



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

TESE DE DOUTORAMENTO

IFT-T.001/16

O espaço-tempo não comutativo em Teoria Quântica de Campos,
Matéria Condensada Mole e Física Biológica

Tatiana Ramos Cardoso

Orientador

Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar

Dezembro de 2015

Dedico esta tese à memória de Yehuda Levanon e (e com muito amor) ao meu Guri.

Es denkt in mir.

Nietzsche

Resumo

Esta tese apresenta o estudo do espaço-tempo não comutativo em teoria quântica de campos e matéria condensada mole, com uma aplicação em física biológica.

No que concerne a teoria quântica de campos, a quantização da eletrodinâmica quântica não comutativa em $(1 + 1)$ – e $(2 + 1)$ – dimensões através da representação espectral de Källén-Lehmann foi realizada com o intuito de se buscar efeitos não comutativos à massa dos fótons, que no contexto de baixas dimensões, é gerada dinamicamente em duas dimensões e surge a partir do termo topológico de Chern-Simons no caso tridimensional. Para isso, as contribuições de 1 e 2 partículas para a função de densidade espectral foram consideradas, permitindo que se extraíssem o propagador livre e sua primeira correção, respectivamente.

Em física da matéria condensada mole, foi proposto um modelo para o estudo da anomalia do calor específico em temperaturas intermediárias de sólidos desordenados para uma rede cristalina definida em um espaço não comutativo. Nesta nova interpretação, as posições de cada átomo de uma rede são não comutativas, o que equivale a afirmar que a posição de cada átomo é livre dentro de uma célula espacial definida pela álgebra não comutativa.

A invariância por translações espaciais assegurada pela teoria não comutativa permitiu a construção de uma rede bidimensional e também estruturas tridimensionais, ambas compostas por átomos idênticos. Foi constatado o surpreendente surgimento de modos óticos em consequência da não comutatividade das posições dos átomos. Uma singularidade proporcional ao parâmetro não comutativo θ foi encontrada no espectro vibracional da rede, caracterizando uma singularidade de van Hove, que por sua vez é a origem do pico de Bóson presente na curva de calor específico reduzido. No limite em que $\theta \rightarrow 0$, mostrou-se que existe um incremento em calor específico para a curva com $\theta \neq 0$, e que pode ser atribuído aos modos óticos que surgiram naturalmente neste modelo e que são proporcionais a θ .

Sobre a aplicação do modelo não comutativo em física biológica, foi escolhida a L – cisteína, um aminoácido que apresenta o pico de Bóson em sua curva de calor específico reduzido. Para este propósito, foi necessário desenvolver uma simplificação em sua estrutura porque, uma vez pertencente ao grupo espacial $P2_12_12_1$ com quatro moléculas em uma célula unitária, gera uma estrutura inicialmente ortorrômbica de faces centradas, que foi enfim convertida em uma estrutura cúbica de faces centradas. O modelo para o calor específico de sólidos desordenados foi apropriadamente adaptado e aplicado, e a curva de calor específico reduzido foi obtida e comparada aos dados experimentais.

Palavras Chaves: espaço-tempo não comutativo, representação espectral de Källén-Lehmann, fótons massivos, capacidade térmica dos sólidos, modos óticos, espectro vibracional da rede, singularidade de van Hove, pico de Bóson, grupo espacial, L – cisteína.

Áreas do conhecimento: Teoria Geral de Partículas e Campos, Física da Matéria Condensada, Biofísica.

Abstract

This thesis presents the study of noncommutative spacetime in quantum field theory and soft condensed matter, with an application in biological physics.

As regards the quantum theory of fields, the quantization of the noncommutative quantum electrodynamics in $(1 + 1)$ - and $(2 + 1)$ - dimensions through the Källén-Lehmann spectral representation was performed to seek for noncommutative effects to the mass of the photon. In the context of lower dimensions it is dynamically generated in two dimensions and arises from the topological Chern-Simons term in three-dimensional case. Therefore, the contributions of 1 and 2 particles to the spectral density function were considered, allowing one to obtain from the full propagator provided by the Källén-Lehmann spectral representation, the free propagator and its first correction.

In physics of soft condensed matter, a model was built for studying the specific heat anomaly at intermediate temperatures of disordered solids from a new interpretation of noncommutative space. In this new interpretation, the position of each atom that belongs to a lattice are noncommutative, which is to say that the position of each atom is free within a cell space defined by a noncommutative algebra.

The invariance under spatial translations assured by the noncommutative theory allowed the construction of two-dimensional lattice and three-dimensional structures composed by identical atoms. The surprising emergence of optical modes as a result of the noncommutativity of the position of atoms was observed. A singularity proportional to the noncommutative parameter θ was found in the vibrational spectrum of a lattice, featuring a van Hove singularity, conversely the origin of the boson peak at reduced specific heat curve. There is an increase in the specific heat curve with $\theta \neq 0$ in the limit where $\theta \rightarrow 0$, which can be attributed to optical modes that have arisen naturally in this model and are proportional to θ .

On the application of the noncommutative model in biological physics, the aminoacid *L*-cysteine was chosen due to the presence of a boson peak in the reduced specific heat curve. For this proposal, it was necessary to develop a simplified version of this structure, once it belongs to the space group $P2_12_12_1$ with four molecules in a unit cell, which initially generates an orthorhombic face-centered structure, converting it into a cubic face-centered structure. The model for the specific heat of disordered solids was adapted and applied appropriately, and low specific heat versus temperature curve was obtained and compared to experimental data.

Keywords: noncommutative spacetime, Källén-Lehmann spectral representation, massive photon, heat capacity of solids, optical modes, vibrational spectrum of a lattice, van Hove singularity, boson peak, space group, *L*-cysteine.

Knowledge Field: General Theory of Particles and Fields, Condensed Matter Physics, Biophysics.

Agradecimentos

Agradeço a Deus pela coragem e por ter conduzido meu caminho da maneira mais nonsense, mas que faz tudo parecer certo agora. Valeu Deus, muito obrigada.

Meu mais profundo agradecimento à minha família: meus pais, Cleunice e José Aparecido, minha irmã Poliana Cardoso e o Gabriel.

Meu agradecimento ao meu companheiro Rodrigo Bufalo, principalmente por seu entusiasmo com as minhas ideias, por nossas calorosas discussões, por seu estímulo ao meu crescimento intelectual contínuo, pelo grande físico teórico cuja competência o precede, por me tornar uma pessoa melhor e colorir meus dias.

Agradeço ao meu melhor amigo Fábio Lúcio Alves, que me acompanha desde a minha jornada da graduação e só me dá orgulho.

Agradeço ao amigo Thiago Peixoto. Obrigada por sua amizade, prontidão e pelas discussões frutíferas sobre física e a vida. E muito obrigada pela ajuda com as unidades recíprocas, jamais me esquecerei. À amiga Adriana Araújo, porque se eu enxergo um possível espaço-tempo não comutativo permeando todo o universo e quebrando as simetrias de Lorentz foi graças às nossas discussões.

Agradeço aos amigos Daneele, Nathaly, Ana Lúcia, Almeida, Luan, Ernane e Henrique, que fizeram meus dias no IFT suaves e doces. Também às amigas Flávia e Ana, por dividirmos por tanto tempo um lar. Às meninas da UFABC, Thamires, Erika e Taciana, e em especial, à Mariana, pela acolhida, o carinho e paciência em me explicar sobre física aplicada em biologia. Às, também físicas e maravilhosas, Gegê e Luciene.

Agradeço aos funcionários da biblioteca do IFT, à dona Meire e às copeiras Dona Cleide e Dona Jô que sempre foram muito atenciosos e carinhosos comigo.

Por fim, agradeço aos professores: Professora Valéria, Professora Anca, Professora Angsula, Professor Herculano, Professor Luciano, Professor Eric, Professor Orlando, por sua contribuição à minha formação, por conselhos e sugestões, pelas oportunidades e por trabalhos em conjunto. Em particular, agradeço ao meu primeiro orientador, o Professor Antonio, que me orientou desde o primeiro ano da minha graduação em Física até meu mestrado e que nunca cerceou minha necessidade de imaginar e enxergar ilustrativa e ludicamente a Física. Em especial, ao meu orientador, o Professor Pimentel, por TUDO.

Também agradeço à CAPES pelo auxílio financeiro.

Prefácio

Esta tese resume uma parte de meus estudos durante o meu período de doutoramento no Instituto de Física Teórica (IFT), contemplando o estudo de um espaço-tempo não comutativo em teoria de campos, matéria condensada e biologia.

Este prefácio tem como propósito esclarecer como foi imprescindível ter uma base conceitual forte em teoria de campos, o apoio de meu orientador em todos os meus questionamentos e ideias, e a minha intrepidez para tornar possível a aplicação de um espaço não comutativo para a descrição de sólidos desordenados e sua aplicação em biologia.

Meu principal interesse quando decidi realizar meu doutorado no IFT estava em aprender sobre teoria quântica de campos, e por isso sou imensamente agradecida de ter tido o apoio do meu orientador de graduação e mestrado, o professor Antonio Soares de Castro, para seguir meus estudos sob a orientação do professor Bruto Max Pimentel. Foi uma escolha muito feliz.

À parte da solidez que obtive enquanto física teórica, e o enriquecimento cultural em física que só sua supervisão pode proporcionar, aprendi com o professor Pimentel em nossos queridos cafés a importância da leitura das referências originais sempre que se enveredar por um novo estudo. Isso porque as referências originais estão sempre em uma linguagem que aborda o problema de uma maneira simples, e deixa muito claro o que se pretende fazer e qual a ideia para se tentar resolver o problema. Mais que isso, o professor Pimentel sempre me encorajou a alcançar novos voos, aproveitar as oportunidades e aprender o máximo que puder.

Assim, e como não poderia ser diferente, inicio citando a primeira referência em um espaço-tempo não comutativo que vem de Snyder [1], em uma tentativa de resolver o problema da divergência na autoenergia do elétron. Isso porque esta divergência pode ser eliminada com a atribuição, à mão, de um termo de *cut-off* (que é um artifício matemático que contorna o problema da divergência estabelecendo um parâmetro de escala arbitrário), ao preço da perda da simetria translacional. Deste modo, um espaço não comutativo talvez fosse uma alternativa para resolver este problema, uma vez que poderia estabelecer um *cut-off* natural para a teoria, já que a não comutatividade do espaço-tempo implica em sua fragmentação em células de pequeninos tamanhos em que imperam as flutuações quânticas. O menor tamanho destas células seria, portanto, uma escala natural da teoria, ao ganho da preservação de sua invariância por translação. Por fim, a ideia acabou sendo abandonada devido ao grande sucesso da teoria da renormalização.

Contudo, no fim dos anos 90, Seiberg e Witten ressucitam a teoria não comutativa [2], e estabelecem uma representação (conhecida por mapa de Seiberg-Witten) que permite que teorias de gauge possam ser estudadas nesse contexto. A partir daí o que segue são inúmeros estudos e aplicações da teoria não comutativa na física das altas energias. Determinar experimentalmente a estrutura do espaço-tempo não é uma tarefa simples, uma vez que para fazer tal medição seria necessária uma energia absurdamente grande (energias na escala de Planck). Mais que isto, para que seja possível fazer alguma ideia da física que permeia a estrutura do espaço-tempo é necessário o rompimento com as teorias usuais que preservam a simetria de Lorentz. Assim, o

espaço-tempo não comutativo também foi visto com grande interesse porque, à parte do setor de translação, quebra explicitamente a invariância de Lorentz.

Mas como saber a forma da estrutura do espaço-tempo sem que seja possível fazer uma medição precisa? A ideia é simples: procurar, em sistemas físicos simples e robustos teórica e experimentalmente, por desvios que possam ser causados apenas pela estrutura do espaço-tempo. Como um célebre exemplo, o trabalho da professora Anca Tureanu e seus colaboradores sobre o efeito de um espaço-tempo não comutativo nas linhas espectrais do átomo de hidrogênio [3]. Neste trabalho, é mostrado que a linha espectral que corresponde ao Lamb shift (que só pode ser determinado a partir da eletrodinâmica quântica para o caso comutativo) surge naturalmente no espectro obtido a partir da mecânica quântica não relativística. Contudo, a contribuição não comutativa a esta linha é tão pequena que não pode ser detectada experimentalmente.

De qualquer forma, buscar por efeitos de físicas de altas energias em sistemas simples e cotidianos engloba uma espantosa quantidade de conceitos e cálculos, e é por isso que abordar efeitos não comutativos na eletrodinâmica quântica em duas e três dimensões me deixou fascinada, especialmente porque, nestas dimensões, o fóton adquire massa. Assim, procurar por estes desvios, e em uma abordagem axiomática que é a representação espectral de Källén-Lehmann, satisfiz minha ânsia pelo estudo da teoria quântica de campos.

Embora sempre estivesse ciente da pequenez de um possível efeito não comutativo, e a conseqüente impossibilidade de uma medida precisa para detectá-lo - o que contribuiu para que a ideia de um espaço-tempo não comutativo permanecesse confinada ao âmbito teórico - não era possível que eu pudesse livrar-me do conceito da perda de localização devido a seus efeitos.

Então, mais ou menos na metade do meu período de doutoramento, enquanto em nossos cafés, o professor Pimentel e eu conversávamos sobre a física das avalanches, terremotos e outros fenômenos da natureza, e lhe confidenciei sobre um workshop da FAPESP que estava bastante interessada, *At the interface between physics and biology*, recebendo pleno apoio e incentivo. Neste workshop tive a imensa felicidade em conhecer o professor Herculano Martinho, que me proporcionou a oportunidade de realizar um estágio de férias em física aplicada à biologia na UFABC. Foi quando então me deparei com o problema da anomalia do calor específico a temperaturas intermediárias do aminoácido *L*-cisteína. Bom, este problema não se resume à *L*-cisteína, ou a estruturas biológicas, mas a todos os sólidos desordenados que apresentam transição vítrea, o que é conhecido na literatura como o *pico de Bóson*.

Basicamente, o pico de Bóson é um pico na curva de calor específico reduzido (ou seja, calor específico dividido pelo cubo da temperatura versus temperatura), com a forte sugestão na literatura de que seja originado por uma divergência na densidade de estados das excitações de uma rede. O grande problema no estudo dos sólidos desordenados está justamente na falta de uma periodicidade para este sistema. Sem periodicidade, todos os fundamentos da física do estado sólido (zona de Brillouin, teorema de Bloch, por exemplo), ficam seriamente comprometidos - em verdade impossíveis de serem tratados - restando apenas um tratamento a partir de potenciais efetivos.

Arrebatadoramente, ao me deparar com uma figura ilustrativa de uma estrutura formada pelo SiO_2 , em suas formas amorfa e cristalina, reproduzidas na figura (1), me dei conta de que era possível interpretar a rede cristalina (ordenada) em termos de um espaço não comutativo, e então obter uma rede desordenada.

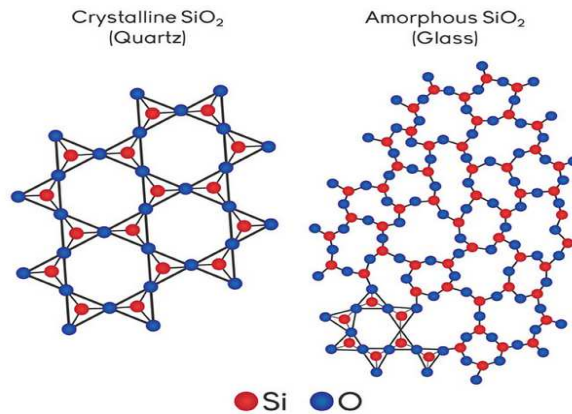


Figura 1: A estrutura das redes amorfa e cristalina de SiO_2 .

Isso porque em um espaço-tempo não comutativo a noção de um ponto no espaço é perdida, uma vez que todos pontos do espaço usual (comutativo) são substituídos por células de tamanho $|\theta^{\mu\nu}|$ em que as flutuações quânticas impedem uma localização exata de eventos dentro desta célula. Então, eu pensei: e se cada átomo que compõe uma rede desordenada puder ter a sua localização definida por um espaço não comutativo? Dessa forma, cada átomo que corresponde a essa rede desordenada vai ser realocado em qualquer ponto dentro de uma célula proporcional à θ , que por sua vez compreende o ponto em que um átomo de uma rede cristalina pode se localizar. O simples fato de um átomo ter a liberdade de se localizar em qualquer ponto dentro dessa célula proporcional à θ , garante o aparente caos que as posições em redes desordenadas têm.

Nessa época, o Dr. Rodrigo Bufalo, meu noivo, estava em Helsinki (Finlândia) trabalhando em seu pós-doutorado com os professores Masud Chaichian e Anca Tureanu. Como eu já tinha comentado com ele sobre esses meus pensamentos, substanciados por alguns cálculos que o corroboravam, o Bufalo então comentou sobre a minha ideia com a professora Anca - conhecida principalmente por seus estudos em teoria de campos em um espaço não comutativo aplicado à física de altas energias. A professora Anca então se interessa pela ideia, e pela conveniência do Bufalo estar residindo em Helsinki surge a oportunidade de fazer um estágio na Universidade de Helsinki, para então desenvolver um *modelo teórico para o calor específico de sólidos desordenados a temperaturas intermediárias baseado em um espaço não comutativo*. De fato, essa nova interpretação e aplicação para o espaço não comutativo e sua aprovação pela professora Anca me deixaram ainda mais entusiasmada.

Assim, ao fim de minha estadia em Helsinki eu tinha um modelo teórico para uma rede desordenada em duas e três dimensões, em que a invariância por translação é garantida pela

teoria não comutativa, e que apresentava uma divergência na densidade de estados proporcional ao parâmetro não comutativo θ , que por sua vez se refletia como um pico na curva do calor específico reduzido.

Mas ainda faltava sua aplicação para o aminoácido *L*-cisteína. O problema é que a *L*-cisteína é uma molécula composta por 14 átomos, e cada célula unitária que compõe um cristal de *L*-cisteína apresenta 4 moléculas. Eu tinha que simplificar este problema de alguma forma. Então, olhando para um desenho da molécula de cisteína, pensei: e se esses 14 átomos fossem feitos de bolinhas de massinha de modelar? Eu poderia então amassar todas essas bolinhas feitas de massinha, perfazendo um bolão. Assim, a questão mudou para: se a célula unitária da cisteína for representada por uma caixa, aonde eu coloco cada um dos 4 bolões?

A resposta e a esperança de que esta ideia poderia dar certo veio com a leitura de um trabalho de Wigner, em que ele afirma que os cristais podem ter suas propriedades inferidas a partir de suas simetrias [4]. Ou seja, não é necessário conhecer a natureza do cristal, apenas suas simetrias. A estrutura da *L*-cisteína determina que sua cristalização ocorra no grupo espacial $P2_12_12_1$, que contém todas as suas simetrias, e é tal que a repetição desta estrutura no espaço gera uma estrutura ortorrômbica de faces centradas. Assim, eu simplifiquei ainda mais o meu problema considerando que a estrutura ortorrômbica seria uma estrutura cúbica de faces centradas. Apliquei o modelo não comutativo, agora para uma estrutura cúbica de faces centradas, e determinei seu calor específico. O professor Herculano Martinho e seu grupo gentilmente me cederam os resultados experimentais para que eu pudesse fazer a comparação entre as curvas experimental e a minha previsão teórica.

Bem... o resultado desta odisséia está nesta tese. Boa leitura!

Tatiana Ramos Cardoso

Sumário

1	A eletrodinâmica quântica não comutativa	1
1.1	A representação espectral de Källén-Lehmann da eletrodinâmica quântica não comutativa	2
1.1.1	A quantização de Weyl e o produto estrela de Moyal	4
1.1.2	O mapa de Seiberg-Witten	11
1.1.3	A representação espectral de Källén-Lehmann	13
1.1.4	A eletrodinâmica quântica não comutativa em $(1 + 1) - e$ e $(2 + 1) -$ dimensões	27
1.1.5	O mapa de Seiberg-Witten na NCQED	28
1.1.6	As equações de movimento	37
1.1.7	Representação de Källén-Lehmann para a NCQED	46
1.1.8	Observações finais	86
2	O modelo não comutativo para sólidos desordenados	87
2.1	O modelo teórico para o calor específico de sólidos desordenados a temperaturas intermediárias baseado em um espaço não comutativo	88
2.2	O oscilador harmônico não comutativo clássico	92
2.3	A densidade de estados de uma rede bidimensional não comutativa	94
2.3.1	Os mapas de contorno e o parâmetro θ	98
2.3.2	A frequência máxima possível à densidade de estados	99
2.4	Uma aproximação para o cálculo da densidade de estados conveniente para sua extensão ao caso tridimensional	100
2.4.1	Equação da seção cônica correspondente ao ramo inferior de frequências	101
2.4.2	Equação da secção cônica correspondente ao ramo superior de frequências	102
2.4.3	A aproximação para a área a partir da equação secular	104
2.5	A rede tridimensional não comutativa	110
2.6	Interpretação física da lagrangiana não comutativa	113
2.7	A densidade de estados de uma rede cúbica simples não comutativa	115
2.7.1	O caso em que $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 \rightarrow 0$	119
2.7.2	O caso em que $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta$	119

2.7.3	O calor específico reduzido e o pico de Bóson	121
2.7.4	A interação entre primeiros e segundos vizinhos de uma rede cristalina	124
2.8	Observações finais	125
3	Uma aplicação em biologia para o modelo não comutativo	127
3.1	O modelo não comutativo e a anomalia do calor específico da <i>L</i> -cisteína	128
3.1.1	O calor específico do modelo da cisteína	139
3.2	Observações finais	142
4	Conclusões	143
	Referências bibliográficas	145

Lista de Figuras

1	A estrutura das redes amorfa e cristalina de SiO_2	viii
2.1	As grandes setas indicam a posição do pico de Bóson para a estrutura SiO_2 nas fases vítrea e cristalina, bem como o patamar previsto por Debye para o calor específico nestas duas distintas fases, indicadas pelas curvas tracejadas. Imagem obtida em [65].	90
2.2	A estrutura das redes amorfa e cristalina de SiO_2	91
2.3	Mapas de contorno para o ramo inferior de frequência com $\frac{\omega_0}{\omega_\theta} = 0.1$	98
2.4	Mapas de contorno para o ramo superior de de frequência com $\frac{\omega_0}{\omega_\theta} = 0.1$	99
2.5	Gráficos de $\cos \phi$ (em azul) e sua expansão em segunda ordem $1 - \frac{1}{2}\phi^2$ (em vermelho). A curva em preto determina o ponto aleatoriamente escolhido para o intervalo de integração, que leva em conta o fim da coincidência entre os dois gráficos.	103
2.6	Gráficos de $\cos \phi$ (em azul) e sua expansão em segunda ordem $1 - \frac{1}{2}(\phi - \pi)^2$ (em vermelho).	109
2.7	Gráfico da densidade de estados de uma rede quadrada não comutativa bidimensional. A reta em preto indica a posição da divergência ν_{div} , ao passo que a reta em azul simboliza o valor máximo para a frequência ν_{max} . Aqui $\omega_0 = 1$ e $\omega_\theta = 10000$	110
2.8	Ilustração do cristal cúbico simples para a visualização dos 6 primeiros vizinhos. Imagem obtida em http://chemwiki.ucdavis.edu	115
2.9	Curva $\frac{C}{T^3}$ versus T para $\frac{\omega_0}{\omega_\theta} = 0.1$, $Z = 4$ moléculas e $\omega_0 = 2000 \text{ rad.s}^{-1}$. A curva em vermelho representa o caso em que $\theta \rightarrow 0$, ao passo que a curva em azul representa a contribuição não comutativa, $\theta \neq 0$	123
3.1	Uma ilustração da L -cisteína. A bolinha amarela simboliza o elemento enxofre. Analogamente, as bolinhas brancas, vermelhas e cinzas representam os elementos hidrogênio, oxigênio e carbono, respectivamente. Imagem obtida em https://pt.wikipedia.org	128
3.2	A célula primitiva da cisteína. À esquerda: configuração ortorrômbica. À direita: configuração monoclinica. Imagem obtida em [76].	128

3.3	A forma para a molécula da <i>L</i> -cisteína considerada neste modelo. Imagem obtida em https://pt.wikipedia.org	129
3.4	A aproximação da estrutura ortorrômbica de faces centradas em uma estrutura cúbica de faces centradas. Imagens obtidas em https://pt.wikipedia.org	129
3.5	Ilustração do cristal cúbico de faces centradas para a visualização dos 12 primeiros vizinhos. A figura conta, ainda, com a identificação dos 6 segundos vizinhos. Imagem obtida em http://www.physics-in-a-nutshell.com	130
3.6	Curva $\frac{C}{T^3}$ versus T relativa à cisteína. A curva em vermelho representa os dados experimentais, enquanto a curva em preto representa a previsão teórica.	141

Capítulo 1

A eletrodinâmica quântica não comutativa

1.1 A representação espectral de Källén-Lehmann da eletrodinâmica quântica não comutativa

O desenvolvimento da Teoria Quântica de Campos está intimamente relacionado a história do estudo do átomo de hidrogênio [5, 6]. A *estrutura bruta*, como se chamaram as primeiras linhas espectrais do átomo de hidrogênio obtidas por Huggins [7] foram interpretadas teoricamente por Bohr por meio de princípios clássicos e pressupostos quânticos ainda muito prematuros à época [8]. De fato, apenas com o advento da equação de Schrödinger [9] foi possível adquirir o espectro de energia do elétron em um potencial coulombiano gerado por um próton estático, ou o átomo de hidrogênio, plenamente fundamentado em princípios da Mecânica Quântica. Este espectro era idêntico à expressão obtida por Bohr e por isso se convencionou chamar a estrutura bruta de *espectro de Bohr*. Altamente degenerado, este espectro já apresenta em seu primeiro estado excitado a superposição de três estados, $^2S_{1/2}$, $^2P_{1/2}$ e $^2P_{3/2}$, todos com energia proporcional à $\alpha^2 mc^2$, em que α é a constante de estrutura fina.

Com o aumento na precisão dos experimentos de aquisição do espectro, novas linhas espectrais foram sendo descobertas, e estados antes degenerados agora apresentavam tênues divisões, quebrando suas degenerescências [6]. Na ausência de um fundamento teórico que possibilitasse uma interpretação coesa de todas as minúcias do espectro, foram incluídos “à mão” termos na equação de Schrödinger que justificassem as discrepâncias do espectro, tais como a interação spin-órbita e correções relativísticas, ambas com energias da ordem de $\alpha^4 mc^2$, cuja contribuição ficou conhecida como *estrutura fina*. Ainda menor, em ordem $\left(\frac{m}{m_p}\right) \alpha^4 mc^2$, são efeitos devido à interação magnética entre os momentos de dipolo do elétron e próton, o que ficou conhecido como *estrutura hiperfina*.

Contudo, em seguida Dirac propõe sua teoria quântica para o elétron [10] em que a estrutura fina do átomo de hidrogênio aparece naturalmente, fruto do estudo do elétron sob a ação de um potencial coulombiano (próton). Em verdade, o limite não-relativístico da equação de Dirac com este potencial leva à equação de Schrödinger acrescida do termo de spin-órbita. Mais ainda, o primeiro estado excitado do átomo de hidrogênio apresenta uma quebra de degenerescência entre os níveis $^2S_{1/2}$, $^2P_{1/2}$ (ainda degenerados) e $^2P_{3/2}$. Assim, a teoria desenvolvida por Dirac pareceu então ter resolvido todas as particularidades do espectro do átomo de hidrogênio.

No entanto, Lamb e Retherford encontraram uma divisão sutil nas linhas espectrais $^2S_{1/2}$ e $^2P_{1/2}$, da ordem de $\alpha^5 mc^2$, não predita pela teoria de Dirac, o que ficou conhecido como *Lamb shift* [11]. Essa sutileza abriu caminho para a mais poderosa e bem sucedida teoria de todos os tempos: a eletrodinâmica quântica, desenvolvida praticamente à mesma época (porém, de modo independente) por Feynman, Schwinger e Tomonaga [12]. Embora nada trivial - o efeito de Lamb shift, do ponto de vista da eletrodinâmica quântica, é atribuído à interação entre o elétron e as flutuações do vácuo do campo eletromagnético - a teoria é extremamente precisa e prevalece como uma das teorias de maior sucesso da Física [5, 13].

Embora bem-sucedida, a retomada da eletrodinâmica quântica (QED₄, em 3 + 1 dimensões) se deve ao programa de renormalização. Seu modelo inicialmente proposto apresentava “in-

finitos”, que advinham da suposição de que o elétron era uma partícula pontual - também conhecido como singularidade da autoenergia do elétron. O programa de renormalização remove tais infinitos, em um procedimento que leva a resultados tão precisos que discrepâncias com experimentos, até o momento, não foram encontradas. Contudo, até que o programa de renormalização fosse proposto, o problema dos infinitos estava em aberto e, em um esforço para superá-lo, Heisenberg sugere a introdução de relações de incerteza para as coordenadas como uma maneira de evitar a singularidade da autoenergia do elétron. Snyder, sob a supervisão de Oppenheimer, desenvolve a ideia e mostra que é possível um espaço-tempo discreto e invariante de Lorentz tal que, a energias suficientemente altas, a ideia de um ponto não mais existe, dando lugar a um espaço-tempo fragmentado em células de pequenino tamanho [1]. Agora, as coordenadas do espaço-tempo abandonam seu caráter contínuo para assumir a identidade de operadores hermitianos que não comutam entre si. É essa a essência de um espaço-tempo não comutativo, um espaço dotado de um comprimento mínimo e livre de um conteúdo físico para a noção de ponto [14].

Assim, torna-se muito interessante entender de que maneira um espaço-tempo não comutativo pode afetar uma teoria tão bem estabelecida quanto a QED_4 , principalmente em duas extensões muito particulares, que são a eletrodinâmica quântica em duas (ou $1 + 1$) e três (ou $2 + 1$) dimensões (QED_2 e QED_3 , respectivamente) que apresentam um fenômeno bastante curioso: nestes dois contextos, os campos vetoriais adquirem massa sem que a invariância de gauge seja perdida.

A QED_2 , também conhecida como modelo de Schwinger, contempla a interação entre fótons e férmions não massivos em sua abordagem original [15], que pode ser estendida a férmions massivos sem perda de generalidade. A QED_2 é um modelo exatamente solúvel (ou seja, apresenta correções quânticas finitas; neste caso, apenas a correção a um *loop*) em que uma massa para o campo de gauge é gerada dinamicamente, que é o mesmo que dizer que é a correção quântica a um *loop* a responsável por atribuir massa a este campo. Desta forma, a interação coulombiana outrora infinita devido à massa nula do campo de gauge é agora uma interação finita; mais que isso, linear, o que possibilita o confinamento de campos de matéria.

A QED_3 topológica, igualmente conhecida como a teoria de Maxwell-Chern-Simons mais férmions ou a teoria de gauge topologicamente massiva [16], [17], é uma extensão da teoria de Maxwell para $(2 + 1)$ - dimensões (em verdade, é válida para todas as dimensões ímpares) em que o campo de gauge adquire massa de tal forma que a simetria de gauge é preservada. A estrutura tridimensional da teoria é a responsável por este fenômeno, porque ainda que se considere apenas a interação entre o campo de Maxwell e um campo fermiônico massivo, o termo de Chern-Simons surge a partir da correção a um *loop*, atribuindo massa ao campo vetorial.

Portanto, os possíveis desvios na massa dos fótons das consolidadas teorias da QED_2 e QED_3 causados pelo efeito de um espaço-tempo não comutativo serão determinados a partir do cálculo da função de autoenergia do fóton, ou seja, das correções quânticas ao propagador do fóton, por meio da representação espectral de Källén-Lehmann.

A representação espectral de Källén-Lehmann [18], [19] é um processo de quantização que têm suas raízes fortemente cravadas nos pressupostos físicos fundamentais referentes ao princípio da invariância, condição de causalidade e condições assintóticas [20], e que conduzem às relações de dispersão, que são relações entre as partes real e imaginária das funções de propagação [21]. O objetivo principal deste método de quantização é derivar as propriedades gerais das funções de propagação sem recorrer às expansões em série de potências, resultando em um processo de quantização que não apresenta constantes de renormalização: somente as massas experimentais e os parâmetros de acoplamento. Em outras palavras, o propagador do fóton expresso por meio da representação espectral de Källén-Lehmann já está renormalizado, ou seja, a massa determinada a partir deste processo de quantização já é a massa física da partícula.

Por fim, o estudo de teorias de gauge em um espaço não comutativo são possíveis por meio do que se conhece por mapa de Seiberg-Witten [2]. A não comutatividade do espaço impede que os campos comutem entre si, como ocorre nas teorias de gauge não Abelianas. Uma teoria não Abeliana assim o é devido à não comutatividade do seu espaço interno, ao passo que em uma teoria não comutativa os campos não comutam entre si devido à estrutura não comutativa do espaço-tempo externo que os engloba. Como resultado, as interações em teorias de gauge em um espaço não comutativo são não locais, a não localidade explicitamente expressa através do produto estrela de Moyal, que é a extensão para Teoria de Campos da quantização de Weyl da Mecânica Quântica no espaço de fase. O mapa de Seiberg-Witten então transforma uma expressão invariante de gauge definida pelo produto estrela de Moyal em uma expressão invariante de gauge ordinária (comutativa) acrescida de uma interação proporcional ao parâmetro não comutativo $\theta^{\mu\nu}$. Portanto, é agora possível estudar os efeitos da não comutatividade do espaço-tempo por meio de uma teoria de gauge comutativa local e interagente.

Este é o rico alicerce em que será desenvolvido o estudo da eletrodinâmica quântica não comutativa em $(1 + 1)$ e $(2 + 1)$ – dimensões na representação espectral de Källén-Lehmann.

1.1.1 A quantização de Weyl e o produto estrela de Moyal

Heisenberg, em junho de 1925 [22], publica seu trabalho sobre uma nova Mecânica Quântica baseada exclusivamente em relações entre quantidades que são, em princípio, observáveis empiricamente. Na Mecânica de Heisenberg, observáveis tais como posição e momento são representadas por operadores autoadjuntos. Em particular, estas duas observáveis se relacionam por meio da relação de comutação canônica, que é a relação fundamental entre quantidades canônicas conjugadas, ou ainda, quantidades que estão definidas de tal forma que uma é a transformada de Fourier da outra (à parte de coeficientes numéricos). Seja então o autoestado do operador momento

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right) |x\rangle \quad (1.1)$$

e o respectivo autoestado do operador posição

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) |p\rangle \quad (1.2)$$

que satisfazem a relação de comutação fundamental de Heisenberg ou o Princípio da Incerteza de Heisenberg

$$[\hat{p}, \hat{x}] = i\hbar I \quad (1.3)$$

em que I denota a matriz identidade e \hbar é a constante de Planck dividida por 2π . Esta estrutura algébrica é um análogo quântico da estrutura canônica da Mecânica Clássica. Em verdade, esta relação reflete uma limitação na observação simultânea das observáveis correspondentes - uma medida precisa da coordenada leva a uma alta indeterminação do momento. Mostra também como a Mecânica Clássica, em que todas as observáveis comutam, pode ser atingida quando \hbar puder ser considerado pequeno o bastante para ser desprezado.

A regra de quantização que faz a correspondência entre os parênteses de Poisson clássicos $\{A, B\}$ e a os comutadores quânticos $\frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}]$ foi introduzida por Paul Dirac em sua tese de doutorado no ano de 1926 [23], e é conhecida como quantização canônica. Esta prescrição permite estabelecer conexões entre a Mecânica Clássica e a Mecânica Quântica através do limite $\hbar \rightarrow 0$. Embora o método de quantização de Dirac seja amplamente difundido na literatura, a correspondência entre os comutadores quânticos e os parênteses de Poisson não se mantém de forma consistente¹, como foi demonstrado por Groenewold em 1941 [25], e posteriormente por van Hove [26].

Contudo, Groenewold pontua que existe uma correspondência entre os comutadores quânticos e uma “deformação” dos parênteses de Poisson: os parênteses de Moyal. A chamada “deformação” dos parênteses de Poisson é a descrição dos comutadores das observáveis em uma formulação no espaço de fase da Mecânica Quântica, quando então essas observáveis são descritas como funções do espaço de fase. A associação entre funções no espaço de fase, observáveis clássicas, e observáveis quânticas é uma prescrição ou quantização, conhecida como quantização de Weyl. Em verdade, Weyl foi o primeiro a desenvolver esta prescrição em 1927 [27], cujo estudo é a base para o que hoje se denota por equação dinâmica de Moyal [28].

O presente estudo tem a finalidade de apresentar a quantização de Weyl, que estabelece uma correspondência entre a álgebra dos campos em um espaço comutativo e a álgebra dos operadores em um espaço não comutativo, para que então se determine corretamente os produtos entre os campos a serem considerados no estudo de Teoria de Campos. Tem de ser assim porque a quantização de Weyl é a única prescrição que nasce em uma Mecânica Quântica no espaço de fase, e onde seus operadores são fundamentalmente não comutativos. Com este propósito,

¹Pode-se dizer que essa inconsistência na teoria de Dirac está no ordenamento entre fatores que não comutam e que em princípio podem ocorrer na quantização de uma variável dinâmica clássica, embora isso nunca tenha sido relevante, uma vez que tais fatores surgem em raras hamiltonianas clássicas hipotéticas para sistemas físicos cuja dinâmica quântica possa ser útil. Em verdade, essa aparente inconsistência pode ser tratada como um incômodo para a completude teórica da mecânica quântica *ortodoxa*, por assim dizer [24].

o procedimento para a determinação do produto Moyal será inicialmente obtido para as observáveis momento e posição, e uma intuitiva extensão para operadores não comutativos será, por fim, efetuada.

A quantização de Weyl tem como objetivo associar um operador quântico $\hat{\mathcal{W}}[f]$ (o operador de Weyl) a toda função de distribuição f no espaço de fase. Então, sejam p e q as observáveis para momento e posição, respectivamente. O sistema quântico correspondente tem suas observáveis posição e momento modeladas por operadores \hat{P} e \hat{Q} que obedecem à relação de comutação fundamental de Heisenberg $[\hat{P}, \hat{Q}] = i\hbar$. Considere também os números reais a e b . Então, para o par (a, b) , é possível contruir o operador

$$U(a, b) = \exp \left[i \left(a\hat{P} + b\hat{Q} \right) \right] \quad (1.4)$$

tal que a este operador deve ser associada uma função $(q, p) \rightarrow \exp [i(ap + bq)]$. Supondo uma função qualquer f que satisfaz as condições de Schwartz (ou seja, funções de quadrado integrável, em que derivadas em ordens arbitrárias zeram no infinito tanto no espaço das coordenadas quanto no espaço dos momentos). As condições de Schwartz implicam que estas funções podem ser representadas por uma transformada de Fourier; explicitamente

$$f(q, p) = \int \tilde{f}(a, b) \exp [i(ap + bq)] da db. \quad (1.5)$$

Na quantização de Weyl, é preciso então associar a f o operador

$$\hat{\mathcal{W}}[f] = \int \tilde{f}(a, b) \exp \left[i \left(a\hat{P} + b\hat{Q} \right) \right] da db = \int \tilde{f}(a, b) U(a, b) da db. \quad (1.6)$$

também chamado de operador de Weyl e que pode ser convenientemente reescrito em termos da transformada de Fourier inversa de $\tilde{f}(a, b)$ como

$$\hat{\mathcal{W}}[f] = \int f(q, p) e^{i[a(\hat{P}-p)+b(\hat{Q}-q)]} dq dp \quad (1.7)$$

donde se define o operador

$$\hat{\Delta}(p, q) \equiv \int e^{i[a(\hat{P}-p)+b(\hat{Q}-q)]} da db \quad (1.8)$$

que representa explicitamente o mapeamento entre operadores da Mecânica Quântica e funções de distribuição no espaço de fase. Esta é a forma geral do processo de quantização de Weyl [27].

Contudo, a quantização de Weyl introduz um novo produto de funções, como bem pontuado por von Neumann em 1931 [29], em um processo análogo àquele das transformadas de Fourier em que o produto ocorre por meio de uma convolução. O produto entre dois operadores de Weyl conduz ao produto estrela de Moyal, a partir do qual relações de comutação e anticomutação são estabelecidas.

Pela definição (1.6), o produto $\hat{\mathcal{W}}[f] \hat{\mathcal{W}}[g]$

$$\hat{\mathcal{W}}[f] \hat{\mathcal{W}}[g] = \int dadbda'db' e^{i(a\hat{P}+b\hat{Q})} e^{i(a'\hat{P}+b'\hat{Q})} \tilde{f}(a, b) \tilde{g}(a', b') \quad (1.9)$$

pode ser reescrito através da fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff²

$$\exp \hat{Q} \exp \hat{P} = \exp \left(\hat{Q} + \hat{P} + \frac{1}{2} [\hat{Q}, \hat{P}] \right) = \exp \left(\hat{Q} + \hat{P} + \frac{i\hbar}{2} \right) \quad (1.10)$$

na seguinte forma

$$\hat{\mathcal{W}}[f] \hat{\mathcal{W}}[g] = \int dadbda'db' e^{i((a+a')\hat{P}+(b+b')\hat{Q})} \tilde{f}(a, b) e^{\frac{i\hbar}{2}(ab'-a'b)} \tilde{g}(a', b'). \quad (1.11)$$

Com a conveniente substituição $a \rightarrow a - a'$ e $b \rightarrow b - b'$ na expressão anterior,

$$\hat{\mathcal{W}}[f] \hat{\mathcal{W}}[g] = \int dadbda'db' e^{i(a\hat{P}+b\hat{Q})} \left[\tilde{f}(a - a', b - b') e^{\frac{i\hbar}{2}(ab'-a'b)} \tilde{g}(a', b') \right] \quad (1.12)$$

é então possível definir um pseudo produto estrela $\widetilde{f \star g}$ por

$$\left(\widetilde{f \star g} \right) (a, b) \equiv \int da'db' \tilde{f}(a - a', b - b') e^{\frac{i\hbar}{2}(ab'-a'b)} \tilde{g}(a', b') \quad (1.13)$$

tal que o produto estrela ou produto de Moyal é definido a partir da transformada de Fourier inversa desta expressão, ou seja,

$$(f \star g) (q, p) \equiv \int dadb \exp [i (ap + bq)] \left(\widetilde{f \star g} \right) (a, b) \quad (1.14)$$

donde se observa que o produto estrela depende apenas das variáveis clássicas (q, p) , e que isso define uma função de distribuição suave no espaço de fase clássico.

Com as substituições $a, a' \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial p}$ e $b, b' \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial q}$, e tendo em vista que derivadas de funções suaves comutam, se alcança a forma obtida por Moyal

$$(f \star g) (x, p) = \exp \left[\frac{\hbar}{2i} \left(\frac{\partial^f}{\partial p} \frac{\partial^g}{\partial q} - \frac{\partial^f}{\partial q} \frac{\partial^g}{\partial p} \right) \right] f(x, p) g(x, p) \quad (1.15)$$

em que claramente

$$f \star g = f \cdot g + \mathcal{O}(\hbar)$$

onde \cdot é o produto comutativo usual e $\mathcal{O}(\hbar)$ são as correções ao produto estrela ou produto de Moyal gerados pela álgebra de Heisenberg.

²Uma vez que os operadores \hat{x} e \hat{p} obedecem à relação de comutação fundamental de Heisenberg em que $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. É neste ponto do cálculo que a álgebra não comutativa deve ser aplicada para que a extensão não comutativa da quantização de Weyl seja efetuada.

Nas expressões para o comutador

$$[f, g] = 2i \sin \left[\frac{\hbar}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} \right) \right] f(x, p) g(x, p) \quad (1.16)$$

e o anticomutador

$$\{f, g\} = 2 \cos \left[\frac{\hbar}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} \right) \right] f(x, p) g(x, p) \quad (1.17)$$

é notório que as ambas as expressões são séries em \hbar , de tal forma que

$$[f, g] = i\hbar \{f, g\} + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad (1.18)$$

que é a forma intuída por Dirac em seus estudos sobre quantização [23].

O procedimento de quantização de Weyl e obtenção de uma expressão para o produto estrela de Moyal pode ser diretamente estendido para a álgebra não comutativa (o procedimento detalhado pode ser encontrado em [30]). Sejam os operadores \hat{x}^μ os geradores da álgebra não comutativa que satisfazem a relação de comutação

$$[\hat{x}^\mu, \hat{x}^\nu] = i\theta^{\mu\nu} \quad (1.19)$$

em que $\theta^{\mu\nu}$ é um tensor antissimétrico real. Uma função $f(x)$ satisfaz as condições de Schwartz e é tal que para cada $f(x)$ que pertence ao espaço comutativo existe um operador de Weyl $\hat{\mathcal{W}}[f]$ correspondente no espaço não comutativo.

O operador de Weyl tem a forma

$$\hat{\mathcal{W}}[f] = \int d^D x f(x) \hat{\Delta}(x), \quad (1.20)$$

em que o operador $\hat{\Delta}(x)$ representa explicitamente o mapeamento entre operadores e campos

$$\hat{\Delta}(x) \equiv \int \frac{d^D p}{(2\pi)^D} \exp(ip_\mu \hat{x}^\mu) \exp(-ip_\mu x^\mu) \quad (1.21)$$

e permite que o campo $f(x)$ seja interpretado como a representação do operador de Weyl $\hat{\mathcal{W}}[f]$ no espaço das coordenadas³.

Agora, os produtos de operadores $\hat{\Delta}(x)$ em pontos distintos podem ser determinados por

$$\hat{\Delta}(x) \hat{\Delta}(y) = \int \frac{d^D p}{(2\pi)^D} \frac{d^D p'}{(2\pi)^D} \int d^D z \exp\left(i(p + p')_\mu z^\mu\right) \times$$

³Para o caso comutativo, o operador de Weyl $\hat{\mathcal{W}}[f] \Big|_{\theta=0} = f(\hat{x})$, uma vez que o operador hermitiano $\hat{\Delta}(x)$ se reduz trivialmente a uma função delta $\delta^D(\hat{x} - x)$.

$$\times \hat{\Delta}(z) \exp\left(-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} p_\mu p'_\nu\right) \exp(ip_\mu x^\mu) \exp(-ip'_\mu y^\mu) \quad (1.22)$$

onde uma integração gaussiana em p e p' só é possível se θ for uma matriz inversível, o que implica que a dimensão do espaço-tempo D deve ser par; com essa premissa⁴, se obtém

$$\hat{\Delta}(x) \hat{\Delta}(y) = \frac{1}{\pi^D |\det \theta|} \int d^D z \hat{\Delta}(z) \exp\left[-2i(\theta^{-1})_{\mu\nu} (x-z)^\mu (y-z)^\nu\right]. \quad (1.23)$$

O traço do operador de Weyl

$$Tr \hat{\mathcal{W}}[f] = \int d^D x f(x), \quad (1.24)$$

em que foi escolhida a normalização $Tr \hat{\Delta}(x) = 1$, é equivalente a uma integração sobre as coordenadas não comutativas \hat{x}^μ e pode ser usada escrever a função $f(x)$ na forma compacta⁵

$$f(x) = Tr \left(\hat{\mathcal{W}}[f] \hat{\Delta}(x) \right) \quad (1.25)$$

de tal forma que o produto de Moyal é obtido a partir do produto entre operadores de Weyl $\hat{\mathcal{W}}[f]$ e $\hat{\mathcal{W}}[g]$

$$\hat{\mathcal{W}}[f] \hat{\mathcal{W}}[g] = \hat{\mathcal{W}}[f \star g] \quad (1.26)$$

explicitamente dado por

$$(f \star g)(x) = \int \frac{d^D p'}{(2\pi)^D} \exp(ip'_\mu x^\mu) \int \frac{d^D p}{(2\pi)^D} \tilde{f}(p) \tilde{g}(p' - p) \exp\left(-\frac{i}{2}\theta^{\mu\nu} p_\mu p'_\nu\right), \quad (1.27)$$

que é uma versão para o produto estrela particularmente útil para teorias de campo no espaço dos momentos. Outra forma para o produto estrela de Moyal é obtida tomando inicialmente a transformada de Fourier de (1.27), obtendo

$$(f \star g)(x) = \int d^D y \frac{d^D k}{(2\pi)^D} a\left(x + \frac{1}{2}\theta \cdot k\right) b(x + y) \exp(iky) \quad (1.28)$$

que, com a identidade

$$\int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \exp[ik \cdot (x - y)] = \delta(x - y) \quad (1.29)$$

mostra que o produto estrela é associativo, $((a \star b) \star c)(x) = (a \star (b \star c))(x)$ e não comutativo, $a \star b \neq b \star a$, e que apresenta a importante propriedade: sendo $f(x)$ e $g(x)$ funções que

⁴Quando a dimensão do espaço-tempo é ímpar, o sistema naturalmente apresenta vínculos, e a quantização deve ser feita levando-se em conta tais vínculos. Contudo, estes vínculos, depois de tratados adequadamente, em nada afetarão a forma do produto estrela de Moyal obtido para o caso de dimensão par. Portanto, o produto estrela de Moyal definido neste estudo é válido para qualquer dimensão do espaço-tempo [31].

