidos que contribuem para uma interação de dois corpos de maneira que o hamiltoniano resultante dessa escolha de momentos possa ser diagonalizado exatamente através de uma transformação unitária.

Iniciamos o Capítulo 2 com uma breve introdução histórica, em que descrevemos ideias relacionadas ao MHTE fazendo uso de um hamiltoniano quântico não relativístico de um sistema de muitas partículas idênticas interagindo por meio de um potencial de dois corpos. No Capítulo 3 apresentamos uma revisão sucinta dos conceitos relacionados a transições de fase estáticas e dinâmicas, com ênfase nas equações dinâmicas de natureza estocástica que descrevem a evolução temporal de parâmetros de ordem - as equações de GLL. Em seguida, estendemos as ideias discutidas no Capítulo 2 para o hamiltoniano de Wilson-Ginzburg-Landau para o caso de uma energia livre do tipo poço-duplo. Evidenciamos que quando é considerado um conjunto finito de componentes de Fourier que contribuem para o autoacoplamento não linear do parâmetro de ordem na energia livre, essas equações podem ser resolvidas analiticamente. Mostramos que podemos ir além do MHTE trabalhando com teoria de perturbação e calculamos explicitamente os quatro primeiros termos da

série perturbativa. Por fim, generalizamos o MHTE para energias livres arbitrárias (não locais) e discutimos a possibilidade de aplicação do método para estes casos.

No Capítulo 4 desenvolvemos o formalismo do MHTE para modelos de teorias quânticas. Especificamente, desenvolvemos o esquema discutido no Capítulo 3 para uma teoria de campos relativísticos envolvendo um campo escalar real com autointeração. O estudo foi feito no contexto da quantização estocástica de Parisi e Wu [22], em que a constante de Planck \hbar , que aparece no peso de Feynman no funcional gerador de funções de Green, desempenha o papel da temperatura T na função de partição da mecânica estatística clássica. Essa analogia permite empregar o formalismo das equações de GLL, em que o parâmetro “tempo” (τ) não está associado ao tempo físico, isto é, a equação de GLL neste contexto representa um processo difusivo fictício, sendo que apenas as soluções de equilíbrio são de interesse físico. Devido à essa analogia, todas as manipulações feitas no Capítulo 3 que nos levaram à energia livre MHTE de Ginzburg-Landau podem ser feitas para a ação euclidiana $S_E[\phi]$ da teoria quântica de campos relativística. Mostramos que a integral de trajetória euclidiana para a função de partição do problema pode ser resolvida exatamente quando somente um conjunto finito de momentos transferidos da autointeração $\lambda\phi^4$ é considerado. Por fim, consideramos a aplicação do MHTE para sistemas de muitos férmions não relativísticos a baixas temperaturas. A proposta foi implementada tanto para sistemas infinitos como também para sistemas aprisionados. Neste último caso, o MHTE é implementado no contexto de uma aproximação de densidade local, a qual fornece uma excelente aproximação às tradicionais, mas computacionalmente intensivas, equações de Bogoliubov-de Gennes [35].

No Capítulo 5 apresentamos métodos numéricos para resolver algumas das equações obtidas no transcórre da Tese. Demos atenção especial para a eliminação da dependência das soluções das equações de GLL com o espaçamento de rede utilizado na discretização das equações, devido à presença de ruído. Enfatizamos que essa dependência não é artefato da aproximação de diferenças finitas, mas sim intrínseca às teorias de campos clássicas, sendo reflexo das divergências ultravioletas de Rayleigh-Jeans. Demonstramos, com bastante detalhe, que este problema pode ser resolvido a partir da adição de contratermos ao potencial original do sistema.

O esquema de aproximação não perturbativo que propusemos compartilha muitas similaridades com tradicionais métodos de aproximação corriqueiramente empregados para o estudo de sistemas de muitos corpos. Dentre esses, discutimos a similaridade com o método da teoria de perturbação otimizada, também conhecido como expansão δ . Também discutimos similaridades com a tradicional aproximação de Hartree-Fock. Argumentamos que a grande vantagem do nosso método baseado no MHTE é que ele garante que a aproximação de ordem zero fornece, rigorosamente,

um limite superior para a energia livre exata do problema (ou para a ação da teoria quântica). Também, correções à ordem zero podem ser calculadas de maneira sistemática e controlada. Essas correções são calculadas perturbativamente, em que a perturbação **não** é a interação original, mas sim o que restou dela após a subtração das contribuições dos momentos transferidos especialmente escolhidos. Ainda mais, essas contribuições perturbativas começam em segunda ordem, pois a contribuição de primeira ordem se anula exatamente. Como mencionado, o fato de o método invocar o princípio variacional de Gibbs é o seu grande diferencial, pois ele garante que a ordem zero fornece um limite superior para a energia livre (ou ação euclidiana) exata do problema.

Os resultados de nossas simulações, apesar de não terem sido exaustivas, motivam trabalhos futuros em muitas direções. Uma das mais interessantes e promissoras é o problema de ações complexas, que aparecem no contexto da quantização de sistemas com um potencial químico, os quais são descritos por uma teoria de campos relativísticos na rede. Além dos problemas de átomos frios, o problema de muitos quarks na cromodinâmica quântica é um dos mais importantes da atualidade. Conforme mostrado na Ref. [27], a aproximação de campo médio no problema da quantização do sistema de muitos bósons, que é caracterizado por uma ação complexa, fornece uma aproximação razoável à solução numérica “exata” da quantização estocástica correspondente. Portanto, há motivos suficientes para acreditarmos que o nosso método baseado no MHTE, que possui muitas das características da aproximação de campo médio, possa ser muito útil no tratamento matemático dessa importante classe de problemas.

Apêndice A

Princípio Variacional de Gibbs

Para a demonstração do princípio variacional de Gibbs, vamos seguir a Ref. [63]. Seja ϱ uma função densidade normalizada para um *ensemble*, que pode ser clássico ou quântico. Ou seja, no caso clássico, ϱ é uma quantidade real e positiva e, no caso quântico, um operador Hermitiano com autovalores positivos. Além disso vamos supor que

$$\text{Tr } \varrho = 1. \quad (\text{A.1})$$

Vamos definir uma função $\psi(\varrho)$ tal que

$$\psi(\varrho) \equiv \text{Tr}(\mathcal{H}\varrho) + \beta^{-1} \text{Tr}(\varrho \log \varrho), \quad (\text{A.2})$$

em que \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema que estamos considerando, e β é uma constante. O princípio variacional de Gibbs estabelece o seguinte:

1. Minimizar a função $\psi(\varrho)$ pela variação de ϱ , sujeito apenas a condição de que esta seja uma função densidade normalizada. A função $\bar{\varrho}$ que minimiza $\psi(\varrho)$ é a função densidade do *ensemble* canônico com $kT = \beta^{-1}$.
2. A energia livre de Helmholtz é dada por $A = \psi(\bar{\varrho})$.

Vamos provar estas afirmações. Iniciamos calculando as variações de $\psi(\varrho)$ quando ϱ varia de $\delta\varrho$:

$$\begin{aligned} \delta\psi(\varrho) &= \text{Tr}(\mathcal{H}\delta\varrho) + \beta^{-1} \text{Tr}(\delta\varrho \log \varrho + \delta\varrho) \\ &= \text{Tr} \{ [\mathcal{H} + \beta^{-1}(1 + \log \varrho)] \delta\varrho \} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\delta^2\psi(\varrho) = \text{Tr} \{ [0 + \beta^{-1}(0 + \varrho^{-1}\delta\varrho)] \delta\varrho \} = \text{Tr} [(\beta\varrho)^{-1}(\delta\varrho)^2] \quad (\text{A.4})$$

Do fato de que $\delta^2\psi(\varrho) > 0$ podemos concluir que $\psi(\varrho)$ é uma função convexa*, logo, $\delta\psi(\varrho) = 0$ fornece um mínimo da função.

Na sequência, vamos variar ϱ , porém levando em consideração o vínculo de normalização dado na Eq. (A.1), através do uso de um multiplicador de Lagrange Λ . Assim:

$$0 = \delta\psi(\varrho) + \Lambda\delta(\text{Tr } \varrho) = \text{Tr} \{ [\mathcal{H} + \beta^{-1}(1 + \log \varrho) + \Lambda]\delta\varrho \}. \quad (\text{A.5})$$

Porém, a variação $\delta\varrho$ é completamente arbitrária, então podemos concluir que

$$\begin{aligned} 0 &= \mathcal{H} + \beta^{-1}(1 + \log \varrho) + \Lambda \\ \varrho &= e^{-(1+\beta\Lambda)} e^{-\beta\mathcal{H}}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Utilizando a equação de vínculo,

$$\begin{aligned} \text{Tr } \varrho = 1 &= \text{Tr} [e^{-(1+\beta\Lambda)} e^{-\beta\mathcal{H}}], \text{ logo} \\ e^{(1+\beta\Lambda)} &= \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Substituindo esta expressão na Eq. (A.6), obtemos

$$\bar{\varrho} = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{\text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}}, \quad (\text{A.8})$$

o que prova (1). Substituindo este resultado na Eq. (A.2) chegamos a:

$$\begin{aligned} \psi(\bar{\varrho}) &= \text{Tr} \left[\mathcal{H} \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{\text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}} \right] + \beta^{-1} \text{Tr} \left[\frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{\text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}} \log \left(\frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{\text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}} \right) \right] \\ \psi(\bar{\varrho}) &= -\beta^{-1} \log \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

o que prova (2) e, com isto, provamos o princípio variacional de Gibbs.

Portanto, qualquer outro ϱ que usarmos, $\varrho \neq \bar{\varrho}$, teremos

$$\psi(\varrho) \geq \psi(\bar{\varrho}) \equiv \Omega. \quad (\text{A.10})$$

Mas o hamiltoniano com que estamos trabalhando pode ser escrito, com o auxílio do MHTE, como

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}(\mathcal{S}) + \hat{H}(\mathbf{q} \notin \mathcal{S}) \\ &= \hat{H}_a + \hat{H}' + \hat{H}(\mathbf{q} \notin \mathcal{S}). \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

*De acordo com a Ref. [64], seja $f : I \rightarrow \Re$ duas vezes derivável no intervalo aberto I . Para que f seja convexa é necessário e suficiente que $f''(x) \geq 0$, para todo $x \in I$.

Então:

$$\begin{aligned}
 \Omega &\leq \psi(\varrho_a) = \text{Tr}(\mathcal{H}\varrho_a) + \beta^{-1} \text{Tr}(\varrho_a \ln \varrho_a) \\
 &\leq \text{Tr} \left\{ [\hat{H}_a + \hat{H}' + \hat{H}(\mathbf{q} \notin \mathcal{S})] \varrho_a \right\} + \beta^{-1} \text{Tr}(\varrho_a \ln \varrho_a) \\
 &\leq [\text{Tr}(\hat{H}_a \varrho_a) + \beta^{-1} \text{Tr}(\varrho_a \ln \varrho_a)] + \text{Tr}(\hat{H}' \varrho_a) + \text{Tr}[\hat{H}(\mathbf{q} \notin \mathcal{S}) \varrho_a] \\
 &\leq \Omega_a + \langle \hat{H}' \rangle_a + \langle \hat{H}(\mathbf{q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a \equiv \Omega_{var}, \tag{A.12}
 \end{aligned}$$

em que

$$\Omega_a = \text{Tr}(\hat{H}_a \varrho_a) + \beta^{-1} \text{Tr}(\varrho_a \ln \varrho_a) \tag{A.13}$$

$$\langle \hat{H}' \rangle_a = \frac{1}{\text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_a}} \text{Tr} \left[\hat{H}' e^{-\beta \hat{H}_a} \right] \tag{A.14}$$

$$\langle \hat{H}(\mathbf{q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a = \frac{1}{\text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_a}} \text{Tr} \left[\hat{H}(\mathbf{q} \notin \mathcal{S}) e^{-\beta \hat{H}_a} \right]. \tag{A.15}$$

Apêndice B

Detalhes de derivações de equações do Capítulo 2

B.1 Diagonalização do hamiltoniano assintótico \hat{H}_a e determinação das funções de *gap*

Anteriormente, mostramos que o hamiltoniano completo para o MHTE pode ser escrito como uma soma de dois termos:

$$\hat{H} = \hat{H}(\mathcal{S}) + \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}), \quad (\text{B.1})$$

em que

$$\hat{H}(\mathcal{S}) = \hat{H}_a + \hat{H}' \quad (\text{B.2})$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_a &= W_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{Q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \{ [w(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) + V^{-1} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathcal{Q})] \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) + h.c. \} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathcal{Q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}] \\ &\times [\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) - g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})] [\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q})], \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

h.c. é o termo conjugado Hermitiano,

$$W_0 = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathcal{Q} \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}] g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \quad (\text{B.5})$$

$$w(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} [\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \delta_{\sigma\sigma'}] g^*(\mathbf{k}', \mathcal{Q}), \quad (\text{B.6})$$

o sinal superior deve ser tomado para férmions e o inferior, para bósons e

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathcal{Q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum'_{\mathcal{Q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathcal{Q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathcal{Q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathcal{Q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma). \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

A linha presente no segundo somatório indica omissão da soma de (a) termos com $\mathcal{Q} \in \mathcal{S}$ [termos diretos] e (b) termos com $\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathcal{Q} \in \mathcal{S}$ [termos de troca], e os parâmetros $g(\mathbf{k}, \mathcal{Q})$ definem funções variacionais no princípio variacional de Gibbs.

Para obtermos a energia livre variacional do sistema (que é sempre um limite superior ou igual à energia livre exata), a condição a ser satisfeita é a seguinte

$$\frac{\partial \Omega_{\text{var}}}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} = 0, \quad (\text{B.8})$$

em que

$$\Omega_{\text{var}} \equiv \Omega_a + \langle \hat{H}' \rangle_a + \langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a \geq \Omega \quad (\text{B.9})$$

$$\Omega_a = -\beta^{-1} \ln \text{Tr} \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] \quad (\text{B.10})$$

$$\langle \dots \rangle_a = \frac{\text{Tr}\{(\dots) \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N})]\}}{\text{Tr} \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N})]} \quad (\text{B.11})$$

e

$$\Omega = -\beta^{-1} \ln \text{Tr} \exp[-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})] \quad (\text{B.12})$$

é o potencial *grand* canônico exato.

Na sequência calcularemos a condição dada pela Eq. (B.8):

$$\frac{\partial \Omega_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} + \frac{\partial \langle \hat{H}' \rangle_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} + \frac{\partial \langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} = 0 \quad (\text{B.13})$$

Mostraremos que, se

$$g(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) = \langle \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) \rangle_a, \quad (\text{B.14})$$

conforme afirmamos no Capítulo 2, a Eq. (B.13) se verifica. Usando a expressão acima para Ω_a obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} &= \left\langle \frac{\partial \hat{H}_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} \right\rangle_a \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} [\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}] [\langle \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \rangle_a - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q})]. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Ou seja, se a condição dada na Eq. (B.14) for satisfeita no limite termodinâmico, então teremos

$$\frac{\partial \Omega_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} = 0. \quad (\text{B.16})$$

Para calcularmos $\partial \langle \hat{H}' \rangle_a / \partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})$, trabalharemos primeiro com a diagonalização de \hat{H}_a :

$$\begin{aligned} \hat{H}_a &= W_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{Q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \{ [w(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) + V^{-1} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathcal{Q})] \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) + h.c. \}. \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

\hat{H}_a é dado pela soma de uma parte *c-number* (W_0) mais quantidades quadráticas nos operadores de criação e de aniquilação. Portanto, \hat{H}_a pode ser diagonalizado a partir de uma transformação canônica linear para operadores de criação e de aniquilação dados respectivamente por $\hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma)$ e $\hat{b}(\mathbf{k}, \sigma)$:

$$\hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) = \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} U(k, k') \hat{b}(\mathbf{k}', \sigma'), \quad (\text{B.18})$$

em que $U(k, k')$ é uma matriz unitária diagonal em *spin*:

$$U(k, k') = U(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (\text{B.19})$$

Assim:

$$\begin{aligned} \hat{H}_a &= W_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \sum_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \sum_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} U^*(k, k') M(k, k') \\ &\quad \times U(k', k_2) \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{b}(\mathbf{k}_2, \sigma_2), \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

e

$$M(k, k') = \sum_{\mathcal{Q}} \omega(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) \delta_{k', k+\mathcal{Q}} \quad (\text{B.21})$$

$$\omega(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \delta_{\mathcal{Q}0} + w(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) + V^{-1} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathcal{Q}), \quad (\text{B.22})$$

Denotaremos $\phi_{k_2}(k)$ os autovetores ortonormais da matriz $M(k, k')$ e ω_{k_2} os autovalores correspondentes:

$$\sum_{\mathbf{k}} \phi_{k_1}^*(k) \phi_{k_2}(k) = \delta_{k_1 k_2}. \quad (\text{B.23})$$

Em $\phi_{k_2}(k)$, k_2 deve ser entendido como índice de autovalor/autovetor, enquanto que k e k' são índices vetoriais. A equação de autovalores/autovetores a ser satisfeita é dada por:

$$\sum_{\mathbf{k}'} M(k, k') \phi_{k_2}(k') = \omega_{k_2} \phi_{k_2}(k) \quad (\text{B.24})$$

É possível mostrar que a matriz que diagonaliza \hat{H}_a é composta por seus autovetores. Logo:

$$U(k, k') = \phi_{k'}(k). \quad (\text{B.25})$$

Com isto, temos que o hamiltoniano diagonalizado \hat{H}_a é dado por:

$$\hat{H}_a - \mu\hat{N} = W_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\omega_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{b}(\mathbf{k}, \sigma), \quad (\text{B.26})$$

em que $\omega_{\mathbf{k}}$ deve ser determinado a partir de um esquema iterativo. Vamos calcular agora $\partial\langle\hat{H}'\rangle_a/\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})$. Para isto, utilizaremos apenas a parte de \hat{H}' que é diagonal em termos de $\hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma)$ e $\hat{b}(\mathbf{k}, \sigma)$ e que será a única parte que contribuirá para o cálculo, uma vez que \hat{H}_a já está escrito em forma diagonal. Assim:

$$\begin{aligned} \langle\hat{H}'\rangle_a &= \langle\hat{H}'_{\text{diag}}\rangle_a \\ &= e^{\beta\Omega_a} \text{Tr} \left\{ \hat{H}'_{\text{diag}} \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu\hat{N})] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

Portanto:

$$\frac{\partial\langle\hat{H}'\rangle_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} = \beta \langle\hat{H}'_{\text{diag}}\rangle_a \frac{\partial\Omega_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} - \beta \left\langle \hat{H}'_{\text{diag}} \frac{\partial\hat{H}_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} \right\rangle_a + \left\langle \frac{\partial\hat{H}'_{\text{diag}}}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} \right\rangle_a \quad (\text{B.28})$$

Mais uma vez, como \hat{H}_a já está diagonalizado,

$$\left\langle \frac{\partial\hat{H}'_{\text{diag}}}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} \right\rangle_a = \left\langle \frac{\partial\hat{H}'}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} \right\rangle_a. \quad (\text{B.29})$$

Após calcularmos os três termos da Eq. (B.28), chegamos a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\langle\hat{H}'\rangle_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} &= \beta \langle\hat{H}'_{\text{diag}}\rangle_a \frac{\partial\Omega_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} \\ &- \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} [\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}] \left\{ \langle\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q})\rangle_a - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right. \\ &\quad \left. + \beta \langle\hat{H}'_{\text{diag}} [\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q})]\rangle_a \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Novamente, se a condição dada na Eq. (B.14) for satisfeita no limite termodinâmico, ficaremos com:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \hat{H}' \rangle_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} &= -\frac{\beta}{2V} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} [\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}] \\ &\quad \times \left\langle \hat{H}'_{\text{diag}} \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right] \right\rangle_a. \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

Ainda precisamos calcular $\partial \langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a / \partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})$. Este termo, porém, se anula identicamente, uma vez que $\langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a$ se anula. Isto pode ser entendido da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a &= \frac{1}{V} \sum_{\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathcal{Q}) \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k} + \mathcal{Q}, \sigma) \rangle_a \\ &\quad + \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum'_{\mathcal{Q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathcal{Q}) \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathcal{Q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathcal{Q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \rangle_a. \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

Conforme visto, \hat{H}_a já está escrito em forma diagonal a partir da utilização de uma transformação canônica linear, dada pela Eq. (B.18). Usando esta transformação na expressão acima, a contribuição para $\langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a$ vinda de $\langle \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) \rangle_a$ se anula

$$\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k} + \mathcal{Q}, \sigma) \rangle_a \propto \sum_{\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}} \left[\sum_{\mathbf{k}, \sigma} \phi_{\mathbf{k}'}^*(k) \phi_p(k + \mathcal{Q}) \right] \langle \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \hat{b}(\mathbf{p}, \sigma'') \rangle_a = 0 \quad (\text{B.33})$$

pois a transformação unitária acopla um dado momento \mathbf{k} somente com $\mathbf{k} + \mathcal{Q}$, $\mathcal{Q} \in \mathcal{S}$. Mas, por definição, $\hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S})$ exclui os valores de $\mathcal{Q} \in \mathcal{S}$. Utilizando o teorema de Matsubara na parte restante:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a &\propto \sum_{\mathcal{Q}} \left[\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathcal{Q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \rangle_a \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathcal{Q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \right. \\ &\quad \left. \mp \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathcal{Q}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathcal{Q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \rangle_a \right] \\ &\propto \sum_{\mathcal{Q}} \left\{ \left[\phi_p^*(k + \mathcal{Q}) \phi_{q'}(k) \right] \left[\phi_{p'}^*(k' - \mathcal{Q}) \phi_q(k') \right] \right. \\ &\quad \left. \mp \left[\phi_p^*(k + \mathcal{Q}) \phi_q(k') \right] \left[\phi_{p'}^*(k' - \mathcal{Q}) \phi_{q'}(k) \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