⁵Quando $f(x)$ é obtida a partir de um operador quântico, como é o caso, a função $f(x)$ é chamada de função de distribuição de Wigner [30], [32].

satisfazem as condições de Schwartz, a igualdade

$$\int d^D x f(x) \star g(x) = \int d^D x f(x) g(x) \quad (1.30)$$

se mantém sob interações por partes. Também

$$\partial_\mu (a \star b) = (\partial_\mu a) \star b + a \star (\partial_\mu b) \quad (1.31)$$

completam as propriedades do produto Moyal necessárias ao presente estudo.

A forma mais popular para o produto Moyal

$$(a \star b)(x) = \exp\left(i\theta^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial y^\mu} \frac{\partial}{\partial z^\nu}\right) a(y) b(z) \Big|_{y=z=x} = ab + \frac{1}{2} i\theta^{\mu\nu} \partial_\mu a \partial_\nu b + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (1.32)$$

é obtida por meio dos seguintes passos [33] a partir da expressão (1.28):

- i. Expansão em Taylor de $a(x + \frac{1}{2}\theta \cdot k)$ em torno de $k = 0$;
- ii. representação repetida de $k_\mu e^{ik \cdot y} = -i \frac{\partial}{\partial y^\mu} e^{ik \cdot y}$;
- iii. integração por partes em y ;
- iv. integração em k , levando a $\int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{(ik \cdot y)} = \delta(y)$;
- v. integração em y .

Como uma expansão em Taylor está envolvida, pelo menos uma das funções a ou b deve ser analítica. Portanto, a expressão popular (1.32) é uma expansão assintótica do produto estrela, que se torna exata quando as funções a e b são suaves (satisfazem às condições de Schwartz). Por fim, é importante ressaltar que a propriedade mais importante do produto de Moyal é a sua não localidade. Esta não localidade está escondida em (1.32): à primeira vista esta expressão parece ser local, haja vista que apenas as derivadas de a e b em x contribuem para $(a \star b)$. Contudo, para o valor de $a \star b$ no ponto x existem contribuições de valores individuais das funções a e b muito longe de x , e por isso sua não localidade.

Como pode ser observado, a base para a quantização de Weyl está nas transformadas de Fourier, que têm um papel importantíssimo para a teoria não comutativa: em 1934, Pontryagin [34] publica um trabalho em que as transformadas de Fourier são estudadas sob a ótica das simetrias. Uma vez que as transformadas de Fourier têm a propriedade de serem periódicas, Pontryagin generaliza o conceito das transformadas de Fourier de tal maneira que se a função obedece às condições de Schwartz, ela é invariante por translações. E é por isso que o espaço não comutativo preserva invariância translacional [35]. O impacto deste destaque é a sua consequência na Física da Matéria Condensada, que se baseia no princípio da invariância translacional como um de seus pilares fundamentais: o teorema de Bloch, que descreve o movimento de elétrons em um sólido supondo que este seja um arranjo periódico, e as condições de contorno de Born-von Kármán, que estabelecem as condições de periodicidade aos contornos de um sólido. Portanto, o espaço não comutativo pode ser uma ferramenta poderosa para ser aplicada em situações em que a noção de uma localização precisa for perdida.

1.1.2 O mapa de Seiberg-Witten

A forma das interações entre os campos é determinada postulando a sua invariância sob certos grupos de transformações, que por sua vez refletem as simetrias destas interações. No caso da eletrodinâmica quântica, a interação ocorre entre campos que descrevem férmions eletricamente carregados e é intermediada por bósons (fótons), descritos pelo potencial eletromagnético A_μ .

Estas interações são introduzidas formal e coerentemente através do formalismo lagrangiano da eletrodinâmica, que é invariante sob as transformações de *gauge* global e local e que, pelos teoremas de Noether, refletem a conservação da carga elétrica e o estabelecimento de uma expressão para a lagrangiana da QED, respectivamente, uma vez que a transformação local de *gauge* implica no surgimento de um campo restaurador A_μ , que é também o campo intermediador da interação entre os férmions carregados.

O conjunto de todas as transformações de *gauge* forma um grupo unitário unidimensional a um parâmetro, o grupo $U(1)$, com o parâmetro infinitesimal denotado por $\lambda(x)$. Quando o parâmetro infinitesimal λ é constante, a transformação de *gauge* é global e a variação ocorre a ponto fixo, ou seja, a variação na forma do campo é igual à variação total do campo (princípio da invariância), resultando em uma carga conservada: a carga elétrica. Por outro lado, em uma transformação local de *gauge*, o parâmetro infinitesimal depende do ponto do espaço-tempo, ou seja $\lambda = \lambda(x)$, em uma transformação que também ocorre à ponto fixo, mas que atua apenas na forma do campo, não em suas coordenadas, validando o princípio da invariância. Desta maneira, a interação eletromagnética entre partículas carregadas pode ser interpretada como uma teoria de *gauge* local, com transformações explicitamente dadas por

$$\begin{aligned}\psi'_\alpha(x) &= e^{-ie\lambda(x)}\psi_\alpha(x) \\ \bar{\psi}'_\alpha(x) &= e^{ie\lambda(x)}\bar{\psi}_\alpha(x) \\ A'_\mu(x) &= A_\mu(x) + \partial_\mu\lambda(x)\end{aligned}\tag{1.33}$$

Nas transformações locais de *gauge*, a transformação ocorre apenas em uma certa região do espaço-tempo, de tal maneira que não influencia, e tampouco é influenciada por outras regiões distintas do espaço-tempo. Ocorre que o espaço-tempo não comutativo é uma teoria fundamentalmente não local, e portanto os campos considerados nesta teoria não comutam entre si em consequência da estrutura não comutativa do espaço-tempo externo que os engloba, de tal maneira que uma transformação de *gauge* não comutativa tem uma estrutura naturalmente não-abeliana. Assim, embora o estudo sobre a eletrodinâmica quântica não comutativa pressuponha que a teoria continue sendo invariante sob as transformações locais de *gauge*, este conflito entre estruturas abelianas e não abelianas é, em princípio, problemático.

Explicitamente, a invariância de *gauge* ordinária (comutativa) para o potencial A_μ atua como

$$\delta A_\mu = A'_\mu - A_\mu = \partial_\mu\lambda\tag{1.34}$$

em que λ é um escalar. A invariância de *gauge* não comutativa atua, em sua forma infinitesimal,

como

$$\delta \hat{A}_\mu = \partial_\mu \hat{\lambda} + i \hat{\lambda} \star \hat{A}_\mu - i \hat{A}_\mu \star \hat{\lambda} \quad (1.35)$$

evidenciando seu caráter não abeliano, uma vez que os produtos estrela são não comutativos⁶. O problema está no fato de que um grupo abeliano não pode ser isomorfo⁷ a um grupo não abeliano. Desta forma, não é possível que apenas uma redefinição do parâmetro de *gauge* seja capaz de mapear um parâmetro de *gauge* ordinário (comutativo) a um não comutativo.

Contudo, como mostrado por Seiberg e Witten [2], em tradução livre, “não é necessária tal identificação entre os grupos de *gauge* abelianos e não abelianos, mas apenas determinar quando dois campos de *gauge* A e A' podem ser considerados equivalentes por [transformação de] *gauge*. Uma equivalência por *gauge* é, intuitivamente, a representação de uma mesma possibilidade física em duas estruturas distintas. Desta forma, se dois campos de *gauge* ordinários A e A' são equivalentes por uma transformação de *gauge* ordinária $U = e^{i\lambda}$, logo, os campos de *gauge* não comutativos correspondentes \hat{A} e \hat{A}' também serão equivalentes por *gauge*, neste caso por uma transformação de *gauge* não comutativa $\hat{U} = e^{i\hat{\lambda}}$. No entanto, $\hat{\lambda}$ vai depender tanto de λ quanto de A . Se $\hat{\lambda}$ fosse uma função apenas de λ , os grupos de *gauge* ordinário e não comutativo seriam os mesmos; contudo, uma vez que $\hat{\lambda}$ é uma função de λ e A , não há um mapeamento entre os grupos de *gauge*, mas uma identificação entre as relações de equivalência por *gauge*”.

Desta feita, é então possível determinar uma transformação de *gauge* em primeira ordem em θ tal que

$$\hat{A}(A) + \delta_{\hat{\lambda}} \hat{A}(A) = \hat{A}(A + \delta_\lambda A) \quad (1.36)$$

em que λ e $\hat{\lambda}$ são parâmetros infinitesimais. Assim, se assegura que uma transformação de *gauge* ordinária de A por λ é equivalente a uma transformação de *gauge* não comutativa de \hat{A} por $\hat{\lambda}$, de tal maneira que campos de *gauge* ordinários que são equivalentes por *gauge* são mapeados em campos de *gauge* não comutativos também equivalentes por *gauge*.

Então, com

$$\hat{A} = A + A'(\lambda, A) \quad \text{e} \quad \hat{\lambda}(\lambda, A) = \lambda + \lambda'(\lambda, A) \quad (1.37)$$

em que A' e λ' são funções locais de λ e A de ordem θ , a expansão de (1.36) em potências de θ

$$\hat{A}'_\mu(A + \delta_\lambda A) - \hat{A}'_\mu(A) - \partial_\mu \lambda' - i[\lambda', A_\mu] - i[\lambda, A'_\mu] = -\frac{1}{2} \theta^{\alpha\beta} (\partial_\alpha \lambda \partial_\beta A_\mu + \partial_\beta A_\mu \partial_\alpha \lambda) + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (1.38)$$

em que a expansão dada em (1.32) foi usada. Todos os produtos que aparecem nesta expressão são produtos ordinários, por exemplo $[\lambda', A_\mu] = \lambda' A_\mu - A_\mu \lambda'$. Assim, (1.38) é determinado

⁶Doravante, as quantidades sem chapéu se referem a quantidades ordinárias (comutativas), enquanto as quantidades com chapéu se aplicam às quantidades não comutativas.

⁷Duas estruturas matemáticas são ditas isomorfas se há um mapeamento um-para-um entre os elementos das estruturas matemáticas. Desta forma, se duas estruturas são isomorfas, então qualquer propriedade que é preservada por um isomorfismo e que é verdade para uma das estruturas, também é verdade para a outra estrutura.

totalmente em termos de produtos ordinários por

$$\hat{A}_\mu(A) = A_\mu + \hat{A}'_\mu(A) = A_\mu - \frac{1}{4}\theta^{\alpha\beta} \{A_\alpha, \partial_\beta A_\mu + F_{\beta\mu}\} + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (1.39)$$

e

$$\hat{\lambda}(\lambda, A) = \lambda + \lambda'(\lambda, A) = \lambda + \frac{1}{4}\theta^{\mu\nu} \{\partial_\mu \lambda, A_\nu\} + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (1.40)$$

o que conduz diretamente a

$$\hat{F}_{\mu\nu} = F_{\mu\nu} + \frac{1}{4}\theta^{\alpha\beta} (2\{F_{\mu\alpha}, F_{\nu\beta}\} - \{A_\alpha, D_\beta F_{\mu\nu}\}) + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (1.41)$$

em que D_β é a derivada covariante $D_\beta = \partial_\beta - ieA_\beta$. As expressões (1.39), (1.40) e (1.41) perfazem, portanto, as transformações de *gauge* não comutativas da eletrodinâmica quântica.

1.1.3 A representação espectral de Källén-Lehmann

A representação espectral de Källén-Lehmann é um formalismo que permite a construção de uma estrutura analítica geral para o valor esperado no vácuo do produto temporalmente ordenado de dois operadores que representam os campos das partículas estáveis. Esta representação é obtida a partir de princípios fundamentais da teoria quântica de campos relativística: o princípio da invariância relativística, as condições de causalidade e as condições assintóticas, e fornece um propagador completo, que tem a forma de uma relação de dispersão. Deste modo, os propagadores completos são descritos como superposições de seus correspondentes propagadores livres tomados em diferentes valores de massa e que são ponderadas por uma distribuição dada pela função de densidade espectral.

Uma relação de dispersão é uma conexão entre as partes real e imaginária de uma função que depende da frequência em consequência das condições de causalidade macroscópica⁸ e tem sua origem física nas teorias de dispersão oriundas da propagação da luz em um meio dielétrico [21]. De fato, o fator de propagação de uma onda plana monocromática em um meio dielétrico homogêneo é o índice de refração, uma quantidade complexa explicitamente escrita como $n' = n + i\frac{c\beta}{2\omega}$. A parte imaginária de n' é a constante de amortecimento associada com a absorção ou espalhamento da onda em que β é o coeficiente de extinção, uma vez que atenua exponencialmente a intensidade da onda, e n é o índice de refração que determina a velocidade da fase da onda que atravessa o meio. As condições de causalidade estabelecem relações entre n e β , ou seja, entre as partes real e imaginária de n' . Isto porque o comportamento de n e β como funções da frequência não podem ser determinados de forma a serem completamente independentes sem que a causalidade seja violada. O exemplo mais simples é conceber que o

⁸A causalidade relativística ou condição de causalidade macroscópica significa que nenhum sinal pode se propagar com velocidade maior que c , em que c é a velocidade da luz no vácuo. A comutatividade local ou condição de causalidade microscópica se expressa em Teoria Quântica de Campos pela nulidade do comutador dos operadores de campo tomados em dois pontos separados por um intervalo tipo espaço, e está também conjugada à ideia de que medidas feitas em dois pontos distintos devem ser tais que o efeito de uma medição em um ponto não interfira na medida em outro ponto.

meio dielétrico seja capaz de atuar como um filtro perfeito para uma particular frequência ω_0 . Para que a causalidade não seja violada, a absorção da frequência ω_0 deve ser acompanhada de uma mudança de fase em todas as outras frequências diferentes de ω_0 , de tal maneira que seja assegurado que as ondas interfiram destrutivamente e para impedir que uma onda emitida surja antes que a onda de entrada. Então, o índice de refração n para qualquer frequência deve estar relacionado aos valores do coeficiente de extinção β também para todas as frequências. Estas relações entre $\text{Re}(n')$ e $\text{Im}(n')$ são as relações de dispersão.

A função de densidade espectral, por sua vez, é uma função real, positiva definida e invariante sob transformações de Lorentz que representa o espectro de massa da teoria relativística, e que consiste em um valor discreto, que representa o estado de mais baixa energia e que corresponde a uma partícula única, mais um contínuo que representa os estados de duas partículas⁹.

Assim, em Teoria Quântica de Campos as relações de dispersão são introduzidas por meio da representação espectral de Källén-Lehmann, e representam uma tentativa de se remediar algumas dificuldades intrínsecas (tais como divergências e ambiguidades) da formulação de Feynman e Dyson da eletrodinâmica quântica, de tal maneira que pode ser considerada como uma teoria que complementa esta formulação da QED. Contudo, antes de abordar o problema da eletrodinâmica quântica na representação espectral de Källén-Lehmann, um estudo detalhado deste formalismo será conduzido para o exemplo mais simples de uma relação de dispersão em Teoria Quântica de Campos: o propagador de um campo escalar na representação de Heisenberg.

A descrição de Heisenberg é definida pela constância no tempo de um vetor de estado, enquanto os operadores de campo realizam toda a interação. Assim, uma lagrangiana descrita em termos desta representação permite que relações de comutação canônicas válidas para operadores a tempos iguais sejam obtidas. Estas relações de comutação podem ser generalizadas em separações tipo espaço¹⁰, o que garante que observáveis locais possam ser mutuamente medidas sem distúrbios recíprocos. Além disso, a lagrangiana também permite que um tensor de energia-momento $T_{\mu\nu}$ seja construído, a partir do qual o quadrimomento P_μ e o tensor de momento angular $M_{\mu\nu}$ podem ser definidos.

Os operadores P_μ e $M_{\mu\nu}$ são os geradores para as translações infinitesimais e para as

⁹Não serão considerados estados ligados, haja vista que as condições assintóticas assumidas para este estudo descrevem campos livres e só permitem, portanto, espalhamento de partículas. Em verdade, os estados ligados aparecem em um espectro de massa na forma de valores discretos limitados entre o valor que corresponde ao estado de partícula única e o contínuo de duas partículas, isso porque mesmo sendo formados por mais de uma partícula, os estados ligados têm a energia que corresponde a soma de suas massas diminuída pela energia de ligação que os mantém ligados.

¹⁰Uma distância do espaço-tempo entre dois pontos, $\Delta s^2 = (x_0 - y_0)^2 - (\vec{x} - \vec{y})^2$, permite a interpretação:

(i) $\Delta s^2 < 0$: é um intervalo tipo espaço, que é não-causal, uma vez que os dois pontos conectam-se por um sinal de velocidade maior que c , a velocidade da luz;

(ii) $\Delta s^2 = 0$: é um intervalo tipo luz ou nulo, em que os dois pontos conectam-se por um sinal de velocidade igual a c ;

(iii) $\Delta s^2 > 0$: é um intervalo tipo tempo, causal, em que os dois pontos conectam-se por um sinal de velocidade menor que c .

transformações de Lorentz; respectivamente

$$U(a, 1) = \exp(ia_\mu P^\mu) \quad (1.42)$$

e

$$U(0, \Lambda) = \exp\left(\frac{1}{2}\Lambda_{\mu\nu} M^{\mu\nu}\right), \quad (1.43)$$

em que o componente temporal P_0 dos operadores de translação P_μ é a hamiltoniana do sistema. As relações de comutação satisfeitas pelos geradores de translação e rotação infinitesimais são

$$[P_\mu, P_\nu] = 0, \quad (1.44)$$

que expressa a conservação da energia total e do momento do sistema, e

$$[P_\mu, M_{\kappa\lambda}] = i(g_{\mu\kappa}P_\lambda - g_{\mu\lambda}P_\kappa) \quad (1.45)$$

e

$$[M_{\kappa\lambda}, M_{\mu\nu}] = i(g_{\lambda\mu}M_{\kappa\nu} + g_{\kappa\nu}M_{\lambda\mu} - g_{\kappa\mu}M_{\lambda\nu} - g_{\lambda\nu}M_{\kappa\mu}), \quad (1.46)$$

que juntas provam a covariância de Lorentz da teoria¹¹. Os operadores P_μ ¹² induzem a seguinte mudança em um operador de Heisenberg arbitrário $F(x)$ ¹³ sob translações infinitesimais

$$i\delta x^\mu [P_\mu, F(x)] = \delta F(x),$$

ou seja,

$$i [P_\mu, F(x)] = \partial_\mu F(x). \quad (1.47)$$

Como todos os operadores P_μ comutam entre si, uma representação pode ser escolhida de

¹¹Todas as transformações que preservam a invariância da expressão

$$s^2 \equiv x^2 = x_0^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$$

são chamadas de transformações de Lorentz homogêneas, ao passo que as transformações que preservam a invariância da expressão

$$\Delta s^2 \equiv (x - y)^2 = (x_0 - y_0)^2 - (\vec{x} - \vec{y})^2$$

são as transformações de Lorentz não homogêneas; estas transformações diferem das transformações de Lorentz homogêneas por uma translação das coordenadas espaciais e temporais. Portanto, relações de comutação satisfeitas pelos geradores para translações e rotações infinitesimais (1.44, 1.45 e 1.46) são idênticas as relações do grupo de Lorentz não homogêneo, assegurando sua covariância.

¹²De fato, P_μ e o operador $J_{\mu\nu}$ satisfazem as relações de comutação

$$\begin{aligned} i [J_{\mu\nu}, J_{\rho\sigma}] &= \delta_{\nu\rho} J_{\mu\sigma} - \delta_{\mu\rho} J_{\nu\sigma} - \delta_{\sigma\mu} J_{\rho\nu} + \delta_{\sigma\nu} J_{\rho\mu} \\ i [P_\mu, J_{\mu\nu}] &= \delta_{\mu\rho} P_\sigma - \delta_{\mu\sigma} P_\rho \\ [P_\mu, P_\nu] &= 0, \end{aligned}$$

que é a álgebra de Lie do grupo de Poincaré.

¹³Este operador depende de x apenas através dos operadores $A_\mu(x)$ e $\psi(x)$.

tal forma que todo o vetor de base é uma autofunção de todos os P_μ 's com autovalor p_μ

$$P_\mu |\Psi_n\rangle = p_\mu^{(n)} |\Psi_n\rangle \quad (1.48)$$

tal que todo $|\Psi_n\rangle$ descreve um estado estacionário e, portanto, terá energia e momento definidos atribuídos. Como a energia e o momento não caracterizam unicamente um estado, a especificação de outros números quânticos para essa caracterização única devem ser conferidos aos estados $|\Psi_n\rangle$. Estes outros autovalores, juntamente com $P_\mu^{(n)}$, formarão um conjunto completo de observáveis denotados por α . Assim, o conjunto completo de estados é $|p^{(n)}, \alpha\rangle$, em que α representa o número finito de observáveis que caracterizam os vetores de base, de tal forma que os estados físicos podem ser expressos em termos de autovetores do quadrimomento como

$$P_\mu |p^{(n)}, \alpha\rangle = p_\mu^{(n)} |p^{(n)}, \alpha\rangle \quad (1.49)$$

Assim, na representação dos momentos, o elemento de matriz do comutador de $F(x)$ e P_μ pode ser reescrito como

$$i \langle \Psi_a | [F(x), P_\mu] | \Psi_b \rangle = i (p_\mu^{(b)} - p_\mu^{(a)}) \langle \Psi_a | F(x) | \Psi_b \rangle, \quad (1.50)$$

ou seja,

$$i \partial_\mu \langle \Psi_a | F(x) | \Psi_b \rangle = - (p_\mu^{(a)} - p_\mu^{(b)}) \langle \Psi_a | F(x) | \Psi_b \rangle \quad (1.51)$$

portanto

$$\langle \Psi_a | F(x) | \Psi_b \rangle = e^{-i(p^{(b)} - p^{(a)}) \cdot x} \langle \Psi_a | F(0) | \Psi_b \rangle \quad (1.52)$$

em que $F(0)$ é o operador $F(x)$ avaliado no ponto $x = 0$. Esta expressão fornece a dependência em x do elemento de matriz de um operador de Heisenberg arbitrário em uma representação na qual os P_μ 's são diagonais.

São ainda admitidos mais três pressupostos relativos aos estados $|\Psi_a\rangle$

- existe um único estado de vácuo, $|\Psi_0\rangle$, que é invariante sob todas as transformações de Lorentz¹⁴

$$U(a, \Lambda) |\Psi_0\rangle = |\Psi_0\rangle \quad (1.53)$$

e este estado é o estado de menor energia, $p_0^{(0)} = 0$;

- os estados deste sistema são tais que *nenhum* estado $|\Psi_n\rangle$ cujo quadrivetor momento $P_\mu^{(n)}$ satisfaz $P_\mu^{(n)} P^{\mu(n)} < 0$ ou $P_\mu^{(n)} P^{\mu(n)} > 0$ em que $P_0^{(n)} < 0$ existe;
- existe um conjunto de estados $|p^{(n)}, \alpha\rangle$ com $P_\mu^{(n)} P^{\mu(n)} \geq 0$, $P_0^{(n)} \geq 0$ que é completo dentro do espaço de Hilbert de estados físicos realizáveis pelo sistema.

¹⁴Na eletrodinâmica quântica a exigência $p_\mu^{(0)} = 0$ não é suficiente para caracterizar o estado de vácuo de forma única devido à liberdade de *gauge*, de tal forma que existem infinitos estados de vácuo que diferem entre si apenas por uma transformação de *gauge*. Quando o estudo da QED for realizado, uma escolha de *gauge* será tomada de tal forma que será assumido que essa escolha não contradiga este postulado.

Portanto, seja um campo escalar neutro na descrição de Heisenberg, $\Phi(x)$, que pode representar um campo de uma partícula elementar. A função de propagação é definida pelo valor esperado no vácuo do ordenamento temporal do produto dos operadores $\Phi(x)\Phi(y)$

$$\langle \Psi_0 | T(\Phi(x)\Phi(y)) | \Psi_0 \rangle \equiv \Delta(x-y) \quad (1.54)$$

e para a obtenção de sua forma geral em termos da representação espectral de Källén-Lehmann os postulados:

- de invariância relativística;
- das condições espectrais, ou a existência de um vácuo único $|\Psi_0\rangle \equiv |0\rangle$ em que o zero da energia é escolhido tal que $P^0|\Psi_0\rangle = 0$. A invariância de Lorentz do vácuo assegura que $|\Psi_0\rangle$ aparece como um estado de vácuo para todos os observadores em todos os sistemas invariantes de Lorentz;
- de que existem estados estáveis de partícula única em que $P_\mu^{(n)}P^{\mu(n)} = m_i^2$ para cada partícula estável de massa m_i . O vácuo e os estados de partícula única formam um espectro discreto em P^μ (também chamado de espectro de massa),

devem ser admitidos de forma a permitir inferir propriedades gerais acerca da estrutura deste propagador.

Contudo, uma forma espectral para o propagador pode ser obtida a partir do produto ordinário entre dois operadores de campo. Seja então o valor esperado no vácuo dos produtos de operadores de campo, também chamada de função de distribuição de Wightman [36], $W(x, y)$,

$$W(x, y) \equiv \langle \Psi_0 | \Phi(x)\Phi(y) | \Psi_0 \rangle, \quad (1.55)$$

que foi o primeiro a estudar as funções definidas pelo valor esperado no vácuo de produtos de operadores de Heisenberg. A covariância de Lorentz da teoria, ou seja, o fato de que sob transformações de Lorentz não-homogêneas¹⁵

$$U(a, \Lambda)\Phi(x)U^{-1}(a, \Lambda) = \Phi(\Lambda x + a) \quad (1.56)$$

e

$$U(a, \Lambda)|\Psi_0\rangle = |\Psi_0\rangle \quad (1.57)$$

em que $U(a, \Lambda)$ é um operador unitário, implicando em

$$\langle \Psi_0 | \Phi(x)\Phi(y) | \Psi_0 \rangle = \langle U(a, \Lambda)\Psi_0 | U(a, \Lambda)\Phi(x)\Phi(y) | \Psi_0 \rangle, \quad (1.58)$$

¹⁵Uma transformação de Lorentz não-homogênea é definida por

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a_\mu$$

ou seja, como o produto de uma translação por um quadri vetor real a_μ e uma transformação de Lorentz homogênea Λ , a translação sendo feita depois da transformação homogênea de Lorentz.

ou seja,

$$\langle \Psi_0 | \Phi(x) \Phi(y) | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \Phi(\Lambda x + a) \Phi(\Lambda y + a) | \Psi_0 \rangle \quad (1.59)$$

que, para o caso particular em que se considere apenas translações ($\Lambda = 1$), então (1.59) assegura que, para deslocamentos arbitrários,

$$W(x, y) = W(x + a, y + a) \quad (1.60)$$

de forma que $W(x, y)$ é invariante sob translações, o que pode ser reescrito evidenciando que a função de distribuição $W(x, y)$ depende apenas da diferença entre as coordenadas x e y [37]; explicitamente¹⁶

$$W(x, y) = W(x - y), \quad (1.62)$$

ao passo que a invariância sob transformações homogêneas de Lorentz próprias¹⁷ asseguram que

$$W(x - y) = W(\Lambda(x - y)) \quad (1.63)$$

em que W é, portanto, uma função somente dos intervalos tipo tempo, tipo espaço ou tipo luz.

As propriedades da função de distribuição $W(x - y)$ que advém das condições espectrais são obtidas a partir da inserção da relação de completeza

$$\sum_{|p^{(n)}, \alpha\rangle} |p^{(n)}, \alpha\rangle \langle p^{(n)}, \alpha| = 1 \quad (1.64)$$

na expressão (1.55), obtendo

$$W(x - y) = \sum_{|p^{(n)}, \alpha\rangle} \langle \Psi_0 | \Phi(x) | p^{(n)}, \alpha \rangle \langle p^{(n)}, \alpha | \Phi(y) | \Psi_0 \rangle \quad (1.65)$$

em que a invariância translacional assegura as igualdades

$$\langle \Psi_0 | \Phi(x) | p^{(n)}, \alpha \rangle = e^{-ip^{(n)} \cdot x} \langle \Psi_0 | \Phi(0) | p^{(n)}, \alpha \rangle \quad (1.66)$$

e

$$\langle p^{(n)}, \alpha | \Phi(y) | \Psi_0 \rangle = e^{ip^{(n)} \cdot y} \langle p^{(n)}, \alpha | \Phi(0) | \Psi_0 \rangle \quad (1.67)$$

¹⁶Em particular, existe uma constante chamada C tal que

$$\langle \Psi_0 | \Phi(f) | \Psi_0 \rangle = C \int f(x) d^4x \quad (1.61)$$

ou seja, a função de um ponto $\langle \Psi_0 | \Phi(f) | \Psi_0 \rangle$ é igual à constante C . É possível então subtrair C do campo, obtendo outro campo em que a função de um ponto seja nula.

¹⁷Transformações homogêneas de Lorentz próprias são as transformações geradas continuamente a partir da identidade e que têm determinante igual a $+1$. As transformações de Lorentz impróprias são aquelas que incluem reflexões e têm determinante igual a -1 .

de forma que a expressão (1.65) se converte em

$$W(x-y) = \sum_{|p^{(n)}, \alpha\rangle} |\langle \Psi_0 | \Phi(0) | p^{(n)}, \alpha \rangle|^2 e^{-ip^{(n)} \cdot (x-y)} \quad (1.68)$$

em que o somatório compreende todos os estados fisicamente distintos (ou seja, α) e todos os valores de seus respectivos energia-momento (ou seja, $p^{(n)}$). É conveniente reescrever esta expressão em termos de uma função de densidade espectral $\rho(p^{(n)})$.

A identidade

$$\sum_{|\alpha\rangle} = \int d^4p \sum_{|\alpha\rangle} \delta(p^{(n)} - p) \quad (1.69)$$

é tal que sua soma é uma função escalar do quadrivetor $P^{\mu 18}$, e portanto pode depender apenas de p^2 e de p^0 , em que necessariamente $p^2 \geq 0$ e $p^0 \geq 0$, que são as condições espectrais. Isto pode ser adequadamente expresso por meio da função de Heaviside por $\theta(p^0)$ e $\theta(p^2)$. A energia-momento total $P_\mu^{(n)}$ do estado $|p^{(n)}, \alpha\rangle$ define a massa $M^{(n)}$ do sistema via relação

$$M^{(n)} = P_\mu^{(n)} P^{\mu(n)} \quad (1.70)$$

em que a massa $M^{(n)}$ corresponde à energia total do estado no referencial de repouso do sistema.

Assim, a inserção da identidade (1.69) na expressão (1.68) permite então definir a quantidade positiva-definida $\rho(p^2)$

$$\theta(p^0) \theta(p^2) \rho(p^2) \equiv (2\pi)^3 \sum_{|\alpha\rangle} \delta(p^{(n)} - p) |\langle \Psi_0 | \Phi(0) | p^{(n)}, \alpha \rangle|^2 \quad (1.71)$$

em que $\rho(p^2)$ é conhecida como *função peso* ou *função de densidade espectral*.

A função de densidade espectral $\rho(p^2)$ tem, por definição, a propriedade

$$\rho(p^2) \geq 0 \quad (1.72)$$

que é diferente de zero apenas para $p^2 > 0$, o que corresponde ao fato de que o quadrivetor energia-momento p^μ deve ser sempre tipo tempo.

Em uma teoria relativística, sempre que existe um estado com quadrimomento p^μ bem definido, existe também outro estado com quadrimomento bem definido $p'^\mu = \Lambda^\mu_\nu p^\nu$ obtido por meio da aplicação da transformação de Lorentz Λ e que, devido à causalidade, forma um hi-

¹⁸A transformação de Lorentz homogênea mais geral entre dois sistemas de coordenadas é a transformação linear

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu,$$

que preserva a forma quadrática $x^\mu x_\mu$, ou seja, $x^2 = x'^2$. Uma vez que x^μ é um quadrivetor, qualquer função $f(x'^\mu)$ que seja invariante sob transformações de Lorentz homogêneas: $f(x'^\mu) = f(\Lambda^\mu_\nu x^\nu)$ será uma função apenas de x^2 , que é a forma preservada por transformações de Lorentz, ou seja, $f(x^2)$. Esta análise pode ser estendida para qualquer quadrivetor.

perboloide no cone de luz¹⁹, caracterizado por uma massa $m > 0$. Assim, os possíveis valores de p^μ são caracterizados pelos possíveis valores de m por meio da relação de dispersão $E^2 = \vec{p}^2 + m^2$, e que define o espectro de massa da teoria.

O único estado com momento zero é o estado fundamental (o vácuo). Então existe um *gap* de massa até que o estado em que $p^2 = m^2$ seja atingido - o que é interpretado como o estado de uma única partícula física. Em geral, o espectro de massa consiste de uma contribuição discreta e uma contribuição contínua; a contribuição discreta corresponde aos estados de partícula única e estados ligados, enquanto a contribuição contínua representa os estados de espalhamento. O espectro contínuo se inicia quando existe a possibilidade de espalhamento, o que significa que a energia é grande o suficiente para que dois sistemas assintoticamente independentes possam existir. Deste modo, dado um estado de massa m , espera-se ter estados com dois sistemas quase independentes de massa m e momento relativo arbitrário, gerando o espectro contínuo de estados de espalhamento com todos os possíveis p^2 excedendo $(2m)^2$. Portanto, o espectro contínuo estende-se desde a massa $2m$ até o infinito, em que m é o *gap* de massa.

Uma função de densidade espectral é uma distribuição em termos de energia que ilustra a contribuição de todos os estados que podem ser acessíveis a um determinado sistema. Assim, na hipótese de restringir os estados a seu referencial de repouso, em que o momento espacial é nulo, o espectro de energia concorda com o espectro de massa. Então, o estado de menor energia será o estado de partícula única que tem um valor discreto da massa invariante m^2 . Na ausência de estados ligados, existirá um limiar em $4m^2$ tal que um contínuo de estados de duas partículas se inicia e se estende até o infinito. Nestes estados contínuos em que predomina a interação entre muitos corpos (por exemplo, interação elétron-elétron, interação elétron-fóton...) podem ocorrer as chamadas ressonâncias, que se manifestam por picos na função de densidade espectral, e são resultado de muitas partículas excitadas com mesmo momento e mesma energia; estes estados estão acoplados de modo que seus autoestados são combinações lineares dos estados originais. Assim, ao invés de se apresentarem por meio de valores discretos na função de densidade espectral, estes estados se manifestam por picos de certa largura, em que a largura reflete a intensidade da interação.

Estes estados degenerados localizados em uma determinada faixa de energia indicam a presença de uma quase-partícula, ou partícula vestida, uma vez que a interação impede que esta partícula tenha uma massa definida e seja estável, e adiciona um termo de autoenergia à função espectral, tal que a parte real da autoenergia muda a posição do pico (ou seja, altera o valor de energia para o qual o pico vai se expressar na função de densidade espectral), enquanto a parte imaginária muda o tempo de vida desta partícula vestida [38].

Assim, a função de distribuição de Wightman é reescrita em termos da função de densidade

¹⁹A norma dos quadrivetores x^μ permite estes que sejam separados em três grupos:

- i. $x^2 > 0$, em vetores tipo tempo;
- ii. $x^2 = 0$, em vetores tipo luz ou vetores nulos;
- iii. $x^2 < 0$, em vetores tipo espaço,

em que os pontos tipo luz formam a superfície de um cone tridimensional no espaço quadridimensional denominado cone de luz, ao passo que vetores tipo tempo formam hiperboloides dentro do cone de luz. Vetores tipo espaço também formam hiperboloides, contudo fora do cone de luz e são, portanto, não causais.

espectral como

$$W(x-y) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^4p \theta(p^0) \theta(p^2) \rho(p) e^{-ip \cdot (x-y)} \quad (1.73)$$

em que a soma sobre os vetores $p^{(n)}$ está implícita por uma integração sobre d^4p . Reescrevendo $\theta(p^2)$ como

$$\theta(p^2) = \int_0^\infty dm^2 \delta(p^2 - m^2) \quad (1.74)$$

a função de distribuição de Wightman adquire a forma

$$W(x-y) = i \int_0^\infty dm^2 \rho(m^2) \left[\frac{-i}{(2\pi)^3} \int d^4p \theta(p^0) \delta(p^2 - m^2) e^{-ip \cdot (x-y)} \right] \quad (1.75)$$

em que o termo entre colchetes é a função singular $\Delta^{(+)}(x-y; m^2)$ para a massa m ; logo

$$W(x-y) = i \int_0^\infty dm^2 \rho(m^2) \Delta^{(+)}(x-y; m^2) \quad (1.76)$$

de tal forma que o produto temporalmente ordenado de $\Phi(x) \Phi(y)$ é obtido pela combinação da expressão

$$W(x-y) = i \int_0^\infty dm^2 \rho(m^2) \Delta^{(+)}(x-y; m^2), \text{ para } x_0 > y_0 \quad (1.77)$$

com a expressão

$$W(y-x) = -i \int_0^\infty dm^2 \rho(m^2) \Delta^{(-)}(x-y; m^2), \text{ para } y_0 > x_0 \quad (1.78)$$

portanto,

$$\langle \Psi_0 | T(\Phi(x) \Phi(y)) | \Psi_0 \rangle = W(x-y) + W(y-x) = \int_0^\infty dm^2 \rho(m^2) \Delta_F(x-y; m^2) \quad (1.79)$$

uma vez que $\Delta_F(x-y; m^2) = 2i [\theta(x_0 - y_0) \Delta^{(+)}(x-y; m^2) - \theta(y_0 - x_0) \Delta^{(-)}(x-y; m^2)]$. Aqui, Δ_F é o propagador (ou função de Green) para partículas de spin 0 e massa m .

A transformada de Fourier de (1.79) fornece o propagador completo

$$\begin{aligned} \Delta_F(k^2) &= \int d^4x e^{-ik \cdot (x-y)} \langle \Psi_0 | T(\Phi(x), \Phi(y)) | \Psi_0 \rangle \\ &= \int_0^\infty dm^2 \rho(m^2) \int d^4x e^{-ik \cdot (x-y)} \Delta_F(x-y; m^2) \end{aligned} \quad (1.80)$$

com a identidade

$$\int d^4x e^{-ik \cdot (x-y)} \Delta_F(x-y; m^2) = \frac{1}{k^2 - m^2 + i\epsilon} \quad (1.81)$$

obtém-se

$$\Delta_F(k^2) = \int_0^\infty dm^2 \frac{\rho(m^2)}{k^2 - m^2 + i\epsilon}, \quad (1.82)$$

que é a representação de Källén-Lehmann para o propagador completo.

A relação de dispersão pode ser obtida por meio do seguinte processo: seja a função $\Delta'_F(\zeta)$ da variável complexa ζ definida por

$$\Delta'_F(\zeta) = \int_0^\infty dm^2 \frac{\rho(m^2)}{\zeta - m^2}, \quad (1.83)$$

uma vez que $\rho(m^2)$ é real, permite então a identidade

$$\overline{\Delta'_F(\zeta)} = \Delta'_F(\bar{\zeta}). \quad (1.84)$$

A quantidade de interesse físico $\Delta_F(k^2)$ pode ser obtida a partir de $\Delta'_F(\zeta)$ com a tomada do limite $\zeta \rightarrow k^2 + i\epsilon$, ou seja,

$$\lim_{\zeta \rightarrow k^2 + i\epsilon} \Delta'_F(\zeta) = \Delta_F(k^2). \quad (1.85)$$

Por outro lado, expressar ζ como $\zeta = \xi + i\epsilon$ implica em

$$\begin{aligned} \Delta'_F(\xi + i\epsilon) &= \int_0^\infty dm^2 \frac{\rho(m^2)}{(\xi + i\epsilon) - m^2} = \int_0^\infty dm^2 \frac{\rho(m^2)}{(\xi - m^2) + i\epsilon} \\ &= \int_0^\infty dm^2 \frac{\rho(m^2)}{(\xi - m^2) + i\epsilon} \frac{(\xi - m^2) - i\epsilon}{(\xi - m^2) - i\epsilon} \\ &= \int_0^\infty \frac{dm^2 \rho(m^2)}{(\xi - m^2)^2 + \epsilon^2} (\xi - m^2) - i \int_0^\infty \frac{dm^2 \rho(m^2)}{(\xi - m^2)^2 + \epsilon^2} \epsilon, \end{aligned} \quad (1.86)$$

donde conclui-se que $\text{Im}(\Delta'_F(\zeta))$ é diferente de zero apenas quando $\text{Im}(\zeta) \neq 0$. Portanto, a função $\Delta'_F(\zeta)$ não tem zeros complexos; zeros serão possíveis apenas ao longo do eixo real, em que $\xi > 0$.

A descontinuidade de $\Delta'_F(\zeta)$ ao longo da linha de ramificação

$$\Delta'_F(\xi + i\epsilon) - \Delta'_F(\xi - i\epsilon) = \int_0^\infty \frac{dm^2 \rho(m^2)}{(\xi + i\epsilon) - m^2} - \int_0^\infty \frac{dm^2 \rho(m^2)}{(\xi - i\epsilon) - m^2}, \quad (1.87)$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
2i \operatorname{Im}(\Delta'_F(\xi + i\varepsilon)) &= \int_0^\infty \frac{dm^2 \rho(m^2)}{(\xi - m^2) + i\varepsilon} \frac{(\xi - m^2) - i\varepsilon}{(\xi - m^2) - i\varepsilon} \\
&\quad - \int_0^\infty \frac{dm^2 \rho(m^2)}{(\xi - m^2) - i\varepsilon} \frac{(\xi - m^2) + i\varepsilon}{(\xi - m^2) + i\varepsilon} \\
&= -2i \int_0^\infty dm^2 \frac{\rho(m^2)}{(\xi - m^2)^2 + \varepsilon^2} \varepsilon
\end{aligned} \tag{1.88}$$

de tal forma que o limite $\varepsilon \rightarrow 0$ conduz a $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{(\xi - m^2)^2 + \varepsilon^2}$. Todavia, a função delta de Dirac pode ser definida como o limite

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \pi \delta(x) \tag{1.89}$$

o que torna possível estabelecer que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} 2i \operatorname{Im}(\Delta'_F(\xi + i\varepsilon)) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[-2i \int_0^\infty dm^2 \frac{\rho(m^2)}{(\xi - m^2)^2 + \varepsilon^2} \varepsilon \right] \tag{1.90}$$

portanto

$$2i \operatorname{Im}(\Delta'_F(\xi)) = -2i\pi \int_0^\infty dm^2 \rho(m^2) \delta(\xi - m^2), \tag{1.91}$$

ou seja

$$\operatorname{Im}(\Delta'_F(\xi)) = -\pi \theta(\xi) \rho(\xi) \tag{1.92}$$

onde a paridade da função delta de Dirac e a função teta de Heaviside foram convenientemente empregadas. A descontinuidade de $\Delta'_F(\zeta)$ ao longo da linha de ramificação não apresenta problemas de convergência; a descontinuidade é puramente imaginária. Desta feita,

$$\operatorname{Im}(\Delta'_F(\xi)) = -\pi \rho(\xi) \tag{1.93}$$

Ora, em tal limite ainda é possível generalizar (uma vez que $\zeta \rightarrow k^2 + i\varepsilon$ e $\zeta = \xi + i\varepsilon$)

$$\rho(k^2) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im}(\Delta'_F(k^2)), \tag{1.94}$$

e estabelecer

$$\Delta_F(k^2) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dm^2 \frac{\operatorname{Im}(\Delta'_F(m^2))}{m^2 - k^2 - i\varepsilon} \tag{1.95}$$

ou seja, o propagador completo (que é uma função real) pode ser determinado uma vez conhecida sua parte imaginária - a também chamada *relação de dispersão* - obtida como uma exata

consequência dos pressupostos de invariância relativística e condições espectrais de uma teoria de campos.

As condições assintóticas, introduzidas por Lehmann, Symanzik e Zimmermann [20], é uma versão aperfeiçoada da hipótese de chaveamento adiabático das interações. De forma geral, as condições assintóticas exigem que o operador de campo $\Phi(x)$ se comporte como um campo livre em $t \rightarrow \pm\infty$, para que as partículas em um evento de espalhamento não interajam umas com as outras e se propaguem apenas sob influência de sua autointeração.

Desta forma, para que uma interação ocorra, é preciso procurar por operadores que criem estados independentes de partículas, em que cada partícula se propague com sua massa física (das premissas anteriores, é assumido que estes estados formam um conjunto completo). Assim, partículas não interagentes são descritas por campos livres, ao passo que estados de partícula única são gerados a partir do vácuo por operadores de criação que aparecem em uma expansão dos campos livres, de tal forma que a aplicação sucessiva de n operadores de criação conduz ao surgimento de estados de n partículas. A interpretação de partícula é derivada a partir do espectro do operador energia-momento P^μ , enquanto a álgebra dos operadores de criação e aniquilação é derivada a partir das relações de comutação e anticomutação.

O presente objetivo é determinar operadores que criem estados de partícula única físicos para campos em interação [39]. Desta feita, sejam o campo $\Phi(x)$ que satisfaz a equação

$$(\square + m_0^2) \Phi(x) = j(x) \quad (1.96)$$

em que a corrente $j(x)$ é um operador escalar construído a partir da interação dos campos com $\Phi(x)$ localmente em x .

O operador que constrói estados de partícula única física é denotado por $\Phi^{\text{in}}(x)$, também chamado de campo assintótico, e é formado a partir de um funcional de $\Phi(x)$ e quaisquer outros campos presentes em $j(x)$. Para assegurar que $\Phi^{\text{in}}(x)$ pode ser interpretado como um operador que cria uma partícula física escalar e livre a partir do vácuo, se atribui a este operador propriedades semelhantes àquelas atribuídas aos campos livres

- $\Phi^{\text{in}}(x)$ é invariante sob translações e transformações de Lorentz da mesma forma que $\Phi(x)$, o que garante a covariância dos estados de partícula única formados por $\Phi^{\text{in}}(x)$.
Em particular

$$[P^\mu, \Phi^{\text{in}}(x)] = -i \frac{\partial \Phi^{\text{in}}(x)}{\partial x_\mu}; \quad (1.97)$$

- $\Phi^{\text{in}}(x)$ é descrito por uma equação de partícula livre com uma massa física m

$$(\square + m^2) \Phi^{\text{in}}(x) = 0. \quad (1.98)$$

As equações (1.97) e (1.98) mostram que $\Phi^{\text{in}}(x)$ cria um estado de partícula única físico a

partir do vácuo. De forma explícita, considere um autoestado arbitrário $|n\rangle$ tal que

$$P_\mu |n\rangle = p_\mu^{(n)} |n\rangle \quad (1.99)$$

de tal maneira que, ao formar o elemento de matriz com o estado de vácuo $|\Psi_0\rangle$

$$-i \frac{\partial}{\partial x_\mu} \langle n | \Phi^{\text{in}}(x) | \Psi_0 \rangle = \langle n | [P_\mu, \Phi^{\text{in}}(x)] | \Psi_0 \rangle = p_\mu^{(n)} \langle n | \Phi^{\text{in}}(x) | \Psi_0 \rangle \quad (1.100)$$

que, com uma iteração desta operação conduz a

$$(\square + m^2) \langle n | \Phi^{\text{in}}(x) | \Psi_0 \rangle = (m^2 - p^{(n)2}) \langle n | \Phi^{\text{in}}(x) | \Psi_0 \rangle = 0 \quad (1.101)$$

e, portanto, os estados produzidos por $\Phi^{\text{in}}(x)$ a partir do vácuo são aqueles em que $p^{(n)2} = m^2$, ou seja, estados de uma partícula física de massa m .