Esta expressão se anula pois a linha presente no somatório indica ausência de $\mathcal{Q} \in \mathcal{S}$ e de $(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathcal{Q}) \in \mathcal{S}$ (termos diretos e de troca, respectivamente). Logo:

$$\frac{\partial \langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} = 0. \quad (\text{B.35})$$

Substituindo as Eqs. (B.16), (B.31) e (B.35) na Eq. (B.13), chegamos a:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \Omega_{var}}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} &= -\frac{\beta}{2V} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \left[\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'} \right] \left\langle \hat{H}'_{\text{diag}} \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right] \right\rangle_a \\
 &= -\frac{\beta}{4V^2} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \sum_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \sum_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} \left[\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'} \right] \\
 &\quad \times \left[\tilde{u}(\mathbf{q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \right] \left\langle \left\{ \left[\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \right] \right. \right. \\
 &\quad \times \left. \left. \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) - g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right] \right\} \right\rangle_{\text{diag}} \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right] \Bigg\rangle_a. \tag{B.36}
 \end{aligned}$$

Vamos então trabalhar apenas com o termo

$$\begin{aligned}
 &\left\langle \left[\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \right] \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) - g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right] \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right] \right\rangle_a = \\
 &= \left\langle \left[\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) - g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right] \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right] \right\rangle_a \\
 &= \left\langle \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right\rangle_a - g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \left\langle \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right\rangle_a \\
 &\quad - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \left\langle \hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right\rangle_a + g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \left\langle \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right\rangle_a \\
 &\quad - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \left\langle \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right\rangle_a + g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \left\langle \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \right\rangle_a \\
 &\quad + g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \left\langle \hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right\rangle_a - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}), \tag{B.37}
 \end{aligned}$$

da Eq. (B.36). Se a condição dada na Eq. (B.14) for satisfeita,

$$\begin{aligned}
 &\left\langle \left[\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \right] \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) - g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right] \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right] \right\rangle_a = \\
 &= \left\langle \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right\rangle_a - g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \left\langle \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right\rangle_a \\
 &\quad - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \left\langle \hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right\rangle_a - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \left\langle \hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right\rangle_a \\
 &\quad + 2g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}). \tag{B.38}
 \end{aligned}$$

Escrevendo os operadores de criação e de aniquilação explicitamente:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \left[\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \right] \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) - g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right] \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right] \right\rangle_a = \\
 & = \left\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \right\rangle_a \\
 & - g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \left\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \right\rangle_a \\
 & - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \left\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \right\rangle_a \\
 & - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \left\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \right\rangle_a \\
 & + 2g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}). \tag{B.39}
 \end{aligned}$$

A seguir usamos o teorema de Matsubara [65]:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \left\{ \left[\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \right] \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) - g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right] \right\}_{\text{diag}} \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right] \right\rangle_a = \\
 & = g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) + g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \left[\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \rangle_a \right. \\
 & \times \left. \langle \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \right] + g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \left[\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \rangle_a \right. \\
 & \times \left. \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \right] + g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \left[\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \rangle_a \right. \\
 & \times \left. \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \rangle_a \right] + \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \rangle_a \\
 & \times \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \rangle_a \\
 & + \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \rangle_a \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \rangle_a \langle \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \\
 & - g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \left[g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right. \\
 & + \left. \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \rangle_a \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \right] \\
 & - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \left[g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right. \\
 & + \left. \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \rangle_a \langle \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \right] \\
 & - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \left[g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right. \\
 & + \left. \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \rangle_a \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \rangle_a \right] \\
 & + 2g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}). \tag{B.40}
 \end{aligned}$$

do que obtemos:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \left[\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \right] \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) - g(\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \right] \left[\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) - g(\mathbf{k}', \mathcal{Q}) \right] \right\rangle_a = \\
 & = \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \rangle_a \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \rangle_a \\
 & + \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \rangle_a \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \rangle_a \langle \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \\
 & . \tag{B.41}
 \end{aligned}$$

Substituindo este resultado na Eq. (B.36), chegamos a:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \Omega_{var}}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} &= -\frac{\beta}{4V^2} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \sum_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \sum_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} \left[\tilde{u}(\mathcal{Q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'} \right] \\
 &\times \left[\tilde{u}(\mathbf{q}) \mp \tilde{u}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{\sigma_1\sigma_2} \right] \left[\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \rangle_a \right. \\
 &\times \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \rangle_a \\
 &+ \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1) \hat{a}(\mathbf{k}' + \mathcal{Q}, \sigma') \rangle_a \\
 &\left. \times \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2) \rangle_a \langle \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \rangle_a \right]. \quad (\text{B.42})
 \end{aligned}$$

Esta expressão não permite que façamos nenhum dos três somatórios em \mathbf{k} (\mathbf{k}' , \mathbf{k}_1 ou \mathbf{k}_2). Dados \mathcal{Q} , \mathbf{q} e \mathbf{k}_1 , esta expressão será não nula apenas para um conjunto **finito** de valores de \mathbf{k}_2 e de \mathbf{k}' , uma vez que a transformação unitária utilizada para diagonalizar \hat{H}_a apenas acopla um dado \mathbf{k} a um número finito de momentos, com vetores de onda diferindo por $\mathcal{Q} \in \mathcal{S}$:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \Omega_{var}}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} &\propto -\frac{\beta}{4V^2} \sum_{\mathbf{q} \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \sum_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \sum_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} \\
 &\times \left\{ [\phi^*(k_1 + q) \phi(k_2 + q)] [\phi(k_1) \phi^*(k')] [\phi^*(k_2) \phi(k' + \mathcal{Q})] \right. \\
 &\left. + [\phi^*(k_1 + q) \phi(k' + \mathcal{Q})] [\phi(k_1) \phi^*(k_2)] [\phi(k_2) \phi^*(k')] \right\}. \quad (\text{B.43})
 \end{aligned}$$

Ou seja, dos quatro somatórios em momento presentes na expressão acima, existe apenas uma soma livre, ou seja, esta expressão é proporcional a V^{-1} , se anulando no limite termodinâmico, se a Eq. (B.14) for satisfeita. Com isso mostramos que

$$\frac{\partial \Omega_{var}}{\partial g^*(\mathbf{k}, \mathcal{Q})} = 0 \quad (\text{B.44})$$

dado que

$$g(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) = \langle \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) \rangle_a, \quad (\text{B.45})$$

conforme queríamos demonstrar.

B.2 Além do teorema variacional - teoria de perturbação

Podemos ir além do teorema variacional discutido anteriormente e tratarmos os termos $\langle \hat{H}' \rangle_a$ e $\langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a$ em teoria de perturbação.

B.2.1 Discussão para o termo $\langle \hat{H}' \rangle_a$

Começamos a discussão trabalhando com a grande função de partição:

$$\begin{aligned} \Xi(\mathcal{S}) &= \exp[-\beta \Omega(\mathcal{S})] \\ &= \text{Tr} \exp[-\beta(\hat{H}_a + \hat{H}' - \mu \hat{N})] = \text{Tr} \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N}) - \beta \hat{H}']. \end{aligned} \quad (\text{B.46})$$

Utilizando a expansão de $\Xi(\mathcal{S})$ em potências de \hat{H}' que segue da expansão de Feynman-Dyson [52, 66] para $\exp\{-\beta[\hat{H}(\mathcal{S}) - \mu \hat{N}]\}$, obtemos:

$$\begin{aligned} \Xi(\mathcal{S}) &= \text{Tr} \left\{ \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] \right. \\ &\quad - \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] \int_0^\beta d\beta_1 \exp[\beta_1(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] \hat{H}' \exp[-\beta_1(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] \\ &\quad + \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \exp[\beta_1(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] \hat{H}' \\ &\quad \times \left. \exp[-\beta_1(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] \exp[\beta_2(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] \hat{H}' \exp[-\beta_2(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.47})$$

Usando a propriedade do traço, $\text{Tr}(a + b) = \text{Tr}a + \text{Tr}b$,

$$\begin{aligned} \Xi(\mathcal{S}) &= \text{Tr} \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] \left[1 - \int_0^\beta d\beta_1 \langle \hat{H}'(\beta_1) \rangle_a \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \langle \hat{H}'(\beta_1) \hat{H}'(\beta_2) \rangle_a + \dots \right] \end{aligned} \quad (\text{B.48})$$

obtemos a expressão desejada para a expansão:

$$\Xi(\mathcal{S}) = \Xi_a \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \cdots \int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_n \langle \hat{H}'(\beta_1) \cdots \hat{H}'(\beta_n) \rangle_a \right], \quad (\text{B.49})$$

em que $\Xi_a = e^{-\beta \Omega_a}$ e $\hat{H}'(\beta_j) = \exp[\beta_j(\hat{H}_a - \mu \hat{N})] \hat{H}' \exp[-\beta_j(\hat{H}_a - \mu \hat{N})]$ está escrito na representação de Heisenberg. Vamos inserir nesta expressão a Eq. (B.4) e avaliar

o n-ésimo termo de $\langle \hat{H}'(\beta_1) \cdots \hat{H}'(\beta_n) \rangle_a$:

$$\begin{aligned}
 \langle \cdots \rangle_a &= (2V)^{-n} \sum_{\mathbf{q}_1 \cdots \mathbf{q}_n \in \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}_1 \cdots \mathbf{k}_n} \sum_{\mathbf{k}'_1 \cdots \mathbf{k}'_n} \sum_{\sigma_1 \cdots \sigma_n} \sum_{\sigma'_1 \cdots \sigma'_n} \\
 &\times \left[\tilde{u}(\mathbf{q}_1) \mp \tilde{u}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1) \delta_{\sigma_1 \sigma'_1} \right] \cdots \left[\tilde{u}(\mathbf{q}_n) \mp \tilde{u}(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}'_n) \delta_{\sigma_n \sigma'_n} \right] \\
 &\times \langle [\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}_1)(\beta_1) - g^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}_1)] [\hat{\rho}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{q}_1)(\beta_1) - g(\mathbf{k}'_1, \mathbf{q}_1)] \\
 &\times \cdots [\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}_n, \mathbf{q}_n)(\beta_n) - g^*(\mathbf{k}_n, \mathbf{q}_n)] [\hat{\rho}(\mathbf{k}'_n, \mathbf{q}_n)(\beta_n) - g(\mathbf{k}'_n, \mathbf{q}_n)] \rangle_a,
 \end{aligned} \tag{B.50}$$

e nesta expressão:

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q})(\beta) &= \exp[\beta(\hat{H}_a - \mu\hat{N})] \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \exp[-\beta(\hat{H}_a - \mu\hat{N})] \\
 &= \exp\left\{ \beta \left[W_0 + \sum_{\mathbf{p}, \sigma} (\omega_p - \mu) \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}, \sigma) \hat{b}(\mathbf{p}, \sigma) \right] \right\} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \sigma) \hat{a}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma) \\
 &\times \exp\left\{ -\beta \left[W_0 + \sum_{\mathbf{p}', \sigma'''} (\omega_{p'} - \mu) \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}', \sigma''') \hat{b}(\mathbf{p}', \sigma''') \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{B.51}$$

ou seja

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q})(\beta) &= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \sum_{\mathbf{k}'', \sigma''} U^*(k, k') U(k + q, k'') \\
 &\times \exp\left[\beta \sum_{\mathbf{p}, \sigma} (\omega_p - \mu) \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}, \sigma) \hat{b}(\mathbf{p}, \sigma) \right] \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \hat{b}(\mathbf{k}'', \sigma'') \\
 &\times \exp\left[-\beta \sum_{\mathbf{p}', \sigma'''} (\omega_{p'} - \mu) \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}', \sigma''') \hat{b}(\mathbf{p}', \sigma''') \right] \\
 &= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \sum_{\mathbf{k}'', \sigma''} U^*(k, k') U(k + q, k'') e^{\beta(\omega_{k'} - \omega_{k''})} \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}', \sigma') \hat{b}(\mathbf{k}'', \sigma'').
 \end{aligned} \tag{B.52}$$

É interessante também calcularmos $\langle \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q})(\beta) \rangle_a$:

$$\langle \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q})(\beta) \rangle_a = \frac{\text{Tr} \left\{ e^{\beta_1(\hat{H}_a - \mu\hat{N})} \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) e^{-\beta_1(\hat{H}_a - \mu\hat{N})} e^{\beta(\hat{H}_a - \mu\hat{N})} \right\}}{\text{Tr} e^{\beta(\hat{H}_a - \mu\hat{N})}}. \tag{B.53}$$

Usando a propriedade de invariância cíclica do traço:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q})(\beta) \rangle_a &= \frac{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta_1(\hat{H}_a - \mu \hat{N})} e^{\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N})} e^{\beta_1(\hat{H}_a - \mu \hat{N})} \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \right\}}{\text{Tr} e^{\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N})}} \\
 &= \frac{\text{Tr} \left\{ e^{\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N})} \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \right\}}{\text{Tr} e^{\beta(\hat{H}_a - \mu \hat{N})}} \\
 &= \langle \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \rangle_a.
 \end{aligned} \tag{B.54}$$

Vamos analisar a Eq. (B.50): substituindo nesta a Eq. (B.52), com o auxílio do teorema de Matsubara é possível escrever $\langle \dots \rangle_a$ como a soma de produtos de $\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle_a$ e $\langle \hat{b} \hat{b}^\dagger \rangle_a$. Consideremos o termo $[\hat{\rho}(\mathbf{k}'_n, \mathbf{q}_n)(\beta_n) - g(\mathbf{k}'_n, \mathbf{q}_n)]$ da Eq. (B.50): a contribuição $-g(\mathbf{k}'_n, \mathbf{q}_n) \chi$, sendo χ a média térmica do produto dos demais fatores em $\langle \dots \rangle_a$ **exceto** o próprio fator $[\hat{\rho}(\mathbf{k}'_n, \mathbf{q}_n)(\beta_n) - g(\mathbf{k}'_n, \mathbf{q}_n)]$ é exatamente cancelada pelo termo $\langle \hat{\rho}(\mathbf{k}'_n, \mathbf{q}_n) \rangle_a \chi$ supondo que a condição dada pela Eq. (B.14) seja satisfeita. Esta afirmação é válida também para qualquer contribuição envolvendo um ou mais fatores de g ou g^* . Ou seja, os termos não nulos serão aqueles envolvendo contrações ‘**cruzadas**’, significando que as contrações de \hat{b}^\dagger e \hat{b} devem ser feitas entre operadores pertencentes a $\hat{\rho}$ e $\hat{\rho}^\dagger$ **diferentes**.

Anteriormente mostramos que a matriz $U(k, k')$ que diagonaliza \hat{H}_a é não nula apenas para valores de $\mathbf{k} - \mathbf{k}' \in \mathcal{S}$. Logo, é possível concluir que as contrações de $\hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ ou $\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ com qualquer outro $\hat{\rho}(\mathbf{k}', \mathbf{q}')$ ou $\hat{\rho}^\dagger(\mathbf{k}', \mathbf{q}')$ (com $\mathbf{q}, \mathbf{q}' \in \mathcal{S}$) serão diferentes de zero apenas para $\mathbf{k} - \mathbf{k}' \in \mathcal{S}$. Assim, podemos definir uma cadeia de j fatores de $\hat{\rho}$ e/ou $\hat{\rho}^\dagger$ que apresentam contrações não nulas. Portanto, os somatórios em \mathbf{k}_j e \mathbf{k}'_j presentes na Eq. (B.50) associados a cada cadeia estão todos relacionados entre si, sendo que eles podem diferir apenas por valores que pertençam ao conjunto \mathcal{S} ($\mathbf{k}_j - \mathbf{k}'_j \in \mathcal{S}$). Assim, existe apenas um somatório livre, ou seja, apenas um fator de volume V no limite termodinâmico associado a cada cadeia:

$$\sum_{\mathbf{k}} \sim (2\pi)^{-3} V \int d^3k. \tag{B.55}$$

Com isso, as contribuições diferentes de zero serão dadas por:

$$\langle \dots \rangle_a \propto V^{-n} \prod_v \mathcal{C}_v \tag{B.56}$$

em que \mathcal{C}_v é a contribuição de cada cadeia proporcional ao volume V . Sendo j_v o tamanho de \mathcal{C}_v , temos a seguinte restrição presente:

$$\sum_v j_v = 2n \tag{B.57}$$

pois definimos anteriormente uma cadeia de j elementos de $\hat{\rho}$ e/ou $\hat{\rho}^\dagger$ e temos n fatores $\hat{\rho}$ e n fatores $\hat{\rho}^\dagger$. Como cada \mathcal{C}_v é proporcional ao volume V , supondo que temos l fatores \mathcal{C}_v em \prod_v , obtemos:

$$\langle \dots \rangle_a \propto V^{l-n}. \quad (\text{B.58})$$

Temos duas situações possíveis:

1. $l = n$: $\langle \dots \rangle_a \propto V^0$ é $O(1)$, independente de volume; ou
2. $l < n$: $\langle \dots \rangle_a \propto V^{-m}$, $m \geq 1$.

Ou seja, no limite termodinâmico concluímos que a série perturbativa é independente de volume em todas as ordens:

$$\Omega(\mathcal{S}) = \Omega_a + O(1). \quad (\text{B.59})$$

Como $\Omega_a \propto V$ concluímos que Ω_a fornece a energia livre de equilíbrio exata para $\Omega(\mathcal{S})$ se, e somente se, a Eq. (B.14) for satisfeita.

B.2.2 Discussão para o termo $\langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a$

Já concluímos que o hamiltoniano completo para o MHTE pode ser escrito como uma soma de dois termos:

$$\hat{H} = \hat{H}(\mathcal{S}) + \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}), \quad (\text{B.60})$$

em que

$$\hat{H}(\mathcal{S}) = \hat{H}_a + \hat{H}' \quad (\text{B.61})$$

e

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathcal{Q}) \hat{\rho}(\mathbf{k}, \mathcal{Q}) \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum'_{\mathcal{Q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{u}(\mathcal{Q}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k} + \mathcal{Q}, \sigma) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathcal{Q}, \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}', \sigma') \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma). \end{aligned} \quad (\text{B.62})$$

A linha presente no segundo somatório indica omissão da soma de (a) termos com $\mathcal{Q} \in \mathcal{S}$ [termos diretos] e (b) termos com $(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathcal{Q}) \in \mathcal{S}$ [termos de troca].

Mostramos na Subseção anterior que a contribuição de \hat{H}' é desprezível no limite termodinâmico. Nesta subseção vamos analisar a contribuição de $\hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S})$, lembrando que no início deste apêndice já mostramos que a contribuição de $\langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S}) \rangle_a$

em primeira ordem em teoria de perturbação se anula identicamente (a série perturbativa começará, portanto, com $n = 2$). Porém, veremos que isto não é verdadeiro para ordens mais altas. Já mostramos que a série de \hat{H}' é toda desprezível em teoria de perturbação. É possível mostrar [18] também que a série ‘cruzada’, que contém fatores \hat{H}' e $\hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S})$ misturados é igualmente $O(1)$ no limite termodinâmico, assumindo novamente que a Eq. (B.14) é satisfeita. Com isto, ficamos apenas com:

$$\begin{aligned} \Omega = \Omega_a - \beta^{-1} \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \\ \times \cdots \int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_n \langle \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S})(\beta_1) \cdots \hat{H}(\mathcal{Q} \notin \mathcal{S})(\beta_n) \rangle_{a,c}. \end{aligned} \quad (\text{B.63})$$

Neste caso, porém, temos a presença de dois ‘índices’ na média térmica: um já conhecido, denotando o hamiltoniano \hat{H}_a , e outro novo, c , que implica que apenas as contribuições conexas para $\langle \cdots \rangle_a$ devem ser consideradas (ou seja, devemos levar em conta apenas os diagramas conectados). Para $n = 2$, os termos conexas são dados por:

$$\begin{aligned} \langle \cdots \rangle_{a,c} = & V^{-2} \sum_{\mathcal{Q}_1 \notin \mathcal{S}} \sum_{\mathcal{Q}_2 \notin \mathcal{S}} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathcal{Q}_1) \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathcal{Q}_2) \\ & \times \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1, \sigma_1)(\beta_1) \hat{a}(\mathbf{k}_2 + \mathcal{Q}_2, \sigma_2)(\beta_2) \rangle_a \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1 + \mathcal{Q}_1, \sigma_1)(\beta_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \sigma_2)(\beta_2) \rangle_a \\ & + V^{-2} \sum_{\mathcal{Q}_1 \notin \mathcal{S}} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma'_2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum'_{\mathcal{Q}_2, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_2} \tilde{u}_{\text{ext}}^*(\mathcal{Q}_1) \tilde{u}(\mathcal{Q}_2) \\ & \times \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1 + \mathcal{Q}_1, \sigma_1)(\beta_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2 + \mathcal{Q}_2, \sigma_2)(\beta_2) \rangle_a \\ & \times \left[\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}'_2 - \mathcal{Q}_2, \sigma_2)(\beta_2) \hat{a}(\mathbf{k}'_2, \sigma'_2)(\beta_2) \rangle_a \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1, \sigma_1)(\beta_1) \hat{a}(\mathbf{k}_2, \sigma_2)(\beta_2) \rangle_a \right. \\ & \mp \left. \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}'_2 - \mathcal{Q}_2, \sigma_2)(\beta_2) \hat{a}(\mathbf{k}_2, \sigma_2)(\beta_2) \rangle_a \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1, \sigma_1)(\beta_1) \hat{a}(\mathbf{k}'_2, \sigma'_2)(\beta_2) \rangle_a \right] \\ & + \frac{1}{2} V^{-2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_{\sigma'_1, \sigma'_2} \sum'_{\mathcal{Q}_1, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1} \sum'_{\mathcal{Q}_2, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_2} \tilde{u}(\mathcal{Q}_1) \tilde{u}(\mathcal{Q}_2) \\ & \times \langle \hat{a}(\mathbf{k}_1, \sigma_1)(\beta_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2 + \mathcal{Q}_2, \sigma_2)(\beta_2) \rangle_a \langle \hat{a}(\mathbf{k}'_1, \sigma'_1)(\beta_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}'_2 - \mathcal{Q}_2, \sigma'_2)(\beta_2) \rangle_a \\ & \times \left[\langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathcal{Q}_1, \sigma_1)(\beta_1) \hat{a}(\mathbf{k}_2, \sigma_2)(\beta_2) \rangle_a \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}'_1 - \mathcal{Q}_1, \sigma'_1)(\beta_1) \hat{a}(\mathbf{k}'_2, \sigma'_2)(\beta_2) \rangle_a \right. \\ & \mp \left. \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathcal{Q}_1, \sigma_1)(\beta_1) \hat{a}(\mathbf{k}'_2, \sigma'_2)(\beta_2) \rangle_a \langle \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}'_1 - \mathcal{Q}_1, \sigma'_1)(\beta_1) \hat{a}(\mathbf{k}_2, \sigma_2)(\beta_2) \rangle_a \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.64})$$