Para expressar $\Phi(x)$ em termos de $\Phi^{\text{in}}(x)$, parte-se das expressões (1.96) e (1.98). Explícitamente, uma solução geral para uma equação diferencial não homogênea tal qual (1.96) é dada por

$$\Phi(x) = \Phi_0(x) + \int d^4y G(x-y) j(y) \quad (1.102)$$

em que $\Phi_0(x)$ é a função que satisfaz à equação homogênea, no caso a equação (1.98), e é por isso que se pode, imediatamente, identificar $\Phi_0(x) = \Phi^{\text{in}}(x)$

$$\Phi(x) = \Phi^{\text{in}}(x) + \int d^4y G(x-y) j(y) \quad (1.103)$$

que, para ser válida no intervalo de interesse, ou seja, para $t \rightarrow -\infty$, deve ser admitido que

$$\Phi(x) = \Phi^{\text{in}}(x) - \int d^4y G(x-y) \theta(t'-t) j(y) \quad (1.104)$$

donde se identifica a função de Green retardada

$$G(x-x') \theta(t'-t) = \Delta_{\text{ret}}(x-y; m) \quad (1.105)$$

e se obtém por fim a expressão

$$\Phi(x) = \Phi^{\text{in}}(x) - \int d^4y \Delta_{\text{ret}}(x-y; m) j(y) \quad (1.106)$$

Assim como o campo assintótico $\Phi^{\text{in}}(x)$, que descreve um campo livre em $t \rightarrow -\infty$, existe também o campo assintótico $\Phi^{\text{out}}(x)$ que, por sua vez, descreve o campo livre em $t \rightarrow +\infty$. Os campos assintóticos $\Phi^{\text{in}}(x)$ e $\Phi^{\text{out}}(x)$ tiveram sua primeira aparição no formalismo de Yang-Feldman [40], onde foram observados como sendo campos livres que produzem apenas estados

de uma partícula a partir do vácuo. Assim, as desejadas condições assintóticas têm a forma

$$\Phi(x) \rightarrow \Phi^{\text{in}}(x), \text{ quando } t \rightarrow -\infty \quad (1.107)$$

e

$$\Phi(x) \rightarrow \Phi^{\text{out}}(x), \text{ quando } t \rightarrow +\infty. \quad (1.108)$$

O campo assintótico $\Phi^{\text{out}}(x)$ apresenta propriedades análogas àquelas atribuídas ao campo assintótico $\Phi^{\text{in}}(x)$, baseado na ideia geral de que em $t \rightarrow \pm\infty$ todas as partículas estão tão distantes umas das outras que não sentem ou exercem quaisquer forças entre si. Desta maneira, a dinâmica em $t \rightarrow \pm\infty$ se reduz à dinâmica das partículas livres com o auxílio dos campos $\Phi^{\text{in}}(x)$ e $\Phi^{\text{out}}(x)$. Por fim, para expressar $\Phi(x)$ em termos de $\Phi^{\text{out}}(x)$, em analogia ao caso de $\Phi^{\text{in}}(x)$,

$$\Phi(x) = \Phi^{\text{out}}(x) - \int d^4y \Delta_{\text{adv}}(x-y; m) j(y) \quad (1.109)$$

em que $\Delta_{\text{adv}}(x-y; m)$ é a função de Green avançada que satisfaz

$$(\square_x + m^2) \Delta_{\text{adv}}(x-y; m) = \delta^4(x-y) \quad (1.110)$$

e

$$\Delta_{\text{adv}}(x-y; m) = 0, x_0 - y_0 > 0. \quad (1.111)$$

Por fim, é válido ressaltar uma importante propriedade da função de densidade espectral $\rho(p^2)$, obtida a partir do espectro dos estados físicos. A expressão (1.71) mostra que $\rho(p^2)$ não é nula somente para aqueles valores de seu argumento p^2 que correspondem ao quadrado da massa total de algum estado físico; além disso, este estado deve ter as mesmas propriedades de transformação que Φ , uma vez que de outra forma o elemento de matriz $\langle \Psi_0 | \Phi(0) | p^{(n)}, \alpha \rangle$ é nulo. Então, para o presente exemplo de uma partícula escalar, os estados $|p^{(n)}, \alpha\rangle$ que podem contribuir são: em primeiro lugar, os estados de partícula única, o que leva a uma contribuição isolada para $\rho(p^2)$ em $p^2 = \mu^2$; em segundo lugar, os estados de duas partículas, para os quais $p^{(n)} = p_1 + p_2$, de tal forma que estes estados contribuem para $\rho(p^2)$ somente quando $p^2 \geq 4\mu^2$; em terceiro lugar, os estados de três partículas, contribuindo apenas para $p^2 \geq 9\mu^2$, e assim sucessivamente. Também é útil ressaltar que os estados de mais de uma partícula sofrem os efeitos da interação, logo não devem ser esperados valores discretos para tais estados no espectro de massa, mas sim um contínuo.

A contribuição para ρ dos estados de partícula única são especialmente interessantes. Para partículas não interagentes, o campo Φ obedece à equação de Klein-Gordon-Fock, o que pode ser realizado somente se $\rho(p^2) = \delta(p^2 - \mu^2)$. Esta então deve ser a contribuição dos estados de partícula única, porque para campos livres Φ é linear nos operadores de criação e aniquilação das partículas ($\Phi = \Phi^{\text{in}}(x) = \Phi^{\text{out}}$), e falha em conectar o vácuo com quaisquer outros estados que não sejam os estados de partícula única. Separando explicitamente a contribuição de uma

partícula para ρ por meio da expressão

$$\rho(p^2) = \delta(p^2 - \mu^2) + \sigma(p^2) \quad (1.112)$$

em que $\sigma(p^2)$ é não nula apenas para $p^2 \geq 4\mu^2$ e, assim como $\rho(p^2)$, $\sigma(p^2)$ é não negativo.

Por fim, a representação de Källén-Lehmann é um exemplo de uma relação de dispersão. Em suma [41], é possível defini-la como uma função de uma variável complexa z :

$$(2\pi)^4 \Delta_F(z) = \frac{1}{\mu^2 - z} + \int_{4\mu^2}^{\infty} da^2 \frac{\sigma(a^2)}{a^2 - z} \quad (1.113)$$

tal que esta função é analítica no plano complexo z , a partir do ponto de ramificação em $z = 4\mu^2$ até $+\infty$, com exceção do polo em $z = \mu^2$. De fato, existem outros pontos de ramificação sobrepostos nos pontos de descontinuidade de σ , isto é, em $z = (n\mu)^2$, $n = 3, 4, \dots$. Em outras palavras, a função original é o valor de contorno de uma função analítica definida pela representação de Källén-Lehmann; esta representação permite continuar $\Delta_F(k^2)$ analiticamente dentro do plano complexo, onde esta estrutura possui a singularidade descrita. A posição dos polos indica a massa (ao quadrado) da partícula estável; as posições dos pontos de ramificação indicam os limiares de estados contínuos tendo as mesmas propriedades de transformação que a da partícula discreta cujo propagador está sendo considerado; o resíduo no polo é determinado por meio das condições assintóticas; a descontinuidade através do corte é determinada em (1.94) sem que qualquer problema de convergência seja encontrado, uma vez que a descontinuidade é puramente imaginária.

É diante deste rico alicerce que será desenvolvido o estudo da eletrodinâmica quântica não comutativa em $(1 + 1)$ e $(2 + 1)$ – dimensões na representação de Källén-Lehmann.

1.1.4 A eletrodinâmica quântica não comutativa em $(1 + 1)$ – e $(2 + 1)$ – dimensões

Todo o formalismo desenvolvido nas seções anteriores permite estudar como o espaço-tempo não comutativo afeta a massa dos fótons na eletrodinâmica quântica em $(1 + 1)$ – e $(2 + 1)$ – dimensões, doravante generalizadas por NCQED.

Este estudo inicia-se com uma discussão geral acerca das propriedades e simetrias da NCQED em uma dimensão genérica ω . Desta feita, com a aplicação do mapa de Seiberg-Witten será possível determinar uma expressão para a ação da NCQED₂ e NCQED₃, e conseqüentemente expressões para as suas respectivas lagrangianas, ambas calculadas já considerando a dimensionalidade de seu respectivo espaço-tempo. A partir destas expressões, as equações de Euler-Lagrange serão obtidas, e o formalismo de Yang-Feldman será usado para construir as soluções assintóticas a partir destas equações de movimento. Em seguida, uma forma geral para o propagador completo do fóton na representação espectral de Källén-Lehmann será definida em termos de sua função densidade espectral. Em conseqüência, a contribuição de 1 e 2 partículas

para a função de densidade espectral será calculada. Por fim, os resultados serão comentados e as considerações finais serão apresentadas.

1.1.5 O mapa de Seiberg-Witten na NCQED

Precedendo o estudo da eletrodinâmica quântica em um espaço-tempo não comutativo em $(1 + 1)$ – e $(2 + 1)$ – dimensões por meio da representação espectral de Källén-Lehmann, é construtivo rever alguns pontos sobre a teoria não comutativa sob o olhar da Teoria Quântica de Campos: em uma teoria não comutativa, as coordenadas do espaço-tempo satisfazem as relações de comutação

$$[x^\mu, x^\nu] = i\theta^{\mu\nu} \quad (1.114)$$

em que $\theta^{\mu\nu}$ é uma matriz real, constante e antissimétrica. A conservação do tensor energia-momento segue da invariância translacional no espaço em que se define o produto de Moyal. Usualmente estas relações de comutação violam a invariância de Lorentz, uma característica bastante desejada quando se busca um entendimento mais profundo sobre a estrutura do espaço-tempo. Entretanto, tanto a simetria de Lorentz quanto a simetria translacional são preservadas em um espaço-tempo de $(1 + 1)$ – dimensões.

Em investigações sobre campos escalares, a relação de incerteza entre as coordenadas temporal e espacial implica na não-unitariedade de uma Teoria Quântica de Campos [42], [43], [44]. Em outras palavras, uma Teoria Quântica de Campos não comutativa com $\theta^{0i} \neq 0$ não satisfaz as “regras de corte de Cutkosky” o que, sem grande rigor, pode ser entendido que uma forma de preservar a unitariedade da teoria não comutativa é impor $\theta^{00} = \theta^{i0} = 0$ e $\theta^{ij} \neq 0$. Portanto, a Teoria Quântica de Campos não comutativa em $(1 + 1)$ – dimensões são não-unitárias. Contudo, a simplicidade do modelo de Schwinger em detrimento de outras teorias de *gauge* é motivação suficiente para estudar este particular caso. Outrora mencionado, uma das características mais interessantes dos estudos sobre a teoria não comutativa foi a descoberta de que uma teoria de *gauge* não comutativa é equivalente a uma contraparte ordinária definida no espaço-tempo comutativo, e estas duas descrições são adequadamente relacionadas via mapa de Seiberg-Witten.

Assim, para dar início ao estudo efetivo da NCQED em $(1 + 1)$ – e $(2 + 1)$ – dimensões será considerada a expansão em θ por intermédio do mapa de Seiberg-Witten inicialmente em uma NCQED ω – dimensional. Deste modo, em posse de um resultado geral, particularizar para os casos de interesse. A ideia deste procedimento é, portanto, mapear uma ação escrita em termos dos campos não comutativos em uma nova ação escrita em termos dos campos ordinários (comutativos). É interessante perceber, ainda, a notável consequência da não trivialidade do produto estrela: a teoria ordinária adquire uma estrutura não-abeliana.

Portanto, seja uma ação para a NCQED ω – dimensional definida por

$$S \equiv \int d^\omega x \left[-\frac{1}{4} \hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu} + \hat{\psi} \star \left(i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi} - m\hat{\psi} \right) \right]. \quad (1.115)$$

Para que esta ação seja invariante de *gauge*, o tensor do campo de força $\hat{F}^{\mu\nu}$ da conexão de *gauge* \hat{A}_μ e derivada covariante não comutativos devem ser generalizados²⁰ por

$$\begin{aligned}\hat{F}_{\mu\nu} &= \partial_\mu \hat{A}_\nu - \partial_\nu \hat{A}_\mu - ig \left[\hat{A}_\mu, \hat{A}_\nu \right]_\star \\ \hat{D}_\mu \hat{A}_\nu &= \partial_\mu \hat{A}_\nu - ig \left[\hat{A}_\mu, \hat{A}_\nu \right]_\star \\ \hat{D}_\mu \hat{\psi} &= \partial_\mu \hat{\psi} - ig \hat{A}_\mu \star \hat{\psi}\end{aligned}\tag{1.116}$$

tal que, em mais baixa ordem do parâmetro não comutativo $\theta^{\mu\nu}$ (real e constante), o mapa de Seiberg-Witten dos campos da NCQED são determinados por

$$\hat{A}_\mu = A_\mu - \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda (2\partial_\sigma A_\mu - \partial_\mu A_\sigma) + \mathcal{O}(\theta^2)\tag{1.117}$$

e

$$\hat{\psi} = \psi - \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda \partial_\sigma \psi + \mathcal{O}(\theta^2),\tag{1.118}$$

o que permite reescrever tensor do campo de força como

$$\begin{aligned}\hat{F}_{\mu\nu} &= \partial_\mu \hat{A}_\nu - \partial_\nu \hat{A}_\mu - ig \left[\hat{A}_\mu, \hat{A}_\nu \right]_\star \\ &= \partial_\mu \hat{A}_\nu - \partial_\nu \hat{A}_\mu - ig \left(\hat{A}_\mu \star \hat{A}_\nu - \hat{A}_\nu \star \hat{A}_\mu \right) \\ &= \partial_\mu \hat{A}_\nu - \partial_\nu \hat{A}_\mu - ig \left[\hat{A}_\mu \hat{A}_\nu + \exp \left(\frac{1}{2} i \theta^{\alpha\beta} \partial_{x^\alpha} \partial_{y^\beta} \hat{A}_\mu(x) \hat{A}_\nu(y) \right) \Big|_{x=y} \right] \\ &\quad + ig \left[\hat{A}_\mu \hat{A}_\nu + \exp \left(\frac{1}{2} i \theta^{\alpha\beta} \partial_{x^\alpha} \partial_{y^\beta} \hat{A}_\nu(x) \hat{A}_\mu(y) \right) \Big|_{x=y} \right] + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= \partial_\mu \hat{A}_\nu - \partial_\nu \hat{A}_\mu + \frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} \partial_\alpha \hat{A}_\mu \partial_\beta \hat{A}_\nu - \frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} \partial_\alpha \hat{A}_\nu \partial_\beta \hat{A}_\mu + \mathcal{O}(\theta^2)\end{aligned}\tag{1.119}$$

como $\theta^{\alpha\beta} = -\theta^{\beta\alpha}$

$$\hat{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \hat{A}_\nu - \partial_\nu \hat{A}_\mu + \frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} \partial_\alpha \hat{A}_\mu \partial_\beta \hat{A}_\nu + \frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} \partial_\alpha \hat{A}_\nu \partial_\beta \hat{A}_\mu + \mathcal{O}(\theta^2)\tag{1.120}$$

e, uma vez que α e β são índices mudos

$$\hat{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \hat{A}_\nu - \partial_\nu \hat{A}_\mu + g \theta^{\alpha\beta} \partial_\alpha \hat{A}_\mu \partial_\beta \hat{A}_\nu + \mathcal{O}(\theta^2)\tag{1.121}$$

²⁰As quantidades sem chapéu se referem a quantidades ordinárias (comutativas), enquanto as quantidades com chapéu se aplicam às quantidades não comutativas.

assim, o mapeamento de $\hat{F}_{\mu\nu}$ em produtos ordinários se determina por

$$\begin{aligned}\hat{F}_{\mu\nu} &= \partial_\mu \left[A_\nu - \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda (2\partial_\sigma A_\nu - \partial_\nu A_\sigma) \right] - \partial_\nu \left[A_\mu - \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda (2\partial_\sigma A_\mu - \partial_\mu A_\sigma) \right] \\ &\quad + g \theta^{\alpha\beta} \partial_\alpha \left[A_\mu - \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda (2\partial_\sigma A_\mu - \partial_\mu A_\sigma) \right] \partial_\beta \left[A_\nu - \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda (2\partial_\sigma A_\nu - \partial_\nu A_\sigma) \right] \\ &\quad + \mathcal{O}(\theta^2)\end{aligned}\tag{1.122}$$

portanto

$$\hat{F}_{\mu\nu} = F_{\mu\nu} + g \theta^{\lambda\sigma} F_{\nu\lambda} F_{\sigma\mu} + g \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda (\partial_\sigma F_{\nu\mu}) + \mathcal{O}(\theta^2)\tag{1.123}$$

em que a antissimetria de $\theta^{\mu\nu}$ foi ampla e convenientemente usada.

Assim, o termo $\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu}$ é determinado a partir de

$$\begin{aligned}\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu} &= \hat{F}_{\mu\nu} \hat{F}^{\mu\nu} + \left(\frac{1}{2} i \theta^{\alpha\beta} \partial_{x^\alpha} \partial_{y^\beta} \hat{F}_{\mu\nu}(x) \hat{F}^{\mu\nu}(y) \right) \Big|_{x=y} + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= \hat{F}_{\mu\nu} \hat{F}^{\mu\nu} + \frac{1}{2} i \theta^{\alpha\beta} \partial_\alpha \hat{F}_{\mu\nu} \partial_\beta \hat{F}^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2)\end{aligned}\tag{1.124}$$

tal que, na aplicação do mapa de Seiberg-Witten

$$\begin{aligned}\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu} &= [F_{\mu\nu} + g \theta^{\lambda\sigma} F_{\nu\lambda} F_{\sigma\mu} + g \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda (\partial_\sigma F_{\nu\mu})] \times \\ &\quad \times [F^{\mu\nu} + g \theta_{\lambda\sigma} F^{\nu\lambda} F^{\sigma\mu} + g \theta_{\lambda\sigma} A^\lambda (\partial^\sigma F^{\nu\mu})] \\ &\quad + \frac{1}{2} i \theta^{\alpha\beta} \partial_\alpha [F_{\mu\nu} + g \theta^{\lambda\sigma} F_{\nu\lambda} F_{\sigma\mu} + g \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda (\partial_\sigma F_{\nu\mu})] \times \\ &\quad \times \partial_\beta [F^{\mu\nu} + g \theta_{\lambda\sigma} F^{\nu\lambda} F^{\sigma\mu} + g \theta_{\lambda\sigma} A^\lambda \partial^\sigma (F^{\nu\mu})] + \mathcal{O}(\theta^2)\end{aligned}\tag{1.125}$$

se obtém

$$\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu} = \left(1 + \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} F_{\sigma\lambda} \right) F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + 2g \theta^{\lambda\sigma} F_{\nu\lambda} F_{\sigma\mu} F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2)\tag{1.126}$$

em que o termo de superfície $g \theta^{\lambda\sigma} \partial_\sigma (A_\lambda F_{\nu\mu} F^{\mu\nu})$ presente em cálculos intermediários é nulo quando substituído na integral da ação e foi, portanto, descartado. É interessante notar, ainda, os termos de autointeração presentes na expressão (1.126), o que deixa explícito que a estrutura da teoria de *gauge* ordinária adquiriu por meio da não comutatividade das coordenadas uma estrutura análoga à teoria não-abeliana. O termo com a derivada covariante pode ser reescrito, usando (1.118) e (1.116), como

$$\begin{aligned}\hat{D}_\mu \hat{\psi} &= \partial_\mu \hat{\psi} - ig \hat{A}_\mu \star \hat{\psi} \\ &= \partial_\mu \hat{\psi} - ig \left[\hat{A}_\mu \hat{\psi} + \frac{1}{2} i \theta^{\alpha\beta} \partial_\alpha \hat{A}_\mu \partial_\beta \hat{\psi} \right] \\ &= \partial_\mu \hat{\psi} - ig \hat{A}_\mu \hat{\psi} + \frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} \partial_\alpha \hat{A}_\mu \partial_\beta \hat{\psi}\end{aligned}\tag{1.127}$$

de forma que o segundo termo presente na ação (1.115) é reescrito como

$$\hat{\psi} \star i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi} = \hat{\psi} i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi} + \left(\frac{1}{2} i\theta^{\alpha\beta} \partial_{x^\alpha} \partial_{y^\beta} \hat{\psi}(x) i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi}(y) \right) \Big|_{x=y} + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (1.128)$$

Explicitamente,

$$\begin{aligned} \hat{\psi} \star i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi} &= i\bar{\psi} \gamma^\mu (\partial_\mu \psi) - i\frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} \bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu (A_\alpha (\partial_\beta \psi)) - i\frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda (\partial_\sigma \bar{\psi}) \gamma^\mu (\partial_\mu \psi) \\ &+ g\bar{\psi} \gamma^\mu A_\mu \psi - \frac{g^2}{2} \theta^{\delta\eta} \bar{\psi} \gamma^\mu A_\mu A_\delta (\partial_\eta \psi) - g^2 \theta^{\alpha\beta} \bar{\psi} \gamma^\mu A_\alpha (\partial_\beta A_\mu) \psi + \frac{g^2}{2} \theta^{\alpha\beta} \bar{\psi} \gamma^\mu A_\alpha (\partial_\mu A_\beta) \psi \\ &- \frac{g^2}{2} \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda (\partial_\sigma \bar{\psi}) \gamma^\mu A_\mu \psi + i\frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} \bar{\psi} \gamma^\mu (\partial_\alpha A_\mu) \partial_\beta \psi + i\frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} [\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\alpha \partial_\beta (A_\mu \psi)] \\ &- \frac{1}{2} \theta^{\alpha\beta} [\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\alpha (\partial_\beta \partial_\mu \psi)] + \mathcal{O}(\theta^2) \end{aligned} \quad (1.129)$$

em que os termos $i\frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} [\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\alpha \partial_\beta (A_\mu \psi)]$ e $-\frac{1}{2} \theta^{\alpha\beta} [\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\alpha (\partial_\beta \partial_\mu \psi)]$ são nulos uma vez que o tensor $\theta^{\alpha\beta}$ é antissimétrico. Logo,

$$\hat{\psi} \star i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi} = \left[1 + \frac{g}{4} \theta^{\alpha\beta} F_{\beta\alpha} \right] i\bar{\psi} \gamma^\mu D_\mu \psi + i\frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} \bar{\psi} \gamma^\mu F_{\alpha\mu} D_\beta \psi + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (1.130)$$

em que a identidade $\theta^{\alpha\beta} (\partial_\beta A_\alpha) = \frac{1}{2} \theta^{\alpha\beta} (\partial_\beta A_\alpha - \partial_\alpha A_\beta) = \frac{1}{2} \theta^{\alpha\beta} F_{\beta\alpha}$ foi convenientemente aplicada. Portanto,

$$\hat{\psi} \star i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi} = \left[1 + \frac{g}{4} \theta^{\alpha\beta} F_{\beta\alpha} \right] i\bar{\psi} \gamma^\mu D_\mu \psi + i\frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} \bar{\psi} \gamma^\mu F_{\alpha\mu} D_\beta \psi + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (1.131)$$

Com (1.118), o termo massivo $m\hat{\psi} \star \hat{\psi}$ é representado por meio do mapa de Seiberg-Witten como

$$m\hat{\psi} \star \hat{\psi} = m \left(\bar{\psi} - \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda \partial_\sigma \bar{\psi} \right) \left(\psi - \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} A_\lambda \partial_\sigma \psi \right) + \mathcal{O}(\theta^2), \quad (1.132)$$

conduzindo à expressão

$$m\hat{\psi} \star \hat{\psi} = m \left[1 + \frac{g}{4} \theta^{\alpha\beta} F_{\beta\alpha} \right] \bar{\psi} \psi + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (1.133)$$

Todas as expansões presentes nestes cálculos têm sentido quando se compreende que a não comutatividade do espaço-tempo, se de fato existir, é bastante pequena.

Portanto, a expressão final para a ação se torna

$$\begin{aligned} S &= \int d^4x \left[-\frac{1}{4} \left(1 - \frac{g}{2} \theta \cdot F \right) F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} F_{\nu\lambda} F_{\sigma\mu} F^{\mu\nu} \right. \\ &\quad \left. + \left(1 - \frac{g}{4} \theta \cdot F \right) \bar{\psi} i\gamma \cdot D\psi + \frac{g}{2} \theta^{\alpha\beta} \bar{\psi} i\gamma^\mu F_{\alpha\mu} D_\beta \psi - m \left(1 - \frac{g}{4} \theta \cdot F \right) \bar{\psi} \psi \right], \end{aligned} \quad (1.134)$$

em que foi empregada a conveniente notação $\theta^{\alpha\beta} F_{\beta\alpha} = \theta \cdot F$. No que concerne às novas interações geradas pela não comutatividade do espaço-tempo, a mais interessante surge

em relação ao campo de *gauge* devido à presença, em primeira ordem em θ , de termos de autointeração. Fica evidente que este setor da ação se assemelha à teoria de Yang-Mills devido à estrutura não comutativa do espaço-tempo. E mais, para $\omega > 2$, a ação (1.134) fornece a estrutura adequada para a investigação de uma extensão para QED que viole a invariância de Lorentz, uma vez que todos os termos dependentes de θ violam a simetria de Lorentz. Outrossim, é importante ressaltar que o único ingrediente necessário para o desenvolvimento da representação espectral de Källén-Lehmann é a invariância translacional, que é sempre satisfeita em uma teoria não comutativa ²¹. No entanto, a simetria de Lorentz (rotações e *boosts*) é preservada somente se $\theta^{\mu\nu}$ se transforma como um tensor. De fato, o mapa de Seiberg-Witten tem uma forma invariante de Lorentz porque θ se transforma como um tensor sob transformações de Lorentz, em acordo com as referências [42], [43], [44].

NCQED em $(1 + 1) -$ dimensões

A particularização de $\omega -$ dimensões em $(1 + 1) -$ dimensões é obtida considerando $\theta^{\mu\nu} = \theta \epsilon^{\mu\nu}$, em que $\epsilon^{\mu\nu}$ é o tensor de Levi-Civita em duas dimensões. Assim, a ação que corresponde ao modelo de Schwinger não comutativo é determinada particularizando a expressão de (1.115) para $(1 + 1) -$ dimensões.

Desta feita, o cálculo de

$$\left(\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu} \right)_{1+1} = \left(1 + \frac{g\theta}{2} \epsilon^{\lambda\sigma} F_{\sigma\lambda} \right) F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + 2g\theta \epsilon^{\lambda\sigma} F_{\mu\lambda} F_{\nu\sigma} F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2), \quad (1.135)$$

explicitamente realizado por

$$\begin{aligned} \left(\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu} \right)_{1+1} &= F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{g\theta}{2} \epsilon^{0\sigma} F_{\sigma 0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{g\theta}{2} \epsilon^{1\sigma} F_{\sigma 1} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + 2g\theta \epsilon^{0\sigma} F_{\mu 0} F_{\nu\sigma} F^{\mu\nu} \\ &\quad + 2g\theta \epsilon^{1\sigma} F_{\mu 1} F_{\nu\sigma} F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{g\theta}{2} \epsilon^{01} F_{10} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{g\theta}{2} \epsilon^{10} F_{01} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + 2g\theta \epsilon^{01} F_{10} F_{01} F^{10} \\ &\quad + 2g\theta \epsilon^{10} F_{01} F_{10} F^{01} + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + 2g\theta \epsilon^{01} (F_{10} F_{01} F^{01} + F_{10} F_{01} F^{10} + F_{01} F_{10} F^{10}) + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + g\theta \epsilon^{01} F_{01} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= \left(1 + \frac{g\theta}{2} (\epsilon^{01} F_{01} + \epsilon^{10} F_{10}) \right) F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2) \end{aligned} \quad (1.136)$$

²¹A invariância de Lorentz só é necessária para derivar a dependência e a estrutura tensorial da função espectral em termos do quadrimomento p^μ .

$$\left(\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu}\right)_{1+1} = \left(1 + \frac{g\theta}{2}\epsilon^{\alpha\beta}F_{\alpha\beta}\right)F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (1.137)$$

resulta em

$$\left(\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu}\right)_{1+1} = (F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + g\theta\epsilon^{\mu\alpha}F_{\alpha\delta}F^{\delta\lambda}F_{\lambda\mu}) + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (1.138)$$

Análoga e explicitamente, o setor fermiônico

$$\begin{aligned} \left(\hat{\psi} \star i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi}\right)_{1+1} &= \left(1 + \frac{g\theta}{4}\epsilon^{\lambda\sigma}F_{\sigma\lambda}\right)\bar{\psi}i\gamma^\mu D_\mu\psi + \frac{g\theta}{2}\epsilon^{\lambda\sigma}\bar{\psi}i\gamma^\mu F_{\lambda\mu}D_\sigma\psi + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= \bar{\psi}i\gamma^\mu D_\mu\psi + \frac{g\theta}{4}(\epsilon^{0\sigma}F_{\sigma 0} + \epsilon^{1\sigma}F_{\sigma 1})\bar{\psi}i\gamma^\mu D_\mu\psi \\ &\quad + \frac{g\theta}{2}(\epsilon^{0\sigma}F_{0\mu} + \epsilon^{1\sigma}F_{1\mu})\bar{\psi}i\gamma^\mu D_\sigma\psi + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= \bar{\psi}i\gamma^\mu D_\mu\psi + \frac{g\theta}{4}(\epsilon^{01}F_{10} + \epsilon^{10}F_{01})\bar{\psi}i\gamma^\mu D_\mu\psi \\ &\quad + \frac{g\theta}{2}\bar{\psi}i(\gamma^1\epsilon^{01}F_{01}D_1 + \gamma^0\epsilon^{10}F_{10}D_0)\psi + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= \bar{\psi}i\gamma^\mu D_\mu\psi + \frac{g\theta}{2}\epsilon^{01}F_{10}\bar{\psi}i\gamma^\mu D_\mu\psi + \frac{g\theta}{2}\epsilon^{01}F_{01}\bar{\psi}i(\gamma^1D_1 + \gamma^0D_0)\psi \\ &\quad + \mathcal{O}(\theta^2) \end{aligned} \quad (1.139)$$

Assim,

$$\left(\hat{\psi} \star i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi}\right)_{1+1} = \bar{\psi}i\gamma^\mu D_\mu\psi + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (1.140)$$

Portanto, a expressão para a lagrangiana (a ação, implicitamente) que será usada para estudar o modelo de NCQED em $(1 + 1)$ – dimensões é dada por

$$\mathcal{L}_{1+1} = \bar{\psi}(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi - \frac{mg\theta}{4}\epsilon^{\alpha\beta}F_{\beta\alpha}\bar{\psi}\psi - \frac{1}{4}\left(1 + \frac{g\theta}{2}\epsilon^{\alpha\beta}F_{\alpha\beta}\right)F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{2\alpha}(\partial_\mu A^\mu)^2, \quad (1.141)$$

em que um termo de *gauge-fixing* $(-\frac{1}{2\alpha}(\partial_\mu A^\mu)^2)$ também foi adequadamente adicionado.

Além da simetria de *gauge* local $U(1)$, os termos acima são invariantes sob as simetrias globais $U(1) \otimes U(1)'$, em que $U(1)$ e $U(1)'$ são as simetrias de carga e quiralidade do férmion não-massivo, respectivamente. Os termos que compõem a ação no modelo de Schwinger não comutativo são invariantes por paridade, embora violem as simetrias discretas de conjugação de carga e reversão temporal via termo de autointeração do fóton. Contudo, a teoria ainda é invariante por *CPT*, como é esperado para uma teoria de QED, embora viole as simetrias *C* e *CP*.

NCQED em $(2 + 1)$ – dimensões

Em analogia ao cálculo anterior, a ação geral da NCQED em $(2 + 1)$ – dimensões, é obtida por meio da particularização $\theta^{\mu\nu} = \epsilon^{\mu\nu\alpha}\theta_\alpha$ na expressão geral para a ação em ω –dimensões.

Assim, o cálculo dos termos que compõem (1.115) para $(2 + 1)$ – dimensões é realizado explicitamente por

$$\begin{aligned}
\left(\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu}\right)_{2+1} &= \left(1 + \frac{g\theta_\delta}{2}\epsilon^{\lambda\sigma\delta}F_{\sigma\lambda}\right)F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + 2g\theta_\delta\epsilon^{\lambda\sigma\delta}F_{\mu\lambda}F_{\nu\sigma}F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2) \\
&= F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{g}{2}\epsilon^{0\sigma\delta}\theta_\delta F_{\sigma 0}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{g}{2}\epsilon^{i\sigma\delta}\theta_\delta F_{\sigma i}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \\
&\quad + 2g\epsilon^{0\sigma\delta}\theta_\delta F_{\mu 0}F_{\nu\sigma}F^{\mu\nu} + 2g\epsilon^{i\sigma\delta}\theta_\delta F_{\mu i}F_{\nu\sigma}F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2) \\
&= F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{g}{2}\epsilon^{0i\delta}\theta_\delta F_{i0}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{g}{2}\epsilon^{i0\delta}\theta_\delta F_{0i}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{g}{2}\epsilon^{ij\delta}\theta_\delta F_{ji}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \\
&\quad + 2g\epsilon^{0i\delta}\theta_\delta F_{\mu 0}F_{\nu i}F^{\mu\nu} + 2g\epsilon^{i0\delta}\theta_\delta F_{\mu i}F_{\nu 0}F^{\mu\nu} + 2g\epsilon^{ij\delta}\theta_\delta F_{\mu i}F_{\nu j}F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2) \\
&= F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{g}{2}\epsilon^{0ij}\theta_j F_{i0}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{g}{2}\epsilon^{i0j}\theta_j F_{0i}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{g}{2}\epsilon^{ij0}\theta_0 F_{ji}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \\
&\quad + 2g\epsilon^{0ij}\theta_j F_{\mu 0}F_{\nu i}F^{\mu\nu} + 2g\epsilon^{i0j}\theta_j F_{\mu i}F_{\nu 0}F^{\mu\nu} + 2g\epsilon^{ij0}\theta_0 F_{\mu i}F_{\nu j}F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2) \\
&= F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + g\epsilon^{0ij}\theta_j F_{i0}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{g}{2}\epsilon^{ij0}\theta_0 F_{ji}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + 2g\epsilon^{0ij}\theta_j F_{k0}F_{\nu i}F^{k\nu} \\
&\quad + 2g\epsilon^{i0j}\theta_j F_{\mu i}F_{k0}F^{\mu k} + 2g\epsilon^{ij0}\theta_0 F_{\mu i}F_{\nu j}F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2) \tag{1.142}
\end{aligned}$$

tratando os termos θ_0 e θ_i separadamente

$$\begin{aligned}
I_{\theta_0} &= \frac{g}{2}\epsilon^{ij0}\theta_0 F_{ji}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + 2g\epsilon^{ij0}\theta_0 F_{\mu i}F_{\nu j}F^{\mu\nu} \\
&= g\epsilon^{120}F_{21}\theta_0 F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + 2g\epsilon^{120}F_{12}\theta_0 F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \\
&= g\epsilon^{120}F_{12}\theta_0 F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \tag{1.143}
\end{aligned}$$

e agora

$$\begin{aligned}
I_{\theta_i} &= g\epsilon^{0ij}\theta_j F_{i0}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + 2g\epsilon^{0ij}\theta_j F_{k0}F_{\nu i}F^{k\nu} + 2g\epsilon^{i0j}\theta_j F_{\mu i}F_{k0}F^{\mu k} \\
&= g\epsilon^{0ij}\theta_j F_{0i}(2F_{k0}F^{k0} + F_{kl}F^{kl}) \\
&= g\epsilon^{0ij}\theta_j F_{0i}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \tag{1.144}
\end{aligned}$$

Por fim

$$\left(\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu}\right)_{2+1} = F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + g\epsilon^{120}F_{12}\theta_0 F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + g\epsilon^{0ij}\theta_j F_{0i}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2), \tag{1.145}$$

em que

$$\epsilon^{0ij}\theta_0 F_{ij} = \epsilon^{01j}\theta_0 F_{1j} + \epsilon^{02j}\theta_0 F_{2j} = \epsilon^{012}\theta_0 F_{12} + \epsilon^{021}\theta_0 F_{21} = 2\epsilon^{012}\theta_0 F_{12}. \quad (1.146)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \left(\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu} \right)_{2+1} &= F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + g \left(\frac{1}{2} \epsilon^{0ij}\theta_0 F_{ij} + \epsilon^{0ij}\theta_j F_{0i} \right) F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= \left[1 + \frac{g}{2} (\epsilon^{i\sigma\delta}\theta_\delta F_{i\sigma} + \epsilon^{0\sigma\delta}\theta_\delta F_{0\sigma}) \right] F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= \left[1 + \frac{g}{2} \epsilon^{\lambda\sigma\delta}\theta_\delta F_{\lambda\sigma} \right] F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2), \end{aligned} \quad (1.147)$$

portanto

$$\left(\hat{F}_{\mu\nu} \star \hat{F}^{\mu\nu} \right)_{2+1} = \left(1 + \frac{g}{2} \epsilon^{\lambda\sigma\delta}\theta_\delta F_{\lambda\sigma} \right) F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (1.148)$$

Analogamente, para o setor fermiônico

$$\begin{aligned} \left(\hat{\psi} \star i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi} \right)_{2+1} &= \left(1 + \frac{g\theta_\delta}{4} \epsilon^{\lambda\sigma\delta} F_{\sigma\lambda} \right) \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi + \frac{g\theta_\delta}{2} \epsilon^{\lambda\sigma\delta} \bar{\psi} i\gamma^\mu F_{\lambda\mu} D_\sigma \psi + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi + \frac{g\theta_\delta}{4} (\epsilon^{0\sigma\delta} F_{\sigma 0} + \epsilon^{i\sigma\delta} F_{\sigma i}) \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi \\ &\quad - \frac{g\theta_\delta}{2} (\epsilon^{0\sigma\delta} F_{\mu 0} + \epsilon^{i\sigma\delta} F_{\mu i}) \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\sigma \psi + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi + \frac{g}{2} \epsilon^{012} (\theta_2 F_{10} - \theta_1 F_{20} + \theta_0 F_{21}) \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi \\ &\quad - \frac{g}{2} \epsilon^{012} \bar{\psi} i (\theta_2 F_{10} (\gamma^1 D_1 + \gamma^0 D_0) + \theta_2 \gamma^2 (F_{20} D_1 + F_{12} D_0)) \psi \\ &\quad - \frac{g}{2} \epsilon^{012} \bar{\psi} i (\theta_1 \gamma^1 (F_{01} D_2 + F_{12} D_0) + \theta_1 F_{02} (\gamma^2 D_2 + \gamma^0 D_0)) \psi \\ &\quad - \frac{g}{2} \epsilon^{012} \bar{\psi} i (\theta_0 \gamma^0 (F_{01} D_2 + F_{20} D_1) + \theta_0 F_{21} (\gamma^2 D_2 + \gamma^1 D_1)) \psi \\ &\quad + \mathcal{O}(\theta^2) \end{aligned} \quad (1.149)$$

com a identidade

$$D_\mu [D_\nu, D_\rho] \phi + D_\nu [D_\rho, D_\mu] \phi + D_\rho [D_\mu, D_\nu] \phi = 0, \quad (1.150)$$

reescrita como

$$[D_\mu, D_\nu] D_\rho \phi + [D_\nu, D_\rho] D_\mu \phi + [D_\rho, D_\mu] D_\nu \phi = 0, \quad (1.151)$$

tendo em mente que

$$F_{\mu\nu} \propto [D_\mu, D_\nu]$$

é possível então reescrever

$$\begin{aligned}
\left(\hat{\psi} \star i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi}\right)_{2+1} &= \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi + \frac{g}{2} \epsilon^{012} (\theta_2 F_{10} + \theta_1 F_{02} + \theta_0 F_{21}) \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi \\
&\quad - \frac{g}{2} \epsilon^{012} \bar{\psi} i \left(\theta_2 F_{10} (\gamma^1 D_1 + \gamma^0 D_0) + \theta_2 \gamma^2 \underbrace{(F_{20} D_1 + F_{12} D_0)}_{=-F_{01} D_2} \right) \psi \\
&\quad - \frac{g}{2} \epsilon^{012} \bar{\psi} i \left(\theta_1 \gamma^1 \underbrace{(F_{01} D_2 + F_{12} D_0)}_{=-F_{20} D_1} + \theta_1 F_{02} (\gamma^2 D_2 + \gamma^0 D_0) \right) \psi \\
&\quad - \frac{g}{2} \epsilon^{012} \bar{\psi} i \left(\theta_0 \gamma^0 \underbrace{(F_{01} D_2 + F_{20} D_1)}_{=-F_{12} D_0} + \theta_0 F_{21} (\gamma^2 D_2 + \gamma^1 D_1) \right) \psi \\
&\quad + \mathcal{O}(\theta^2), \tag{1.152}
\end{aligned}$$

então

$$\begin{aligned}
\left(\hat{\psi} \star i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi}\right)_{2+1} &= \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi + \frac{g}{2} \epsilon^{012} (\theta_2 F_{10} + \theta_1 F_{02} + \theta_0 F_{21}) \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi \\
&\quad - \frac{g}{2} \epsilon^{012} \bar{\psi} i (\theta_2 F_{10} (\gamma^1 D_1 + \gamma^0 D_0) + \theta_2 \gamma^2 F_{10} D_2 + \theta_1 \gamma^1 F_{02} D_1) \psi \\
&\quad - \frac{g}{2} \epsilon^{012} \bar{\psi} i (\theta_1 F_{02} (\gamma^2 D_2 + \gamma^0 D_0) + \theta_0 \gamma^0 F_{21} D_0) \psi \\
&\quad - \frac{g}{2} \epsilon^{012} \bar{\psi} i (\theta_0 F_{21} (\gamma^2 D_2 + \gamma^1 D_1)) \psi + \mathcal{O}(\theta^2) \\
&= \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi + \frac{g}{2} \epsilon^{012} (\theta_2 F_{10} + \theta_1 F_{02} + \theta_0 F_{21}) \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi \\
&\quad - \frac{g}{2} \epsilon^{012} \bar{\psi} i (\theta_2 F_{10} + \theta_1 F_{02} + \theta_0 F_{21}) \gamma^\mu D_\mu \psi + \mathcal{O}(\theta^2) \tag{1.154}
\end{aligned}$$

portanto

$$\left(\hat{\psi} \star i\gamma^\mu \hat{D}_\mu \hat{\psi}\right)_{2+1} = \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi + \mathcal{O}(\theta^2). \tag{1.155}$$

Além destes dois termos, o termo de Chern-Simons

$$- \frac{s}{4} \epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{A}_\mu \star \hat{F}_{\nu\lambda}, \tag{1.156}$$

também deve estar presente na ação em $(2+1)$ -dimensões. Felizmente, este termo sob o mapa de Seiberg-Witten mantém sua forma em sua contraparte comutativa

$$- \frac{s}{4} \epsilon_{\mu\nu\lambda} A_\mu F_{\nu\lambda}, \tag{1.157}$$

e, embora a simetria quiral seja perdida, também é possível adicionar à ação um termo massivo

para os campos fermiônicos, tal que, pelo mapa de Seiberg-Witten, é escrito como

$$\begin{aligned}
m\hat{\psi} \star \hat{\psi} &= m\hat{\psi}\hat{\psi} \\
&= m \left(\bar{\psi} - \frac{g}{2}\theta^{\lambda\sigma} A_\lambda \partial_\sigma \bar{\psi} \right) \left(\psi - \frac{g}{2}\theta^{\alpha\beta} A_\alpha \partial_\beta \psi \right) + \mathcal{O}(\theta^2) \\
&= m\bar{\psi} \left(\psi - \frac{g}{2}\theta^{\alpha\beta} A_\alpha \partial_\beta \psi \right) - m\frac{g}{2}\theta^{\lambda\sigma} A_\lambda \partial_\sigma \bar{\psi}\psi + \mathcal{O}(\theta^2) \\
&= m \left(1 + \frac{g}{2}\theta^{\alpha\beta} \partial_\beta A_\alpha \right) \bar{\psi}\psi + \mathcal{O}(\theta^2), \tag{1.158}
\end{aligned}$$

logo

$$m\hat{\psi} \star \hat{\psi} = m \left(1 + \frac{g}{4}\theta^{\alpha\beta} F_{\beta\alpha} \right) \bar{\psi}\psi + \mathcal{O}(\theta^2). \tag{1.159}$$

Portanto, a expressão para a lagrangiana que será usada para estudar o modelo de NCQED em $(2+1)$ – dimensões é escrita como:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{2+1} &= \bar{\psi} (i\gamma^\mu D_\mu - m) \psi - \frac{mg\theta_\delta}{4} \epsilon^{\alpha\beta\delta} F_{\beta\alpha} \bar{\psi}\psi - \frac{1}{4} \left(1 + \frac{g\theta_\sigma}{2} \epsilon^{\alpha\beta\sigma} F_{\alpha\beta} \right) F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \\
&\quad - \frac{s}{4} \epsilon^{\mu\nu\lambda} A_\mu F_{\nu\lambda} - \frac{1}{2\alpha} (\partial_\mu A^\mu)^2. \tag{1.160}
\end{aligned}$$

em que $\epsilon^{\mu\nu\lambda}$ é o tensor de Levi-Civita totalmente antissimétrico, e s denota o acoplamento do termo topológico, em que foi feito o uso da extensão não comutativa da ação de Chern-Simons derivada em [45], onde foi mostrado que sob o mapa de Seiberg-Witten a teoria não comutativa de Chern-Simons se reduz à sua contraparte comutativa para todas as ordens em θ . Por fim, cabe ressaltar que nenhum termo de massa (ou seja, férmion e *gauge*) em $(2+1)$ – dimensões é gerado perturbativamente se não estiver explicitamente presente na Lagrangiana inicial, uma vez que tal termo violaria a invariância P e T . Entretanto, a combinação das duas invariâncias (ou seja, P e T) resulta na invariância dos termos de massa, e portanto a simetria CPT é respeitada. Assim, se um termo de massa for inserido na Lagrangiana, o outro termo correspondente será induzido por correções radiativas. Também é possível adicionar termos de massa para os campos fermiônicos em $(2+1)$ – dimensões que sejam invariantes por P e T , contudo, neste caso é necessária uma representação 4×4 para as matrizes, e também um bispinor [46], [17].

1.1.6 As equações de movimento

A partir das expressões para as lagrangianas, (1.141) e (1.160), reescritas novamente em termos de $\theta^{\mu\nu}$, se obtém que o setor fermiônico fornece as mesmas equações de movimento, expressas por

$$(i\gamma^\mu D_\mu - m) \psi = \frac{mg}{4} \theta^{\mu\nu} F_{\nu\mu} \psi \tag{1.161}$$

para $(1 + 1)$ – e $(2 + 1)$ – dimensões. Mais ainda, para $\theta = 0$, se obtém as mesmas equações de movimento da QED ordinária. O próximo passo consiste, portanto, na determinação das equações de movimento para o campo de *gauge* em $(1 + 1)$ – e $(2 + 1)$ – dimensões.

A autora ressalta que doravante os cálculos apresentados suprimirão tediosos passos, crente de que o processo para obter todas as expressões a partir deste ponto já foi cuidadosamente indicado.

A equação de movimento para o campo de *gauge* em $(1 + 1)$ – dimensões

A partir da expressão para a lagrangiana \mathcal{L}_{1+1} , expressa em (1.141), se determina a equação de movimento para o campo de *gauge*

$$\frac{\partial}{\partial(\partial_\alpha A_\beta)} \mathcal{L}_{1+1} = \frac{\partial}{\partial(\partial_\alpha A_\beta)} \left[-\frac{1}{4} \left(1 + \frac{g\theta}{2} \epsilon^{\lambda\sigma} F_{\lambda\sigma} \right) F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \frac{1}{2\alpha} (\partial_\mu A^\mu)^2 + \frac{mg\theta}{4} \epsilon^{\lambda\sigma} F_{\lambda\sigma} \bar{\psi}\psi \right], \quad (1.162)$$

que conduz a

$$\frac{\partial}{\partial(\partial_\alpha A_\beta)} \mathcal{L}_{1+1} = -\frac{g\theta}{4} \epsilon^{\alpha\beta} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \left(1 + \frac{g\theta}{2} \epsilon^{\lambda\sigma} F_{\lambda\sigma} \right) F^{\alpha\beta} - \frac{1}{\alpha} (\partial_\lambda A^\lambda) \eta^{\alpha\beta} + \frac{mg\theta}{2} \epsilon^{\alpha\beta} \bar{\psi}\psi, \quad (1.163)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial A_\beta} \mathcal{L}_{1+1} = g\bar{\psi}\gamma^\beta\psi. \quad (1.164)$$

Portanto, a equação de Euler-Lagrange é obtida a partir destas duas expressões por

$$\partial_\alpha \left[-\frac{g\theta}{4} \epsilon^{\alpha\beta} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \left(1 + \frac{g\theta}{2} \epsilon^{\lambda\sigma} F_{\lambda\sigma} \right) F^{\alpha\beta} - \frac{1}{\alpha} (\partial_\lambda A^\lambda) \eta^{\alpha\beta} + \frac{mg\theta}{2} \epsilon^{\alpha\beta} \bar{\psi}\psi \right] - g\bar{\psi}\gamma^\beta\psi = 0. \quad (1.165)$$

Assim, para $\beta = 0$

$$\partial_\alpha \left[F^{\alpha 0} + \frac{3g\theta}{2} \epsilon^{\delta\alpha} F^{0\nu} F_{\nu\delta} + \frac{1}{\alpha} (\partial_\lambda A^\lambda) \eta^{\alpha 0} - \frac{mg\theta}{2} \epsilon^{\alpha 0} \bar{\psi}\psi \right] + g\bar{\psi}\gamma^0\psi = 0, \quad (1.166)$$

e, para $\beta = 1$

$$\partial_\alpha \left[F^{\alpha 1} + \frac{3g\theta}{2} \epsilon^{\delta\alpha} F^{1\nu} F_{\nu\delta} + \frac{1}{\alpha} (\partial_\lambda A^\lambda) \eta^{\alpha 1} - \frac{mg\theta}{2} \epsilon^{\alpha 1} \bar{\psi}\psi \right] + g\bar{\psi}\gamma^1\psi = 0, \quad (1.167)$$

donde segue que

$$\partial_\alpha \left[F^{\alpha\beta} + \frac{3g\theta}{2} \epsilon^{\delta\alpha} F^{\beta\nu} F_{\nu\delta} + \frac{1}{\alpha} (\partial_\lambda A^\lambda) \eta^{\alpha\beta} - \frac{mg\theta}{2} \epsilon^{\alpha\beta} \bar{\psi}\psi \right] + g\bar{\psi}\gamma^\beta\psi = 0. \quad (1.168)$$

Portanto,

$$\partial_\alpha F^{\alpha\beta} + \frac{1}{\alpha} \partial^\beta \partial_\lambda A^\lambda + \frac{g\theta}{2} \partial_\alpha [3\epsilon^{\delta\alpha} F^{\beta\nu} F_{\nu\delta} - m\epsilon^{\alpha\beta} \bar{\psi}\psi] + g\bar{\psi}\gamma^\beta\psi = 0, \quad (1.169)$$

em que é nítido que ao tomar $\theta = 0$ se obtém a equação de movimento para o campo de *gauge* ordinário em $(1 + 1)$ – dimensões.

A equação de movimento para o campo de *gauge* em $(2 + 1)$ – dimensões

De maneira similar ao caso anterior, a partir da expressão para a lagrangiana \mathcal{L}_{2+1} escrita por (1.160), se determina a equação de movimento para o campo de *gauge* a partir do cálculo

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial(\partial_\alpha A_\beta)} \mathcal{L}_{2+1} &= \frac{\partial}{\partial(\partial_\alpha A_\beta)} \left[-\frac{1}{4} \left(1 + \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} F_{\lambda\sigma} \right) F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \frac{1}{2\alpha} (\partial_\mu A^\mu)^2 \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial(\partial_\alpha A_\beta)} \left[-\frac{s}{4} \epsilon^{\mu\nu\lambda} A_\mu F_{\nu\lambda} + \frac{mg}{4} \theta^{\lambda\sigma} F_{\lambda\sigma} \bar{\psi} \psi \right] \end{aligned} \quad (1.170)$$

que leva a

$$\frac{\partial}{\partial(\partial_\alpha A_\beta)} \mathcal{L}_{2+1} = -\frac{g}{4} \theta^{\alpha\beta} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \left(1 + \frac{g}{2} \theta^{\lambda\sigma} F_{\lambda\sigma} \right) F^{\alpha\beta} - \frac{1}{\alpha} (\partial_\lambda A^\lambda) \eta^{\alpha\beta} + \frac{mg}{2} \theta^{\alpha\beta} \bar{\psi} \psi - \frac{s}{2} \epsilon^{\mu\alpha\beta} A_\mu, \quad (1.171)$$

$$\frac{\partial}{\partial A_\beta} \mathcal{L}_{2+1} = g \bar{\psi} \gamma^\beta \psi - \frac{s}{4} \epsilon^{\beta\nu\lambda} F_{\nu\lambda}. \quad (1.172)$$

e, diretamente à equação de Euler-Lagrange é obtida por

$$\partial_\alpha F^{\alpha\beta} + \frac{1}{\alpha} \partial^\beta \partial_\lambda A^\lambda - \frac{s}{2} \epsilon^{\alpha\mu\beta} F_{\alpha\mu} + \frac{g}{4} \partial_\alpha \left[\theta^{\alpha\beta} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + 2(\theta \cdot F) F^{\alpha\beta} - 2m\theta^{\alpha\beta} \bar{\psi} \psi \right] + g \bar{\psi} \gamma^\beta \psi = 0. \quad (1.173)$$

em que também é evidente que ao tomar $\theta = 0$ se obtém a equação de movimento para o campo de *gauge* ordinário em $(2 + 1)$ – dimensões.

Propagadores e a contribuição de n partículas

Antes de proceder com o cálculo explícito para o propagador do fóton em $(1 + 1)$ – e $(2 + 1)$ – dimensões, é necessário e proveitoso desenvolver alguns conceitos sobre as funções auxiliares que surgem a partir do estudo do propagador completo. Mais que isto, também é importante relacionar conceitos bem estabelecidos como o propagador livre e suas correções presentes em um propagador completo em termos da teoria de perturbação com o conceito da contribuição de n partículas para a função de densidade espectral, que por sua vez fornece o propagador completo na representação de Källén-Lehmann [47]. Estes conceitos serão desenvolvidos aqui para os fótons em $(3 + 1)$ – dimensões, mas podem ser estendidos para as dimensões $(1 + 1)$ e $(2 + 1)$, foco deste estudo.

O conceito de propagador completo (ou propagador exato) desempenha um papel central no formalismo de uma teoria exata ou completa, ou seja, sem expansão em potências da constante de acoplamento, e foi desenvolvido por Dyson em 1949 [48]. O propagador completo é definido pelo valor esperado no vácuo do ordenamento temporal do produto de operadores de Heisenberg

$\hat{A}_\mu(x)$ e $\hat{A}_\nu(x')$,

$$\mathfrak{D}_{\mu\nu}(x-x') \equiv \langle \Psi_0 | T(A_\mu(x) A_\nu(x')) | \Psi_0 \rangle, \quad (1.174)$$

em analogia à expressão definida por (1.54) na subseção “A representação espectral de Källén-Lehmann”. O propagador completo é assim chamado porque contém todas as correções; assim, não é possível calculá-lo de forma exata, logo é impossível obter uma expressão analítica exata para $\mathfrak{D}_{\mu\nu}$, embora sua definição permita inferir propriedades gerais sobre esta função.

O propagador do fóton livre (também chamado de propagador nu) é definido por

$$D_{\mu\nu}(x-x') \equiv \langle \Psi_0 | T(A_\mu^{int}(x) A_\nu^{int}(x')) | \Psi_0 \rangle, \quad (1.175)$$

em que os operadores estão na descrição de interação. Um estado na descrição de Heisenberg é independente do tempo, haja vista que toda a dependência temporal está contida nos operadores. Na descrição de interação, a dependência temporal do estado ocorre por meio de

$$A_\mu^{int}(t, \vec{r}) = \hat{S}(t, -\infty) A_\mu^{int}(-\infty, \vec{r}), \quad (1.176)$$

em que

$$\hat{S}(t_1, t_2) = T \exp \left\{ -i \int_{t_1}^{t_2} \hat{V}(t') dt' \right\} \quad (1.177)$$

define o operador de evolução temporal, que inclui apenas operadores para tempos entre t_1 e t_2 em sequência cronológica.

A descrição de Heisenberg e a descrição de interação são idênticas em $t = -\infty$, ou seja, os estados são então idênticos,

$$A_\mu^{int}(t = -\infty, \vec{r}) = A_\mu(t, \vec{r}), \quad (1.178)$$

o que permite relacionar $\hat{A}_\mu(x)$ e $\hat{A}_\mu^{int}(x)$ por

$$A_\mu(x) = \hat{S}(-\infty, t) \hat{A}_\mu^{int}(t, \vec{r}) \hat{S}(t, -\infty). \quad (1.179)$$

Assim, o propagador completo pode ser escrito em termos do operador $\hat{A}_\mu^{int}(x)$ como

$$\mathfrak{D}_{\mu\nu}(x-x') = \langle \Psi_0 | S^{-1} T(A_\mu^{int}(x) A_\nu^{int}(x') S) | \Psi_0 \rangle \quad (1.180)$$

em que \hat{S}^{-1} sai da média sobre o vácuo para se tornar um fator de fase. Para isso é necessário apenas lembrar que o vácuo na descrição de Heisenberg também é o mesmo na descrição de interação. Desta feita, como o vácuo é um estado estritamente estacionário, nenhum processo espontâneo de geração de partículas pode ocorrer, ou seja, no decorrer do tempo o vácuo permanece sendo o vácuo, de tal forma que o propagador completo admite a nova forma

$$\mathfrak{D}_{\mu\nu}(x-x') = \frac{\langle \Psi_0 | T(A_\mu^{int}(x) A_\nu^{int}(x') S) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle} \quad (1.181)$$

de tal forma que expandindo $\mathcal{D}_{\mu\nu}$ em potências da constante de acoplamento, ou seja, considerando o cálculo de $\mathcal{D}_{\mu\nu}$ pela teoria da perturbação, na aproximação em ordem zero, com $\hat{S} = 1$, o numerador desta expressão é o propagador livre $D_{\mu\nu}(x - x')$. Em ordens mais altas se verifica que o papel do denominador $\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle$ é assegurar que em todas as ordens da teoria de perturbação o propagador exato $\mathcal{D}_{\mu\nu}$ seja representado apenas por diagramas que não contêm partes separadas (e que não têm significado físico). Assim, em primeira ordem se obtém um propagador livre, ao passo que as ordens mais altas subsequentes apresentam sempre suas correções retidas entre dois propagadores livres. Estas correções retidas entre propagadores livres são chamadas de *partes da autoenergia do fóton*. Em geral é possível dividir as partes da autoenergia do fóton de tal maneira que se unam apenas por um propagador livre. Quando uma parte da autoenergia do fóton é tal que não pode ser dividida por um propagador livre, se diz que tais partes são *compactas, próprias ou conexas*.

A soma infinita de todas as partes da autoenergia do fóton compactas forma o *operador de polarização* $\mathfrak{P}_{\mu\nu}$, também chamado de tensor de polarização do vácuo. Assim, o propagador completo pode ser escrito (mais convenientemente no espaço dos momentos) em uma forma analítica que representa toda a série perturbativa como

$$\mathcal{D}_{\mu\nu}(k) = D_{\mu\nu}(k) + D_{\mu\lambda}(k) \mathfrak{P}^{\lambda\rho}(k) \mathcal{D}_{\rho\nu}(k) \quad (1.182)$$

que pode ser reescrita na forma equivalente como

$$\mathcal{D}_{\mu\nu}^{-1}(k) = D_{\mu\nu}^{-1}(k) - i\mathfrak{P}_{\mu\nu}(k). \quad (1.183)$$

O operador de polarização é uma estrutura tensorial de segunda ordem, e pode ser decomposto em invariantes relativísticos²² como

$$\mathfrak{P}^{\mu\nu}(k) = \left(g^{\mu\nu} - \frac{k^\mu k^\nu}{k^2} \right) \mathfrak{P}(k) \quad (1.184)$$

em que $\mathfrak{P}(k)$ é o escalar de polarização.

Uma vez que o operador de polarização é a soma de todas as partes da autoenergia do fóton compactas, torna-se então possível definir uma outra função auxiliar: a função de *autoenergia do fóton*, $\Pi_{\mu\nu}$, que é definida como a soma de todas as partes da autoenergia do fóton, incluindo as que não são compactas. Ou seja, a soma de todas as correções retidas entre dois propagadores livres, de tal forma que o propagador completo pode ser escrito em termos da autoenergia do fóton como

$$\mathcal{D}_{\mu\nu} = D_{\mu\nu} + D_{\mu\lambda} \Pi^{\lambda\rho} \mathcal{D}_{\rho\nu} \quad (1.185)$$

e pode também ser decomposto em invariantes relativísticos por

$$\Pi^{\mu\nu}(k) = \left(g^{\mu\nu} - \frac{k^\mu k^\nu}{k^2} \right) \Pi(k) \quad (1.186)$$

²²Esta decomposição é válida em $(3 + 1)$ -dimensões.

em que $\Pi(p)$, é o escalar de autoenergia, e se relaciona com o escalar de polarização $\mathfrak{P}(k)$ como

$$\Pi = \frac{\mathfrak{P}}{1 - \frac{\mathfrak{P}}{k^2}}, \quad (1.187)$$

em que ambos $\Pi^{\mu\nu}$ e $\mathfrak{P}^{\mu\nu}$ são tensores invariantes de *gauge*. Em ordem mais baixa da teoria de perturbação $\Pi^{\mu\nu}$ e $\mathfrak{P}^{\mu\nu}$ são equivalentes.

Na representação de Källén-Lehmann, o conceito de propagador livre do fóton e suas correções é um pouco diferente. Sua estrutura geral fornece o propagador completo em termos da função de densidade espectral. A função de densidade espectral contém todos os estados acessíveis ao fóton sujeito a uma particular forma de interação e que, portanto, contribuem para o propagador completo. Então, para conhecer o propagador completo seria necessário conhecer todos estes estados acessíveis ao fóton, o que é irrealizável. Assim, o que pode ser possível determinar são as contribuições de n partículas à função de densidade espectral. A contribuição de uma partícula fornece o propagador livre, em semelhança à teoria da perturbação, em que a correção em zero-ésima ordem na constante de acoplamento fornece o propagador livre. Contudo, a contribuição de duas partículas proporciona uma estrutura que não necessariamente corresponde à correção em primeira ordem em teoria da perturbação. Isso porque a estrutura das correntes pode permitir que diferentes ordens na constante de acoplamento sejam corrigidas a partir de uma contribuição de duas partículas. Por fim, é ainda importante ressaltar que as contribuições a partir de duas partículas estão fornecendo correções à autoenergia do fóton compactas.

O propagador livre do fóton em $(1 + 1)$ – dimensões

O propagador livre do fóton é obtido a partir da expressão para a lagrangiana (1.141)

$$\mathcal{L}_{1+1,A} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{2\alpha}(\partial_\mu A^\mu)^2 \quad (1.188)$$

em que o subscrito A no membro esquerdo denota que apenas a parte referente ao campo de *gauge* livre da expressão da lagrangiana foi considerada, ou seja, foram desprezados os férmions e o termo de autointeração proporcional a θ (o que equivale dizer que apenas os termos quadráticos em A_μ contribuem para o propagador livre do campo de *gauge*).

O funcional gerador para o campo de *gauge* tem a forma geral

$$Z_0[J_\mu]_{1+1} = \int \mathcal{D}A_\mu \exp i \int d^4x (\mathcal{L}_{1+1,A} + J^\mu A_\mu) \quad (1.189)$$

então

$$Z_0[J_\mu]_{1+1} = \int \mathcal{D}A_\mu \exp i \int d^4x \left(-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{2\alpha}(\partial_\mu A^\mu)^2 + J^\mu(x) A_\mu(x) \right) \quad (1.190)$$

Os termos $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ e $(\partial_\mu A^\mu)$ podem ser reescritos na forma “campo, operador, campo”

$$F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = -2A^\mu (g_{\mu\nu}\square - \partial_\nu\partial_\mu) A^\nu \quad (1.191)$$

$$(\partial_\mu A^\mu)^2 = -A^\mu\partial_\mu\partial_\nu A^\nu \quad (1.192)$$

Assim,

$$Z_0 [J_\mu]_{1+1} = \int \mathcal{D}A_\mu \exp i \int d^4x \left\{ \frac{1}{2}A^\mu \left[g_{\mu\nu}\square - \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right) \partial_\nu\partial_\mu \right] A^\nu + J^\mu(x) A_\mu(x) \right\} \quad (1.193)$$

definido

$$O_{\mu\nu} \equiv g_{\mu\nu}\square - \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right) \partial_\nu\partial_\mu \quad (1.194)$$

se escreve

$$A^\mu \left[g_{\mu\nu}\square - \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right) \partial_\nu\partial_\mu \right] A^\nu + J^\mu(x) A_\mu(x) = A^\mu O_{\mu\nu} A^\nu + J^\mu(x) A_\mu(x) \quad (1.195)$$

que pode ser convenientemente reescrito como

$$\begin{aligned} A^\mu O_{\mu\nu} A^\nu + J^\mu(x) A_\mu(x) &= \left[A^\mu O_{\mu\nu} A^\nu + J^\mu(x) A_\mu(x) + \frac{1}{2}J^\mu(x) (O_{\mu\nu})^{-1} J^\nu(y) \right] \\ &\quad - \frac{1}{4}J^\mu(x) (O_{\mu\nu})^{-1} J^\nu(y) \\ &= \left(A^\mu + \frac{1}{2}J_\gamma (O^{\gamma\mu})^{-1} \right) O_{\mu\nu} \left(A^\nu + \frac{1}{2}(O^{\nu\gamma})^{-1} J_\gamma \right) \\ &\quad - \frac{1}{4}J^\mu(x) (O_{\mu\nu})^{-1} J^\nu(y) \end{aligned} \quad (1.196)$$

Uma vez que

$$\begin{aligned} (A^\mu + \tilde{\alpha}J_\gamma (O^{\gamma\mu})^{-1}) O_{\mu\nu} (A^\nu + \tilde{\alpha}(O^{\nu\gamma})^{-1} J_\gamma) - \frac{1}{4}J^\mu(x) (O_{\mu\nu})^{-1} J^\nu(y) &= \\ = A^\mu O_{\mu\nu} A^\nu + 2\tilde{\alpha}A^\gamma J_\gamma + \tilde{\alpha}^2 J_\nu (O^{\nu\gamma})^{-1} J_\gamma - \frac{1}{4}J^\mu(x) (O_{\mu\nu})^{-1} J^\nu(y) \end{aligned} \quad (1.197)$$

portanto, para que a expressão (1.195) seja mantida, $\tilde{\alpha} = \frac{1}{2}$, justificando o fator de $\frac{1}{4}$ que acompanha o termo $J^\mu(x) (O_{\mu\nu})^{-1} J^\nu(y)$. Definindo

$$\tilde{A}^\mu \equiv A^\mu + \frac{1}{2}J_\gamma (O^{\gamma\mu})^{-1} \quad (1.198)$$

e

$$\tilde{A}^\nu \equiv A^\nu + \frac{1}{2}(O^{\nu\gamma})^{-1} J_\gamma \quad (1.199)$$

têm-se

$$A^\mu O_{\mu\nu} A^\nu + J^\mu A_\mu = \tilde{A}^\mu O_{\mu\nu} \tilde{A}^\nu - \frac{1}{4} J^\mu(x) (O_{\mu\nu})^{-1} J^\nu(y) \quad (1.200)$$

Portanto

$$\begin{aligned} Z_0 [J_\mu]_{1+1} &= \int \mathcal{D}A_\mu \exp i \int d^4x \left(\frac{1}{2} A^\mu O_{\mu\nu} A^\nu + J^\mu A_\mu \right) \\ &= \int \mathcal{D}\tilde{A}_\mu \exp \frac{i}{2} \int d^4x \tilde{A}^\mu O_{\mu\nu} \tilde{A}^\nu \exp \left[-\frac{i}{4} \int d^4x d^4y J^\mu(x) (O_{\mu\nu})^{-1} J^\nu(y) \right] \end{aligned} \quad (1.201)$$

Definindo

$$N = \int \mathcal{D}\tilde{A}_\mu \exp \frac{i}{2} \int d^4x \tilde{A}^\mu O_{\mu\nu} \tilde{A}^\nu \quad (1.202)$$

e, uma vez que N é constante - a integral sobre \tilde{A}_μ resulta em um número - então

$$Z_0 [J_\mu]_{1+1} = N \exp \left[-\frac{i}{4} \int d^4x d^4y J^\mu(x) (O_{\mu\nu})^{-1} J^\nu(y) \right] \quad (1.203)$$

$D_{\mu\nu}$ é convencionalmente determinado por

$$\Gamma^{\alpha\mu}(k) D_{\mu\nu}(k) = i\delta_\nu^\alpha \quad (1.204)$$

A definição de $\Gamma_{\mu\nu}(x)$ (1.194), escrita no espaço dos momentos

$$\Gamma_{\mu\nu}(k) = -g_{\mu\nu} k^2 + \left(1 - \frac{1}{\alpha} \right) k_\mu k_\nu \quad (1.205)$$

sugere que

$$D_{\mu\nu} = Ag_{\mu\nu} + Bk_\mu k_\nu \quad (1.206)$$

Aplicando (1.204)

$$\Gamma^{\alpha\mu} D_{\mu\nu} = \left[-g^{\alpha\mu} k^2 + \left(1 - \frac{1}{\alpha} \right) k^\alpha k^\mu \right] (Ag_{\mu\nu} + Bk_\mu k_\nu) = i\delta_\nu^\alpha \quad (1.207)$$

então

$$A = -\frac{i}{k^2}, \quad B = -(\alpha - 1) \frac{i}{k^4} \quad (1.208)$$

Logo

$$D_{\mu\nu}(k) = -\frac{i}{k^2} g_{\mu\nu} - i(\alpha - 1) \frac{k_\mu k_\nu}{k^2 k^2} \quad (1.209)$$

Portanto

$$iD_{\mu\nu}(k) = \frac{1}{k^2} g_{\mu\nu} + (\alpha - 1) \frac{k_\mu k_\nu}{k^2 k^2} \quad (1.210)$$

que é o propagador livre do campo de *gauge* no espaço dos momentos. É importante ressaltar

que o propagador livre depende de uma escolha de *gauge* - o *gauge* será fixado quando for atribuído um valor específico para α .

O propagador livre do fóton em $(2 + 1)$ - dimensões

Como descrito na seção anterior, o propagador livre do fóton é obtido a partir da expressão para a lagrangiana (1.160), selecionando apenas os termos quadráticos em A_μ desta expressão. Desta feita, a expressão para o funcional gerador é dada por

$$Z_0 [J_\mu]_{2+1} = \int \mathcal{D}A_\mu \exp i \int d^4x \left(-\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \frac{s}{4} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} A_\alpha F_{\beta\gamma} - \frac{1}{2\alpha} (\partial_\mu A^\mu)^2 + J^\mu A_\mu \right) \quad (1.211)$$

em que o termo $-\frac{s}{4} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} A_\alpha F_{\beta\gamma}$ pode ser reescrito como

$$-\frac{s}{4} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} A_\alpha F_{\beta\gamma} = -\frac{s}{2} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} A_\alpha \partial_\beta A_\gamma. \quad (1.212)$$

Portanto, com (1.191), (1.192) e (1.212), (1.211) se escreve como

$$Z_0 [J_\mu]_{2+1} = \int \mathcal{D}A_\mu \exp i \int d^4x \left\{ \frac{1}{2} A^\mu \left[g_{\mu\nu} \square - \left(1 - \frac{1}{\alpha} \right) \partial_\nu \partial_\mu - s \epsilon_{\mu\nu}^\beta \partial_\beta \right] A^\nu + J^\mu A_\mu \right\}, \quad (1.213)$$

o que permite a convencional definição

$$O_{\mu\nu} \equiv \left[g_{\mu\nu} \square - \left(1 - \frac{1}{\alpha} \right) \partial_\nu \partial_\mu - s \epsilon_{\mu\nu}^\beta \partial_\beta \right], \quad (1.214)$$

tornando possível reescrever (1.213) como

$$Z_0 [J_\mu]_{2+1} = \int \mathcal{D}A_\mu \exp i \int d^4x \left(\frac{1}{2} A^\mu O_{\mu\nu} A^\nu + J^\mu A_\mu \right) \quad (1.215)$$

Com (1.196) é possível ainda reexpressar

$$Z_0 [J_\mu]_{2+1} = \int \mathcal{D}\tilde{A}_\mu \exp \frac{i}{2} \int d^4x \tilde{A}^\mu(x) O_{\mu\nu} \tilde{A}^\nu(y) \exp \left[-\frac{i}{4} \int d^4x d^4y J^\mu(x) (O_{\mu\nu})^{-1} J^\nu(y) \right],$$

e, em analogia ao caso em $(1 + 1)$, com a definição

$$N = \int \mathcal{D}\tilde{A}_\mu \exp \frac{i}{2} \int d^4x \tilde{A}^\mu O_{\mu\nu} \tilde{A}^\nu \quad (1.216)$$

enfim determinar

$$Z_0 [J_\mu]_{2+1} = N \exp \left[-\frac{i}{4} \int d^4x d^4y J^\mu(x) (O_{\mu\nu})^{-1} J^\nu(y) \right] \quad (1.217)$$

Com (1.204), e a definição de $\Gamma_{\mu\nu}$ (1.214) escrita no espaço dos momentos,

$$\Gamma_{\mu\nu}(k) = -g_{\mu\nu}k^2 + \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right) k_\mu k_\nu + i s \epsilon_{\mu\nu}^\beta k_\beta \quad (1.218)$$

sugere que

$$D_{\mu\nu} = Ag_{\mu\nu} + Bk_\mu k_\nu + iC\epsilon_{\mu\beta\nu}k^\beta \quad (1.219)$$

aplicando (1.204)

$$\Gamma^{\alpha\mu} D_{\mu\nu} = \left[-g^{\alpha\mu}k^2 + \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right) k^\alpha k^\mu + i s \epsilon^{\alpha\beta\mu} k_\beta \right] (Ag_{\mu\nu} + Bk_\mu k_\nu + iC\epsilon_{\mu\nu}^\lambda k_\lambda) = i\delta_\nu^\alpha \quad (1.220)$$

então

$$A = \frac{i}{s^2 - k^2}, \quad B = \frac{1}{k^2} \frac{i\alpha}{s^2 - k^2} \left(1 - \frac{1}{\alpha} + \frac{s^2}{k^2}\right), \quad C = \frac{s}{k^2} \frac{i}{s^2 - k^2} \quad (1.221)$$

Portanto

$$iD_{\mu\nu}(k) = \frac{1}{k^2 - s^2} g_{\mu\nu} + \frac{1}{k^2} \frac{\alpha}{k^2 - s^2} \left(1 - \frac{1}{\alpha} + \frac{s^2}{k^2}\right) k_\mu k_\nu + \frac{s}{k^2} \frac{i}{k^2 - s^2} \epsilon_{\mu\beta\nu} k^\beta \quad (1.222)$$

é a expressão para o propagador livre do campo de *gauge* no espaço dos momentos em $(2 + 1) -$ dimensões.

1.1.7 Representação de Källén-Lehmann para a NCQED

Até o presente momento, uma ação geral para a QED definida em um espaço-tempo não comutativo em $\omega -$ dimensões foi definida e adequadamente transcrita para o espaço ordinário (comutativo) via mapa de Seiberg-Witten, ao preço de uma expansão em termos do parâmetro não comutativo, haja vista que a não comutatividade do espaço-tempo, se existir, é bastante pequena. Então, a partir da ação geral em $\omega -$ dimensões, foram particularizados os casos em $(1 + 1) -$ e $(2 + 1) -$ dimensões e determinadas suas respectivas equações de movimento e propagadores. O próximo passo consiste na determinação dos propagadores completos na representação espectral de Källén-Lehmann.

Sejam dois campos de *gauge* $A_\mu(x)$ e $A_\nu(y)$ na descrição de Heisenberg. A função de Wightman ou o valor esperado no vácuo destes dois campos em pontos distintos do espaço-tempo pode ser expresso como

$$\langle \Omega | A_\mu(x) A_\nu(y) | \Omega \rangle = \sum_n \langle \Omega | A_\mu(x) | n \rangle \langle n | A_\nu(y) | \Omega \rangle \quad (1.223)$$

em que está implícita a inserção de uma relação de completeza $\{|n\rangle\}$, tal que $P_\mu |n\rangle = p_\mu^{(n)} |n\rangle$, em que n representa todos os números quânticos que especificam um estado. Baseado apenas

em argumentos gerais sobre invariância e o espectro de P_μ , será construída uma expressão para o propagador completo do fóton.

Para que a função de Wightman possa ser escrita em termos de uma função de densidade espectral, parte-se da premissa de invariância translacional, o que assegura $[A_\mu(x), P_\alpha] = i\partial_\alpha A_\mu(x)$ permitindo que se escreva

$$A_\mu(x) = e^{ip(x-x_0)} A_\mu(x_0) e^{-ip(x-x_0)} \quad (1.224)$$

tal que, evocando a identidade

$$\int d^4p \delta^{(4)}(p^{(n)} - p) = 1 \quad (1.225)$$

e tomando arbitrariamente o ponto $x_0 = 0$, se reescreva a função de Wightman (1.223) como

$$\begin{aligned} \langle \Omega | A_\mu(x) A_\nu(y) | \Omega \rangle &= \int d^4p \sum_n \delta^{(4)}(p^{(n)} - p) \langle \Omega | A_\mu(0) | n \rangle \langle n | A_\nu(0) | \Omega \rangle e^{-ip \cdot (x-y)} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^4p e^{-ip \cdot (x-y)} \times \\ &\quad \times \left[(2\pi)^3 \sum_n \delta^{(4)}(p^{(n)} - p) \langle \Omega | A_\mu(0) | n \rangle \langle n | A_\nu(0) | \Omega \rangle \right] \end{aligned} \quad (1.226)$$

O termo entre colchetes pode ser definido como uma função densidade espectral $\rho_{\mu\nu}(p)$, uma vez que esta quantidade é invariante de Lorentz e, como uma função escalar de p , depende apenas de p^2 . Mais que isto, esta função é nula fora do cone de luz, tornando possível defini-la como

$$\rho_{\mu\nu}(p) \equiv \rho_{\mu\nu}(p^2) \theta(p^0) = (2\pi)^3 \sum_n \delta^{(4)}(p^{(n)} - p) \langle \Omega | A_\mu(0) | n \rangle \langle n | A_\nu(0) | \Omega \rangle \quad (1.227)$$

que é nula para $p^2 < 0$, e é real e positiva definida para $p^2 \geq 0$. Diante disto, é proveitoso fazer uso da identidade

$$\rho_{\mu\nu}(p) = \int_0^\infty d\mathcal{K}^2 \rho_{\mu\nu}(\mathcal{K}^2) \delta(p^2 - \mathcal{K}^2) \quad (1.228)$$

que, junto com a expressão (1.227) permite reescrever a função de Wightman na forma de uma

integral sobre um parâmetro de massa

$$\begin{aligned}
\langle \Omega | A_\mu(x) A_\nu(y) | \Omega \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^4p \theta(p^0) \int_0^\infty d\kappa^2 \rho_{\mu\nu}(\kappa^2) \delta(p^2 - \kappa^2) e^{-ip \cdot (x-y)} \\
&= \int_0^\infty d\kappa^2 \rho_{\mu\nu}(\kappa^2) \left[\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^4p \theta(p^0) \delta(p^2 - \kappa^2) e^{-ip \cdot (x-y)} \right]
\end{aligned} \tag{1.229}$$

em que o termo entre colchetes é a função singular $\Delta^{(+)}(x-y; \kappa^2)$ para a massa κ ; por conseguinte

$$\langle \Omega | A_\mu(x) A_\nu(y) | \Omega \rangle = \int_0^\infty d\kappa^2 \rho_{\mu\nu}(\kappa^2) \Delta^{(+)}(x-y; \kappa^2) \tag{1.230}$$

O produto temporalmente ordenado (ou o propagador) de $A_\mu(x) A_\nu(y)$ é obtido pela combinação da expressão

$$\langle \Omega | A_\mu(x) A_\nu(y) | \Omega \rangle = \int_0^\infty d\kappa^2 \rho_{\mu\nu}(\kappa^2) \Delta^{(+)}(x-y; \kappa^2), \text{ para } x_0 > y_0 \tag{1.231}$$

com a expressão

$$\begin{aligned}
\langle \Omega | A_\nu(y) A_\mu(x) | \Omega \rangle &= \int_0^\infty d\kappa^2 \rho_{\mu\nu}(\kappa^2) \Delta^{(+)}(y-x; \kappa^2) \\
&= - \int_0^\infty d\kappa^2 \rho_{\mu\nu}(\kappa^2) \Delta^{(-)}(x-y; \kappa^2), \text{ para } y_0 > x_0.
\end{aligned} \tag{1.232}$$

Portanto,

$$\langle \Omega | T(A_\mu(x) A_\nu(y)) | \Omega \rangle = \int_0^\infty d\kappa^2 \rho_{\mu\nu}(\kappa^2) \Delta_F(x-y; \kappa^2) \tag{1.234}$$

uma vez que $\Delta_F(x-y; \kappa^2) = \Delta^{(+)}(x-y; \kappa^2) - \Delta^{(-)}(x-y; \kappa^2)$. Aqui, $\Delta_F(x-y; \kappa^2)$ é o propagador de Feynman. A transformada de Fourier de (1.234) fornece o propagador completo

$$D_{\mu\nu}(p^2) = \int_0^\infty d\kappa^2 \rho_{\mu\nu}(\kappa^2) \int d^4x e^{-ip \cdot (x-y)} \Delta_F(x-y; \kappa^2) \tag{1.235}$$

e, uma vez que

$$\int d^4x e^{-ip \cdot (x-y)} \Delta_F(x-y; \kappa^2) = \frac{1}{p^2 - \kappa^2 - i\epsilon} \tag{1.236}$$

se obtém

$$D_{\mu\nu}(p^2) = \int_0^\infty d\chi^2 \frac{\rho_{\mu\nu}(\chi^2)}{p^2 - \chi^2 - i\epsilon} \quad (1.237)$$

que é a representação de Källén-Lehmann para o propagador completo. Do estudo do campo escalar da seção “A representação espectral de Källén-Lehmann”, é possível inferir que

$$\rho_{\mu\nu}(p^2) = \frac{1}{\pi} \text{Im}(D_{\mu\nu}(p^2)), \quad (1.238)$$

obtendo a relação de dispersão

$$D_{\mu\nu}(p^2) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\chi^2 \frac{\text{Im}(D_{\mu\nu}(\chi^2))}{p^2 - \chi^2 - i\epsilon} \quad (1.239)$$

Logo, o propagador completo do fóton pode ser determinado se sua parte imaginária for conhecida. Em tempo, como é possível inferir dos estudos realizados até agora, relações similares às (1.237) e (1.239) podem ser obtidas para os campos de férmions (ou quaisquer outros campos). O passo seguinte consiste na construção das soluções assintóticas dos campos fundamentais, ou seja, das equações de Yang-Feldman baseadas nas equações de movimento satisfeitas pelos campos em estudo.

Assim, a equação de Yang-Feldman para o campo de *gauge* são escritas como

$$A_\mu(x) = A_\mu^{in}(x) - \int d^4y \Delta_{F\mu\nu}^{ret}(x-y) j^\nu(y) \quad (1.240)$$

e

$$A_\mu(x) = A_\mu^{out}(x) - \int d^4y \Delta_{F\mu\nu}^{adv}(x-y) j^\nu(y) \quad (1.241)$$

em que $\Delta_{F\mu\nu}^{ret}(x-y)$ é a função de Green retardada e $\Delta_{F\mu\nu}^{adv}(x-y)$ é a função de Green adiantada. A expansão em Fourier da solução livre do campo de *gauge*, em uma forma geral independente da dimensão do espaço-tempo é escrita como

$$A_\mu(x) = \frac{1}{(2\pi)^{(d-1)/2}} \int d^{d-1}k \sqrt{\frac{1}{2\omega_k}} \sum_j \left[\epsilon_\mu^j(k) a_j(k) e^{-ikx} + \epsilon_\mu^j(-k) a_j^\dagger(k) e^{ikx} \right] \quad (1.242)$$

onde $k = (\omega_k, \vec{k})$ e d é a dimensão do espaço-tempo. Os operadores satisfazem à álgebra

$$\left[a_i(k), a_j^\dagger(k') \right] = \delta^{(d-1)}(k-k') \delta_{i,j} \quad (1.243)$$

Para o campo de *gauge* em $(1+1)$ -dimensões, a equação de movimento (1.169) permite

inferir que a corrente j^α para este caso seja dada por²³

$$j^\alpha = g\bar{\psi}\gamma^\alpha\psi + \frac{g}{2}\theta\epsilon^{\alpha\beta}\partial_\beta\left(m\bar{\psi}\psi - \frac{1}{2}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\right) + \frac{g}{2}\theta\epsilon^{\lambda\sigma}\partial_\rho(F_{\lambda\sigma}F^{\rho\eta}) \quad (1.244)$$

em que a conservação da corrente se verifica imediatamente por $\partial_\alpha j^\alpha = 0$, donde se verifica que o primeiro termo é nulo devido à antissimetria do tensor $F^{\alpha\beta}$ e $\partial_\nu\partial^\nu A^\mu = 0$ independente do *gauge* escolhido. Portanto, a corrente é conservada.

A função de Green retardada é determinada, fazendo uso de (1.210), por intermédio de

$$\Delta_{F\mu\nu}^{ret}(x-y) = \frac{-i}{(2\pi)^2} \int d^2k \left[g_{\mu\nu} + (\alpha-1) \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right] \frac{1}{k^2 + i\epsilon} e^{-ik\cdot(x-y)} \quad (1.245)$$

analogamente, a função de Green avançada é determinada por

$$\Delta_{F\mu\nu}^{adv}(x-y) = \frac{-i}{(2\pi)^2} \int d^2k \left[g_{\mu\nu} + (\alpha-1) \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right] \frac{1}{k^2 - i\epsilon} e^{-ik\cdot(x-y)} \quad (1.246)$$

Em um procedimento similar ao caso em $(1+1)$ -dimensões, para o campo de *gauge* em $(2+1)$ -dimensões, a corrente j^η é obtida a partir da equação de movimento (1.173), se expressando na forma

$$j^\eta = g\bar{\psi}\gamma^\eta\psi + \frac{g}{2}\epsilon^{\eta\rho\gamma}\theta_\gamma\partial_\rho m(\bar{\psi}\psi) - \frac{g}{4}\epsilon^{\eta\rho\gamma}\theta_\gamma\partial_\rho(F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}) + \frac{g}{2}\epsilon^{\beta\alpha\gamma}\theta_\beta\partial_\rho(F_{\alpha\gamma}F^{\rho\eta}) \quad (1.247)$$

que também é uma corrente conservada²⁴.

A função de Green retardada é determinada a partir da expressão (1.222), e é escrita como

$$\Delta_{F\mu\nu}^{ret}(x-y) = \frac{-i}{(2\pi)^2} \int d^2k \left[g_{\mu\nu} + \frac{\alpha}{k^2} \left(1 - \frac{1}{\alpha} + \frac{s^2}{k^2} \right) k_\mu k_\nu + \frac{is}{k^2} \epsilon_{\mu\beta\nu} k^\beta \right] \frac{e^{-ik\cdot(x-y)}}{k^2 - s^2 + i\epsilon} \quad (1.248)$$

ao passo que a função de Green avançada é analogamente determinada por

$$\Delta_{F\mu\nu}^{adv}(x-y) = \frac{-i}{(2\pi)^2} \int d^2k \left[g_{\mu\nu} + \frac{\alpha}{k^2} \left(1 - \frac{1}{\alpha} + \frac{s^2}{k^2} \right) k_\mu k_\nu + \frac{is}{k^2} \epsilon_{\mu\beta\nu} k^\beta \right] \frac{e^{-ik\cdot(x-y)}}{k^2 - s^2 - i\epsilon} \quad (1.249)$$

²³Reescrevendo a equação de movimento de tal forma que os termos lineares dos campos sejam separados dos termos em que os campos aparecem em ordens mais altas, a corrente é composta, portanto, pelos termos em que os campos surgem em ordens mais altas.

²⁴Um pouco de paciência permite que as correntes j^α e j^η sejam escritas na forma

$$j^\beta = g\bar{\psi}\gamma^\beta\psi + \frac{g}{4}\partial_\alpha [\theta^{\alpha\beta} F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + 2(\theta \cdot F) F^{\alpha\beta} - 2m\theta^{\alpha\beta}\bar{\psi}\psi]$$

em que $\theta \cdot F = \theta_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$, tal que as expressões (1.244) e (1.247) são obtidas particularizando esta expressão para $(1+1)$ - e $(2+1)$ -dimensões, respectivamente [49]. Assim, se observa que o primeiro termo desta corrente é o termo de interação do campo de *gauge* usual, enquanto o segundo e terceiro termos estão relacionados com a autointeração do fóton, ao passo que o último termo é um termo de interação do tipo Yukawa. Assim, à exceção da dimensionalidade da integral, a diferença entre as soluções bi e tridimensionais são as funções de Green.

O campo dos férmions têm as funções de Green retardada e avançada e em d dimensões dadas por

$$S^{ret}(x-y) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d p \frac{1}{\gamma \cdot p - m + i\epsilon} e^{-ip \cdot (x-y)} \quad (1.250)$$

e

$$S^{adv}(x-y) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d p \frac{1}{\gamma \cdot p - m - i\epsilon} e^{-ip \cdot (x-y)} \quad (1.251)$$

tal que as equações de Yang-Feldman para o campo dos férmions são escritas como

$$\psi_A(x) = \psi_A^{in}(x) - \int d^4 y S_{AB}^{ret}(x-y) \eta_B(y) \quad (1.252)$$

$$\bar{\psi}_A(x) = \bar{\psi}_A^{in}(x) - \int d^4 y \zeta_B(y) S_{AB}^{adv}(x-y) \quad (1.253)$$

em que η e ζ são correntes. A expansão em Fourier da solução livre do campo dos férmions, de forma geral independente da dimensão do espaço-tempo, é escrita como

$$\psi(x) = \sum_s \frac{1}{(2\pi)^{(d-1)/2}} \int d^{d-1} p \sqrt{\frac{m}{E_p}} [b_s(p) u(p, s) e^{-ipx} + d_s^\dagger(p) v(p, s) e^{ipx}] \quad (1.254)$$

$$\bar{\psi}(x) = \sum_s \frac{1}{(2\pi)^{(d-1)/2}} \int d^{d-1} p \sqrt{\frac{m}{E_p}} [b_s^\dagger(p) \bar{u}(p, s) e^{ipx} + d_s(p) \bar{v}(p, s) e^{-ipx}] \quad (1.255)$$

onde $p = (E_p, \vec{p})$ e d é a dimensão do espaço-tempo. Os operadores satisfazem à álgebra

$$\{d_s(p), d_r^\dagger(k)\} = \{b_s(p), b_r^\dagger(k)\} = \delta^{(d-1)}(p-k) \delta_{rs} \quad (1.256)$$

de forma que o campo dos férmions têm sua lagrangiana em $(1+1)$ – dimensões, \mathcal{L}_{1+1} , escrita como

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{1+1} = & i\bar{\psi}\gamma^\mu \partial_\mu \psi + g\bar{\psi}\gamma^\mu A_\mu \psi - m\bar{\psi}\psi - \frac{mg}{4}\theta\epsilon^{\alpha\beta} F_{\beta\alpha}\bar{\psi}\psi \\ & - \frac{1}{4} \left(1 + \frac{g}{2}\theta\epsilon^{\lambda\sigma} F_{\lambda\sigma}\right) F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{2\alpha} (\partial_\mu A^\mu)^2 \end{aligned} \quad (1.257)$$

Donde se infere que a corrente η para o caso $(1+1)$ – dimensões do campo dos férmions é dada por

$$\eta = g\gamma^\mu A_\mu \psi - \frac{mg}{4}\theta\epsilon^{\alpha\beta} F_{\beta\alpha}\psi \quad (1.258)$$

enquanto a corrente ζ , por

$$\zeta = g\bar{\psi}\gamma^\mu A_\mu - \frac{mg}{4}\theta\epsilon^{\alpha\beta}\bar{\psi}F_{\beta\alpha} \quad (1.259)$$

Analogamente, para $(2 + 1)$ – dimensões, a lagrangiana é escrita como

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{2+1} = & i\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi + g\bar{\psi}\gamma^\mu A_\mu\psi - m\bar{\psi}\psi - \frac{mg}{4}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}\theta_\gamma F_{\beta\alpha}\bar{\psi}\psi \\ & - \frac{1}{4}\left(F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{g}{2}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}\theta_\beta F_{\gamma\alpha}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\right) - \frac{s}{4}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}A_\alpha F_{\beta\gamma} - \frac{1}{2\alpha}(\partial_\mu A^\mu)^2 \end{aligned} \quad (1.260)$$

com a corrente η para o caso $(2 + 1)$ – dimensões do campo dos férmions escrita como

$$\eta = g\gamma^\mu A_\mu\psi - \frac{mg}{4}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}\theta_\gamma F_{\beta\alpha}\psi \quad (1.261)$$

ao passo que a corrente ζ é expressa por

$$\zeta = g\bar{\psi}\gamma^\mu A_\mu - \frac{mg}{4}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}\theta_\gamma\bar{\psi}F_{\beta\alpha} \quad (1.262)$$

Por fim, o propagador completo pode ser obtido a partir da expressão para a função de Wightman dos campos fermiônicos

$$\langle\Omega|\psi_A(x)\bar{\psi}_B(y)|\Omega\rangle = \int_0^\infty ds\rho_{AB}(\gamma.p, s)\Delta^+(x-y; s), \quad (1.263)$$

expressa em termos da função de densidade espectral $\rho_{\mu\nu}(\gamma.p, p^2)$ para o campo dos férmions, explicitamente escrita como

$$\rho_{AB}(\gamma.p, p^2)\tau(p_0) = (2\pi)^3\sum_n\delta^{(4)}(p^{(n)} - p)\langle\Omega|\psi_A(0)|n\rangle\langle n|\bar{\psi}_B(0)|\Omega\rangle, \quad (1.264)$$

ao passo que o propagador completo, expresso em termos desta função de densidade espectral, é dado por

$$S_{AB}(\gamma.p, m) = \int_0^\infty ds\rho_{AB}(\gamma.p, s)\frac{1}{p^2 - s - i\epsilon}. \quad (1.265)$$

Por fim, é importante ressaltar que a unitariedade é perdida para o caso em $(1 + 1)$ – dimensões. Assim, para que a unitariedade seja mantida para o caso em $(2 + 1)$ – dimensões, será assumido que $\theta_{ij} \neq 0$, assim as coordenadas temporais sempre comutarão com as coordenadas espaciais.

A contribuição de uma e duas partículas para a função de densidade espectral em $(1 + 1)$ – dimensões

Vale a pena salientar mais uma vez que na representação espectral de Källén-Lehmann a principal quantidade a ser calculada é a função de densidade espectral (1.227). Devido à invariância relativística, a função de densidade espectral pode ser escrita em termos de projetores como

$$\rho_{\mu\nu}(k^2) = \left(\eta_{\mu\nu} - \frac{k^\mu k^\nu}{k^2}\right)\rho_1(k^2) + \frac{k^\mu k^\nu}{k^2}\rho_2(k^2), \quad (1.266)$$

em que ρ_1 e ρ_2 são funções espectrais escalares.