Para continuarmos a análise desta expressão, precisamos saber se o sistema é cristalino (a densidade do número médio de partículas é periódica no espaço - $\langle \hat{\rho}(\mathcal{Q}) \rangle = 0$) ou não é cristalino (como exemplo podemos citar gases, líquidos, plasmas não cristalinos e sólidos desordenados):

1. Sistemas cristalinos: é possível mostrar que se \mathcal{S} consiste apenas de vetores da rede recíproca do cristal, então Ω_a não fornece a energia livre exata para Ω , pois para este caso $\langle \dots \rangle_{a,c}$ é proporcional ao volume para $n \geq 2$. Porém, Ω_a fornece um limite superior exato para Ω (uma vez que estamos trabalhando com um teorema variacional). E não adianta tentarmos incluir outros vetores para \mathcal{S} , pois desta forma estaríamos violando a condição dada pela Eq. (B.14).
2. Sistemas não cristalinos: este caso é o mais complexo de se analisar. Aqui, porém, é suficiente dizer que para $n = 2$, $\langle \dots \rangle_{a,c}$ é uma quantidade extensiva.

Apêndice C

Integrais funcionais Euclideanas

C.1 Integrais gaussianas multidimensionais usuais

C.1.1 Na ausência de fonte externa

Anteriormente afirmamos que quando temos uma ação que é quadrática nos campos, nosso problema pode ser resolvido exatamente. Provaremos [6] esta afirmação. Vamos supor que $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_k) \in \mathfrak{R}^k$ e $A = (A)_{ij}$, com $i, j = 1, \dots, k$ e A sendo uma matriz real, simétrica e positiva (o que significa que todos os seus autovalores são positivos). Definiremos uma notação:

$$(\phi, A\phi) = \phi_i A_{ij} \phi_j. \quad (\text{C.1})$$

Vamos mostrar que

$$Z_0 \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d^k \phi \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\phi, A\phi) \right\} = \frac{(2\pi)^{k/2}}{\sqrt{\det A}}, \quad (\text{C.2})$$

ou seja, conhecendo a matriz A , calcular o $(\det A)$ significa, para uma matriz diagonal, apenas a multiplicação de seus autovalores. Vamos então supor que a matriz A pode ser diagonalizada:

$$SAS^t = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k) \quad (\text{C.3})$$

sendo S a matriz diagonalizante. Conforme dito anteriormente, todos os autovalores λ_i de A são positivos, $\lambda_i > 0$. Iniciaremos a demonstração fazendo uma mudança de variáveis:

$$y = S\phi. \quad (\text{C.4})$$

Portanto:

$$d\phi = \frac{1}{|\det S|} dy \Rightarrow d^k \phi = |\det S|^{-1} d^k y, \text{ ou seja, } d^k \phi = d^k y \quad (\text{C.5})$$

pois o Jacobiano desta transformação é igual a 1. Logo:

$$\int d^k \phi \exp \left\{ -\frac{1}{2}(\phi, A\phi) \right\} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\phi_1 \cdots d\phi_k \exp \left\{ -\frac{1}{2}[\phi_1 A_{11} \phi_1 + \cdots + \phi_k A_{kk} \phi_k] \right\} \quad (\text{C.6})$$

Pela troca de variáveis proposta acima,

$$y = S\phi \Rightarrow \phi = S^{-1}y \text{ e } A\phi = AS^{-1}y. \quad (\text{C.7})$$

obtemos:

$$\begin{aligned} \int d^k \phi \exp \left\{ -\frac{1}{2}(\phi, A\phi) \right\} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \cdots dy_k \exp \left\{ -\frac{1}{2}[(S^{-1}y)_1 (AS^{-1})_{11} y_1 \right. \\ &\quad \left. + \cdots + (S^{-1}y)_k (AS^{-1})_{kk} y_k] \right\} \\ &= \int d^k y \exp \left\{ -\frac{1}{2}(S^{-1}y, AS^{-1}y) \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Mas

$$(S^{-1}y, AS^{-1}y) = (S^{-1}y)_i (AS^{-1}y)_i = (S^{-1})_{ij} y_j A_{ik} (S^{-1})_{kl} y_l. \quad (\text{C.9})$$

Desde o início estamos supondo que A é uma matriz simétrica. Então, a matriz que diagonaliza A também o é, $(S^{-1})_{ij} = S_{ji}$. Como estamos lidando apenas com as componentes dos vetores e das matrizes (que são números), podemos escrever:

$$(S^{-1}y)_i (AS^{-1}y)_i = S_{ji} y_j A_{ik} (S^{-1})_{kl} y_l = y_j [S_{ji} A_{ik} (S^{-1})_{kl}] y_l = y_j \underbrace{(SAS^{-1})_{jl}}_{\lambda_i} y_l \quad (\text{C.10})$$

Assim:

$$\begin{aligned} \int d^k y \exp \left\{ -\frac{1}{2}(S^{-1}y, AS^{-1}y) \right\} &= \int d^k y \exp \left\{ -\frac{1}{2}(y, SAS^{-1}y) \right\} \\ &= \int d^k y \exp \left\{ -\frac{1}{2}\lambda_i y_i^2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

Porém,

$$\begin{aligned} \int d^k y \exp \left\{ -\frac{1}{2}\lambda_i y_i^2 \right\} &= \int dy_1 \exp \left\{ -\frac{1}{2}\lambda_1 y_1^2 \right\} \cdots \int dy_k \exp \left\{ -\frac{1}{2}\lambda_k y_k^2 \right\} \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_1}} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_2}} \cdots \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_k}} = \frac{(2\pi)^{k/2}}{\sqrt{\prod \lambda_i}} \\ &= \prod_{i=1}^k \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_i}} = \frac{(2\pi)^{k/2}}{\sqrt{\det A}}, \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

conforme queríamos demonstrar.

C.1.2 Na presença de fonte externa

Quando o sistema com o qual estamos trabalhando se encontra na presença de uma fonte externa J , o resultado acima se modifica. É possível mostrar que

$$\begin{aligned} Z_0[J] &\equiv \frac{1}{Z_0} \int_{-\infty}^{+\infty} d^k \phi \exp \left\{ -\frac{1}{2}(\phi, A\phi) + (J, \phi) \right\} \\ &= \exp \left\{ \frac{1}{2}(J, A^{-1}J) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Vamos provar esta igualdade. Para isto, iniciamos calculando a seguinte quantidade:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}(\phi + A^{-1}J, A[\phi + A^{-1}J]) + \frac{1}{2}(J, A^{-1}J) &= \\ &= -\frac{1}{2}(\phi + A^{-1}J)_i (A[\phi + A^{-1}J])_i + \frac{1}{2}J_i (A^{-1}J)_i \\ &= -\frac{1}{2}(\phi_i + A_{il}^{-1}J_l) (A_{ij}\phi_j + A_{ij}A_{jm}^{-1}J_m) + \frac{1}{2}J_i A_{ik}^{-1}J_k. \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

A é uma matriz simétrica, $A_{ji} = A_{ij}$. Assim:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}(\phi + A^{-1}J, A[\phi + A^{-1}J]) + \frac{1}{2}(J, A^{-1}J) &= \\ &= -\frac{1}{2}\phi_i A_{ij}\phi_j - \frac{1}{2}[\phi_i A_{ji}A_{jm}^{-1}J_m + \phi_j A_{ji}A_{il}^{-1}J_l + J_l A_{il}^{-1}J_m A_{ji}A_{jm}^{-1}] \\ &\quad + \frac{1}{2}J_i A_{ik}^{-1}J_k. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Mas $A_{ji}A_{jm}^{-1} = \delta_{im}$:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}(\phi + A^{-1}J, A[\phi + A^{-1}J]) + \frac{1}{2}(J, A^{-1}J) &= \\ &= -\frac{1}{2}\phi_i A_{ij}\phi_j - J_i \phi_i = -\frac{1}{2}(\phi, A\phi) - (J, \phi). \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Trocando $\phi \rightarrow -\phi$ em $Z_0[J]$ obtemos:

$$Z_0[J] \equiv \frac{1}{Z_0} \int_{-\infty}^{+\infty} d^k \phi \exp \left\{ -\frac{1}{2}(\phi, A\phi) - (J, \phi) \right\}. \quad (\text{C.17})$$

Portanto:

$$Z_0[J] \equiv \frac{1}{Z_0} \int_{-\infty}^{+\infty} d^k \phi \exp \left\{ -\frac{1}{2}(\phi + A^{-1}J, A[\phi + A^{-1}J]) + \frac{1}{2}(J, A^{-1}J) \right\}. \quad (\text{C.18})$$

A seguir faremos a troca de variáveis:

$$y = \phi + A^{-1} J \Rightarrow d^k \phi = d^k y, \quad (\text{C.19})$$

e usando o resultado obtido anteriormente, chegamos a:

$$\begin{aligned} Z_0[J] &\equiv \frac{1}{Z_0} \exp \left\{ \frac{1}{2} (J, A^{-1} J) \right\} \int_{-\infty}^{+\infty} d^k y \exp \left\{ -\frac{1}{2} (y, Ay) \right\} \\ &= \exp \left\{ \frac{1}{2} (J, A^{-1} J) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

conforme queríamos demonstrar.

É possível definirmos as quantidades $\langle \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_n} \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_n} \rangle &\equiv \frac{1}{Z_0} \int_{-\infty}^{+\infty} d^k \phi \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_n} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\phi, A\phi) \right\} \\ &= \left. \frac{\partial}{\partial J_{i_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial J_{i_n}} Z_0[J] \right|_{J=0} \\ &= \left. \frac{\partial}{\partial J_{i_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial J_{i_n}} \exp \left\{ \frac{1}{2} (J, A^{-1} J) \right\} \right|_{J=0}, \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

C.2 Integrais funcionais

A partir de agora vamos considerar um campo escalar real de uma componente, o qual denotaremos por $\phi(x)$. Seja $J(x)$ uma fonte à qual o sistema está sujeito. Usaremos a seguinte notação:

$$(J, \phi) = \int d^4 x J(x) \phi(x). \quad (\text{C.22})$$

O gerador funcional das funções de Green é definido por:

$$\begin{aligned} Z[J] &\equiv \langle e^{(J, \phi)} \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d^4 x_1 \cdots d^4 x_n J(x_1) \cdots J(x_n) G(x_1, \dots, x_n), \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

sendo que $Z[0] = 1$ e as funções de Green $G(x_1, \dots, x_n)$ podem ser obtidas de $Z[J]$ a partir de derivações funcionais:

$$G(x_1, \dots, x_n) = \left. \frac{\delta^n Z[J]}{\delta J(x_1) \cdots \delta J(x_n)} \right|_{J=0}. \quad (\text{C.24})$$

Para as funções de Green conexas,

$$G_c(x_1, \dots, x_n) = \frac{\delta^n W[J]}{\delta J(x_1) \cdots \delta J(x_n)} \Bigg|_{J=0}, \quad (\text{C.25})$$

em que $W[J]$ é o gerador funcional das funções de Green conexas somente. $Z[J]$ e $W[J]$ se relacionam por [59]:

$$Z[J] = \exp\{W[J]\}. \quad (\text{C.26})$$

Para o campo escalar livre,

$$\begin{aligned} Z[J] &= \exp \left\{ \int d^4x d^4y J(x) G(x, y) J(y) \right\} \\ W_0[J] &= \int d^4x d^4y J(x) G(x, y) J(y) \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

em que $G(x, y)$ é o propagador para o campo livre e que satisfaz

$$(\square + m^2)G(x, y) = \delta(x - y). \quad (\text{C.28})$$

Comparando as duas seções descritas acima, e fazendo as devidas correspondências, podemos concluir por analogia que:

$$-\frac{1}{2}(\phi, A\phi) = -\frac{1}{2} \int d^4x \phi(x)(\square + m^2) \phi(x) = S_0, \quad (\text{C.29})$$

sendo que S_0 é a ação Euclideana para o campo escalar livre. E podemos escrever o gerador funcional na forma de uma integral gaussiana:

$$\begin{aligned} Z_0[J] &= \exp \left\{ \frac{1}{2} \int d^4x d^4y J(x) G(x, y) J(y) \right\} \\ &= \frac{1}{Z_0} \int \prod_x d\phi(x) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^4x \phi(x)(\square + m^2) \phi(x) \right. \\ &\quad \left. + \int d^4x J(x) \phi(x) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.30})$$

e

$$Z_0 = \int \prod_x d\phi(x) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^4x \phi(x)(\square + m^2) \phi(x) \right\}, \quad (\text{C.31})$$

e podemos usar isto como uma definição para a medida de integração da integral funcional:

$$\prod_x d\phi(x) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^4x \phi(x)(\square + m^2) \phi(x) \right\} = \mathcal{D}\phi e^{-S_0}. \quad (\text{C.32})$$

Ou seja, para as funções de correlação:

$$\langle \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) \rangle = \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi e^{-S_0} \phi(x_1) \cdots \phi(x_n). \quad (\text{C.33})$$

Portanto, fica claro que

$$\langle \phi(x_1)\phi(x_2) \rangle = G(x_1, x_2), \quad (\text{C.34})$$

em que $G(x_1, x_2)$ é a matriz inversa do operador diferencial $\square + m^2$, definido na Eq. (C.28). Também é fácil demonstrar o Teorema de Wick. Por exemplo, o valor médio do produto de 3 ou 4 operadores pode ser fatorado como [67]:

$$\langle \phi(x_1)\phi(x_2)\phi(x_3) \rangle = 0, \quad (\text{C.35})$$

$$\begin{aligned} \langle \phi(x_1)\phi(x_2)\phi(x_3)\phi(x_4) \rangle &= \langle \phi(x_1)\phi(x_2) \rangle \langle \phi(x_3)\phi(x_4) \rangle + \langle \phi(x_1)\phi(x_3) \rangle \langle \phi(x_2)\phi(x_4) \rangle \\ &+ \langle \phi(x_1)\phi(x_4) \rangle \langle \phi(x_2)\phi(x_3) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.36})$$

Apêndice D

Sistemas fermiônicos com interações dependentes do momento

O objetivo do presente Apêndice é para contrastar, por completeza de discussão, o formalismo BCS usual [52] para o problema de muitos férmions em que a interação **não** é de contato. Vamos considerar um gás de Fermi que interage por meio de um potencial dependente de momento. Mostraremos que a função de *gap* dependerá da forma do potencial em questão. Como referência bibliográfica seguiremos o que foi proposto por Fetter e Walecka [52] e por Tinkham [62].

É possível mostrar [68] que o pareamento entre dois férmions em estados $(\mathbf{k} \uparrow)$ e $(-\mathbf{k} \downarrow)$ faz com que o mar de Fermi se torne instável se o potencial que conecta as duas partículas for atrativo. Com esta afirmação, vamos considerar como quantidade relevante para o problema com o qual trabalharemos o potencial termodinâmico Ω do sistema a temperatura zero, com volume v e potencial químico μ , $\Omega(T = 0, v, \mu)$. Em segunda quantização, o hamiltoniano deste problema é dado por:

$$\hat{H} = \sum_{rs} a_r^\dagger \langle r | \hat{T} | s \rangle a_s + \frac{1}{2} \sum_{rstu} a_r^\dagger a_s^\dagger \langle rs | \hat{V} | tu \rangle a_u a_t. \quad (\text{D.1})$$

Vamos definir o operador Hermitiano $\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N}$, o qual possui um conjunto completo de autovetores e autovalores:

$$\hat{K} |\Psi_j\rangle = K_j |\Psi_j\rangle. \quad (\text{D.2})$$

Para um sistema termodinâmico no estado fundamental, a entropia S é nula, e podemos obter o potencial químico a partir da energia:

$$\mu = \left(\frac{\partial E(v, N)}{\partial N} \right)_v. \quad (\text{D.3})$$

A partir desta relação escrevemos o número de partículas N do sistema em termos de μ e de v . Assim:

$$\langle \Psi_0(\mu) | \hat{K} | \Psi_0(\mu) \rangle = \Omega(T = 0, v, \mu) = (E - \mu N)|_{T=0}, \quad (\text{D.4})$$

$|\Psi_0(\mu)\rangle$ representa o estado de equilíbrio do sistema para $T = 0$, μ e v fixos e

$$\langle \Psi_0(\mu) | \hat{N} | \Psi_0(\mu) \rangle = N, \quad \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1. \quad (\text{D.5})$$

Logo:

$$\hat{K} = \sum_{rs} a_r^\dagger \langle r | \hat{T} | s \rangle a_s + \frac{1}{2} \sum_{rstu} a_r^\dagger a_s^\dagger \langle rs | \hat{V} | tu \rangle a_u a_t - \mu \hat{N}. \quad (\text{D.6})$$

Podemos definir operadores Hermitianos \hat{N}_i cujos autovalores são os números de ocupação das partículas, n_i :

$$\hat{N} = \sum_i \hat{N}_i = \sum_i a_i^\dagger a_i \quad (\text{D.7})$$

$$\hat{K} = \sum_i \mathcal{K}_i \hat{N}_i = \sum_i \mathcal{K}_i a_i^\dagger a_i, \quad (\text{D.8})$$

e o operador \hat{K} dá o valor total de uma quantidade aditiva de partícula única, tal como a energia cinética. Portanto:

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \epsilon_{\mathbf{k}}^0 a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}. \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Vamos assumir que o potencial de interação seja atrativo. Assim, a Eq. (D.6) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} \hat{K} &= \sum_{\mathbf{krs}} \sum_{\lambda\lambda_1\lambda_2} \epsilon_{\mathbf{k}}^0 a_{\mathbf{r}\lambda_1}^\dagger \langle 0 | a_{\mathbf{r}\lambda_1} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{s}\lambda_2}^\dagger | 0 \rangle a_{\mathbf{s}\lambda_2} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} \langle \mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2 | \hat{V} | \mathbf{k}_3\lambda_3\mathbf{k}_4\lambda_4 \rangle a_{\mathbf{k}_1\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_4\lambda_4} a_{\mathbf{k}_3\lambda_3} \\ &\quad - \mu \sum_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}. \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

A seguir usando as relações de anticomutação para férmions $\{a_{\mathbf{k}\lambda}, a_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'}$ chegamos a:

$$\begin{aligned} \hat{K} &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} (\epsilon_{\mathbf{k}}^0 - \mu) a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} \langle \mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2 | \hat{V} | \mathbf{k}_3\lambda_3\mathbf{k}_4\lambda_4 \rangle a_{\mathbf{k}_1\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_4\lambda_4} a_{\mathbf{k}_3\lambda_3}. \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

O próximo passo é escrever a quantidade \hat{K} em termos de operadores $\alpha_{\mathbf{k}}$ e $\beta_{-\mathbf{k}}$ definidos a partir de uma transformação canônica:

$$\alpha_{\mathbf{k}} = u_k a_{\mathbf{k}\uparrow} - v_k a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (\text{D.12})$$

$$\beta_{-\mathbf{k}} = u_k a_{-\mathbf{k}\downarrow} + v_k a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, \quad (\text{D.13})$$

com as relações de comutação dadas por:

$$\{\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \{\beta_{\mathbf{k}}, \beta_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (\text{D.14})$$

e os demais comutadores se anulando. Destes comutadores obtemos que:

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad (\text{D.15})$$

Podemos inverter estas expressões para escrever:

$$a_{\mathbf{k}\uparrow} = u_k \alpha_{\mathbf{k}} + v_k \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \quad (\text{D.16})$$

$$a_{-\mathbf{k}\downarrow} = u_k \beta_{-\mathbf{k}} - v_k \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad (\text{D.17})$$

Inserindo estas expressões no primeiro termo do lado direito (LD) da Eq.(D.11), assumindo que o potencial é independente de spin e fazendo uma troca de variáveis ($\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}$, $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'$, $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k} + \mathbf{q}$, $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}' - \mathbf{q}$) que assegure que $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$ no segundo termo do (LD) da Eq.(D.11):

$$\begin{aligned} \hat{K} &= \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}}^0 - \mu) \left[2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)(\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) \right. \\ &\quad \left. + 2u_k v_k (\beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger) \right] \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \langle \mathbf{k}\mathbf{k}' | \hat{V} | (\mathbf{k} + \mathbf{q})(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \rangle \left[a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\uparrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} \right. \\ &\quad \left. + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} + a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\uparrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