A parte transversal do propagador completo é, portanto

$$D^t(k^2) = \int_0^\infty ds \rho(s) \frac{1}{k^2 - s - i\epsilon}, \quad (1.267)$$

enquanto o traço da expressão (1.266) fornece

$$\rho_{\mu\mu}(k^2) = \rho_1(k^2) \quad (1.268)$$

e

$$k^\mu k^\nu \rho_{\mu\nu}(k^2) = k^2 \rho_2(k^2). \quad (1.269)$$

Torna-se então possível escrever a função de densidade espectral (1.227) na forma

$$\frac{\rho_{\mu\nu}(k^2) \tau(k_0)}{2\pi} = \int dp_1 \delta^{(2)}(p_1 - k) \sum_j \langle \Omega | A_\mu(0) | p_1, j \rangle \langle p_1, j | A_\nu(0) | \Omega \rangle, \quad (1.270)$$

tal que para contribuição de uma partícula se expressa pela construção os estados de uma partícula, a saber um fóton de momento p_1 e polarização j , que são construídos como

$$|p_1, j\rangle = a_j^\dagger(p_1) |\Omega\rangle. \quad (1.271)$$

Fazendo uso da solução (1.242), é imediato que

$$\begin{aligned} \langle \Omega | A_\mu(0) | p_1, j \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \sum_i \int dk \sqrt{\frac{1}{2\omega_k}} \langle \Omega | [\epsilon_\mu^i(k) a_i(k)] a_j^\dagger(p_1) | \Omega \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \sum_i \int dk \sqrt{\frac{1}{2\omega_k}} \epsilon_\mu^i(k) \delta_{ij} \delta^{(1)}(k - p_1) \\ &= \sqrt{\frac{1}{2^2 \pi \omega_{p_1}}} \epsilon_\mu^j(p_1), \end{aligned} \quad (1.272)$$

e, analogamente

$$\langle p_1, j | A_\nu(0) | \Omega \rangle = \sqrt{\frac{1}{2^2 \pi \omega_{p_1}}} \epsilon_\nu^j(p_1) \quad (1.273)$$

de tal forma que a equação (1.270) se reescreve como

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{\mu\nu}(k^2) \tau(k_0)}{2\pi} &= \int dp_1 \delta^{(2)}(p_1 - k) \frac{1}{4\pi\omega_{p_1}} \sum_j \epsilon_\mu^j(p_1) \epsilon_\nu^j(p_1) \\ &= \int d^2 p \delta^{(2)}(p_1 - k) \frac{1}{4\pi\omega_{p_1}} \delta((p_1)_0 - \omega_{p_1}) [\eta_{\mu\nu}] \end{aligned} \quad (1.274)$$

$$\frac{\rho_{\mu\nu}(k^2) \tau(k_0)}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \int d^2 p_1 \delta(p_1^2) \delta^{(2)}(p_1 - k) \eta_{\mu\nu} \quad (1.275)$$

Logo

$$\rho_{\mu\nu}(k^2) = \delta(k^2) \tau(k_0) \eta_{\mu\nu}, \quad (1.276)$$

tal que seu traço é dado por $\rho_{\mu\mu}(k^2) = 2\delta(k^2) \tau(k_0)$, em que as funções escalares têm a forma

$$\rho_1^{(0)}(k^2) = 2\delta(k^2) \quad (1.277)$$

e

$$\rho_2^{(0)}(k^2) = \delta(k^2) \tau(k_0). \quad (1.278)$$

Portanto, a equação (1.276) representa a contribuição para a função de densidade espectral de estados de uma partícula, e é especialmente interessante porque mostra explicitamente que esta contribuição é uma função delta, o que implica na presença de uma partícula livre, já que esta forma para a função de densidade espectral implica em um propagador livre (explicitamente dado pelo primeiro termo das expressões (1.319) e (1.320)). No entanto, não é possível, a partir desta expressão, atribuir uma massa ao fóton. Em verdade, será visto que a massa para o fóton surgirá a partir da contribuição de duas partículas, ou seja, por correções ao propagador livre. Portanto, a massa do fóton é gerada dinamicamente. Mais que isso, é importante notar que *não existe nenhum efeito não comutativo para a contribuição de uma partícula para a função de densidade espectral*. Contudo, será visto que a contribuição de duas partículas para a função de densidade espectral apresenta efeitos não comutativos como resultado das interações expressas pela corrente (1.244). Desta feita, a função de densidade espectral com a contribuição de duas partículas é escrita como

$$\frac{\rho^{(1)}(k^2) \tau(k_0)}{2\pi} = \int dp_1 dp_2 \delta(k - p_1 - p_2) \sum_{n,m} \langle \Omega | A_\mu(0) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | A^\mu(0) | \Omega \rangle, \quad (1.279)$$

em que n e m representam qualquer número quântico das possíveis partículas intermediárias. Com a equação de Yang-Feldman (1.240), esta equação pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \frac{\rho^{(1)}(k^2) \tau(k_0)}{2\pi} &= \int dp_1 dp_2 \delta^{(2)}(k - p_1 - p_2) \eta^{\mu\nu} \times \\ &\times \sum_{n,m} \langle \Omega | A_\mu^{in}(0) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | A_\nu^{in}(0) | \Omega \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \int dp_1 dp_2 \int d^2 y \delta^{(2)}(k - p_1 - p_2) \eta^{\mu\nu} \times \\
& \times \sum_{n,m} \Delta_{\nu\rho}^{ret}(-y) \langle \Omega | A_\mu^{in}(0) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | (j^{in})^\rho(y) | \Omega \rangle \\
& - \int dp_1 dp_2 \int d^2 y \delta^{(2)}(k - p_1 - p_2) \eta^{\mu\nu} \times \\
& \times \sum_{n,m} \Delta_{\mu\sigma}^{ret}(-y) \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(y) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | A_\nu(0) | \Omega \rangle \\
& + \int dp_1 dp_2 \int d^2 z d^2 w \delta^{(2)}(k - p_1 - p_2) \Delta_{\mu\sigma}^{ret}(-z) \Delta_{\nu\rho}^{ret}(-w) \eta^{\mu\nu} \times \\
& \times \sum_{n,m} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle, \tag{1.280}
\end{aligned}$$

em que j^{in} representa a corrente (1.244) escrita em termos dos campos assintóticos. Ao observar a estrutura desta corrente se verifica, além do termo usual da QED, uma contribuição derivativa dos férmions e também um termo de autointeração do campo de *gauge*, de tal forma que os estados intermediários, que levam em conta todas as interações possíveis, podem ser escritos como

$$\sum_{n,m} |p_1, n; p_2, m\rangle = \sum_{i,j} a_i^\dagger(p_1) a_j^\dagger(p_2) |\Omega\rangle + \sum_{r,s} d_r^\dagger(p_1) b_s^\dagger(p_2) |\Omega\rangle, \tag{1.281}$$

em que o primeiro termo é caracterizado por dois fótons que carregam momento e polarização dados por (p_1, i) e (p_2, j) , enquanto o segundo termo corresponde ao par férmion e antiférmion caracterizados por seu momento e spin (p_1, r) e (p_2, s) , respectivamente. E assim, a expressão para a soma dos elementos de matriz se torna

$$\begin{aligned}
& \sum_{n,m} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle = \\
& = \sum_{i,j} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, i; p_2, j \rangle \langle p_1, i; p_2, j | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle \\
& + \sum_{r,s} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, r; p_2, s \rangle \langle p_1, r; p_2, s | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle. \tag{1.282}
\end{aligned}$$

Desta feita, uma vez que o primeiro, o segundo e o terceiro termos são nulos, a expressão para

a função de densidade espectral se reescreve como

$$\begin{aligned} \frac{\rho^{(1)}(k^2) \tau(k_0)}{2\pi} &= \int dp_1 dp_2 \int d^2 z d^2 w \delta^{(2)}(k - p_1 - p_2) \eta^{\mu\nu} \Delta_{\mu\sigma}^{ret}(-z) \Delta_{\nu\rho}^{ret}(-w) \times \\ &\times \left[\sum_{r,s} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, r; p_2, s \rangle \langle p_1, r; p_2, s | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle + \right. \\ &\left. + \sum_{i,j} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, i; p_2, j \rangle \langle p_1, i; p_2, j | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle \right], \quad (1.283) \end{aligned}$$

e o próximo passo consiste em calcular separadamente os elementos de matriz das correntes (1.282). Para isso, é necessário primeiramente calcular a contribuição dos férmions. Assim,

$$\begin{aligned} \langle \Omega | (j^{in})^\beta(z) | p_1, r; p_2, s \rangle &= g \langle \Omega | \bar{\psi}^{in}(z) \gamma^\beta \psi^{in}(z) | p_1, r; p_2, s \rangle \\ &\quad - \frac{mg\theta}{2} \epsilon^{\alpha\beta} \langle \Omega | \partial_\alpha [\bar{\psi}^{in} \psi^{in}](z) | p_1, r; p_2, s \rangle. \quad (1.284) \end{aligned}$$

Calculando cada um dos termos separadamente

$$\langle \Omega | \bar{\psi}^{in}(z) \gamma^\beta \psi^{in}(z) | p_1, r; p_2, s \rangle = (\gamma^\beta)_{AB} \langle \Omega | \bar{\psi}_A^{in}(z) \psi_B^{in}(z) d_r^\dagger(p_1) b_s^\dagger(p_2) | \Omega \rangle, \quad (1.285)$$

e com as soluções (1.254) e (1.255)

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \bar{\psi}^{in}(z) \gamma^\beta \psi^{in}(z) | p_1, r; p_2, s \rangle &= \frac{m}{(2\pi)} \sum_{t,t_1} \int dp_3 dp_4 \sqrt{\frac{1}{E_{p_3} E_{p_4}}} (\gamma^\beta)_{AB} \times \\ &\times e^{-iz(p_3+p_4)} \bar{v}_A(p_3, t) u_B(p_4, t_1) \times \\ &\times \langle \Omega | d_t(p_3) b_{t_1}(p_4) d_r^\dagger(p_1) b_s^\dagger(p_2) | \Omega \rangle, \quad (1.286) \end{aligned}$$

em que, com o uso da álgebra (1.256)

$$\langle \Omega | d_t(p_3) b_{t_1}(p_4) d_r^\dagger(p_1) b_s^\dagger(p_2) | \Omega \rangle = -\delta_{s,t_1} \delta_{r,t} \delta^{(1)}(p_3 - p_1) \delta^{(1)}(p_2 - p_4), \quad (1.287)$$

permite então reescrever

$$\langle \Omega | \bar{\psi}^{in}(z) \gamma^\beta \psi^{in}(z) | p_1, r; p_2, s \rangle = -\frac{m}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} (\gamma^\beta)_{AB} \bar{v}_A(p_1, r) u_B(p_2, s) e^{-iz(p_1+p_2)}, \quad (1.288)$$

e, de forma análoga, os termos

$$\langle p_1, r; p_2, s | \bar{\psi}^{in}(w) \gamma^\beta \psi^{in}(w) | \Omega \rangle = -\frac{m}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} (\gamma^\beta)_{AB} e^{iw(p_1+p_2)} \bar{u}_A(p_2, s) v_B(p_1, r) \quad (1.289)$$

$$\langle \Omega | \partial_\alpha [\bar{\psi}^{in} \psi^{in}] (z) | p_1, r; p_2, s \rangle = \frac{m}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} (i (p_1 + p_2)_\alpha) e^{-iz(p_1+p_2)} \bar{v}_A (p_1, r) u_A (p_2, s) \quad (1.290)$$

$$\langle p_1, r; p_2, s | \partial_\alpha [\bar{\psi}^{in} \psi^{in}] (w) | \Omega \rangle = -\frac{m}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} e^{iw(p_1+p_2)} (i (p_1 + p_2)_\alpha) \bar{u}_A (p_2, s) v_A (p_1, r). \quad (1.291)$$

Portanto

$$\begin{aligned} \langle \Omega | (j^{in})^\beta (z) | p_1, r; p_2, s \rangle &= -\frac{mg}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} e^{-iz(p_1+p_2)} \bar{v}_A (p_1, r) \times \\ &\times \left[(\gamma^\beta)_{AB} - \frac{im\theta}{2} \delta_{AB} \epsilon^{\alpha\beta} (p_1 + p_2)_\alpha \right] u_B (p_2, s), \end{aligned} \quad (1.292)$$

e

$$\begin{aligned} \langle p_1, r; p_2, s | (j^{in})^\beta (z) | \omega \rangle &= -\frac{mg}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} e^{iw(p_1+p_2)} \bar{u}_C (p_2, s) \times \\ &\times \left[(\gamma^\beta)_{CD} + \frac{im\theta}{2} \delta_{CD} \epsilon^{\alpha\beta} (p_1 + p_2)_\alpha \right] v_D (p_1, r). \end{aligned} \quad (1.293)$$

findando os cálculos para os termos fermiônicos. Desta feita, um procedimento análogo pode ser efetuado para o campo de *gauge*

$$\langle \Omega | (j^{in})^\sigma (z) | p_1, i; p_2, j \rangle = \frac{3g\theta}{2} \epsilon^{\delta\alpha} \langle \Omega | \partial_\alpha [F^{\sigma\nu} F_{\nu\delta}] (z) | p_1, i; p_2, j \rangle \quad (1.294)$$

Fazendo uso da solução (1.242)

$$\begin{aligned} &\langle \Omega | \partial_\alpha [F^{\sigma\nu} F_{\nu\delta}] (z) | p_1, i; p_2, j \rangle = \\ &= \partial_\alpha^z \left\langle \Omega \left| [\partial^\sigma A^\nu \partial_\nu A_\delta - \partial^\sigma A^\nu \partial_\delta A_\nu - \partial^\nu A^\sigma \partial_\nu A_\delta + \partial^\nu A^\sigma \partial_\delta A_\nu] (z) a_i^\dagger (p_1) a_j^\dagger (p_2) \right| \Omega \right\rangle \end{aligned} \quad (1.295)$$

para obter

$$\begin{aligned}
\langle \Omega | \partial_\alpha [F^{\sigma\nu} F_{\nu\delta}] (z) | p_1, i; p_2, j \rangle &= \frac{i}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{-iz(p_1+p_2)} \times \\
&\times [(p_1)^\sigma (p_2)_\nu \epsilon^{i,\nu} (p_1) \epsilon_\delta^j (p_2) + (p_2)^\sigma (p_1)_\nu \epsilon^{j,\nu} (p_2) \epsilon_\delta^i (p_1)] \\
&- \frac{i}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{-iz(p_1+p_2)} \times \\
&\times [(p_1)^\sigma (p_2)_\delta \epsilon^{i,\nu} (p_1) \epsilon_\nu^j (p_2) + (p_2)^\sigma (p_1)_\delta \epsilon^{j,\nu} (p_2) \epsilon_\nu^i (p_1)] \\
&- \frac{i}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{-iz(p_1+p_2)} (p_1) \times \\
&\times (p_2) [\epsilon^{i,\sigma} (p_1) \epsilon_\delta^j (p_2) + \epsilon^{j,\sigma} (p_2) \epsilon_\delta^i (p_1)] \\
&+ \frac{i}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{-iz(p_1+p_2)} \times \\
&\times [(p_1)^\nu (p_2)_\delta \epsilon^{i,\sigma} (p_1) \epsilon_\nu^j (p_2) + (p_2)^\nu (p_1)_\delta \epsilon^{j,\sigma} (p_2) \epsilon_\nu^i (p_1)],
\end{aligned} \tag{1.296}$$

e, de maneira similar

$$\begin{aligned}
\langle p_1, i; p_2, j | \partial_\alpha [F^{\sigma\nu} F_{\nu\delta}] (w) | \Omega \rangle &= -\frac{i}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{iw(p_1+p_2)} \times \\
&\times [(p_1)^\sigma (p_2)_\nu \epsilon_\delta^j (p_2) \epsilon^{i,\nu} (p_1) + (p_2)^\sigma (p_1)_\nu \epsilon_\delta^i (p_1) \epsilon^{j,\nu} (p_2)] \\
&+ \frac{i}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{iw(p_1+p_2)} \times \\
&\times [(p_1)^\sigma (p_2)_\delta \epsilon_\nu^j (p_2) \epsilon^{i,\nu} (p_1) + (p_2)^\sigma (p_1)_\delta \epsilon_\nu^i (p_1) \epsilon^{j,\nu} (p_2)] \\
&+ \frac{i}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{iw(p_1+p_2)} (p_1) \times \\
&\times (p_2) [\epsilon_\delta^j (p_2) \epsilon^{i,\sigma} (p_1) + \epsilon_\delta^i (p_1) \epsilon^{j,\sigma} (p_2)] \\
&- \frac{i}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{iw(p_1+p_2)} \times \\
&\times [(p_2)_\delta (p_1)^\nu \epsilon^{i,\sigma} (p_1) \epsilon_\nu^j (p_2) + (p_1)_\delta (p_2)^\nu \epsilon^{j,\sigma} (p_2) \epsilon_\nu^i (p_1)],
\end{aligned} \tag{1.297}$$

e finalmente determinar

$$\begin{aligned}
& \sum_{r,s} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, r; p_2, s \rangle \langle p_1, r; p_2, s | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle = \\
& = \frac{m^2 g^2 e^{-i(z-w)(p_1+p_2)}}{(2\pi)^2 E_{p_1} E_{p_2}} \left[(\gamma^\sigma)_{AB} + \frac{im\theta}{2} \delta_{AB} \epsilon^{\alpha\sigma} (p_1 + p_2)_\alpha \right] \times \\
& \times \left[(\gamma^\rho)_{CD} - \frac{im\theta}{2} \delta_{CD} \epsilon^{\lambda\rho} (p_1 + p_2)_\lambda \right] \sum_{r,s} \bar{v}_A(p_1, r) u_B(p_2, s) \bar{u}_C(p_2, s) v_D(p_1, r)
\end{aligned} \tag{1.298}$$

com

$$\begin{aligned}
\sum_{r,s} \bar{v}_A(p_1, r) u_B(p_2, s) \bar{u}_C(p_2, s) v_D(p_1, r) & = \sum_s u_B(p_2, s) \bar{u}_C(p_2, s) \times \\
& \times \sum_r v_D(p_1, r) \bar{v}_A(p_1, r) \\
& = \left(\frac{\gamma \cdot p_2 + m}{2m} \right)_{BC} \left(\frac{\gamma \cdot p_1 - m}{2m} \right)_{DA} \tag{1.299}
\end{aligned}$$

então

$$\begin{aligned}
& \sum_{r,s} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, r; p_2, s \rangle \langle p_1, r; p_2, s | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle = \\
& = \frac{g^2 e^{-i(z-w)(p_1+p_2)}}{4(2\pi)^2 E_{p_1} E_{p_2}} \left[\text{Tr} [\gamma^\sigma [\gamma \cdot p_2 + m] \gamma^\rho [\gamma \cdot p_1 - m]] \right. \\
& \quad - im^2 \theta \epsilon^{\lambda\rho} (p_1 + p_2)_\lambda (p_1 - p_2)^\sigma + im^2 \theta \epsilon^{\lambda\sigma} (p_1 + p_2)_\lambda (p_1 - p_2)^\rho \\
& \quad \left. + \frac{m^2 \theta^2}{2} \epsilon^{\alpha\sigma} \epsilon^{\lambda\rho} (p_1 + p_2)_\alpha (p_1 + p_2)_\lambda (p_1 \cdot p_2 - m^2) \right], \tag{1.300}
\end{aligned}$$

em que as propriedades do traço

$$\begin{aligned}
\text{Tr} [[\gamma \cdot p_1 - m] \gamma^\sigma [\gamma \cdot p_2 + m]] & = 2m (p_1 - p_2)^\sigma \\
\text{Tr} [[\gamma \cdot p_2 + m] \gamma^\rho [\gamma \cdot p_1 - m]] & = 2m (p_1 - p_2)^\rho \\
\text{Tr} [[\gamma \cdot p_1 - m] [\gamma \cdot p_2 + m]] & = 2 (p_1 \cdot p_2 - m^2),
\end{aligned} \tag{1.301}$$

foram aplicadas.

Portanto, a expressão para a contribuição de duas partículas para a função de densidade espectral é escrita como

$$\begin{aligned}
\frac{\rho^{(1)}(k^2) \tau(k_0)}{2\pi} &= \left(\frac{g}{4\pi}\right)^2 \int d^2 p_1 d^2 p_2 \int d^2 z d^2 w \delta^{(2)}(k - p_1 - p_2) \eta^{\mu\nu} e^{-i(z-w)(p_1+p_2)} \\
&\times \Delta_{\mu\sigma}^{ret}(-z) \Delta_{\nu\rho}^{ret}(-w) \left[\frac{\delta((p_1)_0 - E_{p_1}) \delta((p_2)_0 - E_{p_2})}{E_{p_1} E_{p_2}} \Pi^{\sigma\rho} \right. \\
&\left. - \frac{9\theta^2 \delta((p_1)_0 - \omega_{p_1}) \delta((p_2)_0 - \omega_{p_2})}{4 \omega_{p_1} \omega_{p_2}} \epsilon^{\delta\alpha} \epsilon^{\lambda\xi} \times \right. \\
&\left. \times (p_1 + p_2)_\alpha (p_1 + p_2)_\xi \sum_{i,j} \Xi_{ij}^{\sigma\rho\delta\lambda} \right], \tag{1.302}
\end{aligned}$$

em que

$$\begin{aligned}
\Pi^{\sigma\rho}(p_1, p_2; m, \theta) &= \text{Tr}[\gamma^\sigma [\gamma \cdot p_2 + m] \gamma^\rho [\gamma \cdot p_1 - m]] - im^2 \theta \epsilon^{\lambda\rho} (p_1 + p_2)_\lambda (p_1 - p_2)^\sigma \\
&+ \frac{m^2 \theta^2}{2} \epsilon^{\alpha\sigma} \epsilon^{\lambda\rho} (p_1 + p_2)_\alpha (p_1 + p_2)_\lambda (p_1 \cdot p_2 - m^2) \\
&+ im^2 \theta \epsilon^{\lambda\sigma} (p_1 + p_2)_\lambda (p_1 - p_2)^\rho \tag{1.303}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j} \Xi_{ij}^{\sigma\rho\delta\lambda}(p_1, p_2) &= \left[(p_1)^\sigma (p_2)_\nu \epsilon^{i,\nu} (p_1) \epsilon_\delta^j (p_2) + (p_2)^\sigma (p_1)_\nu \epsilon^{j,\nu} (p_2) \epsilon_\delta^i (p_1) \right. \\
&- (p_1)^\sigma (p_2)_\delta \epsilon^{i,\nu} (p_1) \epsilon_\nu^j (p_2) - (p_2)^\sigma (p_1)_\delta \epsilon^{j,\nu} (p_2) \epsilon_\nu^i (p_1) \\
&- (p_1 \cdot p_2) \epsilon^{i,\sigma} (p_1) \epsilon_\delta^j (p_2) - (p_1 \cdot p_2) \epsilon^{j,\sigma} (p_2) \epsilon_\delta^i (p_1) \\
&\left. + (p_1)^\nu (p_2)_\delta \epsilon^{i,\sigma} (p_1) \epsilon_\nu^j (p_2) + (p_2)^\nu (p_1)_\delta \epsilon^{j,\sigma} (p_2) \epsilon_\nu^i (p_1) \right] \\
&\times \left[- (p_1)^\rho (p_2)_\chi \epsilon_\lambda^j (p_2) \epsilon^{i,\chi} (p_1) - (p_2)^\rho (p_1)_\chi \epsilon_\lambda^i (p_1) \epsilon^{j,\chi} (p_2) \right. \\
&+ (p_1)^\rho (p_2)_\lambda \epsilon_\chi^j (p_2) \epsilon^{i,\chi} (p_1) + (p_2)^\rho (p_1)_\lambda \epsilon_\chi^i (p_1) \epsilon^{j,\chi} (p_2) \\
&+ (p_1 \cdot p_2) \epsilon_\lambda^j (p_2) \epsilon^{i\rho} (p_1) + (p_1 \cdot p_2) \epsilon_\lambda^i (p_1) \epsilon^{j\rho} (p_2) \\
&\left. - (p_2)_\lambda (p_1)^\chi \epsilon^{i\rho} (p_1) \epsilon_\chi^j (p_2) - (p_1)_\lambda (p_2)^\chi \epsilon^{j\rho} (p_2) \epsilon_\chi^i (p_1) \right]. \tag{1.304}
\end{aligned}$$

Contudo, a relação

$$\tau(\pm k_0) \delta(k^2 - m^2) = \frac{1}{2E_k} \delta(k_0 \mp E_k), \tag{1.305}$$

permite simplificar a expressão para a função de densidade espectral de duas partículas como

$$\begin{aligned}
\frac{\rho^{(1)}(k^2) \tau(k_0)}{2\pi} &= \left(\frac{g}{2\pi}\right)^2 \frac{1}{(k^2 - i\epsilon k_0)^2} \eta^{\mu\nu} \left(\eta_{\mu\sigma} - \frac{k_\mu k_\sigma}{k^2}\right) \left(\eta_{\rho\nu} - \frac{k_\rho k_\nu}{k^2}\right) \int d^2 p_1 d^2 p_2 \\
&\times \left[\delta((p_1)^2 - m^2) \tau((p_1)_0) \delta((p_2)^2 - m^2) \tau((p_2)_0) \Pi^{\sigma\rho}(p_1, p_2; m, \theta) \right. \\
&- \frac{9\theta^2}{4} \delta((p_1)^2) \tau((p_1)_0) \delta((p_2)^2) \tau((p_2)_0) \epsilon^{\delta\alpha} \epsilon^{\lambda\xi} (p_1 + p_2)_\alpha (p_1 + p_2)_\xi \times \\
&\left. \times \sum_{i,j} \Xi_{ij}^{\sigma\rho\delta\lambda}(p_1, p_2) \right] \delta^{(2)}(k - p_1 - p_2) \quad (1.306)
\end{aligned}$$

tal que, integrando em p_2 e $p_1 \rightarrow p$, resulta em

$$\begin{aligned}
\frac{\rho^{(1)}(k^2) \tau(k_0)}{2\pi} &= \left(\frac{g}{2\pi}\right)^2 \frac{1}{(k^2 - i\epsilon k_0)^2} \int d^2 p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) \times \\
&\times \left[\delta(p^2 - m^2) \delta((k-p)^2 - m^2) \Pi^{\sigma\rho}(p, k-p; m, \theta) \right. \\
&\left. + \delta(p^2) \delta((k-p)^2) \sum_{i,j} \Xi_{ij}^{\sigma\rho}(p, k-p) \right], \quad (1.307)
\end{aligned}$$

e resta apenas determinar o produto dos termos de Lorentz com índices contraídos. Desta feita, o termo

$$\begin{aligned}
\left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) \Pi^{\sigma\rho}(p, k-p; m, \theta) &= 2 \left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) ((k-p)^\sigma p^\rho - p \cdot (k-p) \eta^{\sigma\rho} + (k-p)^\rho p^\sigma) \\
&- 2m^2 \left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) \eta^{\sigma\rho} - im^2 \left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) \tilde{k}^\rho (2p-k)^\sigma \\
&+ im^2 \left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) \tilde{k}^\sigma (2p-k)^\rho \\
&+ \frac{m^2}{2} \left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) \tilde{k}^\sigma \tilde{k}^\rho (p \cdot (k-p) - m^2) \quad (1.308)
\end{aligned}$$

pode ser reescrito, considerando as simplificações $\tilde{k} \cdot k = k_\alpha \theta^{\alpha\beta} k_\beta = 0$, $\tilde{k} \cdot \tilde{k} = k_\alpha \theta^{\alpha\beta} k^\pi \theta_{\pi\beta} = -k_\alpha \theta^{\alpha\beta} \theta_{\beta\pi} k^\pi = -(k \circ k)$ e $k^2 = 2(k \cdot p)$, na forma

$$\left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) \Pi^{\sigma\rho}(p, k-p; m, \theta) = -2p^2 - 2m^2 - \frac{m^2}{4} (k \circ k) (k^2 - 2p^2 - 2m^2). \quad (1.309)$$

Finalmente, o termo

$$\begin{aligned}
& \left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2} \right) \sum_{i,j} \Xi_{ij}^{\sigma\rho\delta\lambda} (p, k-p) = \\
= & \left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2} \right) \sum_{i,j} \left[p^\sigma (k-p)_\nu \epsilon^{i,\nu} (p) \epsilon_\delta^j (k-p) \right. \\
& + (k-p)^\sigma p_\nu \epsilon^{j,\nu} (k-p) \epsilon_\delta^i (p) - p^\sigma (k-p)_\delta \epsilon^{i,\nu} (p) \epsilon_\nu^j (k-p) \\
& - (k-p)^\sigma p_\delta \epsilon^{j,\nu} (k-p) \epsilon_\nu^i (p) - (p \cdot (k-p)) \epsilon^{i,\sigma} (p) \epsilon_\delta^j (k-p) \\
& - (p \cdot (k-p)) \epsilon^{j,\sigma} (k-p) \epsilon_\delta^i (p) \\
& \left. + p^\nu (k-p)_\delta \epsilon^{i,\sigma} (p) \epsilon_\nu^j (k-p) + (k-p)^\nu p_\delta \epsilon^{j,\sigma} (k-p) \epsilon_\nu^i (p) \right] \\
& \times \left[-p^\rho (k-p)_\chi \epsilon_\lambda^j (k-p) \epsilon^{i,\chi} (p) - (k-p)^\rho p_\chi \epsilon_\lambda^i (p) \epsilon^{j,\chi} (k-p) \right. \\
& + p^\rho (k-p)_\lambda \epsilon_\chi^j (k-p) \epsilon^{i,\chi} (p) + (k-p)^\rho p_\lambda \epsilon_\chi^i (p) \epsilon^{j,\chi} (k-p) \\
& + (p \cdot (k-p)) \epsilon_\lambda^j (k-p) \epsilon^{i\rho} (p) + (p \cdot (k-p)) \epsilon_\lambda^i (p) \epsilon^{j\rho} (k-p) \\
& \left. - (k-p)_\lambda p^\chi \epsilon^{i\rho} (p) \epsilon_\chi^j (k-p) - p_\lambda (k-p)^\chi \epsilon^{j\rho} (k-p) \epsilon_\chi^i (p) \right]
\end{aligned} \tag{1.310}$$

adquire a forma final com as simplificações $p^2 = 0$, $2(p \cdot k) = k^2$, $(k \cdot p)_\theta = k_\alpha \theta^{\alpha\beta} p_\beta$ e $\tilde{a} \cdot \tilde{b} = -(a \circ b)$, resultando em

$$\begin{aligned}
\left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2} \right) \sum_{i,j} \Xi_{ij}^{\sigma\rho} (p, k-p; \theta) &= -\frac{k^2 k^2}{2} (k \circ k) + 3k^2 (k \cdot p)_\theta (k \cdot p)_\theta \\
&\quad - \frac{k^2 k^2}{2} (k \circ p) + \frac{k^2 k^2}{2} (p \circ p).
\end{aligned} \tag{1.311}$$

tal que, para $\theta^{\mu\nu} = \theta \epsilon^{\mu\nu}$

$$\left(\eta_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2} \right) \sum_{i,j} \Xi_{ij}^{\sigma\rho} (p, k-p; \theta) = 0. \tag{1.312}$$

em que estão implícitos aqui numerosos cálculos.

O elemento de matriz que corresponde à autointeração do fóton (que surge como um novo efeito à teoria usual causado pela não comutatividade do espaço-tempo) é explicitamente dado por

$$\begin{aligned}
\rho_{self-int}^{(1)}(k^2) \tau(k_0) &= \int dp_1 dp_2 \int d^2 z d^2 w \delta^{(2)}(k - p_1 - p_2) \eta_{\mu\nu} \Delta^{\mu\sigma(ret)}(-z) \times \\
&\quad \times \Delta^{\nu\rho(ret)}(-w) \sum_{i,j} \langle \Omega | j_\sigma^{in}(z) | p_1, i; p_2, j \rangle \langle p_1, i; p_2, j | j_\rho^{in}(w) | \Omega \rangle, \\
&= \frac{g^2}{4\pi} \frac{1}{(k^2)^2} \int d^2 p \tau(p_0) \delta(p^2) \tau(k_0 - p_0) \delta((k - p)^2) \times \\
&\quad \times \left[(p \circ p) - (k \circ k) - (k \circ p) + \frac{6}{k^2} (k \times p)^2 \right]. \tag{1.313}
\end{aligned}$$

Assim, a expressão final para a contribuição de duas partículas para a função de densidade espectral (com $\theta^{\mu\nu} = \theta \epsilon^{\mu\nu}$) é dada por

$$\begin{aligned}
\rho^{(1)}(k^2) \tau(k_0) &= \frac{g^2}{2\pi} \frac{1}{(k^2)^2} \left[-4m^2 \left[1 - \frac{\theta^2 k^2}{16} (k^2 - 4m^2) \right] \times \right. \\
&\quad \times \int d^2 p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \delta(p^2 - m^2) \delta((k - p)^2 - m^2) \\
&\quad \left. + \frac{3}{2} k^2 k^2 \theta^2 \int d^2 p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \delta(p^2) \delta((k - p)^2) \right] \tag{1.314}
\end{aligned}$$

em que uma integral útil em $(1 + 1)$ –dimensões para $\vec{k} = 0$ (ou seja, o centro de massa) será

$$\begin{aligned}
I_0 &= \int d^2 p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \delta(p^2 - m^2) \delta((k - p)^2 - m^2) \\
&= \int \frac{dp_1}{2\mathcal{E}} \tau(k_0 - \mathcal{E}) \delta(-2k_0 \mathcal{E} + k_0^2) \tag{1.315}
\end{aligned}$$

em que $\mathcal{E}^2 = |\vec{p}|^2 + m^2, (p_1 = |\vec{p}|)$ $\mathcal{E} d\mathcal{E} = |\vec{p}| d|\vec{p}| \rightarrow d|\vec{p}| = \frac{\mathcal{E}}{\sqrt{\mathcal{E}^2 - m^2}} d\mathcal{E}$, e também $|\vec{p}| = k_0^2 - 4m^2$. Logo,

$$\begin{aligned}
I_0 &= \tau(k_0^2 - 4m^2) \int d\mathcal{E} \frac{\mathcal{E}}{\sqrt{\mathcal{E}^2 - m^2}} \frac{1}{2\mathcal{E}} \frac{1}{2k_0} \delta\left(\mathcal{E} - \frac{k_0}{2}\right) \tau(k_0 - \mathcal{E}) \\
&= \frac{1}{4} \tau(k_0^2 - 4m^2) \int d\mathcal{E} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}^2 - m^2}} \frac{1}{k_0} \delta\left(\mathcal{E} - \frac{k_0}{2}\right) \tau(k_0 - \mathcal{E}) \\
&= \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{\frac{k_0^2}{4} - m^2}} \frac{1}{k_0} \tau(k_0^2 - 4m^2) \tau(k_0) \\
&= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{4m^2}{k_0^2}}} \frac{1}{k_0^2} \tau(k_0^2 - 4m^2) \tau(k_0), \tag{1.316}
\end{aligned}$$

de tal forma que, ao retornar a expressão para um referencial arbitrário, este resultado toma a

forma

$$I_0 = \frac{1}{2k^2} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{4m^2}{k^2}}} \tau(k^2 - 4m^2) \tau(k_0), \quad (1.317)$$

e permite escrever a expressão final para a contribuição de duas partículas para a função de densidade espectral como

$$\rho^{(1)}(k^2) \tau(k_0) = -\frac{g^2}{2\pi} \frac{2m^2}{k^2 k^2 k^2} \left[1 - \frac{\theta^2 k^2}{16} (k^2 - 4m^2) \right] \frac{\tau(k^2 - 4m^2)}{\sqrt{1 - \frac{4m^2}{k^2}}} \quad (1.318)$$

a forma não trivial desta expressão, quando comparada à expressão para a contribuição de uma partícula à função de densidade espectral dada por uma função delta, exprime nitidamente os efeitos da interação, que é a de espalhar a função de densidade espectral em uma ampla faixa de energia, representando que nesta região impera o contínuo de estados de duas partículas. Também é possível notar a presença de um termo proporcional a θ , indicando correções à função de densidade espectral derivadas da não comutatividade do espaço-tempo.

Por fim, a expressão final para o propagador (1.267) com a contribuição de uma e duas partículas é dada por

$$\begin{aligned} i\mathcal{D}(k^2) &= \frac{2}{k^2} + \frac{g^2 m^2}{\pi k^2} \int_{4m^2}^{\infty} \frac{d\chi}{\chi^2 (k^2 - \chi - i\epsilon)} \frac{\left[1 + \frac{(k \circ k)}{16} (\chi - 4m^2) \right]}{\sqrt{1 - \frac{4m^2}{\chi}}} \\ &+ \frac{g^2 \theta^2}{4\pi k^2} \int_{\lambda^2}^{\infty} \frac{d\chi}{\chi (k^2 - \chi - i\epsilon)}, \end{aligned} \quad (1.319)$$

tal que, para $\theta^{\mu\nu} = \theta \epsilon^{\mu\nu}$, se obtém a contribuição de uma e duas partículas para o propagador do fóton na representação espectral de Källén-Lehmann

$$\begin{aligned} i\mathcal{D}(k^2) &= \frac{2}{k^2} + \frac{g^2 \theta^2}{4\pi k^4} \ln \left(1 - \frac{k^2}{\lambda^2} \right) \\ &+ \frac{g^2}{8\pi k^4} \left\{ (4 + k^2 \theta^2 m^2) - \frac{m^2 [16 - k^2 \theta^2 (k^2 - 4m^2)]}{\sqrt{k^2 (4m^2 - k^2)}} \csc^{-1} \left(\frac{2m}{\sqrt{k^2}} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (1.320)$$

em que o primeiro termo deste propagador corresponde ao propagador livre, fruto da contribuição de uma partícula para a função de densidade espectral, ao passo que os termos seguintes são as correções a este propagador livre dadas pela contribuição de duas partículas.

É claro que todos os termos proporcionais a θ desta expressão são manifestações da não comutatividade do espaço-tempo. Contudo, a ausência de um significado físico para θ impede uma adequada interpretação para estes novos termos. Resta então comparar este resultado ao resultado conhecido na literatura [50], em que este mesmo problema foi estudado em termos da teoria da perturbação. Desta feita, o termo entre chaves na equação (1.320) é tal que, quando

o limite $m \rightarrow 0$ é tomado e as bolhas de polarização do vácuo são adicionadas, dá surgimento à massa de Schwinger $m_A^2 = \frac{g^2}{\pi}$, que corresponde à massa do fóton. Para obter uma expressão simplificada da equação (1.320), e compará-la com resultados da literatura [50], foi considerado que em um espaço-tempo bidimensional a matriz não comutativa $\theta^{\mu\nu}$ pode ser expressa como $\theta^{\mu\nu} = \theta \epsilon^{\mu\nu}$, em que $\epsilon^{\mu\nu}$ é o tensor de Levi-Civita em duas dimensões. Portanto, com esta escolha para a matriz não comutativa, a contribuição para a autointeração do fóton é dada por

$$i\mathcal{D}_{self-int}^{(1)}(k^2) = \frac{g^2 \theta^2}{4\pi k^4} \ln \left(1 - \frac{k^2}{\lambda^2} \right). \quad (1.321)$$

Este resultado contrasta com aquele obtido na referência [50], em que foi discutido, por meio da avaliação do diagrama de um-*loop*, que esta contribuição dá surgimento a um termo de ordem mais alta (quando somado ao propagador completo), dinamicamente gerado por correções quânticas e que é finito no ultravioleta. Além disso, na referência [50], o comportamento do propagador no setor infravermelho não está claro, ao passo que o comportamento é transparente do ponto de vista de integrais de dispersão. Mais que isto, de forma a tornar a integral do infravermelho finita, foi necessário introduzir uma massa finita λ para o fóton na equação 1.319, $\tau(k^2) \rightarrow \tau(k^2 - \lambda^2)$, mostrando que este termo é um efeito puramente infravermelho, como é o mecanismo de geração de massa para o fóton e tal análise desempenha um importante papel na interpretação correta deste termo [51]. No entanto, está claro a partir da expressão (1.321) que esta contribuição não é um termo de ordem mais alta em qualquer limite plausível ainda que a pequenez de λ seja levada em conta.

A contribuição de uma e duas partículas para a função de densidade espectral em $(2 + 1)$ – dimensões

Esta seção compreende uma extensão do estudo anterior para a contribuição de uma e duas partículas para a função de densidade espectral em $(2 + 1)$ – dimensões. Em verdade, é importante ressaltar que muita atenção tem sido dada à análise de propriedades gerais de teorias de campo em $(2 + 1)$ – dimensões [52], principalmente no que concerne a aplicações em física da matéria condensada [53].

É importante ressaltar que este modelo para a NCQED₃ é uma extensão não comutativa à conhecida QED₃ topológica, que se baseia no estudo de uma lagrangiana com os termos de Maxwell e Dirac acrescida de um termo topológico (1.160), o termo de Chern-Simons (1.157). Será verificado que o termo de massa do fóton corresponde ao parâmetro s , via contribuição de uma partícula para a função de densidade de estados, ou seja, para o propagador livre.

Contudo, a QED₃ usual (não comutativa) pressupõe que apenas os termos de Maxwell e Dirac estejam presentes em sua lagrangiana. Neste distinto modelo, o fóton adquire massa dinamicamente, ou seja, a partir do cálculo de sua autoenergia. Outrossim, a análise da QED₃, principalmente no que concerne à massa do fóton, tem procurado responder a questões fundamentais tais como se a massa do fóton gerada dinamicamente é diferente de zero [17], [54].

Ainda assim, com limites apropriados, é possível traçar um paralelo entre a QED₃ e a QED₃ topológica. Valendo-se de tais limites, será possível então comparar os resultados da presente extensão não comutativa para a QED₃ topológica com os sólidos resultados usuais (não comutativos).

O cálculo para a NCQED₃ segue a mesma sistemática apresentada para o caso bidimensional, com a ressalva de que alguns pontos importantes sobre a estrutura geral da função de densidade espectral serão inicialmente estudados. Deste modo, para o cálculo do propagador do campo de *gauge* em (2 + 1) – dimensões, estrutura tensorial de segunda ordem da função de densidade espectral do campo de *gauge* $\rho_{\mu\nu}(k^2)$ sugere a decomposição em invariantes relativísticos

$$\rho_{\mu\nu}(k^2) = \left(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) \rho_S(k^2) + i\varepsilon_{\mu\nu\sigma} k^\sigma \rho_A(k^2) \quad (1.322)$$

em que $\rho_S(k^2)$ e $\rho_A(k^2)$ denotam as funções espectral escalar simétrica e antissimétrica, respectivamente.

Os operadores

$$P_{\mu\nu}^{(1)} = \frac{1}{2} \left(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} + i\varepsilon_{\mu\nu\sigma} \frac{k^\sigma}{\sqrt{k^2}} \right) \quad (1.323)$$

e

$$P_{\mu\nu}^{(2)} = \frac{1}{2} \left(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} - i\varepsilon_{\mu\nu\sigma} \frac{k^\sigma}{\sqrt{k^2}} \right) \quad (1.324)$$

podem ser dispostos de forma que sua combinação linear

$$P_{\mu\nu} \equiv P_{\mu\nu}^{(1)} + P_{\mu\nu}^{(2)} = \left(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right), \quad (1.325)$$

é um projetor, que satisfaz à identidade

$$P_{\mu\nu} P^{\nu\alpha} = \left(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) \left(g^{\nu\alpha} - \frac{k^\nu k^\alpha}{k^2} \right) = g_{\mu\nu} g^{\nu\alpha} - \frac{k_\mu k^\alpha}{k^2} = P_\mu^\alpha. \quad (1.326)$$

O operador

$$P_{\mu\nu}^{(3)} \equiv \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \quad (1.327)$$

é tal que satisfaz à identidade

$$P_{\mu\nu}^{(3)} P^{\nu\alpha(3)} = \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \frac{k^\nu k^\alpha}{k^2} = \frac{k_\mu k^\alpha}{k^2} = P_\mu^{\alpha(3)} \quad (1.328)$$

logo, também é um projetor. Os operadores $P_{\mu\nu}$ e $P^{\nu\alpha(3)}$ satisfazem às identidades

$$P_{\mu\nu} P^{\nu\alpha(3)} = \left(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) \frac{k^\nu k^\alpha}{k^2} = 0 \quad (1.329)$$

e

$$P_{\mu\nu} + P_{\mu\nu}^{(3)} = g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} + \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} = g_{\mu\nu} \quad (1.330)$$

Os operadores $P_{\mu\nu}^{(1)}$ e $P_{\mu\nu}^{(2)}$ satisfazem à identidade

$$P_{\mu\nu}^{(1)} P^{\nu\alpha(2)} = \frac{1}{4} \left(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} + i\varepsilon_{\mu\nu\sigma} k^\sigma \right) \frac{k^\nu k^\alpha}{k^2} = 0 \quad (1.331)$$

que é oriunda da expressão

$$\begin{aligned} P_{\mu\nu}^{(1)} P^{\nu\alpha(2)} &= \frac{1}{4} \left(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} + i\varepsilon_{\mu\nu\sigma} \frac{k^\sigma}{\sqrt{k^2}} \right) \left(g^{\nu\alpha} - \frac{k^\nu k^\alpha}{k^2} - i\varepsilon^{\nu\alpha\sigma} \frac{k_\sigma}{\sqrt{k^2}} \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(g_{\mu\nu} g^{\nu\alpha} - \frac{k_\mu k^\alpha}{k^2} - \varepsilon^{\nu\alpha\rho} \varepsilon_{\nu\mu\sigma} k^\sigma \frac{k_\rho}{k^2} \right) \end{aligned} \quad (1.332)$$

que, com a identidade

$$- \varepsilon_{\nu\mu\sigma} \varepsilon^{\nu\alpha\rho} k_\rho k^\sigma = - (\delta_\mu^\alpha \delta_\sigma^\rho - \delta_\mu^\rho \delta_\sigma^\alpha) k^\rho k^\sigma = -\delta_\mu^\alpha k^2 + k_\mu k^\alpha \quad (1.333)$$

conduz diretamente ao resultado desejado

$$P_{\mu\nu}^{(1)} P^{\nu\alpha(2)} = \frac{1}{4} \left(\delta_\mu^\alpha - \frac{k_\mu k^\alpha}{k^2} - \frac{1}{k^2} \delta_\mu^\alpha k^2 + \frac{1}{k^2} k_\mu k^\alpha \right) = 0 \quad (1.334)$$

Portanto, a função de densidade espectral $\rho_{\mu\nu}(k^2)$ é escrita em termos de operadores de projeção como

$$\rho_{\mu\nu}(k^2) = (P_{\mu\nu}^{(1)} + P_{\mu\nu}^{(2)}) \rho_S(k^2) + \sqrt{k^2} (P_{\mu\nu}^{(1)} - P_{\mu\nu}^{(2)}) \rho_A(k^2), \quad (1.335)$$

o que permite que as funções $\rho_S(k^2)$ e $\rho_A(k^2)$ sejam obtidas a partir das convenientes contrações em $\rho_{\mu\nu}(k^2)$

$$\begin{aligned} g^{\mu\nu} \rho_{\mu\nu}(k^2) &= \left(g^{\mu\nu} g_{\mu\nu} - g^{\mu\nu} \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) \rho_S(k^2) + i g^{\mu\nu} \varepsilon_{\mu\nu\sigma} k^\sigma \rho_A(k^2) \\ \rho_\nu^\nu(k^2) &= (\delta_\nu^\nu - 1) \rho_S(k^2) + i \varepsilon_{\nu\sigma}^\nu k^\sigma \rho_A(k^2) \\ \rho_\nu^\nu(k^2) &= 2\rho_S(k^2) \end{aligned} \quad (1.336)$$

assim, a parte simétrica da função de densidade espectral toma a forma

$$\rho_S(k^2) = \frac{1}{2} g^{\mu\nu} \rho_{\mu\nu}(k^2), \quad (1.337)$$

enquanto a parte antissimétrica da função de densidade espectral pode ser obtida pela contração

de

$$\begin{aligned}
\varepsilon^{\mu\nu\lambda}\rho_{\mu\nu}(k^2) &= \left(\varepsilon^{\mu\nu\lambda}g_{\mu\nu} - \varepsilon^{\mu\nu\lambda}\frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) \rho_S(k^2) + i\varepsilon^{\mu\nu\lambda}\varepsilon_{\mu\nu\sigma}k^\sigma \rho_A(k^2) \\
&= \left(\varepsilon_{\nu}^{\nu\lambda} - \varepsilon^{\mu\nu\lambda}\frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) \rho_S(k^2) + 2i\delta_\sigma^\lambda k^\sigma \rho_A(k^2) \\
&= 2ik^\lambda \rho_A(k^2)
\end{aligned} \tag{1.338}$$

ou ainda

$$k_\lambda 2ik^\lambda \rho_A(k^2) = k_\lambda \varepsilon^{\mu\nu\lambda} \rho_{\mu\nu}(k^2), \tag{1.339}$$

ou seja,

$$2ik^2 \rho_A(k^2) = k_\lambda \varepsilon^{\mu\nu\lambda} \rho_{\mu\nu}(k^2). \tag{1.340}$$

Portanto,

$$\rho_A(k^2) = -\frac{i}{2k^2} k_\lambda \varepsilon^{\mu\nu\lambda} \rho_{\mu\nu}(k^2) \tag{1.341}$$

Assim, a função de densidade espectral para a contribuição de uma partícula é expressa por

$$\frac{\rho_{\mu\nu}(k^2)\tau(k_0)}{(2\pi)^2} = \int d^2p_1 \delta^{(3)}(p_1 - k) \sum_j \langle \Omega | A_\mu(0) | p_1, j \rangle \langle p_1, j | A_\nu(0) | \Omega \rangle \tag{1.342}$$

em que

$$p_1 = (\omega_{p_1}, \vec{p}_1) \tag{1.343}$$

e

$$\omega_p = \sqrt{|\vec{p}|^2 + s^2}. \tag{1.344}$$

Os estados de uma partícula, são construídos com a forma

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \sum_j |p_1, j\rangle \langle p_1, j| = \sum_j a_j^\dagger(p_1) |\Omega\rangle \langle \Omega| a_j(p_1), \tag{1.345}$$

e em conjunto com a álgebra (1.243) permitem que sejam determinados os termos

$$\langle \Omega | A_\mu(0) | p_1, j \rangle = \frac{1}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{2\omega_{p_1}}} \epsilon_\mu^j(p_1) \tag{1.346}$$

e

$$\langle p_1, j | A_\nu(0) | \Omega \rangle = \frac{1}{(2\pi)} \sqrt{\frac{1}{2\omega_{p_1}}} \epsilon_\nu^j(p_1), \tag{1.347}$$

tal que a função de densidade espectral para a contribuição de uma partícula toma a forma

$$\frac{\rho_{\mu\nu}(k^2)\tau(k_0)}{(2\pi)^2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^3p_1 \delta((p_1)^2 - s^2) \tau((p_1)_0) \delta^{(3)}(p_1 - k) [g_{\mu\nu}] \quad (1.348)$$

levando à expressão final

$$\rho_{\mu\nu}(k^2) = \delta(k^2 - s^2) \tau(k_0) g_{\mu\nu}. \quad (1.349)$$

em que mais uma vez *nenhum efeito não comutativo é encontrado*, embora seja possível identificar que a contribuição de uma partícula para a função de densidade espectral corresponde a uma partícula única: um fóton massivo. Portanto, é somente a partir desta expressão que o parâmetro s presente no termo de Chern-Simons da lagrangiana (1.160) pode ser de fato associado a um termo de massa.

Por fim, a função de densidade espectral para a contribuição de duas partículas é expressa por

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{\mu\nu}(k^2)\tau(k_0)}{(2\pi)^2} &= \int d^2p_1 d^2p_2 \delta^{(3)}(k - p_1 - p_2) \times \\ &\times \sum_{n,m} \langle \Omega | A_\mu(0) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | A_\nu(0) | \Omega \rangle, \end{aligned} \quad (1.350)$$

em que n, m representam qualquer número quântico para as possíveis partículas intermediárias. Com a equação de Yang-Feldman (1.240)

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{\mu\nu}(k^2)\tau(k_0)}{(2\pi)^2} &= \int d^2p_1 d^2p_2 \delta^{(3)}(k - p_1 - p_2) \times \\ &\times \sum_{n,m} \langle \Omega | A_\mu^{in}(0) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | A_\nu^{in}(0) | \Omega \rangle \\ &- \int d^2p_1 d^2p_2 \int d^3y \delta^{(3)}(k - p_1 - p_2) \sum_{n,m} \times \\ &\times \left[\Delta_{\nu\rho}^{ret}(-y) \langle \Omega | A_\mu^{in}(0) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | (j^{in})^\rho(y) | \Omega \rangle \right. \\ &\left. + \Delta_{\mu\sigma}^{ret}(-y) \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(y) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | A_\nu(0) | \Omega \rangle \right] \\ &+ \int d^2p_1 d^2p_2 \int d^3z d^3w \delta^{(3)}(k - p_1 - p_2) \Delta_{\mu\sigma}^{ret}(-z) \Delta_{\nu\rho}^{ret}(-w) \times \\ &\times \sum_{n,m} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle, \end{aligned} \quad (1.351)$$

em que j^{in} representa que a corrente está escrita em termos dos campos assintóticos. Da estrutura da corrente (1.247) se observa que os estados intermediários devem levar em conta todas as interações possíveis, ou seja, o termo usual da QED, uma contribuição derivativa dos

férmions e uma autointeração do campo de *gauge*. Diante disto, os estados intermediários têm a forma

$$\sum_{n,m} |p_1, n; p_2, m\rangle = \sum_{i,j} a_i^\dagger(p_1) a_j^\dagger(p_2) |\Omega\rangle + \sum_{r,s} d_r^\dagger(p_1) b_s^\dagger(p_2) |\Omega\rangle. \quad (1.352)$$

tal que

$$\begin{aligned} & \sum_{n,m} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, n; p_2, m \rangle \langle p_1, n; p_2, m | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle = \\ & = \sum_{i,j} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, i; p_2, j \rangle \langle p_1, i; p_2, j | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle \\ & + \sum_{r,s} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, r; p_2, s \rangle \langle p_1, r; p_2, s | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle. \end{aligned} \quad (1.353)$$

Logo, os três primeiros termos de (1.351) são nulos, e esta expressão toma a forma

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{\mu\nu}(k^2) \tau(k_0)}{(2\pi)^2} & = \int d^2 p_1 d^2 p_2 \int d^3 z d^3 w \delta^{(3)}(k - p_1 - p_2) \Delta_{\mu\sigma}^{ret}(-z) \Delta_{\nu\rho}^{ret}(-w) \\ & \times \left[\sum_{r,s} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, r; p_2, s \rangle \langle p_1, r; p_2, s | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle \right. \\ & \left. + \sum_{i,j} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, i; p_2, j \rangle \langle p_1, i; p_2, j | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle \right], \end{aligned} \quad (1.354)$$

o que permite que se determine separadamente todos os elementos de matriz das correntes.

Seja então a contribuição dos férmions, expressa por

$$\begin{aligned} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, r; p_2, s \rangle & = g \langle \Omega | \bar{\psi}^{in}(z) \gamma^\sigma \psi^{in}(z) | p_1, r; p_2, s \rangle \\ & - \frac{mg\theta^{\alpha\sigma}}{2} \langle \Omega | \partial_\alpha [\bar{\psi}^{in} \psi^{in}](z) | p_1, r; p_2, s \rangle, \end{aligned} \quad (1.355)$$

em que os termos são, separadamente e levando em conta a álgebra (1.256), dados por

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \bar{\psi}^{in}(z) \gamma^\sigma \psi^{in}(z) | p_1, r; p_2, s \rangle & = (\gamma^\sigma)_{AB} \langle \Omega | \bar{\psi}_A^{in}(z) \psi_B^{in}(z) d_r^\dagger(p_1) b_s^\dagger(p_2) | \Omega \rangle \\ & = -\frac{m}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} (\gamma^\sigma)_{AB} \bar{v}_A(p_1, r) u_B(p_2, s) e^{-iz(p_1+p_2)} \end{aligned} \quad (1.356)$$

e

$$\langle p_1, r; p_2, s | \bar{\psi}^{in}(w) \gamma^\rho \psi^{in}(w) | \Omega \rangle = -\frac{m}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} (\gamma^\rho)_{AB} e^{iw(p_1+p_2)} \bar{u}_A(p_2, s) v_B(p_1, r) \quad (1.357)$$

também

$$\begin{aligned} \theta^{\alpha\sigma} \langle \Omega | \partial_\alpha [\bar{\psi}^{in} \psi^{in}](z) | p_1, r; p_2, s \rangle &= \langle \Omega | (\partial_\alpha \bar{\psi}_A^{in}(z)) \psi_A^{in}(z) d_r^\dagger(p_1) b_s^\dagger(p_2) | \Omega \rangle \\ &+ \langle \Omega | \bar{\psi}_A^{in}(z) (\partial_\alpha \psi_A^{in}(z)) d_r^\dagger(p_1) b_s^\dagger(p_2) | \Omega \rangle \\ &= \frac{im}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\sigma e^{-iz(p_1+p_2)} \times \\ &\times \bar{v}_A(p_1, r) u_A(p_2, s) \end{aligned} \quad (1.358)$$

e

$$\theta^{\alpha\rho} \langle p_1, r; p_2, s | \partial_\alpha [\bar{\psi}^{in} \psi^{in}](w) | \Omega \rangle = -\frac{im}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} e^{iw(p_1+p_2)} \times \\ \times (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\rho \bar{u}_A(p_2, s) v_A(p_1, r). \quad (1.359)$$

em que

$$\tilde{a}^\alpha \equiv a_\beta \theta^{\beta\alpha} \quad (1.360)$$

para simplificar os cálculos. Por fim,

$$\begin{aligned} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, r; p_2, s \rangle &= -\frac{mg}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} e^{-iz(p_1+p_2)} \bar{v}_A(p_1, r) \times \\ &\times \left[(\gamma^\sigma)_{AB} + \frac{im}{2} \delta_{AB} (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\sigma \right] u_B(p_2, s) \end{aligned} \quad (1.361)$$

e

$$\begin{aligned} \langle p_1, r; p_2, s | (j^{in})^\rho(z) | \omega \rangle &= -\frac{mg}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}}} e^{iw(p_1+p_2)} \bar{u}_C(p_2, s) \times \\ &\times \left[(\gamma^\rho)_{CD} - \frac{im}{2} \delta_{CD} (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\rho \right] v_D(p_1, r). \end{aligned} \quad (1.362)$$

Uma vez calculada toda a contribuição fermiônica, resta calcular a parte referente ao campo de *gauge*. Assim, a partir de

$$\begin{aligned}
\langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, i; p_2, j \rangle &= \frac{g}{4} \theta^{\alpha\sigma} \langle \Omega | \partial_\alpha [F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}] (z) | p_1, i; p_2, j \rangle \\
&\quad + \frac{g}{2} \theta^{\chi\xi} \langle \Omega | \partial_\alpha [F_{\chi\xi} F^{\alpha\sigma}] (z) | p_1, i; p_2, j \rangle,
\end{aligned} \tag{1.363}$$

se determinam os termos que compõem esta expressão por

$$\begin{aligned}
&\langle \Omega | \partial_\alpha [F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}] (z) | p_1, i; p_2, j \rangle = \\
&= \partial_\alpha^z \langle \Omega | \left[\partial_\mu A_\nu \partial^\mu A^\nu - \partial_\mu A_\nu \partial^\nu A^\mu - \partial_\nu A_\mu \partial^\mu A^\nu + \partial_\nu A_\mu \partial^\nu A^\mu \right] (z) a_i^\dagger(p_1) a_j^\dagger(p_2) | \Omega \rangle \\
&= \frac{4i}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{-iz(p_1+p_2)} [(p_1 \cdot p_2) g^{\mu\nu} - (p_1)^\mu (p_2)^\nu] \epsilon_\nu^i(p_1) \epsilon_\mu^j(p_2),
\end{aligned} \tag{1.364}$$

e, analogamente

$$\begin{aligned}
&\langle p_1, i; p_2, j | \partial_\alpha [F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}] (w) | \Omega \rangle = \\
&= \partial_\alpha^w \langle \Omega | a_i(p_1) a_j(p_2) [\partial_\mu A_\nu \partial^\mu A^\nu - \partial_\mu A_\nu \partial^\nu A^\mu - \partial_\nu A_\mu \partial^\mu A^\nu + \partial_\nu A_\mu \partial^\nu A^\mu] (w) | \Omega \rangle \\
&= -\frac{4i}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{iw(p_1+p_2)} [(p_1 \cdot p_2) g^{\lambda\sigma} - (p_1)^\lambda (p_2)^\sigma] \epsilon_\sigma^i(p_1) \epsilon_\lambda^j(p_2)
\end{aligned} \tag{1.365}$$

e também o termo

$$\begin{aligned}
&\theta^{\chi\xi} \langle \Omega | \partial_\alpha [F_{\chi\xi} F^{\alpha\sigma}] (z) | p_1, i; p_2, j \rangle = \\
&= \theta^{\chi\xi} \partial_\alpha^z \langle \Omega | \left[\partial_\chi A_\xi \partial^\alpha A^\sigma - \partial_\chi A_\xi \partial^\sigma A^\alpha - \partial_\xi A_\chi \partial^\alpha A^\sigma + \partial_\xi A_\chi \partial^\sigma A^\alpha \right] (z) a_i^\dagger(p_1) a_j^\dagger(p_2) | \Omega \rangle
\end{aligned} \tag{1.366}$$

que resultam na expressão

$$\begin{aligned}
\langle \Omega | \partial_\alpha [F_{\chi\xi} F^{\alpha\sigma}] (z) | p_1, i; p_2, j \rangle &= \frac{i}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{-iz(p_1+p_2)} \times \\
&\times \left[(p_2)^\alpha (p_1)_\chi \epsilon^{j\sigma} (p_2) \epsilon_\xi^i (p_1) + (p_1)^\alpha (p_2)_\chi \epsilon^{i\sigma} (p_1) \epsilon_\xi^j (p_2) \right] \\
&- \frac{i}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{-iz(p_1+p_2)} \times \\
&\times \left[(p_1)_\chi (p_2)^\sigma \epsilon^{j\alpha} (p_2) \epsilon_\xi^i (p_1) + (p_2)_\chi (p_1)^\sigma \epsilon^{i\alpha} (p_1) \epsilon_\xi^j (p_2) \right] \\
&- \frac{i}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{-iz(p_1+p_2)} \times \\
&\times \left[(p_2)^\alpha (p_1)_\xi \epsilon^{j\sigma} (p_2) \epsilon_\chi^i (p_1) + (p_1)^\alpha (p_2)_\xi \epsilon^{i\sigma} (p_1) \epsilon_\chi^j (p_2) \right] \\
&+ \frac{i}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\alpha e^{-iz(p_1+p_2)} \times \\
&\times \left[(p_1)_\xi (p_2)^\sigma \epsilon^{j\alpha} (p_2) \epsilon_\chi^i (p_1) + (p_2)_\xi (p_1)^\sigma \epsilon^{i\alpha} (p_1) \epsilon_\chi^j (p_2) \right], \\
\end{aligned} \tag{1.367}$$

e o termo final

$$\begin{aligned}
&\theta^{\lambda\delta} \langle p_1, i; p_2, j | \partial_\beta [F_{\lambda\delta} F^{\beta\rho}] (w) | \Omega \rangle = \\
&= \theta^{\lambda\delta} \partial_\beta^w \langle \Omega | a_i (p_1) a_j (p_2) [\partial_\lambda A_\delta \partial^\beta A^\rho - \partial_\lambda A_\delta \partial^\rho A^\beta - \partial_\delta A_\lambda \partial^\beta A^\rho + \partial_\delta A_\lambda \partial^\rho A^\beta] (w) | \Omega \rangle,
\end{aligned}$$

expresso por

$$\begin{aligned}
\langle p_1, i; p_2, j | \partial_\beta [F_{\lambda\delta} F^{\beta\rho}] (w) | \Omega \rangle &= -\frac{i}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\beta e^{iw(p_1+p_2)} \times \\
&\times \left[(p_1)_\lambda (p_2)^\beta \epsilon^{j\rho} (p_2) \epsilon_\delta^i (p_1) + (p_2)_\lambda (p_1)^\beta \epsilon^{i\rho} (p_1) \epsilon_\delta^j (p_2) \right] \\
&+ \frac{i}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\beta e^{iw(p_1+p_2)} \times \\
&\times \left[(p_1)_\lambda (p_2)^\rho \epsilon^{j\beta} (p_2) \epsilon_\delta^i (p_1) + (p_2)_\lambda (p_1)^\rho \epsilon^{i\beta} (p_1) \epsilon_\delta^j (p_2) \right] \\
&+ \frac{i}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\beta e^{iw(p_1+p_2)} \times \\
&\times \left[(p_1)_\delta (p_2)^\beta \epsilon_\lambda^i (p_1) \epsilon^{j\rho} (p_2) + (p_2)_\delta (p_1)^\beta \epsilon_\lambda^j (p_2) \epsilon^{i\rho} (p_1) \right] \\
&- \frac{i}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{1}{2^2 \omega_{p_1} \omega_{p_2}}} (p_1 + p_2)_\beta e^{iw(p_1+p_2)} \times \\
&\times \left[(p_1)_\delta (p_2)^\rho \epsilon^{j\beta} (p_2) \epsilon_\lambda^i (p_1) + (p_2)_\delta (p_1)^\rho \epsilon^{i\beta} (p_1) \epsilon_\lambda^j (p_2) \right]. \\
\end{aligned} \tag{1.368}$$

Assim, as expressões (1.361) e (1.362) permitem determinar

$$\begin{aligned}
& \sum_{r,s} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, r; p_2, s \rangle \langle p_1, r; p_2, s | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle = \\
& = \frac{m^2 g^2}{(2\pi)^4} \frac{1}{E_{p_1} E_{p_2}} e^{i(w-z)(p_1+p_2)} \left[(\gamma^\sigma)_{AB} + \frac{im}{2} \delta_{AB} (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\sigma \right] \times \\
& \times \left[(\gamma^\rho)_{CD} - \frac{im}{2} \delta_{CD} (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\rho \right] \sum_{r,s} \bar{v}_A(p_1, r) u_B(p_2, s) \bar{u}_C(p_2, s) v_D(p_1, r)
\end{aligned} \tag{1.369}$$

que, com as identidades

$$\begin{aligned}
\sum_{r,s} \bar{v}_A(p_1, r) u_B(p_2, s) \bar{u}_C(p_2, s) v_D(p_1, r) & = \sum_s u_B(p_2, s) \bar{u}_C(p_2, s) \sum_r v_D(p_1, r) \bar{v}_A(p_1, r) \\
& = \left(\frac{\gamma \cdot p_2 + m}{2m} \right)_{BC} \left(\frac{\gamma \cdot p_1 - m}{2m} \right)_{DA}, \tag{1.370}
\end{aligned}$$

em que γ^μ são matrizes 2×2 que e satisfazem

$$[\gamma^\mu, \gamma^\nu]_+ = 2g^{\mu\nu}, \quad \gamma^\mu \gamma^\nu = g^{\mu\nu} - i\epsilon^{\mu\nu\lambda} \gamma_\lambda, \tag{1.371}$$

seguem as identidades para os traços de

$$\begin{aligned}
\text{Tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu) & = 2g^{\mu\nu}, \quad \text{Tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\lambda) = -2i\epsilon^{\mu\nu\lambda}, \\
\text{Tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\lambda \gamma^\sigma) & = 2(g^{\mu\nu} g^{\lambda\sigma} - g^{\mu\lambda} g^{\nu\sigma} + g^{\mu\sigma} g^{\nu\lambda})
\end{aligned}$$

e também

$$\begin{aligned}
\text{Tr}[\gamma^\sigma (\gamma \cdot p_2 + m) \gamma^\rho (\gamma \cdot p_1 - m)] & = 2(p_2)^\sigma (p_1)^\rho + 2(p_2)^\rho (p_1)^\sigma - 2mi\epsilon^{\sigma\rho\alpha} (p_1 + p_2)_\alpha \\
& - 2[(p_2) \cdot (p_1) + m^2] g^{\sigma\rho}, \tag{1.372}
\end{aligned}$$

e

$$\text{Tr}[(\gamma \cdot p_1 - m) \gamma^\sigma (\gamma \cdot p_2 + m)] = 2(p_1 \cdot p_2 - m^2), \tag{1.373}$$

desta feita, se obtém que

$$\begin{aligned}
& \sum_{r,s} \langle \Omega | (j^{in})^\sigma(z) | p_1, r; p_2, s \rangle \langle p_1, r; p_2, s | (j^{in})^\rho(w) | \Omega \rangle = \\
& = \frac{g^2}{(2\pi)^4} \frac{e^{i(w-z)(p_1+p_2)}}{2E_{p_1} 2E_{p_2}} \left[2(p_2)^\sigma (p_1)^\rho + 2(p_2)^\rho (p_1)^\sigma \right. \\
& \quad - 2mi\epsilon^{\sigma\rho\alpha} (p_1 + p_2)_\alpha - 2[(p_2) \cdot (p_1) + m^2] g^{\sigma\rho} \\
& \quad - im(\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\rho \left[m(p_1 - p_2)^\sigma - i\epsilon^{\alpha\sigma\beta} (p_1)_\alpha (p_2)_\beta \right] \\
& \quad + im(\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\sigma \left[m(p_1 - p_2)^\rho - i\epsilon^{\alpha\rho\beta} (p_2)_\alpha (p_1)_\beta \right] \\
& \quad \left. + \frac{m^2}{2} (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\sigma (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\rho [p_1 \cdot p_2 - m^2] \right], \tag{1.374}
\end{aligned}$$

que conduz à nova expressão para a função de densidade espectral com a contribuição de duas partículas

$$\begin{aligned}
\frac{\rho_{\mu\nu}(k^2) \tau(k_0)}{(2\pi)^2} & = \frac{g^2}{(2\pi)^4} \int d^3 p_1 d^3 p_2 \int d^3 z d^3 w \delta^{(3)}(k - p_1 - p_2) e^{i(w-z)(p_1+p_2)} \\
& \quad \times \Delta_{\mu\sigma}^{ret}(-z) \Delta_{\nu\rho}^{ret}(-w) \left[\frac{\delta((p_1)_0 - E_{p_1}) \delta((p_2)_0 - E_{p_2})}{2E_{p_1} 2E_{p_2}} \Pi^{\sigma\rho}(p_1, p_2; \theta) \right. \\
& \quad - \frac{1}{4} \frac{\delta((p_1)_0 - \omega_{p_1}) \delta((p_2)_0 - \omega_{p_2})}{2\omega_{p_1} 2\omega_{p_2}} (p_1 + p_2)_\alpha (p_1 + p_2)_\beta \times \\
& \quad \left. \times \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p_1, p_2; \theta) \right], \tag{1.375}
\end{aligned}$$

em que

$$\begin{aligned}
\Pi^{\sigma\rho}(p_1, p_2; \theta) & = 2(p_2)^\sigma (p_1)^\rho + 2(p_2)^\rho (p_1)^\sigma - 2mi\epsilon^{\sigma\rho\alpha} (p_1 + p_2)_\alpha \\
& \quad - 2[(p_2) \cdot (p_1) + m^2] g^{\sigma\rho} \\
& \quad - im(\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\rho \left[m(p_1 - p_2)^\sigma - i\epsilon^{\alpha\sigma\beta} (p_1)_\alpha (p_2)_\beta \right] \\
& \quad + im(\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\sigma \left[m(p_1 - p_2)^\rho - i\epsilon^{\alpha\rho\beta} (p_2)_\alpha (p_1)_\beta \right] \\
& \quad + \frac{m^2}{2} (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\sigma (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\rho [p_1 \cdot p_2 - m^2], \tag{1.376}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p_1, p_2; \theta) = & \sum_{i,j} \left[2\theta^{\alpha\sigma} [(p_1 \cdot p_2) g^{\mu\nu} - (p_1)^\mu (p_2)^\nu] \epsilon_\nu^i(p_1) \epsilon_\mu^j(p_2) \right. \\
& + \theta^{\chi\xi} (p_2)^\alpha (p_1)_\chi \epsilon^{j\sigma}(p_2) \epsilon_\xi^i(p_1) + \theta^{\chi\xi} (p_1)^\alpha (p_2)_\chi \epsilon^{i\sigma}(p_1) \epsilon_\xi^j(p_2) \\
& - \theta^{\chi\xi} (p_1)_\chi (p_2)^\sigma \epsilon^{j\alpha}(p_2) \epsilon_\xi^i(p_1) - \theta^{\chi\xi} (p_2)_\chi (p_1)^\sigma \epsilon^{i\alpha}(p_1) \epsilon_\xi^j(p_2) \\
& - \theta^{\chi\xi} (p_2)^\alpha (p_1)_\xi \epsilon^{j\sigma}(p_2) \epsilon_\chi^i(p_1) - \theta^{\chi\xi} (p_1)^\alpha (p_2)_\xi \epsilon^{i\sigma}(p_1) \epsilon_\chi^j(p_2) \\
& \left. + \theta^{\chi\xi} (p_1)_\xi (p_2)^\sigma \epsilon^{j\alpha}(p_2) \epsilon_\chi^i(p_1) + \theta^{\chi\xi} (p_2)_\xi (p_1)^\sigma \epsilon^{i\alpha}(p_1) \epsilon_\chi^j(p_2) \right] \\
& \times \left[-2\theta^{\beta\rho} [(p_1 \cdot p_2) g^{\lambda\delta} - (p_1)^\lambda (p_2)^\delta] \epsilon_\delta^i(p_1) \epsilon_\lambda^j(p_2) \right. \\
& - \theta^{\lambda\delta} (p_2)_\lambda (p_1)^\beta \epsilon^{i\rho}(p_1) \epsilon_\delta^j(p_2) + \theta^{\lambda\delta} (p_1)_\lambda (p_2)^\rho \epsilon^{j\beta}(p_2) \epsilon_\delta^i(p_1) \\
& + \theta^{\lambda\delta} (p_2)_\lambda (p_1)^\rho \epsilon^{i\beta}(p_1) \epsilon_\delta^j(p_2) + \theta^{\lambda\delta} (p_1)_\delta (p_2)^\beta \epsilon_\lambda^i(p_1) \epsilon^{j\rho}(p_2) \\
& + \theta^{\lambda\delta} (p_2)_\delta (p_1)^\beta \epsilon_\lambda^j(p_2) \epsilon^{i\rho}(p_1) - \theta^{\lambda\delta} (p_1)_\lambda (p_2)^\beta \epsilon^{j\rho}(p_2) \epsilon_\delta^i(p_1) \\
& \left. - \theta^{\lambda\delta} (p_1)_\delta (p_2)^\rho \epsilon^{j\beta}(p_2) \epsilon_\lambda^i(p_1) - \theta^{\lambda\delta} (p_2)_\delta (p_1)^\rho \epsilon^{i\beta}(p_1) \epsilon_\lambda^j(p_2) \right]. \quad (1.377)
\end{aligned}$$

Por fim, com a expressão (1.245) para a função de Green retardada, a função de densidade espectral com a contribuição de duas partículas é ainda reescrita como

$$\begin{aligned}
\frac{\rho_{\mu\nu}(k^2) \tau(k_0)}{(2\pi)^2} = & \frac{g^2}{(2\pi)^4} \left(\frac{1}{k^2 - s^2} \right)^2 \int d^3 p_1 d^3 p_2 \delta^{(3)}(k - p_1 - p_2) \times \\
& \times \left(g_{\mu\sigma} - \frac{k_\mu k_\sigma}{k^2} - \frac{is}{k^2} \epsilon_{\mu\sigma\zeta} k^\zeta \right) \left(g_{\nu\rho} - \frac{k_\nu k_\rho}{k^2} + \frac{is}{k^2} \epsilon_{\nu\rho\phi} k^\phi \right) \\
& \times \left[\delta((p_1)^2 - m^2) \tau((p_1)_0) ((p_2)^2 - m^2) \tau((p_2)_0) \Pi^{\sigma\rho}(p_1, p_2; \theta) \right. \\
& \left. - \frac{1}{4} \delta((p_1)^2) \tau((p_1)_0) ((p_2)^2) \tau((p_2)_0) k_\alpha k_\beta \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p_1, p_2; \theta) \right] \quad (1.378)
\end{aligned}$$

tal que, integrando em p_2 e $p_1 \rightarrow p$ se obtém a expressão

$$\begin{aligned}
\frac{\rho_{\mu\nu}(k^2) \tau(k_0)}{(2\pi)^2} = & \frac{g^2}{(2\pi)^4} \left(\frac{1}{k^2 - s^2} \right)^2 \left(g_{\mu\sigma} - \frac{k_\mu k_\sigma}{k^2} - \frac{is}{k^2} \epsilon_{\mu\sigma\zeta} k^\zeta \right) \times \\
& \times \left(g_{\nu\rho} - \frac{k_\nu k_\rho}{k^2} + \frac{is}{k^2} \epsilon_{\nu\rho\phi} k^\phi \right) \int d^3 p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \times \\
& \times \left[\delta(p^2 - m^2) \delta((k-p)^2 - m^2) \Pi^{\sigma\rho}(p, k; \theta) \right. \\
& \left. - \frac{1}{4} \delta(p^2) \delta((k-p)^2) k_\alpha k_\beta \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p, k-p; \theta) \right]. \quad (1.379)
\end{aligned}$$

Contudo, a integração de Π exige um certo cuidado. Explicitamente, esta integração é

realizada por

$$\begin{aligned}
& \int d^3 p_1 d^3 p_2 \delta^{(3)}(k - p_1 - p_2) \Pi^{\sigma\rho}(p_1, p_2; \theta) = \\
& = \int d^3 p_1 d^3 p_2 \delta^{(3)}(k - p_1 - p_2) \left[2(p_2)^\sigma (p_1)^\rho + 2(p_2)^\rho (p_1)^\sigma \right. \\
& \quad - 2mi\epsilon^{\sigma\rho\alpha} (p_1 + p_2)_\alpha - 2[(p_2) \cdot (p_1) + m^2] g^{\sigma\rho} \\
& \quad - im\theta (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\rho \left[m(p_1 - p_2)^\sigma - i\epsilon^{\alpha\sigma\beta} (p_1)_\alpha (p_2)_\beta \right] \\
& \quad + im(\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\sigma \left[m(p_1 - p_2)^\rho - i\epsilon^{\alpha\rho\beta} (p_2)_\alpha (p_1)_\beta \right] \\
& \quad \left. + \frac{m^2}{2} (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\sigma (\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2)^\rho (p_1 \cdot p_2 - m^2) \right] \\
& = \int d^3 p_1 d^3 p_2 \delta^{(3)}(k - p_1 - p_2) \left[2(p_2)^\sigma (p_1)^\rho + 2(p_2)^\rho (p_1)^\sigma \right. \\
& \quad - 2mi\epsilon^{\sigma\rho\alpha} k_\alpha - 2[p \cdot (k - p) + m^2] g^{\sigma\rho} \\
& \quad - im\theta \tilde{k}^\rho \left[m(p_1 - p_2)^\sigma - i\epsilon^{\alpha\sigma\beta} (p_1)_\alpha (p_2)_\beta \right] \\
& \quad \left. + im\tilde{k}^\sigma \left[m(p_1 - p_2)^\rho - \underbrace{i\epsilon^{\alpha\rho\beta} (p_2)_\alpha (p_1)_\beta}_{p_2 \rightarrow p \text{ e } p_1 \rightarrow k-p} \right] + \frac{m^2}{2} \tilde{k}^\sigma \tilde{k}^\rho (p_1 \cdot p_2 - m^2) \right], \tag{1.380}
\end{aligned}$$

com exceção do termo indicado, a integração em p_2 e $p_1 \rightarrow p$ fornece

$$\begin{aligned}
\Pi^{\sigma\rho}(p, k; \theta) & = 2(k - p)^\sigma p^\rho + 2(k - p)^\rho p^\sigma - 2mi\epsilon^{\sigma\rho\alpha} k_\alpha - 2[p \cdot (k - p) + m^2] g^{\sigma\rho} \\
& \quad - im\theta \tilde{k}^\rho \left[m(2p - k)^\sigma - i\epsilon^{\alpha\sigma\beta} p_\alpha (k - p)_\beta \right] \\
& \quad + im\tilde{k}^\sigma \left[m(2p - k)^\rho - i\epsilon^{\alpha\rho\beta} p_\alpha (k - p)_\beta \right] \\
& \quad + \frac{m^2}{2} \tilde{k}^\sigma \tilde{k}^\rho [p \cdot (k - p) - m^2]. \tag{1.381}
\end{aligned}$$

Para finalmente estabelecer a função de densidade espectral expressa por (1.379), é interessante fazer uso das quantidades definidas em (1.337) e (1.341), ou seja, ρ_S e ρ_A , respectivamente. Tomando o traço de (1.379) e fazendo uso dos projetores (1.323) e (1.324)

$$\begin{aligned}
\rho_\mu^\mu(k^2) \tau(k_0) & = \frac{g^2}{(2\pi)^2} \left(\frac{1}{k^2 - s^2} \right)^2 \left(1 - \frac{s^2}{k^2} \right) (P^{(1)} + P^{(2)})_{\sigma\rho} \int d^3 p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \\
& \quad \times \left[\delta(p^2 - m^2) \delta((k - p)^2 - m^2) \Pi^{\sigma\rho}(p, k - p; \theta) \right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{4} \delta(p^2) \delta((k - p)^2) k_\alpha k_\beta \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p, k - p; \theta) \right]; \tag{1.382}
\end{aligned}$$

a parte simétrica da função de densidade espectral é determinada por

$$\begin{aligned} \rho_S(k^2) \tau(k_0) &= \frac{g^2}{2(2\pi)^2} \frac{1}{k^2(k^2 - s^2)} \int d^3p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \left(g_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2} \right) \\ &\times \left[\delta(p^2 - m^2) \delta((k-p)^2 - m^2) \Pi^{\sigma\rho}(p, k-p; \theta) \right. \\ &\left. - \frac{1}{4} \delta(p^2) \delta((k-p)^2) k_\alpha k_\beta \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p, k-p; \theta) \right]. \end{aligned} \quad (1.383)$$

Contraindo a equação para a função de densidade espectral, (1.379), com $ik_\lambda \epsilon^{\mu\nu\lambda}$ ou $\sqrt{k^2} (P^{(1)} - P^{(2)})^{\mu\nu}$

$$\begin{aligned} ik_\lambda \epsilon^{\mu\nu\lambda} \rho_{\mu\nu}(k^2) \tau(k_0) &= \frac{g^2}{(2\pi)^2} \left(\frac{1}{k^2 - s^2} \right)^2 \sqrt{k^2} \left(1 - \frac{s^2}{k^2} \right) (P^{(1)} - P^{(2)})_{\sigma\rho} \times \\ &\times \int d^3p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \times \\ &\times \left[\delta(p^2 - m^2) \delta((k-p)^2 - m^2) \Pi^{\sigma\rho}(p, k-p; \theta) \right. \\ &\left. - \frac{1}{4} \delta(p^2) \delta((k-p)^2) k_\alpha k_\beta \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p, k-p; \theta) \right] \end{aligned} \quad (1.384)$$

se determina a parte antissimétrica da função de densidade espectral por

$$\begin{aligned} \rho_A(k^2) \tau(k_0) &= -\frac{ig^2}{2(2\pi)^2} \frac{1}{k^2 k^2 (k^2 - s^2)} k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \int d^3p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \times \\ &\times \left[\delta(p^2 - m^2) \delta((k-p)^2 - m^2) \Pi^{\sigma\rho}(p, k-p; \theta) \right. \\ &\left. - \frac{1}{4} \delta(p^2) \delta((k-p)^2) k_\alpha k_\beta \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p, k-p; \theta) \right]. \end{aligned} \quad (1.385)$$

Desta feita, se torna necessário determinar as contrações de $\Pi^{\sigma\rho}(p, k-p; \theta)$ e $\Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p, k-p; \theta)$. Assim, as contrações em $\Pi^{\sigma\rho}(p, k-p; \theta)$ são determinadas por

$$\begin{aligned}
\left(g_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) \Pi^{\sigma\rho}(p, k; \theta) &= 2 \left(g_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) (k-p)^\sigma p^\rho + 2 \left(g_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) (k-p)^\rho p^\sigma \\
&\quad - 2 \left((k-p) \cdot p + m^2\right) \left[g_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right] g^{\sigma\rho} \\
&\quad - im\tilde{k}^\rho \left(g_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) \left[m(p - (k-p))^\sigma - i\epsilon^{\alpha\sigma\beta} p_\alpha (k-p)_\beta\right] \\
&\quad + im\tilde{k}^\sigma \left(g_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) \left[m(p - (k-p))^\rho - i\epsilon^{\alpha\rho\beta} p_\alpha (k-p)_\beta\right] \\
&\quad (\rho \leftrightarrow \sigma) \\
&\quad + \frac{m^2}{2} \tilde{k}^\sigma \tilde{k}^\rho \left(g_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) [p \cdot (k-p) - m^2];
\end{aligned} \tag{1.386}$$

por fim

$$\left(g_{\sigma\rho} - \frac{k_\rho k_\sigma}{k^2}\right) \Pi^{\sigma\rho}(p, k-p; \theta) = 4 \left[\frac{1}{k^2} (k \cdot p)^2 - (p \cdot k) - m^2\right] - \frac{m^2}{2} (k \circ k) [(p \cdot k) - p^2 - m^2]. \tag{1.387}$$

em que a definição (1.360) e a nova definição

$$(k \circ k) = -(\tilde{k} \cdot \tilde{k}) \tag{1.388}$$

foram usadas para simplificar os cálculos. Também,

$$\begin{aligned}
k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \Pi^{\sigma\rho}(p, k; \theta) &= -4mik^2 - im\tilde{k}^\rho [2mp^\sigma k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} + ik^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \epsilon^{\sigma\alpha\beta} p_\alpha k_\beta] \\
&\quad + im\tilde{k}^\rho [2mk^\lambda p^\sigma \epsilon_{\sigma\rho\lambda} - ik^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \epsilon^{\sigma\alpha\beta} p_\alpha k_\beta] \\
&\quad + \frac{m^2}{2} k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \tilde{k}^\sigma \tilde{k}^\rho [p \cdot (k-p) - m^2],
\end{aligned} \tag{1.389}$$

em que

$$\epsilon_{\sigma\rho\lambda} \theta^{\xi\rho} \theta^{\alpha\sigma} k_\alpha k_\xi = -\epsilon_{\sigma\rho\lambda} \theta^{\xi\rho} \theta^{\alpha\sigma} k_\alpha k_\xi = \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \tilde{k}^\sigma \tilde{k}^\rho = 0 \tag{1.390}$$

permite que se reescreva a expressão anterior como

$$k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \Pi^{\sigma\rho}(p, k; \theta) = -4mik^2 - 4im^2 \tilde{k}^\rho p^\sigma k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} + 2m\tilde{k}^\rho p_\rho k^2. \tag{1.391}$$

Portanto

$$k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \Pi^{\sigma\rho}(p, k; \theta) = -4mik^2 - 4im^2 (p \cdot \tilde{k} \cdot k)_\theta + 2m (k \cdot p)_\theta k^2, \tag{1.392}$$

em que a simplificação expressa por (1.360) e as novas definições

$$(k \cdot p)_\theta = k_\xi \theta^{\xi\rho} p_\rho \tag{1.393}$$

e

$$\left(p.\tilde{k}.k \right)_\theta = \epsilon_{\sigma\rho\lambda} p^\sigma \tilde{k}^\rho k^\lambda \quad (1.394)$$

foram introduzidas para se determinar este resultado.

Para determinar as contrações de $\Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p_1, p_2; \theta)$, é mais conveniente partir da expressão geral (1.377), determinando a expressão

$$\begin{aligned} & k_\alpha k_\beta \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p, k-p; \theta) \\ = & \sum_{i,j} \left[2k_\alpha \theta^{\alpha\sigma} [p.(k-p)g^{\mu\nu} - p^\mu(k-p)^\nu] \epsilon_\nu^i(p) \epsilon_\mu^j(k-p) \right. \\ & + \theta^{\chi\xi} k.(k-p) p_\chi \epsilon^{j\sigma}(k-p) \epsilon_\xi^i(p) + \theta^{\chi\xi} (k.p)(k-p)_\chi \epsilon^{i\sigma}(p) \epsilon_\xi^j(k-p) \\ & - \theta^{\chi\xi} p_\chi (k-p)^\sigma k_\alpha \epsilon^{j\alpha}(k-p) \epsilon_\xi^i(p) - \theta^{\chi\xi} (k-p)_\chi p^\sigma k_\alpha \epsilon^{i\alpha}(p) \epsilon_\xi^j(k-p) \\ & - \theta^{\chi\xi} k.(k-p) p_\xi \epsilon^{j\sigma}(k-p) \epsilon_\chi^i(p) - \theta^{\chi\xi} (k.p)(k-p)_\xi \epsilon^{i\sigma}(p) \epsilon_\chi^j(k-p) \\ & \left. + \theta^{\chi\xi} k_\alpha p_\xi (k-p)^\sigma \epsilon^{j\alpha}(k-p) \epsilon_\chi^i(p) + \theta^{\chi\xi} k_\alpha (k-p)_\xi p^\sigma \epsilon^{i\alpha}(p) \epsilon_\chi^j(k-p) \right] \\ & \times \left[-2k_\beta \theta^{\beta\rho} [p.(k-p)g^{\lambda\delta} - p^\lambda(k-p)^\delta] \epsilon_\delta^i(p) \epsilon_\lambda^j(k-p) \right. \\ & - \theta^{\lambda\delta} k.(k-p) p_\lambda \epsilon^{j\rho}(k-p) \epsilon_\delta^i(p) - \theta^{\lambda\delta} (k.p)(k-p)_\lambda \epsilon^{i\rho}(p) \epsilon_\delta^j(k-p) \\ & + \theta^{\lambda\delta} k_\beta p_\lambda (k-p)^\rho \epsilon^{j\beta}(k-p) \epsilon_\delta^i(p) + \theta^{\lambda\delta} k_\beta (k-p)_\lambda p^\rho \epsilon^{i\beta}(p) \epsilon_\delta^j(k-p) \\ & + \theta^{\lambda\delta} k.(k-p) p_\delta \epsilon_\lambda^i(p) \epsilon^{j\rho}(k-p) + \theta^{\lambda\delta} (k.p)(k-p)_\delta \epsilon_\lambda^j(k-p) \epsilon^{i\rho}(p) \\ & \left. - \theta^{\lambda\delta} p_\delta k_\beta (k-p)^\rho \epsilon^{j\beta}(k-p) \epsilon_\lambda^i(p) - \theta^{\lambda\delta} (k-p)_\delta k_\beta p^\rho \epsilon^{i\beta}(p) \epsilon_\lambda^j(k-p) \right] \quad (1.395) \end{aligned}$$

que, após sofrer muitas simplificações tais como $(a \circ b) = -\tilde{a}_\alpha g^{\alpha\beta} \tilde{b}_\beta = -a^\lambda \theta_{\lambda\alpha} b_\sigma \theta^{\sigma\alpha} = a^\lambda \theta_{\lambda\alpha} \theta^{\alpha\sigma} b_\sigma = (b \circ a)$ e $(k.p)_\theta = k_\alpha \theta^{\alpha\beta} p_\beta = -k_\alpha \tilde{p}^\alpha = \tilde{k}_\alpha p^\alpha$, e tendo em mente também $p^2 = 0$ e $2(k.p) = k^2$, se torna

$$\begin{aligned} -\frac{1}{4} k_\alpha k_\beta \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p, k-p; \theta) &= \tilde{k}^\sigma \frac{k^2}{2} \left[k^2 \tilde{k}^\rho - (k-2p)^\rho (k.p)_\theta \right] \\ &+ (k-p)^\sigma \left[(p \circ p) \left[\frac{k^2}{2} k^\rho - k^2 (k-p)^\rho \right] \right. \\ &\left. - \frac{k^2}{2} (k.p)_\theta \tilde{p}^\rho - (k.p)_\theta (k.p)_\theta p^\rho \right] \\ &+ \frac{k^2}{2} (k.p)_\theta p^\sigma \left(\tilde{k} - \tilde{p} \right)^\rho - (k.p)_\theta (k.p)_\theta p^\sigma (k-p)^\rho \\ &+ \frac{k^2}{2} \tilde{k}^\rho \left[\frac{k^2}{2} \tilde{k}^\sigma + (k.p)_\theta (2p-k)^\sigma \right] \\ &+ \frac{k^2}{2} \tilde{p}^\sigma \tilde{k}^\rho - k^2 \tilde{p}^\sigma \tilde{p}^\rho - (k.p)_\theta \tilde{p}^\sigma k^\rho \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{k^2}{2} ((k \circ k) - 2(k \circ p) + (p \circ p)) \left[-\frac{k^2}{2} g^{\sigma\rho} + k^\sigma p^\rho + p^\sigma k^\rho - 2p^\sigma p^\rho \right] \\
& - (p \circ p) \left[\frac{k^2}{2} g^{\sigma\rho} - k^\sigma (k - p)^\rho \right] + \frac{k^2}{2} \tilde{k}^\sigma \tilde{p}^\rho + (k \cdot p)_\theta \tilde{k}^\sigma p^\rho \quad (1.396)
\end{aligned}$$

tal que, contraindo esta expressão com $g_{\sigma\rho} - \frac{k_\sigma k_\rho}{k^2}$ resulta em

$$\left(g_{\sigma\rho} - \frac{k_\sigma k_\rho}{k^2} \right) k_\alpha k_\beta \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta} (p, k - p; \theta) = -4k^2 \left[3 (k \cdot p)_\theta (k \cdot p)_\theta - k^2 (k \circ k) \right]. \quad (1.397)$$

Este resultado, em união ao resultado (1.392) permite que se determine a parte simétrica da função de densidade espectral, $\rho_S(k^2)$, por meio de sua expressão (1.383)

$$\begin{aligned}
\rho_S(k^2) \tau(k_0) &= \frac{g^2}{2(2\pi)^2 k^2 (k^2 - s^2)} \int d^3 p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \times \\
&\times \left[\delta(p^2 - m^2) \delta((k - p)^2 - m^2) \right. \\
&\times \left[4 \left[\frac{1}{k^2} (p \cdot k)^2 - (p \cdot k) - m^2 \right] - \frac{m^2}{2} (k \circ k) [(p \cdot k) - p^2 - m^2] \right] \\
&\left. - \frac{1}{4} \delta(p^2) \delta((k - p)^2) \left[-4k^2 \left[3 (k \cdot p)_\theta (k \cdot p)_\theta - k^2 (k \circ k) \right] \right] \right] \quad (1.398)
\end{aligned}$$

em que a contribuição fermiônica do primeiro termo também satisfaz a relação²⁵ $p^2 = m^2 = (k - p)^2$, o que implica em²⁶ $2(p \cdot k) = k^2$, de tal forma que

$$\begin{aligned}
\rho_S(k^2) \tau(k_0) &= \frac{g^2}{2(2\pi)^2 k^2 (k^2 - s^2)} \left[- \left[(k^2 + 4m^2) + \frac{m^2}{4} (k \circ k) (k^2 - 4m^2) \right] \times \right. \\
&\times \int d^3 p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \delta(p^2 - m^2) \delta((k - p)^2 - m^2) \\
&+ k^2 \int d^3 p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \delta(p^2) \delta((k - p)^2) \times \\
&\left. \times \left[3 (k \cdot p)_\theta (k \cdot p)_\theta - k^2 (k \circ k) \right] \right]. \quad (1.399)
\end{aligned}$$

tal que as integrais

$$I_3^{(1)} \equiv \int d^3 p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \delta(p^2 - m^2) \delta((k - p)^2 - m^2) \quad (1.400)$$

²⁵Funções (distribuições) $\delta(p^2 - m^2)$ e $\delta((k - p)^2 - m^2)$.