É possível mostrar que o elemento de matriz apresenta a seguinte propriedade simétrica:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \hat{V} | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle &= \langle \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 | \hat{V} | \mathbf{k}_4 \mathbf{k}_3 \rangle \\ &= \langle -\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4 | \hat{V} | -\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 \rangle \\ &= \langle -\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 | \hat{V} | -\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

e com isto, chegamos a:

$$\begin{aligned} \hat{K} = & \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}}^0 - \mu) \left[2v_{\mathbf{k}}^2 + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) \right. \\ & \left. + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (\beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger) \right] + \hat{V}_a + \hat{V}_b, \end{aligned} \quad (\text{D.20})$$

em que:

$$\hat{V}_b = - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k} + \mathbf{q})(-\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \rangle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} \quad (\text{D.21})$$

e

$$\begin{aligned} \hat{V}_a = & -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \langle \mathbf{k}\mathbf{k}' | \hat{V} | (\mathbf{k} + \mathbf{q})(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \rangle \left[a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\uparrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} \right. \\ & \left. + a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow} a_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow} \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

O segundo termo desta expressão pode ser obtido a partir do primeiro se as seguintes trocas forem feitas: $\alpha_{\mathbf{k}} \leftrightarrow \beta_{-\mathbf{k}}$ e $v \leftrightarrow -v$. Vamos inicialmente trabalhar apenas com este termo e reescreveremos o mesmo com o auxílio do teorema de Wick:

$$a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow} = N(a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow}) + a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \dot{a}_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad (\text{D.23})$$

em que N corresponde ao ordenamento normal e $a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \dot{a}_{\mathbf{k}'\uparrow}$ representa o valor esperado no vácuo da quantidade $a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow}$, sendo dado por:

$$a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \dot{a}_{\mathbf{k}'\uparrow} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}}^2. \quad (\text{D.24})$$

Com isto, a Eq.(D.22) fica dada por:

$$\begin{aligned} \hat{V}_a = & N(\hat{V}_a) \\ - & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(\langle \mathbf{k}\mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k}\mathbf{k}' \rangle - \langle \mathbf{k}\mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k}'\mathbf{k} \rangle \right) \left\{ \left[v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 + 2v_{\mathbf{k}'}^2 N(a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}) \right] \right. \\ & \left. + \left[\alpha_{\mathbf{k}} \leftrightarrow \beta_{-\mathbf{k}}, v \leftrightarrow -v \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{D.25})$$

Mas:

$$N(a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}) = (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) \quad (\text{D.26})$$

$$N(a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}) = 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (\beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger). \quad (\text{D.27})$$

Portanto:

$$\begin{aligned}
 \hat{V}_a &= N(\hat{V}_a) \\
 &- \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(\langle \mathbf{k}\mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k}\mathbf{k}' \rangle - \langle \mathbf{k}\mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k}'\mathbf{k} \rangle \right) \left[v_k^2 v_{k'}^2 + v_{k'}^2 (u_k^2 - v_k^2) (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) \right. \\
 &+ \left. v_{k'}^2 (2u_k v_k) (\beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger) \right]. \tag{D.28}
 \end{aligned}$$

De modo semelhante podemos trabalhar com a Eq.(D.21).

$$\begin{aligned}
 \hat{V}_b &= N(\hat{V}_b) \\
 &- \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') \rangle v_{k'}^2 \left[v_k^2 + N(a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}) + N(a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}) \right] \\
 &- \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}) | \hat{V} | (\mathbf{k}')(-\mathbf{k}') \rangle u_{k'} v_{k'} \left[u_k v_k + N(a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) + N(a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}) \right]. \tag{D.29}
 \end{aligned}$$

Inserindo nesta expressão as expressões para os ordenamentos normais, chegamos a:

$$\begin{aligned}
 \hat{V}_b &= N(\hat{V}_b) \\
 &- \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(u_k v_k u_{k'} v_{k'} \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}) | \hat{V} | (\mathbf{k}')(-\mathbf{k}') \rangle + v_k^2 v_{k'}^2 \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') \rangle \right) \\
 &- \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left\{ (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) \left[(u_k^2 - v_k^2) v_{k'}^2 \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') \rangle \right. \right. \\
 &- \left. \left. 2u_k v_k u_{k'} v_{k'} \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}) | \hat{V} | (\mathbf{k}')(-\mathbf{k}') \rangle \right] \right\} \\
 &- \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left\{ (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger + \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}) \left[(u_k^2 - v_k^2) u_{k'} v_{k'} \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}) | \hat{V} | (\mathbf{k}')(-\mathbf{k}') \rangle \right. \right. \\
 &+ \left. \left. 2u_k v_k v_{k'}^2 \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') \rangle \right] \right\}. \tag{D.30}
 \end{aligned}$$

Podemos inserir as Eqs.(D.30) e (D.28) na Eq.(D.20). Com isto, obtemos uma nova expressão para o potencial termodinâmico:

$$\hat{K} = U + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + N(\hat{V}) \tag{D.31}$$

Usaremos a notação abreviada de que:

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{k})(\mathbf{k}') | \bar{V} | (\mathbf{k})(\mathbf{k}') \rangle &\equiv \langle (\mathbf{k})(\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k})(\mathbf{k}') \rangle - \langle (\mathbf{k})(\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k}')(\mathbf{k}) \rangle \\ &+ \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.32})$$

Assim:

$$\begin{aligned} U &= 2 \sum_k (\epsilon_k^0 - \mu) v_k^2 - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle (\mathbf{k})(\mathbf{k}') | \bar{V} | (\mathbf{k})(\mathbf{k}') \rangle v_k^2 v_{k'}^2 \\ &- \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k}')(-\mathbf{k}') \rangle u_k v_k u_{k'} v_{k'} \end{aligned} \quad (\text{D.33})$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \sum_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) \left\{ (u_k^2 - v_k^2) \left[\epsilon_k^0 - \mu - \sum_{\mathbf{k}'} v_{k'}^2 \langle (\mathbf{k})(\mathbf{k}') | \bar{V} | (\mathbf{k})(\mathbf{k}') \rangle \right. \right. \\ &\left. \left. + 2u_k v_k \sum_{k'} u_{k'} v_{k'} \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k}')(-\mathbf{k}') \rangle \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{D.34})$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_2 &= \sum_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger + \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}) \left\{ 2 \left[\epsilon_k^0 - \mu - \sum_{\mathbf{k}'} v_{k'}^2 \langle (\mathbf{k})(\mathbf{k}') | \bar{V} | (\mathbf{k})(\mathbf{k}') \rangle \right] u_k v_k \right. \\ &\left. - (u_k^2 - v_k^2) \sum_{k'} u_{k'} v_{k'} \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k}')(-\mathbf{k}') \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (\text{D.35})$$

O próximo passo é definirmos o *gap* de energia Δ_k :

$$\Delta_k \equiv \sum_{k'} u_{k'} v_{k'} \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}') | \hat{V} | (\mathbf{k}')(-\mathbf{k}') \rangle. \quad (\text{D.36})$$

Por conveniência introduziremos uma nova energia de partícula única:

$$\epsilon_k = \epsilon_k^0 - \sum_{\mathbf{k}'} v_{k'}^2 \langle (\mathbf{k})(\mathbf{k}') | \bar{V} | (\mathbf{k})(\mathbf{k}') \rangle, \quad (\text{D.37})$$

e mediremos esta nova quantidade a partir do potencial químico μ :

$$\xi_k \equiv \epsilon_k - \mu. \quad (\text{D.38})$$

Com isso, as Eqs.(D.33)-(D.35) podem ser escritas como:

$$U = 2 \sum_k \xi_k v_k^2 + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} v_k^2 v_{k'}^2 \langle (\mathbf{k})(\mathbf{k}') | \bar{V} | (\mathbf{k})(\mathbf{k}') \rangle - \sum_{\mathbf{k}} u_k v_k \Delta_k \quad (\text{D.39})$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) \left[(u_k^2 - v_k^2) \xi_k + 2u_k v_k \Delta_k \right] \quad (\text{D.40})$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger + \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}) \left[2u_k v_k \xi_k - (u_k^2 - v_k^2) \Delta_k \right]. \quad (\text{D.41})$$

A fim de diagonalizarmos o hamiltoniano e, conseqüentemente, o potencial termodinâmico (ou seja, \hat{H}_2 deve se anular), vamos impor uma condição adicional às quantidades u_k e v_k :

$$2u_k v_k \xi_k = (u_k^2 - v_k^2) \Delta_k. \quad (\text{D.42})$$

Vamos escrever para as quantidades u_k e v_k :

$$u_k = \cos \chi_k \quad (\text{D.43})$$

$$v_k = \sin \chi_k, \quad (\text{D.44})$$

que respeita a condição anteriormente imposta de que $u_k^2 + v_k^2 = 1$. Usaremos duas relações trigonométricas: ($\sin 2\chi_k = 2 \cos \chi_k \sin \chi_k$) e ($\cos 2\chi_k = \cos^2 \chi_k - \sin^2 \chi_k$) e definiremos uma nova quantidade,

$$E_k \equiv \sqrt{\Delta_k^2 + \xi_k^2}. \quad (\text{D.45})$$

Assim:

$$\sin 2\chi_k = \pm \Delta_k E_k^{-1} = 2u_k v_k \quad (\text{D.46})$$

$$\cos 2\chi_k = \pm \xi_k E_k^{-1} = u_k^2 - v_k^2. \quad (\text{D.47})$$

Podemos então reescrever a Eq.(D.40):

$$\hat{H}_1 = \pm \sum_{\mathbf{k}} E_k (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}). \quad (\text{D.48})$$

Ou seja, para garantir que a energia tenha um mínimo, devemos ficar com:

$$\hat{H}_1 = + \sum_{\mathbf{k}} E_k (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}). \quad (\text{D.49})$$

Desta forma chegamos finalmente a:

$$u_k v_k = \frac{\Delta_k}{2E_k} \quad (\text{D.50})$$

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}'}} \langle (\mathbf{k})(-\mathbf{k}) | \hat{V} | (\mathbf{k}')(-\mathbf{k}') \rangle. \quad (\text{D.51})$$

Esta é a equação de *gap* de BCS, significando que os estados excitados estão separados do estado fundamental por um *gap* de energia dado por esta expressão. Resumindo, ficamos com um potencial termodinâmico dado pela Eq.(D.20):

$$\hat{K} = \hat{K}_0 + N(\hat{V}), \quad (\text{D.52})$$

em que:

$$\hat{K}_0 = U + \hat{H}_1 = U + \sum_{\mathbf{k}} E_k (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}). \quad (\text{D.53})$$

Podemos estudar as soluções da Eq.(D.51), a equação que fornece o *gap* entre os estados fundamental e excitado do sistema. Esta equação sempre apresenta a solução trivial, $\Delta_k = 0$. Neste caso, não existe *gap* de energia e desta forma descrevemos o estado normal (não supercondutor) do sistema em questão. Este seria um mar de Fermi preenchido e temos que:

$$E_k = |\xi_k| \quad (\text{D.54})$$

$$u_k v_k = 0 \quad (\text{D.55})$$

$$u_k^2 = \theta(\epsilon_k - \mu) \quad (\text{D.56})$$

$$v_k^2 = \theta(\mu - \epsilon_k) \quad (\text{D.57})$$

Para o modelo de Cooper, no qual o potencial é não nulo apenas para uma certa região próxima à superfície de Fermi, teríamos que:

$$\langle \mathbf{k} - \mathbf{k} | \hat{V} | \mathbf{l} - \mathbf{l} \rangle = gv \theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|) \theta(\hbar\omega_D - |\xi_l|), \quad (\text{D.58})$$

e $\hbar\omega_D$ é a energia de *cutoff* para fazer com que as integrais permaneçam finitas. Com isto, a equação de *gap* pode ser resolvida exatamente:

$$\Delta_k = \Delta \theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|), \quad (\text{D.59})$$

e Δ é solução da equação

$$1 = g(2v)^{-1} \sum_k \theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|) (\Delta^2 + \xi_k^2)^{-1/2}. \quad (\text{D.60})$$

Resolvendo esta expressão assumindo que $\hbar\omega_D/\Delta \gg 1$ obtemos a solução para o estado supercondutor:

$$\Delta = 2\hbar\omega_D \exp \left[-\frac{1}{N(0)g} \right] \quad (\text{D.61})$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \xi_k (\Delta^2 + \xi_k^2)^{-1/2} \right] \quad (\text{D.62})$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \xi_k (\Delta^2 + \xi_k^2)^{-1/2} \right] \quad (\text{D.63})$$

$N(0)$ é a densidade de estados para uma projeção de spins na superfície de Fermi.