²⁶A integral será resolvida no referencial do centro de massa tal que $k = (k_0, 0)$.

e

$$I_3^{(2)} \equiv \int d^3p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \delta(p^2) \delta((k - p)^2) \quad (1.401)$$

são respectivamente determinadas por

$$\begin{aligned} I_3^{(1)} &= \int d^3p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \delta(p^2 - m^2) \delta(k_0^2 - 2k_0p_0 + p^2 - m^2) \\ &= 2\pi \int \frac{dp_0 p dp}{2\mathcal{E}_p} \delta(p_0 - \mathcal{E}_p) \tau(k_0 - p_0) \delta(k_0^2 - 2k_0p_0) \\ &= 2\pi \int \frac{p dp}{2\mathcal{E}_p} \tau(k_0 - \mathcal{E}_p) \delta(k_0^2 - 2k_0\mathcal{E}_p), (|\vec{p}| \equiv p,) \end{aligned} \quad (1.402)$$

e, como $\mathcal{E}_p = \frac{k_0}{2} = \sqrt{p^2 + m^2}$, o que implica em $p = \sqrt{\frac{(k_0)^2}{4} - m^2}$, então

$$\begin{aligned} I_3^{(1)} &= \pi \tau(k_0^2 - 4m^2) \int \frac{\mathcal{E}_p d\mathcal{E}_p}{\mathcal{E}_p} \tau(k_0 - \mathcal{E}_p) \frac{1}{2|k_0|} \delta\left(\frac{k_0}{2} - \mathcal{E}_p\right) \\ &= \frac{\pi}{2\sqrt{k_0^2}} \tau(k_0^2 - 4m^2) \tau\left(\frac{k_0}{2}\right) \int d\mathcal{E}_p \delta\left(\frac{k_0}{2} - \mathcal{E}_p\right) \\ &= \frac{\pi}{2\sqrt{k_0^2}} \tau(k_0^2 - 4m^2) \tau(k_0); \end{aligned} \quad (1.403)$$

tal que, no retorno a um sistema referencial arbitrário esta integral se torna

$$I_3^{(1)} = \frac{\pi}{2\sqrt{k^2}} \tau(k^2 - 4m^2) \tau(k_0) \quad (1.404)$$

e a integral

$$\begin{aligned} I_3^{(2)} &= \int d^3p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \delta(p^2) \delta(k_0^2 - 2k_0p_0 + p^2) \\ &= 2\pi \int \frac{dp_0 p dp}{2\omega_p} \delta(p_0 - \omega_p) \tau(k_0 - p_0) \delta(k_0^2 - 2k_0p_0) \\ &= 2\pi \int \frac{p dp}{2\omega_p} \tau(k_0 - \omega_p) \delta(k_0^2 - 2k_0\omega_p), (|\vec{p}| \equiv p,) \end{aligned}$$

e, como $\omega_p = \frac{k_0}{2} = \sqrt{p^2}$, o que implica em $p = \sqrt{\frac{(k_0)^2}{4}}$,

$$\begin{aligned}
I_3^{(2)} &= \pi \tau(k_0^2) \int \frac{\omega_p d\omega_p}{\omega_p} \tau(k_0 - \omega_p) \frac{1}{2|k_0|} \delta\left(\frac{k_0}{2} - \omega_p\right) \\
&= \frac{\pi}{2\sqrt{k_0^2}} \tau(k_0^2) \tau\left(\frac{k_0}{2}\right) \int d\omega_p \delta\left(\frac{k_0}{2} - \omega_p\right) \\
&= \frac{\pi}{2\sqrt{k_0^2}} \tau(k_0^2) \tau(k_0); \tag{1.405}
\end{aligned}$$

e, no retorno a um sistema referencial arbitrário, esta integral se torna

$$I_3^{(2)} = \frac{\pi}{2\sqrt{k^2}} \tau(k^2) \tau(k_0). \tag{1.406}$$

Seja a contração da expressão (1.396) com a quantidade $k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda}$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{4} k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} k_\alpha k_\beta \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p, k-p; \theta) = \\
= & k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \tilde{k}^\sigma \frac{k^2}{2} \left[k^2 \tilde{k}^\rho - (k-2p)^\rho (k.p)_\theta \times \right. \\
& \times \left. + \frac{k^2}{2} ((k \circ k) - 2(k \circ p) + (p \circ p)) k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \left[-\frac{k^2}{2} g^{\sigma\rho} + k^\sigma p^\rho + p^\sigma k^\rho - 2p^\sigma p^\rho \right] \right. \\
& + \frac{k^2}{2} k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \left[\tilde{k}^\rho \left[\frac{k^2}{2} \tilde{k}^\sigma + (k.p)_\theta (2p-k)^\sigma \right] + \frac{k^2}{2} \tilde{p}^\sigma \tilde{k}^\rho - k^2 \tilde{p}^\sigma \tilde{p}^\rho - (k.p)_\theta \tilde{p}^\sigma k^\rho \right. \\
& - (p \circ p) \left[\frac{k^2}{2} g^{\sigma\rho} - k^\sigma (k-p)^\rho \right] + \frac{k^2}{2} \tilde{k}^\sigma \tilde{p}^\rho + (k.p)_\theta \tilde{k}^\sigma p^\rho \left. \right] \\
& + (k-p)^\sigma k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} \left[(p \circ p) \left[\frac{k^2}{2} k^\rho - k^2 (k-p)^\rho \right] \right. \\
& \left. - \frac{k^2}{2} (k.p)_\theta \tilde{p}^\rho - (k.p)_\theta (k.p)_\theta p^\rho \right] \\
& + \frac{k^2}{2} (k.p)_\theta k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} p^\sigma \left(\tilde{k} - \tilde{p} \right)^\rho - (k.p)_\theta (k.p)_\theta k^\lambda \epsilon_{\sigma\rho\lambda} p^\sigma (k-p)^\rho; \tag{1.407}
\end{aligned}$$

que, com $\epsilon_{\sigma\rho\phi} \tilde{p}^\rho \tilde{p}^\sigma = 0$, se verifica que

$$k^\phi \epsilon_{\sigma\rho\phi} k_\alpha k_\beta \sum_{i,j} \Xi^{(ij)\sigma\rho\alpha\beta}(p, k-p; \theta) = 0. \tag{1.408}$$

Este resultado e o resultado de (1.392) permitem que a contribuição antissimétrica da função de densidade espectral (1.383) sejam determinadas por

$$\begin{aligned} \rho_A(k^2) \tau(k_0) &= \frac{mig^2}{(2\pi)^2 k^2 k^2 (k^2 - s^2)} \int d^3 p \tau(p_0) \tau(k_0 - p_0) \delta(p^2 - m^2) \times \\ &\times \delta((k - p)^2 - m^2) \left[2im \left(p \cdot \tilde{k} \cdot k \right)_\theta + (2i - (k \cdot p)_\theta) k^2 \right]. \end{aligned} \quad (1.409)$$

Portanto, as expressões para as contribuições simétrica e antissimétrica da função de densidade espectral podem ser escritas, depois de efetuadas as integrais, como

$$\begin{aligned} \rho_S^{(1)}(k^2) &= \frac{\alpha}{4} \frac{1}{\sqrt{k^2} (k^2 - s^2)} \left\{ \frac{11k^2}{8} (k \circ k) \tau(k^2) \right. \\ &\left. + \left[\left(1 + \frac{4m^2}{k^2} \right) + \frac{m^2}{4} (k \circ k) \left(1 - \frac{4m^2}{k^2} \right) \right] \tau(k^2 - 4m^2) \right\}, \end{aligned} \quad (1.410)$$

e

$$\rho_A^{(1)}(k^2) = \frac{\alpha}{k^2 (k^2 - s^2)} \frac{m}{\sqrt{k^2}} \tau(k^2 - 4m^2), \quad (1.411)$$

em que $\alpha = \frac{g^2}{4\pi}$. Como já antecipado neste estudo, em três dimensões o fóton adquire uma massa não nula [54]; logo, é interessante analisar se a massa do fóton sofre alguma mudança devido a efeitos da não comutatividade. Para isso, considere as inserções adequadas de polarização do vácuo,

$$(\mathcal{D}^{-1})_{\mu\nu} = (D^{-1})_{\mu\nu} - i\Pi_{\mu\nu}, \quad (1.412)$$

em que o propagador livre é dado por

$$(D^{-1})_{\mu\nu} = ik^2 \left(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} + \frac{is}{k^2} \epsilon_{\mu\nu\lambda} k^\lambda + \frac{1}{\xi} \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right), \quad (1.413)$$

onde ξ é um parâmetro de *gauge* geral, enquanto o tensor de polarização do vácuo é escrito como

$$\Pi_{\mu\nu}(k) = \left(g_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) \Pi_S(k^2) + i\epsilon_{\mu\nu\sigma} k^\sigma \Pi_A(k^2). \quad (1.414)$$

As funções Π_S e Π_A que correspondem ao escalar de polarização estão relacionadas com as funções espectrais escalares ρ_S e ρ_A por

$$\Pi_{\mu\nu}(k) = \int_{4s^2}^{\infty} d\chi \sigma_{\mu\nu}(\chi) \frac{1}{k^2 - \chi - i\epsilon}, \quad (1.415)$$

em que a função de densidade espectral $\sigma_{\mu\nu}$ inclui as contribuições de todas as partículas a $\rho_{\mu\nu}$. Para determinar \mathcal{D} a partir de (1.412), o conjunto de operadores de projeção definidos por (1.323), (1.324) e (1.327) é usado para obter \mathcal{D}^{-1}

$$\mathcal{D}^{-1} = i \left[k^2 \left(1 + \frac{s}{\sqrt{k^2}} \right) - \Pi_S - \sqrt{k^2} \Pi_A \right] P^{(1)}$$

$$+i \left[k^2 \left(1 - \frac{s}{\sqrt{k^2}} \right) - \Pi_S + \sqrt{k^2} \Pi_A \right] P^{(2)} + \frac{i}{\xi} k^2 P^{(3)}. \quad (1.416)$$

de tal maneira que, depois de algumas manipulações algébricas, se torna possível obter

$$i\mathcal{D}_{\lambda\nu} = \frac{1}{k^2 - \Pi(k^2)} \left[g_{\lambda\nu} - \frac{k_\lambda k_\nu}{k^2} - \frac{i}{k^2} \epsilon_{\lambda\nu\sigma} k^\sigma \frac{s - \Pi_A}{1 - \frac{\Pi_S}{k^2}} \right], \quad (1.417)$$

tal que, para $\xi = 0$, $\Pi(k^2)$ se define por

$$\Pi(k^2) = \Pi_S + \frac{(s - \Pi_A)^2}{1 - \frac{\Pi_S}{k^2}}. \quad (1.418)$$

Assim, em segunda ordem da teoria de perturbação, a expressão para a massa do fóton se torna

$$\Pi^{(1)}(0) = \Pi_S^{(1)}(0) + \frac{\left(s - \Pi_A^{(1)}(0) \right)^2}{1 - \frac{\Pi_S^{(1)}(0)}{k^2}}. \quad (1.419)$$

Determinando as funções $\Pi_S^{(1)}$ e $\Pi_A^{(1)}$ por meio das equações (1.415), (1.409) e (1.411), com a integração em χ dada na região de interesse $k^2 < 4m^2$, e, por fim, expandindo as expressões para $k^2 \rightarrow 0$, se encontram os limites

$$\lim_{k^2 \rightarrow 0} \frac{\Pi_S^{(1)}(k^2)}{k^2} = \frac{\alpha}{8s^3} \left\{ 2ms(4 - m^2(k \circ k)) + \left[(k \circ k)m^2(4m^2 - s^2) - 4(s^2 + 4m^2) \right] \coth^{-1} \left(\frac{2m}{s} \right) \right\}, \quad (1.420)$$

e

$$\lim_{k^2 \rightarrow 0} \Pi_A^{(1)}(k^2) = -\frac{g^2}{4\pi} \frac{2m}{s} \coth^{-1} \left(\frac{2m}{s} \right). \quad (1.421)$$

Para que seja possível fazer uma comparação entre os presentes resultados e a QED₃ ordinária [50], o limite apropriado $s \rightarrow 0$ nas expressões acima, (1.420) e (1.421), são necessários, resultando em uma massa não nula para o campo do fóton dada por

$$\Pi(0) = \frac{\alpha^2}{1 + \frac{\alpha}{12m} [8 + m^2(k \circ k)]} \neq 0. \quad (1.422)$$

Esta expressão reproduz o conhecido resultado para a QED₃ se $k_{nc}^2 = (k \circ k) \rightarrow 0$. Para QED₃ existe uma prova na referência [55] que mostra que todas as contribuições para a massa derivadas de outros grafos são identicamente nulas; portanto, é plausível afirmar que, para a QED₃ uma massa não perturbativa é gerada dinamicamente. Contudo, não existe tal prova ou discussão para a QED₃ não comutativa, o que torna impossível afirmar se o resultado acima (1.422) tem também uma natureza não perturbativa.

1.1.8 Observações finais

Este estudo apresenta a eletrodinâmica quântica não comutativa em duas e três dimensões sob a luz da representação espectral de Källén-Lehmann. O principal interesse no estudo de extensões não comutativas em teorias de campo está na busca por efeitos não comutativos que possam ser mensuráveis por meio de algum desvio dos resultados padrão. Os dois modelos usados como teste, QED_2 e QED_3 , foram muito estudados em inúmeras áreas da física teórica por serem autênticos laboratórios de testes de novas ideias, especialmente em física da matéria condensada, que tem como exemplo o célebre efeito Hall quântico [56], além dos recentes progressos em isolantes topológicos e supercondutores [57].

Com início em uma discussão acerca da eletrodinâmica quântica definida em um espaço-tempo de ω -dimensões, seguida das simetrias presentes na ação, o mapa de Seiberg-Witten permitiu representar uma ação definida em um espaço-tempo não comutativo em uma ação definida no espaço-tempo ordinário acrescida de uma interação não comutativa, em que termos não lineares surgiram para o campo de força. Para $\omega > 2$, esta ação também fornece a estrutura adequada para estudos sobre a violação das simetrias de Lorentz. Com a restrição em duas e três dimensões do espaço-tempo, as lagrangianas correspondentes geraram as equações de movimento para os campos de *gauge* e fermiônicos. Assim, com as equações de Yang-Feldman foi então possível encontrar as soluções das equações de movimento dos operadores de Heisenberg, obtendo assim os importantes ingredientes da representação de Källén-Lehmann.

Para enfim efetuar a quantização via representação espectral de Källén-Lehmann, foi primeiro introduzida a função de densidade espectral para o campo de *gauge*, em que uma discussão sobre suas propriedades gerais foi realizada, bem como sua relação com os propagadores completos. O principal objetivo deste estudo foi determinar a contribuição de uma e duas partículas à função de densidade espectral do campo de *gauge* em duas e três dimensões. Com efeito, após a determinação da contribuição de duas partículas (em ordem g^2) para o campo de *gauge*, a autoenergia do fóton em duas dimensões apresenta um resultado que contrasta com o resultado de [50], em que é afirmado que esta mesma contribuição dá surgimento a termos de derivadas mais altas. A principal diferença mostrada é uma indicação de que este termo depende explicitamente do parâmetro infravermelho, uma massa λ para o fóton tal que, em qualquer limite plausível em que seja levado em conta a pequenez de λ , este termo não gera um termo de ordem mais alta como afirmado em [50]. Esta análise, inédita até então, e substantiada pelo cálculo de uma relação de dispersão, permite uma interpretação consistente e uma expressão correta decorrente do setor infravermelho. Mais ainda, em consequência da geração dinâmica de massa para o fóton em três dimensões, foram derivadas as relações entre a função de autoenergia com o polo do propagador para verificar se e como a não comutatividade afeta do valor da massa do fóton.

Capítulo 2

O modelo não comutativo para sólidos desordenados

2.1 O modelo teórico para o calor específico de sólidos desordenados a temperaturas intermediárias baseado em um espaço não comutativo

Uma das leis físicas mais veneráveis é a lei de Dulong e Petit [58] para o calor específico dos sólidos. Formulada em 1819 em decorrência da observação experimental realizada pelos franceses Pierre Louis Dulong e Alexis Thérèse Petit, a lei estabelece que todos os sólidos têm o mesmo calor específico molar independente da temperatura a qual sejam submetidos, e se baseia na premissa de que os átomos que compõem um sólido têm sua posição mantida fixa por forças harmônicas restauradoras, e assim cada átomo contribui com energias cinética e potencial médias, pelo teorema da equipartição de energia, para o calor específico molar do sólido. Contudo, este resultado apresentou severa discrepância em experiências nas quais os sólidos eram submetidos à contínua diminuição da temperatura. Nesta circunstância, o calor específico também apresentava uma contínua diminuição em seu valor, sendo então nulo à temperatura de zero absoluto.

A variação do calor específico dos sólidos em relação à variação de temperatura no limite de baixas temperaturas obteve uma explicação geral satisfatória quando a estatística quântica foi aplicada ao movimento dos átomos que compunham o sólido em estudo. A primeira estatística quântica proposta para o tratamento de sólidos se deveu a Einstein [59], e conduziu a resultados promissores: ao propor que cada átomo que compõe a rede se comporta como um oscilador harmônico quântico independente e que todos estes osciladores harmônicos quânticos vibram com uma mesma frequência, Einstein obteve um modelo que no limite de altas temperaturas conduz naturalmente à lei de Dulong e Petit; contudo, seu modelo prevê uma dependência exponencial do calor específico em relação à temperatura, enquanto a experiência mostra que essa dependência é uma lei de potência proporcional a T^3 . Neste ponto, simultaneamente duas teorias consistentes para o calor específico dos sólidos se desenvolveram: o modelo de Debye [60] e o modelo de Born e von Kármán [61], ambas baseadas na premissa de que as vibrações dos átomos de um rede cristalina consistem em uma distribuição de modos normais de vibração, em contraste com a suposição de Einstein de que todos vibravam em uma mesma frequência.

O modelo de Debye substitui a estrutura de uma rede cristalina por um meio contínuo em vibração (e, por isso, é também conhecido como o modelo do contínuo elástico) em que não são mais considerados osciladores harmônicos quânticos individuais, mas os modos normais de vibração de um cristal. Uma vez que existe um número finito de frequências de vibração possíveis, se estabelece uma frequência máxima para estes modos normais, e se determina que a densidade de estados é proporcional à ν^2 . A teoria de Debye concorda muito bem com os dados experimentais nos limites de altas e baixas temperaturas, à exceção de um importante ponto: ela prediz a existência de uma constante Θ , a temperatura característica de Debye, que teoricamente é constante para um dado cristal uma vez que é proporcional à velocidade do som, presumida ser constante e única para cada sólido cristalino. Contudo, os experimentos mostram

que Θ não é constante para uma grande faixa de temperatura, embora apresente concordância com a lei de Dulong-Petit a altas temperaturas. Ainda assim, e principalmente por sua inerente simplicidade, a teoria de Debye ou teoria do contínuo elástico tornou-se a preferida da comunidade acadêmica.

Por outro lado, o modelo de Born e von Kármán determina os modos normais de vibração de um cristal a partir do cálculo das raízes de uma equação secular derivada da equação de movimento dos átomos da rede. Este é o grande triunfo da teoria de Born e von Kármán: uma teoria plenamente baseada na dinâmica de uma rede, e que compreende todas as nuances da variação do calor específico em relação à temperatura. Contudo, para a obtenção de tamanha exatidão, até mesmo sólidos simples demandam uma quantidade de cálculo considerável; dessa forma sólidos com estruturas mais complicadas são, por vezes, inexequíveis. Por essa inerente complexidade, este modelo se tornou preterido no meio científico.

O fato é que independente do modelo a ser utilizado, os sólidos cristalinos dispõem de modelos que descrevem seu calor específico com satisfatória precisão, uma vez que seu arranjo periódico preciso favorece seu modelamento matemático. O mesmo não acontece com as estruturas não cristalinas.

Se entende por estruturas não cristalinas os sólidos vítreos, estruturas desordenadas que apresentam transição vítrea e que não apresentam um ordenamento periódico espacial tal qual os sólidos cristalinos apresentam. Aqui os sólidos vítreos também serão denotados por sólidos desordenados. O âmbar, os colóides, as emulsões, os polímeros de vidro de janela, e até os aminoácidos presentes no organismo de todos os animais são exemplos cotidianos de sólidos vítreos. Mas, o que torna ainda mais curioso o comportamento de sólidos desordenados é a presença de um pico na curva de seu calor específico reduzido, além de um incremento em calor específico, enquanto o modelo de Debye prevê um patamar contínuo e de valor muito menor para esta mesma faixa de temperatura.

Posteriormente este fenômeno tornou-se conhecido na literatura pela denominação de “pico de Bóson” (do inglês *boson peak*), e é universal a todos os sólidos desordenados, embora alguns sólidos cristalinos também o apresentem, contudo sem o incremento de calor específico. Nas estruturas cristalinas, este fenômeno está associado ao surgimento de uma singularidade de van Hove [62], que nada mais é do que uma divergência na densidade de estados do cristal que pode ou não se expressar como um pico na curva de calor específico reduzido.

De forma não trivial, a percepção de que o pico de Bóson em sólidos desordenados poderia ter a mesma natureza que em sua contraparte cristalina foi inicialmente suscitada por X. Liu e H.V. Löhneysen [63], que sugerem uma correlação geral entre o mecanismo que conduz a um pico em C/T^3 em sólidos vítreos e cristalinos a temperaturas intermediárias - contudo sem quaisquer argumento físico para tal correlação. No campo experimental, o grupo de Chumakov [64] mostrou a equivalência entre o pico de Bóson em vidros e a singularidade de van Hove em cristais para fônons acústicos transversais na borda da pseudo zona de Brillouin, reforçando a hipótese de Liu e Löhneysen. Contudo, ainda não há uma teoria que correlacione naturalmente e a partir de primeiros princípios estes dois fenômenos, tampouco que apresente uma justificativa

para o aumento do calor específico dos sólidos desordenados em relação aos sólidos cristalinos.

Para que o fenômeno do pico de Bóson em sólidos desordenados e o efeito de uma singularidade de van Hove em um cristal fiquem evidentes, é então frutífero analisar dois sólidos de mesma composição nestas duas distintas fases. O primeiro trabalho sistemático na obtenção das curvas de calor específico frisando diferenças entre sólidos cristalinos e sua contraparte não cristalina foi realizado por Zeller e Pohl em 1971¹ [65], em que um comportamento anômalo ao modelo de Debye para o calor específico dos sólidos a temperaturas intermediárias foi pela primeira vez detectado.

Tal comportamento anômalo reside a temperaturas compreendidas entre 5 e 100K e se caracteriza por um pico na curva de calor específico reduzido versus temperatura ($\frac{C(T)}{T^3}$ versus T) e um acréscimo de calor específico. Como suposto inicialmente por Zeller e Pohl, este fenômeno é intrínseco a todos os sólidos desordenados.

O fenômeno do pico de Bóson pode ser visualizado na figura a seguir

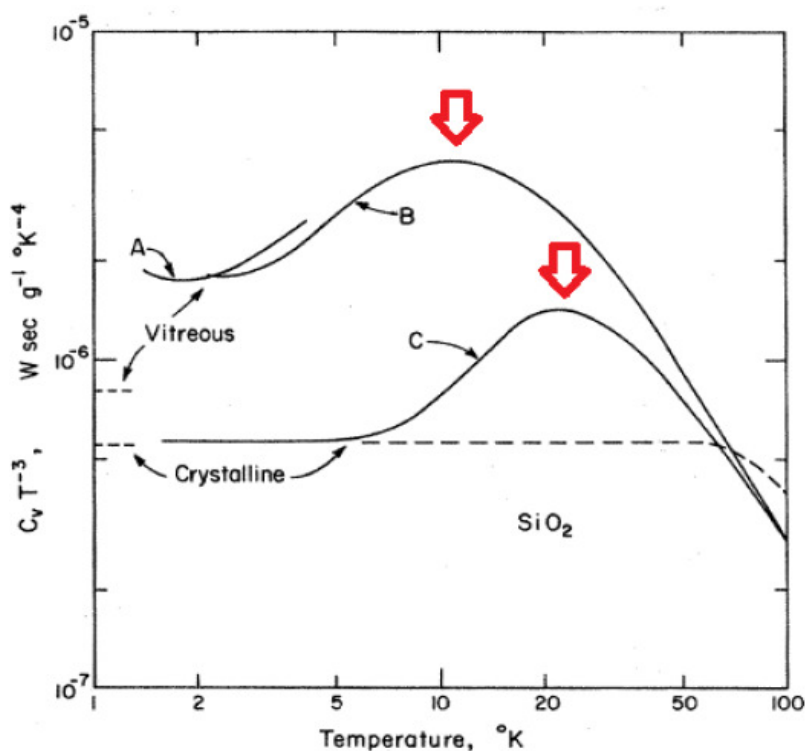


Figura 2.1: As grandes setas indicam a posição do pico de Bóson para a estrutura SiO_2 nas fases vítrea e cristalina, bem como o patamar previsto por Debye para o calor específico nestas duas distintas fases, indicadas pelas curvas tracejadas. Imagem obtida em [65].

donde imediatamente se identifica²

¹Também neste trabalho foi realizada uma extensão da análise do calor específico a uma vasta gama de materiais desordenados disponíveis (e conhecidos) à época.

²O presente trabalho não vai analisar o comportamento anômalo do calor específico relacionado às estruturas vítreas à baixas temperaturas ($< 2K$), uma vez que este fenômeno é descrito adequadamente pelo modelo do sistema de tunelamento em dois níveis (TLS, na sigla em inglês).

- a curva tracejada que corresponde à previsão de Debye para o calor específico reduzido para as fases cristalina e vítrea. O patamar da curva para a fase vítrea é maior que o patamar da fase cristalina porque a velocidade do som é menor em um sólido desordenado em comparação à sua contraparte cristalina;
- que a curva correspondente à fase cristalina de SiO_2 apresenta um pico a temperaturas intermediárias (com ápice em aproximadamente $20K$), mas obedece ao patamar de calor específico reduzido previsto pelo modelo de Debye;
- a curva que corresponde à fase vítrea de SiO_2 apresenta um pico com o ápice em aproximadamente $10K$; contudo o patamar do calor específico não obedece à previsão da teoria de Debye, apresentando um sensível incremento em seu valor.

Em vista de primeiros princípios, uma estrutura cristalina difere de uma estrutura desordenada simplesmente pela disposição dos átomos na rede correspondente: na estrutura cristalina o arranjo é espacialmente ordenado, de tal forma que as posições dos átomos constituintes são bem definidas, formando um padrão de rede geométrico homogêneo. A estrutura desordenada, como o próprio nome sugere, não apresenta um ordenamento espacial na posição dos átomos, de tal forma que não é possível a obtenção de um padrão geométrico desta rede. Ilustrativamente, as estruturas vítrea e cristalina de SiO_2 podem ser visualizadas como

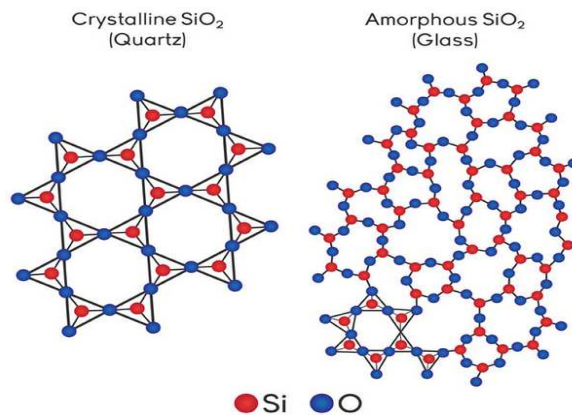


Figura 2.2: A estrutura das redes amorfa e cristalina de SiO_2 .

deixando evidente que as posições dos átomos em uma rede cristalina são bem definidas. No entanto, a estrutura vítrea, à primeira vista, parece caótica, desordenada.

Com um olhar mais cuidadoso, porém, é possível reinterpretar a imagem da estrutura desordenada de tal modo a atribuir a cada átomo disposto nessa rede uma incerteza associada à sua posição. Desta feita, é imediato concluir que as posições dos átomos em uma rede desordenada é não comutativa, ou seja, cada ponto da rede apresenta uma incerteza associada à sua localização, de tal forma que as posições dos átomos podem assumir qualquer valor dentro

de uma célula mínima caracterizada pelo parâmetro de não comutatividade do espaço. Neste novo olhar, é possível então modelar a estrutura de uma rede desordenada a partir de primeiros princípios e obter o calor específico reduzido a partir do estudo do espectro dos modos normais de vibração com a teoria de Born e von Kármán, tal que as posições dos átomos da rede sejam não comutativas. Como prêmio, os fenômenos do pico de Bóson e o incremento de calor específico surgirão fisicamente bem fundamentados e de forma natural.

2.2 O oscilador harmônico não comutativo clássico

Para a descrição da dinâmica da rede é assumido apenas a existência de forças centrais - o que significa imaginar que todos os átomos desta rede estão conectados por molas idênticas que não possuem massa - ou seja, uma função potencial do tipo oscilador harmônico. O presente modelo considera, ainda, que os sólidos desordenados são espaçados de tal maneira que uma certa imprecisão em suas posições fixas são permitidas. Esta imprecisão é realizada pelo espaço não comutativo, explicitamente pelo parâmetro não comutativo θ . Portanto, a dinâmica da rede não comutativa será dada por uma função potencial do tipo oscilador harmônico não comutativo.

Contudo, para a aplicação da teoria do espaço não comutativo na mecânica clássica, é necessário a descrição do espaço não comutativo em seu limite clássico. Assim, a partir das relações de comutação da mecânica quântica no espaço não comutativo

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = i\hbar\theta_{ij}, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (2.1)$$

o limite clássico é obtido na substituição do comutador da mecânica quântica pelos parênteses de Poisson via

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] \rightarrow \{A, B\}, \quad (2.2)$$

de tal maneira que o limite clássico das relações de comutação da mecânica quântica dadas por (2.1) se tornam

$$\{\tilde{x}_i, \tilde{x}_j\} = \theta_{ij} \quad (2.3)$$

em que θ_{ij} é um tensor antissimétrico, e

$$\{\tilde{x}_i, \tilde{p}_j\} = \delta_{ij}, \quad \{\tilde{p}_i, \tilde{p}_j\} = 0. \quad (2.4)$$

Com estas novas definições das variáveis no espaço de fase, a forma geral dos parênteses de Poisson são escritos como

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial \tilde{x}_i} \frac{\partial B}{\partial \tilde{p}_i} - \frac{\partial A}{\partial \tilde{p}_i} \frac{\partial B}{\partial \tilde{x}_i} + \theta_{ij} \frac{\partial A}{\partial \tilde{x}_i} \frac{\partial B}{\partial \tilde{x}_j} \quad (2.5)$$

e a hamiltoniana do oscilador harmônico bidimensional no espaço não comutativo é escrita

como

$$H = \frac{1}{2m} (\tilde{p}_1^2 + \tilde{p}_2^2) + V(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) \quad (2.6)$$

em que

$$V(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = \frac{1}{2}k(\tilde{x}_1^2 + \tilde{x}_2^2). \quad (2.7)$$

Neste ponto, existem duas formas distintas e equivalentes para abordar este problema: resolver a hamiltoniana não comutativa (2.6) sujeita aos parênteses de Poisson deformados (2.3) ou realizar uma transformação linear nas variáveis \tilde{x}_i e \tilde{p}_i , de tal forma que os parênteses de Poisson padrão serão restabelecidos ao preço do surgimento de uma nova hamiltoniana. Esta nova hamiltoniana consiste na hamiltoniana usual do oscilador harmônico bidimensional mais uma interação proporcional ao termo não comutativo θ_{ij} , ou seja, uma interação não comutativa³.

Sejam então as transformações lineares

$$\tilde{x}_k = x_k - \frac{1}{2}\theta_{kj}p_j, \quad \tilde{p}_i = p_i \quad (2.8)$$

em que as novas variáveis canônicas x_i e p_i satisfazem os parênteses de Poisson padrão

$$\{x_i, x_j\} = 0, \quad \{x_i, p_j\} = \delta_{ij}, \quad \{p_i, p_j\} = 0 \quad (2.9)$$

e conduzem à hamiltoniana transformada determinada a partir de

$$H_\theta = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}k \left[\left(x_1 - \frac{1}{2}\theta_{12}p_2 \right)^2 + \left(x_2 - \frac{1}{2}\theta_{21}p_1 \right)^2 \right] \quad (2.10)$$

e fazendo $\theta_{ij} = \epsilon_{ij}\theta$ ⁴, então

$$H_\theta = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}k (x_1^2 + x_2^2) + \frac{1}{8}k [(\epsilon_{12}\theta)^2 p_2^2 + (\epsilon_{21}\theta)^2 p_1^2] - \frac{1}{2}k (\epsilon_{12}\theta x_1 p_2 + \epsilon_{21}\theta x_2 p_1) \quad (2.11)$$

como $\epsilon_{12} = 1$ e $\epsilon_{21} = -1$, a expressão é reescrita como

$$H_\theta = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}k (x_1^2 + x_2^2) + \frac{1}{8}k\theta^2 (p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{2}k\theta (x_1 p_2 - x_2 p_1) \quad (2.12)$$

da qual se observa nitidamente a hamiltoniana usual (comutativa) acrescida de uma interação proporcional a θ , uma interação não comutativa. Com a definição usual da frequência natural do oscilador harmônico simples

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (2.13)$$

³Estas duas distintas abordagens estão relacionadas pelo teorema de Darboux, que assegura ser sempre possível encontrar coordenadas canônicas em uma variedade simplética que satisfaça às relações de comutação padrão.

⁴Uma vez que θ_{ij} é um tensor antissimétrico em duas dimensões, seus únicos componentes não nulos são θ_{12} e θ_{21} , relacionados entre si por $\theta_{12} = -\theta_{21}$. Deste modo, considerando θ_{ij} um tensor constante, então $\theta_{12} = \theta$, e a conveniente notação $\theta_{ij} = \epsilon_{ij}\theta$ está justificada.

a hamiltoniana se torna

$$H_\theta = \frac{1}{2m} \left[1 + \frac{1}{4} m^2 \omega_0^2 \theta^2 \right] (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (x_1^2 + x_2^2) - \frac{1}{2} m \omega_0^2 \theta (x_1 p_2 - x_2 p_1) \quad (2.14)$$

e permite a definição da constante adimensional κ

$$\kappa \equiv 1 + \frac{1}{4} m^2 \omega_0^2 \theta^2 \quad (2.15)$$

então

$$H_\theta = \frac{\kappa}{2m} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (x_1^2 + x_2^2) - \frac{1}{2} m \omega_0^2 \theta (x_1 p_2 - x_2 p_1). \quad (2.16)$$

Assim, a lagrangiana pode ser determinada a partir da transformação de Legendre

$$L_\theta (q_i, \dot{q}_i) = p_i \dot{q}_i - H_\theta (q_i, p_i) \quad (2.17)$$

uma vez que, pela equação de Hamilton

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H_\theta}{\partial p^i}, \quad (2.18)$$

o que leva à lagrangiana não comutativa

$$L_\theta = \frac{m}{2\kappa} (\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) - \frac{m\omega_0^2}{2\kappa} (q_1^2 + q_2^2) + \frac{m^2\omega_0^2\theta}{2\kappa} (\dot{q}_2 q_1 - \dot{q}_1 q_2) \quad (2.19)$$

tal que no limite do espaço comutativo, i.e., $\theta = 0$, então $\kappa \rightarrow 1$ e a lagrangiana se torna

$$L_{\theta \rightarrow 0} = \frac{m}{2} (\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) - \frac{m\omega_0^2}{2} (q_1^2 + q_2^2), \quad (2.20)$$

recuperando o caso usual (comutativo).

2.3 A densidade de estados de uma rede bidimensional não comutativa

As propriedades termodinâmicas dos cristais está fortemente associada à dinâmica da rede cristalina, e em particular com a natureza da distribuição de suas frequências em modos normais de vibração. Uma vez determinada esta densidade de estados, uma expressão para o calor específico volumétrico é prontamente encontrado. Construtivamente, o presente estudo consiste na determinação da densidade de estados de uma rede não comutativa em duas dimensões, uma vez que este é o mais simples modelo para a gradativa compreensão do efeito não comutativo na dinâmica de uma rede. A extensão do modelo de rede bidimensional para uma rede tridimensional é o objetivo principal deste estudo; desta forma, um estudo sistemático em duas dimensões criará caminhos imprescindíveis para a obtenção da densidade de estados de uma

rede não comutativa tridimensional.

A lagrangiana (2.19) será o ponto de partida para a descrição de uma rede quadrada monoatômica (em que todos os átomos da rede têm mesma massa m) contendo N pontos de rede em cada direção, perfazendo um total de N^2 átomos. Cabe ainda ressaltar que os átomos neste modelo não apresentam carga elétrica. Agora, considere \vec{d}_1 e \vec{d}_2 os vetores de base tomados a partir de um ponto aleatório da rede escolhido para ser a origem. A coordenada do vetor de qualquer ponto na rede pode ser então expressa por

$$\vec{R} = l \vec{d}_1 + m \vec{d}_2 \quad (2.21)$$

em que l e m são os parâmetros que identificam cada ponto da rede e que variam sobre valores inteiros. Desta rede, também chamada rede direta, se obtêm as equações de movimento e a periodicidade do meio [66]. Os componentes do deslocamento do átomo (l, m) a partir de sua posição de equilíbrio são designados por $u_{l,m}$ e $v_{l,m}$ nas direções horizontal e vertical, respectivamente. Portanto

$$\begin{aligned} L_\theta = & \frac{m}{2\kappa} \left(\dot{U}_{l,m}^2 + \dot{V}_{l,m}^2 \right) \\ & - \frac{1}{2\kappa} m \omega_0^2 \left[(U_{l,m} - u_{l-a,m})^2 + (u_{l+1,m} - U_{a,m})^2 \right] \\ & - \frac{1}{2\kappa} m \omega_0^2 \left[(V_{l,m} - v_{l,m-a})^2 + (v_{l,m+a} - V_{l,m})^2 \right] \\ & + \frac{1}{2\kappa} m^2 \omega_0^2 \theta \left[\dot{V}_{l,m} (2U_{l,m} - u_{l+a,m} - u_{l-a,m}) - \dot{U}_{l,m} (2V_{l,m} - v_{l,m+a} - v_{l,m-a}) \right] \end{aligned} \quad (2.22)$$

lembrando que

$$\kappa = 1 + \frac{1}{4} m^2 \omega_0^2 \theta^2 \quad \text{e} \quad \omega_0^2 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (2.23)$$

e identificando a como a constante de rede, ou também a distância entre os vizinhos mais próximos ou primeiros vizinhos; também vale ressaltar que k representa a constante de força elástica da rede, assumida neste modelo ser o parâmetro da força interatômica de curto alcance e de tal forma que apenas a interação entre vizinhos mais próximos são significativas. Esta lagrangiana conduz ao conjunto de equações de Euler-Lagrange

$$\ddot{U}_{l,m} + \omega_0^2 (2U_{l,m} - u_{l-a,m} - u_{l+a,m}) - 2m\omega_0^2 \theta \dot{V}_{l,m} = 0 \quad (2.24)$$

$$\ddot{V}_{l,m} + \omega_0^2 (2V_{l,m} - v_{l,m-a} - v_{l,m+a}) + 2m\omega_0^2 \theta \dot{U}_{l,m} = 0 \quad (2.25)$$

As equações (2.24) e (2.25) correspondem a osciladores harmônicos acoplados. Uma vez que a força de acoplamento é proporcional à velocidade e à massa, é possível a realização de uma transformação de eixos principais - a diagonalização simultânea de duas formas quadráticas que levam aos modos normais de vibração [67]. Como toda função em um espaço formado por um arranjo periódico de átomos deve satisfazer a condições de contorno periódicas, as

condições de contorno de Born-von Kármán

$$\begin{aligned} u_{l,N+1} &= u_{l,1}, & u_{N+1,m} &= u_{1,m}, \\ v_{l,N+1} &= v_{l,1}, & v_{N+1,m} &= v_{1,m}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

são as mais adequadas neste caso, especialmente quando N é grande, representando uma rede infinita⁵. Fisicamente estas condições descrevem uma rede em um toro [68]. Mais ainda, neste ponto torna-se importante determinar a rede recíproca da rede quadrada, para que se obtenha a periodicidade das ondas que se propagam através de um meio.

A rede recíproca é então delimitada pela primeira zona de Brillouin, ou simplesmente zona de Brillouin, que convenientemente inclui um período completo para cada direção de propagação, bem como todas as frequências permitidas [69]. Desta maneira, as soluções periódicas para as equações de movimento (2.24) e (2.25) podem ser escritas como

$$U_{l,m} = u' \exp \left[i \left(2\pi\nu t + \vec{\sigma} \cdot \vec{R} \right) \right] \quad \text{e} \quad V_{l,m} = v' \exp \left[i \left(2\pi\nu t + \vec{\sigma} \cdot \vec{R} \right) \right] \quad (2.27)$$

em que $\vec{\sigma}$ é o vetor de onda do espaço recíproco tal que

$$\vec{\sigma} = \sigma_x \vec{i} + \sigma_y \vec{j} = \sigma_x \vec{b}_1 + \sigma_y \vec{b}_2 \quad (2.28)$$

e \vec{R} é o vetor posição no qual

$$\vec{R} = a \left(l \vec{i} + m \vec{j} \right) = l\vec{d}_1 + m\vec{d}_2, \quad (2.29)$$

onde a é a constante de rede e \vec{i} e \vec{j} são os vetores unitários ao longo dos eixos x e y .

Os vetores recíprocos \vec{b}_1 e \vec{b}_2 são definidos por

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{d}_1 = 2\pi, \quad \vec{b}_2 \cdot \vec{d}_2 = 2\pi, \quad \vec{b}_1 \cdot \vec{d}_2 = 0 \quad \text{e} \quad \vec{b}_2 \cdot \vec{d}_1 = 0 \quad (2.30)$$

e portanto

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{R} = 2\pi a \left(l \sigma_x + m \sigma_y \right) \equiv l\phi_1 + m\phi_2. \quad (2.31)$$

Neste caso, as condições de contorno de Born-von Kármán (2.26) implicam no conjunto de valores permitidos para ϕ_j sejam dados por

$$\phi_j = \frac{2\pi}{N} e_j, \quad j = 1, 2 \quad (2.32)$$

em que os e_j são inteiros tais que $-\frac{1}{2}N \leq e_j \leq \frac{1}{2}N$.

⁵A desordem do arranjo dos átomos nos sólidos vítreos foi descrita considerando-se a não comutatividade dos pontos de rede. Contudo, as transformações lineares (2.8) são tais que o efeito não comutativo aparece como uma interação à lagrangiana de uma rede ordinária. Desta forma, a periodicidade da rede é mantida, e as condições de contorno de Born-von Kármán podem ser aplicadas.

Deste modo, a forma final para as soluções (2.27) são escritas como

$$\begin{aligned} U_{l,m} &= u' \exp [i (2\pi\nu t + l\phi_1 + m\phi_2)] \\ V_{l,m} &= v' \exp [i (2\pi\nu t + l\phi_1 + m\phi_2)] \end{aligned} \quad (2.33)$$

e incorporam tanto uma solução periódica para as equações acopladas como também realizam a correspondência entre a rede direta e a rede recíproca. Com efeito, as soluções (2.24) e (2.25) se tornam

$$\begin{aligned} 2\pi^2\nu^2 u' - \omega_0^2 [1 - \cos(a\phi_1)] u' + 2\pi i\nu m\omega_0^2\theta v' &= 0 \\ 2\pi^2\nu^2 v' - \omega_0^2 [1 - \cos(a\phi_2)] v' - 2\pi i\nu m\omega_0^2\theta u' &= 0 \end{aligned} \quad (2.34)$$

respectivamente. Para que as soluções u' e v' existam para as equações (2.34) e (2.34), o determinante dos coeficientes de u' e v' deve ser nulo, ou seja,

$$\begin{vmatrix} 2\pi^2\nu^2 - \omega_0^2 [1 - \cos(a\phi_1)] & 2\pi i\nu m\omega_0^2\theta \\ -2\pi i\nu m\omega_0^2\theta & 2\pi^2\nu^2 - \omega_0^2 [1 - \cos(a\phi_2)] \end{vmatrix} = 0 \quad (2.35)$$

As frequências permitidas aos modos normais de vibração da rede são as raízes de ν deste determinante, isto é, a equação secular

$$\begin{aligned} 4\pi^4\nu^4 - 2\pi^2\nu^2\omega_0^2 [2m^2\omega_0^2\theta^2 + 2 - \cos(a\phi_1) - \cos(a\phi_2)] \\ + \omega_0^4 [1 - \cos(a\phi_2)] [1 - \cos(a\phi_1)] = 0 \end{aligned} \quad (2.36)$$

neste ponto, torna-se interessante, para que se obtenha correta e gradativamente a influência do parâmetro não comutativo θ como uma correção à teoria usual (comutativa), definir a quantidade

$$\omega_\theta = \frac{1}{m\theta} \quad (2.37)$$

tal que o parâmetro adimensional κ se torna

$$\kappa = 1 + \frac{1}{4} \frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} \quad (2.38)$$

deste modo, os casos de interesse no presente estudo serão aqueles tais que $\frac{\omega_0}{\omega_\theta} < 1$, evidenciando que a contribuição não comutativa é uma perturbação à teoria usual.

Portanto, as frequências permitidas aos modos normais de vibração da rede são as raízes da equação secular reescrita em termos de ω_θ como

$$4\pi^4\nu^4 - 2\pi^2\nu^2\omega_0^2 \left[2m^2 \frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} + 2 - \cos(a\phi_1) - \cos(a\phi_2) \right] + \omega_0^4 [1 - \cos(a\phi_2)] [1 - \cos(a\phi_1)] = 0 \quad (2.39)$$

em que as duas raízes positivas são escritas explicitamente como

$$\nu_{\pm} = \frac{\omega_0}{2\pi} \left\{ 2 \frac{\omega_0^2}{\omega_{\theta}^2} + [2 - \cos(a\phi_1) - \cos(a\phi_2)] \right. \\ \left. \pm 2 \left[\frac{\omega_0^4}{\omega_{\theta}^4} + \frac{\omega_0^2}{\omega_{\theta}^2} (2 - \cos(a\phi_1) - \cos(a\phi_2)) + \frac{1}{4} (\cos(a\phi_1) - \cos(a\phi_2))^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (2.40)$$

onde ν_- denota o ramo inferior de frequências, enquanto ν_+ denota o ramo superior de frequências. Cada raiz está relacionada a uma relação de dispersão. O caso limite $\phi_1, \phi_2 \rightarrow 0$ leva diretamente a $\nu_- = 0$, caracterizando um ramo acústico. Cabe ressaltar que apenas ramos acústicos são esperados em uma rede em que todos os átomos têm a mesma massa e a mesma carga. O surpreendente resultado vem da raiz ν_+ , que não se anula neste limite, caracterizando um ramo ótico. A comparação entre esse resultado e o resultado usual (comutativo) mostra a primeira contribuição atribuída somente ao efeito não comutativo: o aparecimento de um ramo ótico na relação de dispersão⁶.

2.3.1 Os mapas de contorno e o parâmetro θ

Cada ramo de frequências determinada por (2.40), soluções da equação secular (2.39), é uma relação entre as variáveis ν , ϕ_1 e ϕ_2 que pode ser expressa graficamente no espaço (ϕ_1, ϕ_2) , em que cada curva deste espaço representa os pontos em ϕ_1 e ϕ_2 nos quais uma frequência ν é constante. Os dois ramos de frequências levam a dois mapas de contorno independentes: um mapa correspondendo ao ramo inferior de frequências, ilustrado por

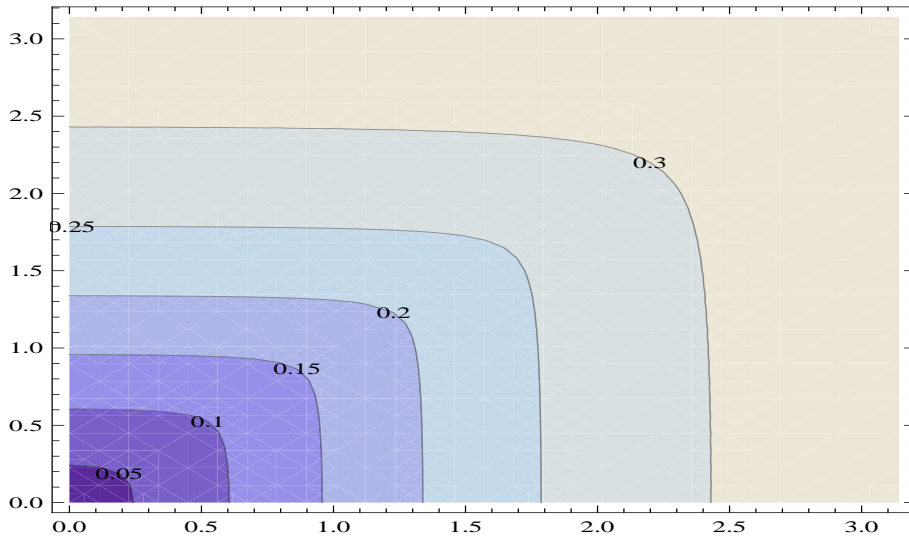


Figura 2.3: Mapas de contorno para o ramo inferior de frequência com $\frac{\omega_0}{\omega_{\theta}} = 0.1$.

⁶Este resultado torna-se ainda mais interessante levando-se em conta o trabalho de Flubacher et al [70] em que uma evidência experimental direta do comportamento incomum do incremento de calor específico da sílica vítrea a baixas temperaturas é atribuído à presença de modos óticos de frequências muito baixas.

e um outro mapa correspondendo ao ramo superior de frequências, representado por

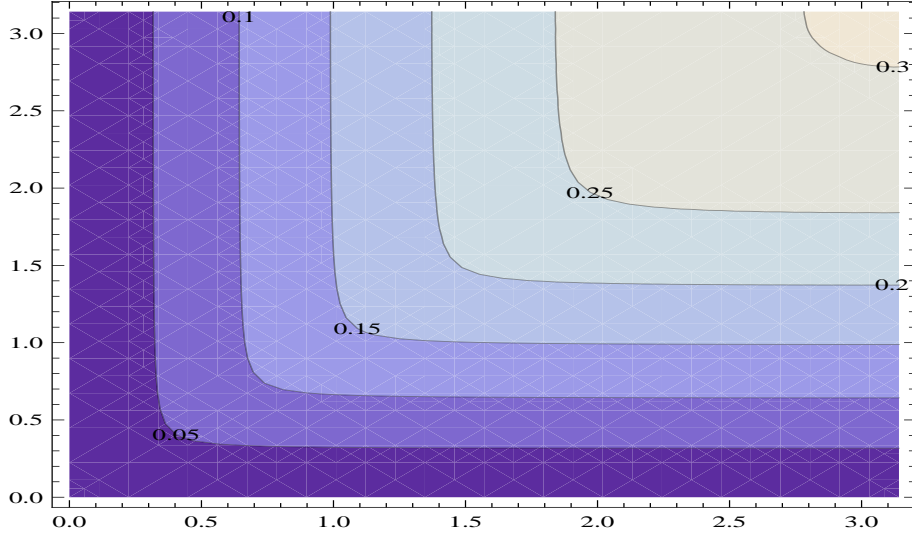


Figura 2.4: Mapas de contorno para o ramo superior de de frequência com $\frac{\omega_0}{\omega_\theta} = 0.1$.

tal que o padrão das curvas de frequência constante apresentada em ambos os mapas de contorno depende do valor de ω_0 e ω_θ , que por sua vez estão sujeitos à condição $\frac{\omega_0}{\omega_\theta} < 1$.

2.3.2 A frequência máxima possível à densidade de estados

A necessidade do cálculo de uma frequência máxima possível à densidade de estados surge do fato de que o vetor de onda está confinado à primeira zona de Brillouin. Além da frequência máxima, existem também pontos de máximo na densidade de estados associados aos pontos finais do espaço ϕ , a saber os pontos $(0, 0)$, $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ e (π, π) , de cada ramo de frequências.