Referências

- [1] J.D. Gunton, M. San Miguel e P.S. Sahni, *Phase Transitions and Critical Phenomena* (edited by C. Domb e J.L. Lebowitz, Academic, Vol. 8, New York, 1983).
- [2] A. Onuki, *Phase Transition Dynamics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002).
- [3] J. Berges, *Introduction to nonequilibrium quantum field theory*, arXiv: 0409233 [hep-ph], baseado em uma série de palestras proferidas na HADRON-RANP 2004, Angra dos Reis-Brasil e em Quantum Fields in and out of Equilibrium, 2004, Bielefeld-Alemanha.
- [4] K. Wilson, Phys. Rev. D 10, 2445 (1974).
- [5] J. Smit, *An introduction to quantum fields on a lattice* (Cambridge Lecture Notes in Physics 15, Cambridge, 2002).
- [6] I. Montvay e G. Münster, *Quantum Fields on a Lattice* (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).
- [7] J.P. Blaizot, E. Iancu e A. Rebhan, *Thermodynamics of the high temperature quark gluon plasma*, arXiv: 0303185 [hep-ph], em Quark Gluon Plasma, edited by R.C. Hwa e X.N. Wang, World Scientific, Cingapura, 2003.
- [8] A. Okopinska, Phys. Rev. D 35, 1835 (1987); A. Duncan e M. Moshe, Phys. Lett. B 215, 352 (1988).
- [9] H.F. Jones e M. Moshe, Phys. Lett. B 234, 492 (1990); S. Gandhi e M.B. Pinto, Phys. Rev. D 46, 2570 (1992); M.B. Pinto, R.O. Ramos e P. J. Sena, Physica A 342, 570 (2004).
- [10] D.F. Litim e C. Manuel, Phys. Rept. 364, 451 (2002); *ibid* Phys. Rev. Lett. 82, 4981 (1999).
- [11] H.T. Elze e U. Heinz, Phys. Rep. 183, 81 (1989).

- [12] M. Morikawa, Phys. Rev. D 33, 3607 (1985).
- [13] M. Gleiser e R.O. Ramos, Phys. Rev. D 50, 2441 (1994).
- [14] G. Wentzel, Phys. Rev. 120, 1572 (1960).
- [15] W. Ketterle e M.W. Zwierlein, *Making, Probing and Understanding Ultracold Fermi Gases*, arXiv: 0801.2500v1 [cond-mat], Proceedings of the International School of Physics ‘Enrico Fermi’, Course CLXIV, Varenna, Italy. Edited by M. Inguscio, W. Ketterle, e C. Salomon, IOS Press, Amsterdam, 2008.
- [16] J. Bardeen, L.N. Cooper e J.R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [17] N.N. Bogoliubov, D.B. Zubarev e Iu. Tserkovnikov, Sov. Phys. Dok. 2, 535 (1957).
- [18] M.D. Girardeau, Phys. Rev. A 42, 3303 (1990).
- [19] G. Parisi, *Statistical Field Theory* (Addison-Wesley, New York, 1988).
- [20] E. Calzetta e B.-L. B. Hu, *Nonequilibrium Quantum Field Theory* (Cambridge Monographs on Mathematical Physics, New York, 2008).
- [21] L.S. Brown, *Quantum Field Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
- [22] G. Parisi e Y. S. Wu, Sci. Sin. 24, 483 (1981).
- [23] P.H. Damgaard e H. Hüffel, Phys. Rep. 152, 227 (1987).
- [24] M. Namiki, *Stochastic Quantization* (Springer, Berlin, 1992).
- [25] S. Duane e J.B. Kogut, Nucl. Phys. B 275 [FS17], 398 (1986); S. Gottlieb, W. Liu, D. Toussaint, R.L. Renken e R.L. Sugar, Phys. Rev. D 35, 2531 (1987).
- [26] J. Berges e I.O. Stamatescu, Phys. Rev. Lett. 95, 202003 (2005); J. Berges, S. Borsanyi, D. Sexty e I. O. Stamatescu, Phys. Rev. D 75, 045007 (2007); J. Berges e D. Sexty, Nucl. Phys. B 799, 306 (2008).
- [27] G. Aarts e I.-O. Stamatescu, JHEP 0809, 018 (2008); G. Aarts, Phys. Rev. Lett. 102, 131601 (2009); G. Aarts, F. A. James, E. Seiler e I. O. Stamatescu, Phys. Lett. 687, 154 (2010); G. Aarts, JHEP 0905, 052 (2009); G. Aarts e K. Splittorff, JHEP 1008, 017 (2010); G. Aarts e F. A. James, JHEP 1008, 020 (2010).

- [28] G. Aarts, Phys. Rev. Lett. 102, 131601 (2009).
- [29] G. Parisi, Phys. Lett. B 131, 393 (1983).
- [30] J.R. Klauder e W.P. Petersen, J. Stat. Phys. 39, 53 (1985).
- [31] G. Menezes e N.F. Svaiter, Physica A 374, 617 (2007);
- [32] G. Menezes e N.F. Svaiter, J. Math. Phys. 47, 073507 (2006); *ibid* J. Math. Phys. 49, 102 (2008).
- [33] G. Krein, N.F. Svaiter e S.M. Antunes, em preparação.
- [34] N.C. Cassol-Seewald, R.L.S. Farias, G. Krein e R.S. Marques de Carvalho, *Noise and Ultraviolet Divergences in Simulations of Ginzburg-Landau-Langevin Type of Equations*, a ser publicado em Int. J. Mod. Phys. C.
- [35] P.G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Addison-Wesley, New York, 1989).
- [36] D. Lehmann, Commun. Math. Phys. 198, 427 (1998).
- [37] N.C. Cassol-Seewald, *Um estudo sobre transições de fase dinâmicas e equações estocásticas de Ginzburg-Landau-Langevin*, Dissertação de Mestrado, Instituto de Física Teórica - IFT/UNESP, 2006.
- [38] S.K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena* (W.A. Benjamin, New York, 1976.)
- [39] P. C. Hohenberg e B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. 49, 435 (1977).
- [40] A. Velytsky, *A model study of the deconfining phase transition*, Ph.D. Thesis, The Florida State University, 2004.
- [41] N. Goldenfeld, *Lectures on phase transitions and the renormalization group* (Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1997).
- [42] H. T. C. Stoof, J. Low Temp. Phys. 114, 11 (1999); H.T.C. Stoof e M. J. Bijlsma, *ibid.* 124, 431 (2001); C.W. Gardiner e M. J. Davis, J. Phys. B 36, 4731 (2003).
- [43] C. Itzykson e J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory* (McGraw-Hill, New York, 1980).

- [44] G. Krein, R.S. Marques de Carvalho, D.P. Menezes e M.B. Pinto, Eur. Phys. J. A 1, 45 (1998).
- [45] G. Krein, D.P. Menezes e M.B. Pinto, Phys. Lett. B 370, 5 (1998).
- [46] R.L.S. Farias, G. Krein e R. O. Ramos, Phys. Rev. D 78, 065046 (2008).
- [47] J.-L. Kneur, M.B. Pinto e R.O. Ramos, Phys.Rev. C 81, 065205 (2010).
- [48] P.M. Stevenson, Phys. Rev. D 23, 2916 (1981).
- [49] Esse assunto é parte da dissertação de Mestrado de Felipe Attanasio, estudante do IFT/UNESP.
- [50] B.R. Holstein e J.F. Donoghue, Phys. Rev. Lett. 93, 201602 (2004).
- [51] X. Liu, H. Hu e P.D. Drummond, Phys. Rev. A 75, 023614 (2007).
- [52] A.L. Fetter e J.D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems* (Dover Publications, New York, 2003).
- [53] L.Q. Chen e Jie Shen, Comp. Phys. Comm. 108, 147 (1998).
- [54] N.C. Cassol-Seewald, M.I.M. Copetti e G. Krein, Comp. Phys. Comm. 179, 297 (2008).
- [55] S. Villain-Guillot e C. Josserand, Phys. Rev. E 66, 036308 (2002).
- [56] E.S. Fraga, G. Krein e A.J. Mizher, Phys. Rev. D 76, 034501 (2007).
- [57] N.C. Cassol-Seewald, R.L.S. Farias, E.S. Fraga, G. Krein e R.O. Ramos, *Langevin Simulation of Scalar Fields: Additive and Multiplicative Noises and Lattice Renormalization*, aceito para publicação em Physica A.
- [58] R.L.S. Farias, N.C. Cassol-Seewald, G. Krein e R.O. Ramos, Nucl. Phys. A 782, 33 (2007).
- [59] R. Jackiw, Phys. Rev. D 9, 1686 (1974).
- [60] K. Farakos, K. Kajantie, K. Rummukainen e M. E. Shaposhnikov, Nucl. Phys. B 425, 67 (1994); *ibid.* B 442, 317 (1995).
- [61] W. Loinaz e R. S. Willey, Phys. Rev. D 58, 076003 (1998).
- [62] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity* (McGraw-Hill Kagakusha, Tokyo, 1975).

-
- [63] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley, New York, 1987).
- [64] E.L. Lima, *Curso de análise* (Livros Técnicos e Científicos Editora, Vol. 1, Sétima Edição, Rio de Janeiro, 1992).
- [65] T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* 14, 351 (1955).
- [66] S. Doniach e E.H. Sondheimer, *Green's Functions for Solid State Physicists* (Imperial College Press, London, 1999).
- [67] M. Le Bellac, *Thermal Field Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [68] L.N. Cooper, *Phys. Rev.* 104, 1189 (1956).