A frequência máxima possível à densidade de estados é obtida por meio das condições

$$\frac{\partial \nu}{\partial \phi_1} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial \nu}{\partial \phi_2} = 0 \quad (2.41)$$

que, aplicadas à equação (2.36), resultam nas expressões

$$\left\{ 4\nu^3 - 2\nu \left[\frac{\omega_0^2}{2\pi^2} (2 - \cos(a\phi_1) - \cos(a\phi_2)) + \frac{m^2\omega_0^4\theta^2}{\pi^2} \right] \right\} \frac{\partial \nu}{\partial \phi_1} + \left[\frac{\omega_0^4}{4\pi^4} (1 - \cos(a\phi_2)) - \nu^2 \frac{\omega_0^2}{2\pi^2} \right] \sin(a\phi_1) = 0 \quad (2.42)$$

e

$$\left\{ 4\nu^3 - 2\nu \left[\frac{\omega_0^2}{2\pi^2} (2 - \cos(a\phi_1) - \cos(a\phi_2)) + \frac{m^2\omega_0^4\theta^2}{\pi^2} \right] \right\} \frac{\partial \nu}{\partial \phi_2} + \left[\frac{\omega_0^4}{4\pi^4} (1 - \cos(a\phi_1)) - \nu^2 \frac{\omega_0^2}{2\pi^2} \right] \sin(a\phi_2) = 0 \quad (2.43)$$

respectivamente, e que para serem satisfeitas simultaneamente o par (ϕ_1, ϕ_2) admite os pontos $(0, 0)$, $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ e (π, π) . Portanto os pontos em que a frequência tem um máximo têm valores explícitos dados por

$$\nu_{\max}^{(1)} = \frac{m\omega_0^2\theta}{\pi}, \quad \text{para o par } (0, 0) \quad (2.44)$$

$$\nu_{\max}^{(2)} = \left(\frac{\omega^2}{\pi^2} + \frac{m^2\omega_0^4\theta^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \text{para os pares } (0, \pi) \text{ e } (\pi, 0) \quad (2.45)$$

$$\nu_{\max}^{(3)} = \frac{m\omega_0^2\theta}{2\pi} + \frac{\omega_0}{2\pi^2} (m^2\pi^2\omega_0^2\theta^2 + 4\pi^2)^{\frac{1}{2}} \quad (2.46)$$

e

$$\nu_{\max}^{(4)} = -\frac{m\omega_0^2\theta}{2\pi} + \frac{\omega_0}{\pi} \left(1 + \frac{1}{4}m^2\omega_0^2\theta^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \text{para o par } (\pi, \pi) \quad (2.47)$$

e naturalmente surge uma frequência máxima acessível à densidade de estados, o que define um intervalo de frequências para a densidade de estados entre $\nu = 0$ até $\nu = \nu_{\max}$. Analisando estes resultados é imediata a conclusão de que a maior frequência é dada por

$$\nu_{\max} = \frac{m\omega_0^2\theta}{2\pi} + \frac{\omega_0}{2\pi^2} (m^2\pi^2\omega_0^2\theta^2 + 4\pi^2)^{\frac{1}{2}} \quad (2.48)$$

que é maior que o valor usual (comutativo), $\nu_{\max} = \frac{\omega_0}{\pi}$ (que também pode ser obtido a partir do limite $\theta \rightarrow 0$).

2.4 Uma aproximação para o cálculo da densidade de estados conveniente para sua extensão ao caso tridimensional

A densidade de estados pode ser analiticamente determinada em termos de integrais elípticas [71] a partir dos mapas de contorno das expressões explícitas para a frequência (equações 2.40), determinadas a partir da equação secular de quarta ordem em ν (2.36). Contudo, a extensão desta análise analítica em três dimensões é extremamente complicada, já que a equação secular neste caso é uma equação de sexto grau em ν . O presente estudo tem como objetivo fornecer uma certa intuição para o cálculo aproximado da densidade de estados de uma rede não comutativa em duas dimensões sem que seja necessário o conhecimento da expressão explícita para as soluções das frequências, de tal maneira que uma extensão para uma rede tridimensional se torne factível.

Segundo a metodologia de Blackman⁷ [72], [73], [74], a densidade de estados é definida como a derivada com respeito à frequência da área entre as curvas correspondentes aos ramos

⁷É importante ressaltar que os trabalhos de Blackman tiveram como objetivo determinar a densidade de estados em duas e três dimensões de uma rede quadrada e cúbica simples, respectivamente, considerando a interação entre primeiros e segundos vizinhos e na suposição de que a interação entre os segundos vizinhos era muito mais fraca quando comparada à interação entre os primeiros vizinhos.

superior e inferior de frequência, na consideração de que é válida a expansão de $\cos \phi$ em $1 - \frac{1}{2}\phi^2$, $\phi \ll 1$, na origem dos mapas de contorno - o que é bastante razoável, uma vez que as derivadas da frequência se comportam bem nas proximidades da origem. Desta maneira, Blackman estende a análise para três dimensões evoluindo a seção cônica encontrada em duas dimensões para sua superfície quádrica correspondente em três dimensões.

Em analogia aos trabalhos de Blackman, a ideia então é determinar a equação da seção cônica a partir da equação secular em duas dimensões para cada ponto do contorno da rede (a saber os pontos $(0, 0)$, $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ e (π, π)), admitindo que nestes pontos a expansão em série de Taylor até a ordem ϕ^2 é válida. Para demonstrar que este procedimento apresenta uma concordância razoável com o resultado obtido levando-se em conta o cálculo para as áreas compreendidas entre as soluções dos ramos superior e inferior de frequências, seu cálculo explícito será realizado a seguir. Conforme será visto, a área resultante da seção cônica encontrada será, aproximadamente, a área entre as curvas dos ramos superior e inferior de frequência determinada com esta mesma expansão. Por fim, a densidade de estados será calculada assumindo que seu comportamento será majoritariamente dominado pelo contorno que apresenta uma divergência.

Por fim se verifica que com esta metodologia a desejada extensão em três dimensões para a densidade de estados é simples e imediata.

2.4.1 Equação da seção cônica correspondente ao ramo inferior de frequências

A análise se inicia a partir da expressão para a raiz que corresponde ao ramo inferior de frequências (equação 2.40), e considerando a expansão $\cos \phi \simeq 1 - \frac{1}{2}\phi^2$ para ϕ_1 e ϕ_2 , que corresponde a região em torno do ponto $(0, 0)$ do mapa de contorno, levando à expressão

$$\left(\frac{2\pi}{\omega_0}\nu\right)^2 = 2\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} + \frac{1}{2}\phi_1^2 + \frac{1}{2}\phi_2^2 - 2\left(\frac{\omega_0^4}{\omega_\theta^4}\right)^{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{\omega_\theta^2}{\omega_0^2} \left(\frac{1}{2}\phi_1^2 + \frac{1}{2}\phi_2^2\right) + \frac{1}{4}\frac{\omega_\theta^4}{\omega_0^4} \left(-\frac{1}{2}\phi_1^2 + \frac{1}{2}\phi_2^2\right)^2\right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.49)$$

como

$$(1+x)^{\frac{1}{2}} \simeq 1 + \frac{x}{2} \quad (2.50)$$

então

$$\frac{1}{4}\phi_1^4 - \frac{1}{2}\phi_1^2\phi_2^2 + \frac{1}{4}\phi_2^4 + 16\frac{\pi^2}{\omega_\theta^2}\nu^2 = 0, \quad (2.51)$$

expressão que caracteriza a equação de uma seção cônica degenerada⁸. Pelo seu discriminante⁹, esta seção cônica degenerada representa uma reta ou um par de retas paralelas, como pode ser verificado por meio da mudança de variáveis $\phi_1^2 = x$ e $\phi_2^2 = y$ em (2.51), ou seja,

$$\frac{1}{4}x^2 - \frac{1}{2}xy + \frac{1}{4}y^2 + 16\frac{\pi^2}{\omega_\theta^2}\nu^2 = 0 \quad (2.52)$$

seguida de uma rotação de 45° realizada por

$$x = \frac{\sqrt{2}}{2}x' - \frac{\sqrt{2}}{2}y' \quad \text{e} \quad y = \frac{\sqrt{2}}{2}x' + \frac{\sqrt{2}}{2}y' \quad (2.53)$$

o que leva à equação das retas paralelas

$$\frac{1}{2}y'^2 + 16\frac{\pi^2}{\omega_\theta^2}\nu^2 = 0 \quad (2.54)$$

ou, explicitamente,

$$y' + \sqrt{32i}\frac{\pi}{\omega_\theta}\nu = 0 \quad \text{e} \quad y' - \sqrt{32i}\frac{\pi}{\omega_\theta}\nu = 0 \quad (2.55)$$

que não têm representação no eixo real. Portanto, nesta aproximação, o ramo inferior de frequências não contribui para a densidade de estados.

2.4.2 Equação da seção cônica correspondente ao ramo superior de frequências

O procedimento anterior será agora aplicado à expressão para a raiz que corresponde ao ramo superior de frequências (equação 2.40); a expansão $\cos \phi \simeq 1 - \frac{1}{2}\phi^2$ para ϕ_1 e ϕ_2 conduz

⁸A equação geral de uma seção cônica tem a forma

$$Ax^2 + Bxy + Cy^2 + Dx + Ey + F = 0$$

e é tal que o determinante da matriz da seção cônica, Δ , dado por

$$\Delta = \begin{vmatrix} 2A & B & D \\ B & 2C & E \\ D & E & 2F \end{vmatrix}$$

determina que a seção cônica é regular se $\Delta \neq 0$ ou degenerada se $\Delta = 0$.

⁹O discriminante de uma seção cônica tem a forma

$$B^2 - AC$$

e classifica uma seção cônica por meio das condições

- $B^2 - AC < 0$: se $\Delta = 0$ a cônica degenerada é um ponto; se $\Delta \neq 0$ a seção cônica representa uma elipse.
- $B^2 - AC = 0$: se $\Delta = 0$ a cônica degenerada é uma reta ou um par de retas paralelas; se $\Delta \neq 0$ a seção cônica representa uma parábola.
- $B^2 - AC > 0$: se $\Delta = 0$ a cônica degenerada é um par de retas concorrentes; se $\Delta \neq 0$ a seção cônica representa uma hipérbole.

à expressão

$$\frac{1}{16} \frac{\omega_\theta^2}{\omega_0^2} \phi_1^4 - \frac{1}{8} \frac{\omega_\theta^2}{\omega_0^2} \phi_1^2 \phi_2^2 + \frac{1}{16} \frac{\omega_\theta^2}{\omega_0^2} \phi_2^4 + \phi_1^2 + \phi_2^2 + 4 \left(\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{\pi^2}{\omega_0^2} \nu^2 \right) = 0 \quad (2.56)$$

que é a equação de uma secção cônica que caracteriza uma parábola. Com a mudança de variáveis $\phi_1^2 = x$ e $\phi_2^2 = y$

$$\frac{1}{16} \frac{\omega_\theta^2}{\omega_0^2} x^2 - \frac{1}{8} \frac{\omega_\theta^2}{\omega_0^2} xy + \frac{1}{16} \frac{\omega_\theta^2}{\omega_0^2} y^2 + x + y + 4 \left(\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{\pi^2}{\omega_0^2} \nu^2 \right) = 0 \quad (2.57)$$

seguida de uma rotação de 45°

$$x = \frac{\sqrt{2}}{2} x' - \frac{\sqrt{2}}{2} y' \quad \text{e} \quad y = \frac{\sqrt{2}}{2} x' + \frac{\sqrt{2}}{2} y' \quad (2.58)$$

se obtém

$$\frac{1}{8} \frac{\omega_\theta^2}{\omega_0^2} y'^2 + \sqrt{2} x' + 4 \left(\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{\pi^2}{\omega_0^2} \nu^2 \right) = 0 \quad (2.59)$$

que é a forma canônica da equação da parábola.

Para se determinar a área compreendida por esta parábola é necessário fazer sua integração entre um determinado intervalo em x' e y' em que a expansão em segunda ordem para $\cos \phi$ é válida. O valor para o intervalo de integração será então obtido a partir da comparação entre os gráficos de $\cos \phi$ e sua expansão em segunda ordem

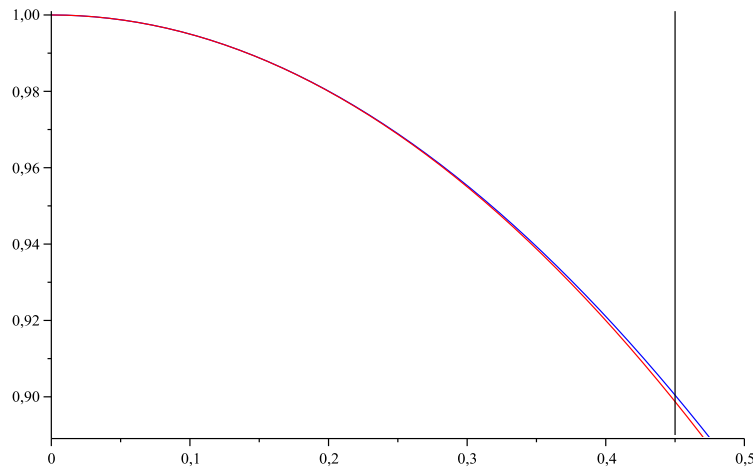


Figura 2.5: Gráficos de $\cos \phi$ (em azul) e sua expansão em segunda ordem $1 - \frac{1}{2} \phi^2$ (em vermelho). A curva em preto determina o ponto aleatoriamente escolhido para o intervalo de integração, que leva em conta o fim da coincidência entre os dois gráficos.

O intervalo de interesse será então a área sob a curva delimitada entre 0 e 0.45 em ϕ_1 e ϕ_2 estimada pela análise da figura acima. Deste modo, com a mudança de variáveis inicial, x e y estão então delimitados entre 0 e $(0.45)^2$. Com a rotação de 45° se obtém os limites de

integração nas novas coordenadas que descrevem a curva (2.59) por $x' = \frac{x+y}{\sqrt{2}}$ e $y' = \frac{y-x}{\sqrt{2}}$. Portanto, os pontos de interesse em (ϕ_1, ϕ_2) se reescrevem em termos de (x', y') como

$$(\phi_1, \phi_2) = (0, 0.45) \rightarrow (x', y') = \left(\frac{(0.45)^2}{\sqrt{2}}, \frac{(0.45)^2}{\sqrt{2}} \right) \quad (2.60)$$

e

$$(\phi_1, \phi_2) = (0.45, 0) \rightarrow (x', y') = \left(\frac{(0.45)^2}{\sqrt{2}}, -\frac{(0.45)^2}{\sqrt{2}} \right) \quad (2.61)$$

logo, a área sob a curva (2.59) pode ser determinada por

$$A = \int_{-\frac{(0.45)^2}{\sqrt{2}}}^{\frac{(0.45)^2}{\sqrt{2}}} \left| 2\sqrt{2}\frac{\pi^2}{\omega_0^2}\nu^2 - 2\sqrt{2}\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{1}{16}\sqrt{2}\frac{\omega_\theta^2}{\omega_0^2}y'^2 \right| dy \quad (2.62)$$

que, para valores arbitrários tais como $\omega_0 = 1 \frac{rad}{s}$, $\omega_\theta = 10 \frac{rad}{s}$ e $\nu = 0.05Hz$ (de acordo com a condição $\frac{\omega_0}{\omega_\theta} < 1$), conduzem ao valor

$$A = 0.1710 [L]^2 \quad (2.63)$$

para a área.

2.4.3 A aproximação para a área a partir da equação secular

Da expressão para a equação secular (2.39), reescrita aqui tomando $a = 1$ para efeito de simplificação de cálculo,

$$4\pi^4\nu^4 - 2\pi^2\nu^2\omega_0^2 \left(2\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} + 2 - \cos\phi_1 - \cos\phi_2 \right) + \omega_0^4(1 - \cos\phi_1)(1 - \cos\phi_2) = 0 \quad (2.64)$$

e considerando a expansão $\cos\phi \simeq 1 - \frac{1}{2}\phi^2$, correspondente à região em torno do ponto $(0, 0)$, e descartando termos superiores a ϕ^2 , levam à equação

$$4\pi^4\nu^4 - \pi^2\nu^2\omega_0^2\phi_1^2 - \pi^2\nu^2\omega_0^2\phi_2^2 - 4\pi^2\nu^2\frac{\omega_0^4}{\omega_\theta^2} = 0 \quad (2.65)$$

que é a equação canônica da circunferência, comumente na forma

$$\phi_1^2 + \phi_2^2 = \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} - 4\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2}, \quad (2.66)$$

cuja área é diretamente determinada por

$$A = \pi \left| \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} - 4\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} \right| \quad (2.67)$$

e que, para os valores arbitrários $\omega_0 = 1 \frac{rad}{s}$, $\omega_\theta = 10 \frac{rad}{s}$ e $\nu = 0.05Hz$ conduz a

$$A = 0.1844 [L]^2 \quad (2.68)$$

o que torna esta aproximação uma boa estimativa para a área quando comparado ao valor obtido em (2.63).

A derivada da expressão para a área em relação à frequência conduz diretamente à densidade de estados; contudo, se observa imediatamente que tomar esta derivada, tanto em (2.62) quanto em (2.67), não conduz a nenhuma divergência, mas a uma densidade de estados linear em ν . É previsto, contudo, que a rede bidimensional apresente pelo menos uma divergência [62]. Assim se verifica que a divergência não está em torno do ponto $(0, 0)$, e é necessário então realizar o mesmo procedimento nos outros pontos do contorno, a saber $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ (que são simetricamente equivalentes) e (π, π) para que se verifique a presença da divergência e se determine a densidade de estados.

Desta feita, sejam as expansões para os contornos simetricamente equivalentes $(0, \pi)$ e $(\pi, 0)$ dadas por

$$\cos \phi_1 = 1 - \frac{1}{2}\phi^2 \quad (2.69)$$

e

$$\cos \phi_2 = -1 + \frac{1}{2}(\phi - \pi)^2 \quad (2.70)$$

aplicadas à equação secular (2.39). A expressão resultante,

$$4\pi^4\nu^4 - \pi^2\nu^2\omega_0^2 [\phi_1^2 - 4 + (\phi_2 - \pi)^2] + \omega_0^4\phi_1^2 \left[1 - \frac{1}{4}(\phi_2 - \pi)^2\right] = 0, \quad (2.71)$$

é tal que, descartando termos maiores ou iguais a ϕ^3 se obtém

$$4\pi^4\nu^4 + \left[\omega_0^4 - \frac{\omega_0^4}{4}\pi^2 - \pi^2\nu^2\omega_0^2\right]\phi_1^2 + \pi^2\nu^2\omega_0^2(\phi_2^2 - 2\pi\phi_2) + \pi^2\nu^2\omega_0^2 \left[\pi^2 - 4 - 4\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2}\right] = 0 \quad (2.72)$$

que é a equação da seção cônica que representa uma hipérbole. Definindo

$$A = \omega_0^4 \left[1 - \frac{1}{4}\pi^2\right] - \pi^2\nu^2\omega_0^2 \quad (2.73)$$

$$B = D = 0, \quad (2.74)$$

$$C = \pi^2\nu^2\omega_0^2, \quad E = 2\pi^3\nu^2\omega_0^2, \quad (2.75)$$

$$F = 4\pi^4\nu^4 + \pi^4\nu^2\omega_0^2 - 4\pi^2\nu^2\omega_0^2 - 4\pi^2\nu^2\frac{\omega_0^4}{\omega_\theta^2} \quad (2.76)$$

a equação (2.72) se reescreve como

$$-|A|\phi_1^2 + C\phi_2^2 - E\phi_2 + F = 0 \quad (2.77)$$

por fim, a translação

$$\phi_1 = x_0 + x' \quad \text{e} \quad \phi_2 = y_0 + y' \quad (2.78)$$

em que

$$x_0 = 0 \quad \text{e} \quad y_0 = \frac{E}{2C} \quad (2.79)$$

conduz à equação canônica da hipérbole

$$\frac{|A|}{F}x'^2 - \frac{C}{F}y'^2 = 1 \quad (2.80)$$

o que permite visualizar imediatamente que existe um valor para ν em que ocorre uma divergência; esta divergência está em $|A|$ e é explicitamente dada por

$$\nu_{\text{div}} = \sqrt{\frac{\omega_0^2}{\pi^2} \left(\frac{1}{4}\pi^2 - 1 \right)} \quad (2.81)$$

Embora à primeira vista a divergência pareça estar localizada na região do contorno $(0, \pi)$, simetricamente equivalente a $(\pi, 0)$, um detalhe importante não deve passar despercebido: a frequência máxima permitida à densidade de estados. Embora calculada explicitamente em (2.48), para se determinar se (2.81) é uma divergência que realmente se expressa na densidade de estados, é necessário reescrever ν_{max} em referência aos novos eixos x' e y' . Para isso, se obtém a condição para a frequência máxima determinando $\frac{\partial \nu}{\partial \phi_1} = 0$ e $\frac{\partial \nu}{\partial \phi_2} = 0$ a partir da equação (2.71), conduzindo aos valores $\phi_1 = 0$ e $\phi_2 = \pi$. Estes valores são expressos em termos de x' e y' com a translação dada por (2.78), se tornando

$$x' = \phi_1 = 0 \quad \text{e} \quad y' = \phi_2 - \frac{E}{2C} \quad (2.82)$$

tal que sua substituição em (2.80) conduz imediatamente à expressão para a frequência máxima

$$\nu_{\text{max}} = \sqrt{\frac{\omega_0^2}{\pi^2} \left(\frac{1}{4}\pi^2 - 1 - \frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} \right)} \quad (2.83)$$

que é um valor menor do que o valor para a divergência dado em (2.81), ainda que muito próximos devido a $\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} < 1$. Portanto, os pontos $(0, \pi)$ e $(\pi, 0)$ não apresentam divergência.

Resta então a análise do último ponto do contorno, o ponto (π, π) . A expansão do cosseno em torno deste ponto, $\cos(\phi) \simeq -1 + \frac{1}{2}(\phi - \pi)^2$, para os valores de ϕ_1 e ϕ_2 na expressão para

a equação secular (2.39) conduz à equação

$$\left[2\pi^2\nu^2 - \omega_0^2 \left(2 - \frac{1}{2}(\phi_1 - \pi)^2 \right) \right] \left[2\pi^2\nu^2 - \omega_0^2 \left(2 - \frac{1}{2}(\phi_2 - \pi)^2 \right) \right] - 4\pi^2\nu^2 \frac{\omega_0^4}{\omega_\theta^2} = 0 \quad (2.84)$$

reescrita como

$$\begin{aligned} & \left[\left(\frac{1}{4}\pi^2 - 1 \right) \omega_0^4 + \pi^2\nu^2\omega_0^2 \right] (\phi_1^2 + \phi_2^2) + \phi_2\phi_1\pi^2\omega_0^4 + \left[\left(2\pi - \frac{1}{2}\pi^3 \right) \omega_0^4 - 2\pi^3\nu^2\omega_0^2 \right] (\phi_1 + \phi_2) \\ & + 4\pi^4\nu^4 + 2\pi^2\nu^2\omega_0^2 \left(\pi^2 - 4 - 2\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} \right) + \left(4 - 2\pi^2 + \frac{1}{4}\pi^4 \right) \omega_0^4 = 0 \end{aligned} \quad (2.85)$$

no desprezo por termos em ordens mais altas como ϕ^3 . Com a correspondência

$$A = C = \left(\frac{1}{4}\pi^2 - 1 \right) \omega_0^4 + \pi^2\nu^2\omega_0^2 > 0,$$

$$B = \pi^2\omega_0^4 > 0,$$

$$D = E = \left(2\pi - \frac{1}{2}\pi^3 \right) \omega_0^4 - 2\pi^3\nu^2\omega_0^2 < 0,$$

$$F = 4\pi^4\nu^4 + 2\pi^2\nu^2\omega_0^2 \left(\pi^2 - 2\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - 4 \right) + \left(4 - 2\pi^2 + \frac{1}{4}\pi^4 \right) \omega_0^4 > 0$$

a seção cônica pode ser indentificada por uma hipérbole, e sua equação canônica correspondente é determinada após a rotação de 45° dos eixos originais

$$\phi_1 = \frac{\sqrt{2}}{2}x' - \frac{\sqrt{2}}{2}y' \quad \text{e} \quad \phi_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}x' + \frac{\sqrt{2}}{2}y' \quad (2.86)$$

que conduz à nova expressão

$$(2A + B)x'^2 + (2A - B)y'^2 + 2\sqrt{2}Dx' + 2F = 0 \quad (2.87)$$

em que, com uma translação destes novos eixos

$$x' = x_0 + x'' \quad \text{e} \quad y' = y_0 + y'' \quad (2.88)$$

tal que

$$x_0 = -\frac{\sqrt{2}D}{2A + B} > 0 \quad \text{e} \quad y_0 = 0 \quad (2.89)$$

conduz finalmente à equação canônica da hipérbole

$$\frac{2A + B}{\frac{2D^2}{2A + B} - 2F} x''^2 + \frac{2A - B}{\frac{2D^2}{2A + B} - 2F} y''^2 = 1 \quad (2.90)$$

que toma a forma familiar com a redefinição

$$a^2 = \frac{\frac{2D^2}{2A+B} - 2F}{2A+B} \quad \text{e} \quad b^2 = \frac{\frac{2D^2}{2A+B} - 2F}{2A-B}$$

e assim

$$\frac{x''^2}{a^2} + \frac{y''^2}{b^2} = 1 \quad (2.91)$$

Explicitamente, os denominadores de a^2 e b^2 têm a forma

$$2A + B = \left(\frac{3}{2}\pi^2 - 2\right)\omega_0^4 + \pi^2\nu^2\omega_0^2 \quad (2.92)$$

e

$$2A - B = -\left(\frac{1}{2}\pi^2 + 2\right)\omega_0^4 + 2\pi^2\nu^2\omega_0^2, \quad (2.93)$$

respectivamente, donde se torna possível inferir que a divergência está localizada em

$$\nu_{\text{div}} = \sqrt{\frac{\omega_0^2}{\pi^2} \left(1 + \frac{1}{4}\pi^2\right)} \quad (2.94)$$

A expressão para a frequência máxima é obtida a partir do cálculo de $\frac{\partial\nu}{\partial\phi_1} = 0$ e $\frac{\partial\nu}{\partial\phi_2} = 0$ a partir da equação (2.84), conduzindo aos valores $\phi_1 = \pi$ e $\phi_2 = \pi$. Estes valores são então convertidos às novas coordenadas x'' e y'' após a rotação dos eixos originais em 45° (2.86) seguida de uma translação (2.88). Assim, em termos das novas coordenadas

$$x'' = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} + \frac{\sqrt{2}D}{2A+B} \quad \text{e} \quad y'' = 0. \quad (2.95)$$

Impondo estas novas condições sobre as coordenadas em (2.90) se obtém a equação que determina a frequência máxima

$$4\pi^4\nu_{\text{max}}^4 - \left(\pi^2 + 8 + 4\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2}\right)\pi^2\omega_0^2\nu_{\text{max}}^2 + \left(4 + \frac{3}{4}\pi^4\right)\omega_0^4 = 0 \quad (2.96)$$

cuja raiz de maior valor corresponde à frequência máxima, explicitamente dada por

$$\nu_{\text{max}} = \frac{\sqrt{2}\omega_0}{4\pi} \sqrt{4\left(1 + \frac{1}{4}\pi^2\right) + 4\left(1 + \frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2}\right) + \sqrt{64\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} + \left(4\frac{\omega_0^2}{\omega_\theta^2} + \pi^2\right)^2} + 4\pi^2(4 - 3\pi^2)} \quad (2.97)$$

que compreende o valor da divergência dada em (2.94). Portanto, o contorno (π, π) apresenta a desejada divergência; o próximo passo consiste em determinar a área compreendida pela parábola e os eixos x'' e y'' . Para estabelecer um intervalo de integração coerente, mais uma vez será feito o uso da comparação entre os gráficos de $\cos\phi$ e sua expansão em segunda ordem em torno do ponto (π, π)

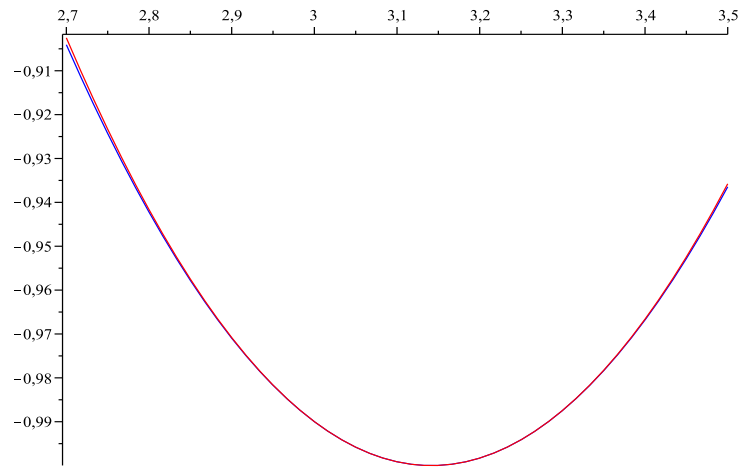


Figura 2.6: Gráficos de $\cos \phi$ (em azul) e sua expansão em segunda ordem $1 - \frac{1}{2}(\phi - \pi)^2$ (em vermelho).

Como é possível inferir pela figura acima, o intervalo de integração mais conveniente se estabelece entre 2.7 e π . Para que se determine de antemão o eixo em que a hipérbole é paralela, uma análise do denominador de (2.90) mostra que o termo $2D^2 - 2F(2A + B) > 0$. Uma vez que $2A - B < 0$ e $2A + B > 0$, então a equação (2.90) pode ser reescrita convenientemente como

$$\frac{(2A + B)^2}{[2D^2 - 2F(2A + B)]}x''^2 - \frac{(2A + B)|2A - B|}{[2D^2 - 2F(2A + B)]}y''^2 = 1 \quad (2.98)$$

de tal maneira que é agora explícito que a hipérbole é paralela ao eixo x . Estabelecendo os limites de integração nas variáveis x'' e y'' por

$$x'' = \frac{\phi_1 + \phi_2}{\sqrt{2}} - x_0 \quad \text{e} \quad y'' = \frac{\phi_1 - \phi_2}{\sqrt{2}}$$

o início do intervalo de integração tem localização em $(x'', y'') = \left(\frac{2a}{\sqrt{2}} - x_0, 0\right)$ e o fim do intervalo de integração em $(x'', y'') = \left(\frac{2b}{\sqrt{2}} - x_0, 0\right)$, em que $a = 2.7$ e $b = \pi$. Portanto, a área é determinada pela expressão

$$A = \frac{x''}{2} \sqrt{\frac{\frac{2D^2}{2A+B} - 2F}{2A-B} - \frac{2A+B}{2A-B}x''^2} \Bigg|_{\frac{2a}{\sqrt{2}} - x_0}^{\frac{2b}{\sqrt{2}} - x_0} + \frac{\left[\frac{2D^2}{2A+B} - 2F\right]}{2\sqrt{\frac{2A+B}{2A-B}}} \arctan \left[\frac{\frac{2A+B}{2A-B}x''}{\sqrt{\left(\frac{2D^2}{2A+B} - 2F\right) - \frac{2A+B}{2A-B}x''^2}} \right] \Bigg|_{\frac{2a}{\sqrt{2}} - x_0}^{\frac{2b}{\sqrt{2}} - x_0} \quad (2.99)$$

nessa aproximação, a densidade de estados é a derivada com respeito a ν desta expressão, ou seja, $g(\nu) = \frac{\partial A}{\partial \nu}$. Ilustrativamente, um gráfico para a densidade de estados não comutativa bidimensional pode ser visualizado a seguir

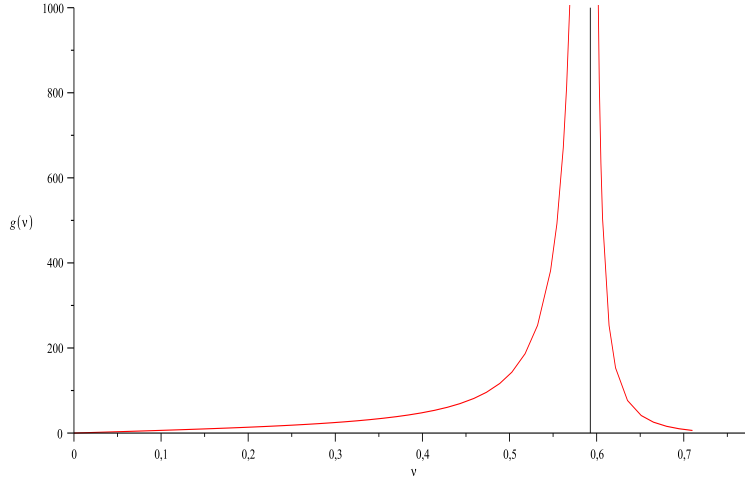


Figura 2.7: Gráfico da densidade de estados de uma rede quadrada não comutativa bidimensional. A reta em preto indica a posição da divergência ν_{div} , ao passo que a reta em azul simboliza o valor máximo para a frequência ν_{max} . Aqui $\omega_0 = 1$ e $\omega_\theta = 10000$.

em que é notório o efeito da divergência, exatamente localizada pela expressão (2.94). A contribuição para a densidade de estados dos outros contornos analisados são desprezados, assumindo portanto que o contorno que apresenta a divergência tem efeito majoritário e resume todo o comportamento das vibrações harmônicas não comutativas de uma rede quadrada.

Por fim, a presença de uma singularidade na densidade de estados é um fenômeno conhecido como *singularidade de van Hove* [62], que indica a presença de pontos de sela na expressão para a relação de dispersão, por sua vez sinaliza que a velocidade de grupo das vibrações da rede é nula neste ponto.

2.5 A rede tridimensional não comutativa

Em analogia ao caso bidimensional, a hamiltoniana clássica do oscilador harmônico tridimensional em um espaço não comutativo toma a forma

$$H = \frac{1}{2m} (\tilde{p}_1^2 + \tilde{p}_2^2 + \tilde{p}_3^2) + V(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3) \quad (2.100)$$

em que

$$V(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3) = \frac{1}{2}k(\tilde{x}_1^2 + \tilde{x}_2^2 + \tilde{x}_3^2) \quad (2.101)$$

Desta feita, as transformações lineares, como no caso bidimensional, escritas como

$$\tilde{x}_k = q_k - \frac{1}{2}\theta_{kj}p_j, \quad \tilde{p}_i = p_i \quad (2.102)$$

satisfazem os parênteses de Poisson usuais. A matriz antissimétrica θ_{ij} tem seus componentes explicitamente escritos como

$$\theta_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \theta_{12} & \theta_{13} \\ \theta_{21} & 0 & \theta_{23} \\ \theta_{31} & \theta_{32} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.103)$$

e pode ser convenientemente reescrita como

$$\theta_{ij} = \epsilon_{ijk}\theta_k \quad (2.104)$$

conduzindo a uma nova hamiltoniana

$$H_\theta = \frac{1}{2m}\tilde{p}_i^2 + \frac{1}{2}k\tilde{x}_i^2 \quad (2.105)$$

em que índices repetidos estão somados. Logo,

$$\begin{aligned} H_\theta &= \frac{1}{2m}p_i^2 + \frac{1}{2}k \left(q_k - \frac{1}{2}\theta_{kj}p_j \right)^2 \\ &= \frac{1}{2m}p_i^2 + \frac{1}{2}kq_i^2 + \frac{1}{2}k \left(-\frac{1}{2}\epsilon_{kji}\theta_i p_j q_k - \frac{1}{2}\epsilon_{klm}\theta_m q_k p_l + \frac{1}{4}\epsilon_{kji}\epsilon_{klm}\theta_i\theta_m p_j p_l \right) \end{aligned} \quad (2.106)$$

haja vista

$$\epsilon_{kji}\epsilon_{klm} = \delta_{jl}\delta_{im} - \delta_{jm}\delta_{il}$$

então

$$H_\theta = \frac{1}{2m}p_i^2 + \frac{1}{2}kq_i^2 + \frac{1}{8}k\theta^2 p_i^2 - \frac{1}{2}k\epsilon_{kji}\theta_i p_j q_k - \frac{1}{8}k(\theta \cdot p)^2 \quad (2.107)$$

em que

$$(\theta \cdot p) = \theta_j p_j.$$

Com a definição usual da frequência do oscilador harmônico simples

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (2.108)$$

a hamiltoniana se reescreve por

$$H_\theta = \frac{1}{2m} \left(1 + \frac{1}{4}m^2\omega_0^2\theta^2 \right) p_i^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q_i^2 - \frac{1}{2}m\omega_0^2 \epsilon_{kji}\theta_i p_j q_k - \frac{1}{8}m\omega_0^2 (\theta \cdot p)^2 \quad (2.109)$$

que é reescrita em termos da quantidade adimensional κ (explicitamente em (2.15)) como

$$H_\theta = \frac{\kappa}{2m} p_i^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q_i^2 - \frac{1}{2}m\omega_0^2 \theta_i \epsilon_{kji} p_j q_k - \frac{1}{8}m\omega_0^2 (\theta \cdot p)^2 \quad (2.110)$$

que é ainda possível de ser expressa como

$$H_\theta = \frac{\kappa}{2m} p_i^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 q_i^2 - \frac{1}{2} m \omega_0^2 \theta \cdot L - \frac{1}{8} m \omega_0^2 (\theta \cdot p)^2 \quad (2.111)$$

em que

$$L_i = \epsilon_{kji} q_k p_j \quad (2.112)$$

é o conhecido momento angular. Agora (2.110) apresenta variáveis (a saber x_1, p_1, x_2, p_2, x_3 e p_3) que satisfazem as relações de comutação usuais

$$\{x_i, x_j\} = 0, \quad \{x_i, p_j\} = \delta_{ij}, \quad \{p_i, p_j\} = 0 \quad (2.113)$$

de tal maneira que a lagrangiana correspondente pode ser determinada através da transformação de Legendre

$$L_\theta(q_i, \dot{q}_i) = p_i \dot{q}_i - H_\theta(q_i, p_i) \quad (2.114)$$

em que

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H_\theta}{\partial p^i}, \quad (2.115)$$

ou seja,

$$\dot{q}_i = \frac{\kappa}{m} p_i - \frac{1}{2} m \omega_0^2 \left[\theta_s (\epsilon_{kis} q_k) + \frac{1}{2} \theta_i (\theta \cdot p) \right] \quad (2.116)$$

em que, no procedimento de isolar p_i

$$\dot{q}_i + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \theta_s (\epsilon_{kis} q_k) = \left(\frac{\kappa}{m} \delta_{ij} - \frac{1}{4} m \omega_0^2 \theta_j \theta_i \right) p_j \quad (2.117)$$

se torna necessário tomar a inversa da matriz $\frac{\kappa}{m} \delta_{ij} + \frac{1}{4} m \omega_0^2 \theta_j \theta_i$. Este cálculo pode ser feito satisfazendo-se a equação

$$\left(\frac{\kappa}{m} \delta_{ij} - \frac{1}{4} m \omega_0^2 \theta_i \theta_j \right) (A \delta_{jk} + \theta_j \theta_k B) = \delta_{ik} \quad (2.118)$$

de tal forma que ao equacionar os coeficientes idênticos se obtém

$$A = \frac{1}{\frac{\kappa}{m}} \quad \text{e} \quad B = \frac{\frac{1}{4} m \omega_0^2 \frac{1}{\frac{\kappa}{m}}}{\left[\frac{\kappa}{m} - \frac{1}{4} m \omega_0^2 \theta^2 \right]} \quad (2.119)$$

que é possível porque θ^2 é um produto escalar entre dois vetores. Portanto, a expressão para a inversa da matriz $\left[\frac{\kappa}{m} \delta_{ij} + \frac{1}{4} m \omega_0^2 \theta_j \theta_i \right]$ é dada por

$$A \delta_{jk} + \theta_j \theta_k B = \left[\frac{1}{\frac{\kappa}{m}} \delta_{jk} + \frac{1}{4} \frac{1}{\frac{\kappa}{m}} m^2 \omega_0^2 \theta_j \theta_k \right] \quad (2.120)$$

o que torna então possível reescrever p_j em termos de \dot{q}_j como

$$p_b = \frac{1}{\kappa} \dot{q}_b + \frac{1}{4} \frac{1}{\kappa} m^2 \omega_0^2 \theta_b \theta_i \dot{q}_i + \frac{1}{\kappa} \frac{1}{2} m \omega_0^2 (\epsilon_{kbs} q_k \dot{\theta}_s) \quad (2.121)$$

permitindo então que se escreva a lagrangiana como

$$\begin{aligned} L_\theta(q_i, \dot{q}_i) &= \frac{1}{\kappa} \dot{q}_i \dot{q}_i + \frac{1}{4} \frac{1}{\kappa} m^2 \omega_0^2 \theta_i \theta_j \dot{q}_j \dot{q}_i + \frac{1}{\kappa} \frac{1}{2} m \omega_0^2 (\epsilon_{kis} q_k \dot{q}_i \theta_s) - \frac{\kappa}{2m} p_i^2 \\ &\quad - \frac{1}{2} m \omega_0^2 q_i^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \left[\theta_i (\epsilon_{kji} p_j q_k) + \frac{1}{4} (\theta \cdot p)^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.122)$$

As identidades

$$\theta_i p_i = m \theta_i \dot{q}_i \quad (2.123)$$

$$\theta_i \epsilon_{kji} p_j q_k = \frac{1}{\kappa} \epsilon_{kji} \dot{q}_j q_k \theta_i + \frac{1}{\kappa} \frac{1}{2} m \omega_0^2 q^2 \theta^2 - \frac{1}{\kappa} \frac{1}{2} m \omega_0^2 (\theta \cdot q)^2 \quad (2.124)$$

$$\begin{aligned} p_i p_i &= \left(\frac{1}{\kappa} \right)^2 \dot{q}_i^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\kappa} \right)^2 m^2 \omega_0^2 (\theta \cdot \dot{q})^2 + \left(\frac{1}{\kappa} \right)^2 m \omega_0^2 (\epsilon_{kis} q_k \dot{q}_i \theta_s) \\ &\quad + \frac{1}{16} \left(\frac{1}{\kappa} \right)^2 (m^2 \omega_0^2)^2 \theta^2 (\theta \cdot \dot{q})^2 + \left(\frac{1}{\kappa} \right)^2 \frac{1}{4} (m \omega_0^2)^2 q^2 \theta^2 - \left(\frac{1}{\kappa} \right)^2 \frac{1}{4} (m \omega_0^2)^2 (\theta \cdot q)^2 \end{aligned} \quad (2.125)$$

permitem que finalmente se obtenha uma expressão para a lagrangiana do oscilador harmônico tridimensional em um espaço não comutativo

$$L_\theta(q_i, \dot{q}_i) = \frac{m}{2\kappa} \dot{q}_i^2 - \frac{m}{2\kappa} \omega_0^2 q_i^2 + \frac{m}{2\kappa} m \omega_0^2 (\epsilon_{kji} \dot{q}_j q_k \theta_i) + \frac{m}{2\kappa} \frac{m^2 \omega_0^2}{4} (\theta \cdot \dot{q})^2 - \frac{m}{2\kappa} \frac{(m \omega_0^2)^2}{4} (\theta \cdot q)^2 \quad (2.126)$$

que, na tomada do limite comutativo (i.e., $\theta = 0$, que conduz a $\kappa \rightarrow 1$)

$$L_{\theta \rightarrow 0} = \frac{m}{2} \dot{q}_i^2 - \frac{m \omega_0^2}{2} q_i^2 \quad (2.127)$$

retoma a expressão usual (comutativa) da lagrangiana do oscilador harmônico tridimensional.

2.6 Interpretação física da lagrangiana não comutativa

A interpretação física do efeito não comutativo na dinâmica de uma rede é obtido a partir da interpretação das equações de movimento fornecidas pela lagrangiana (2.126). Desta feita, sejam as equações de Euler-Lagrange dadas por

$$\frac{m}{\kappa} \ddot{q}_i - \frac{m}{\kappa} m \omega_0^2 (\epsilon_{iks} \dot{q}_k \theta_s) + \frac{m}{\kappa} \frac{m^2 \omega_0^2}{4} \theta_i (\theta \cdot \ddot{q}) + \frac{m}{\kappa} \omega_0^2 q_i + \frac{m}{\kappa} \frac{(m \omega_0^2)^2}{4} \theta_i (\theta \cdot q) = 0 \quad (2.128)$$

que, ao ser simplificada como

$$\left(\delta_{ij} + \frac{m^2 \omega_0^2}{4} \theta_i \theta_j \right) \ddot{q}_j - m \omega_0^2 (\epsilon_{iks} \dot{q}_k \theta_s) + \omega_0^2 q_i + \frac{(m \omega_0^2)^2}{4} \theta_i (\theta \cdot q) = 0 \quad (2.129)$$

e ter a matriz $\delta_{ij} + \frac{m^2 \omega_0^2}{4} \theta_i \theta_j$ invertida pelo já conhecido processo de inversão, conduz à equação de movimento

$$\ddot{q}_k - m \omega_0^2 (\epsilon_{kbs} \dot{q}_b \theta_s) + \omega_0^2 q_k = 0 \quad (2.130)$$

que pode ser reescrita na familiar forma

$$\ddot{q}_k + \omega_0^2 q_k - m \omega_0^2 \left(\vec{q} \times \vec{\theta} \right)_k = 0 \quad (2.131)$$

Esta equação permite que se conclua, imediatamente, que cada átomo da rede experimenta uma força de restauração proporcional ao seu deslocamento (como esperado pelo modelo usual de vibração de uma rede) mais uma nova força que aparece como efeito da não comutatividade na posição dos átomos na rede. Esta nova força é análoga à força de Lorentz (ou força magnética)

$$\vec{F}_{\text{Lorentz}} = q \left(\vec{v} \times \vec{B} \right) \quad (2.132)$$

e, como a força de Lorentz, a “força θ ” varia a direção de propagação das vibrações da rede sem alterar seu módulo. Portanto, temos a composição de duas espécies diferentes de força atuando sobre os átomos que compõem a rede.

O resultado da composição destas forças se reflete nas curvas de frequência constante: sem a “força θ ” o movimento dos átomos nas direções x , y e z são desacoplados, e cada direção se comporta como uma cadeia unidimensional independente de átomos em vibração. Contudo, com a “força θ ” um efeito gigantesco na dinâmica da rede ocorre: ao considerar que a posição dos átomos em uma rede desordenada apresenta uma incerteza natural que pode ser descrita pelo parâmetro espacial não comutativo θ , o efeito coletivo desta rede desordenada (ou rede não comutativa) é a “força θ ”, que atua de forma análoga à força de Lorentz, em adição ao movimento harmônico simples inerente aos átomos em uma rede, causando o acoplamento das vibrações nas direções x , y e z .

O principal efeito físico da “força θ ” (ou o acoplamento das vibrações nas direções x , y e z) será o aparecimento de um pico na curva do calor específico reduzido ($\frac{C}{T^3}$ versus T), o aludido pico de bósons, e um incremento no calor específico quando comparado com a previsão usual para sólidos cristalinos oriundo de uma densidade de estados proporcional à ν^2 .

2.7 A densidade de estados de uma rede cúbica simples não comutativa

A lagrangiana descrita pela equação (2.126) será aqui aplicada na descrição de uma rede cúbica monoatômica simples contendo N pontos de rede em cada direção, perfazendo um total de N^3 átomos (em que m é a massa de cada átomo desta rede). Os pontos da rede são identificados pelos três parâmetros (l, m, n) tal que os componentes do deslocamento do átomo em (l, m, n) a partir de sua posição de equilíbrio são designados por $u_{l,m,n}$, $v_{l,m,n}$ e $w_{l,m,n}$.

Será considerado que as interações ocorrem apenas entre os primeiros vizinhos. Para que os deslocamentos sejam corretamente determinados, a figura a seguir ilustra a posição de um átomo de referência e o número e a posição de seus primeiros vizinhos

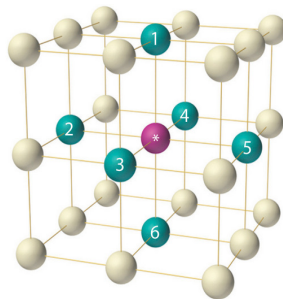


Figura 2.8: Ilustração do cristal cúbico simples para a visualização dos 6 primeiros vizinhos. Imagem obtida em <http://chemwiki.ucdavis.edu>

Os vetores de base desta rede são

$$\vec{d}_1 = a\vec{i} \quad \text{e} \quad \vec{d}_2 = a\vec{j} \quad \text{e} \quad \vec{d}_3 = a\vec{k} \quad (2.133)$$

em que \vec{i} , \vec{j} e \vec{k} são vetores unitários ao longo dos eixos x , y e z , respectivamente. O vetor de posição para um ponto da rede (l, m, n) em relação a um ponto tomado como origem é

$$\vec{R} = a \left(l\vec{i} + m\vec{j} + n\vec{k} \right) = l\vec{d}_1 + m\vec{d}_2 + n\vec{d}_3 \quad (2.134)$$

em que l , m e n são inteiros. Os vetores de base da rede recíproca, calculados pela prescrição padrão¹⁰, são descritos por

¹⁰Os vetores fundamentais da rede recíproca são obtidos a partir da condição de difração satisfeita por $\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$, em que $\Delta\vec{k}$ é o vetor que caracteriza a mudança do vetor de onda em um espalhamento. Para satisfazer a condição de difração, três equações devem ser simultaneamente satisfeitas para valores inteiros de h , k e l , a saber

$$\vec{a} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi h \quad \text{e} \quad \vec{b} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi k \quad \text{e} \quad \vec{c} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi l$$

de tal forma que, se $\Delta\vec{k} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$, os vetores \vec{A} , \vec{B} e \vec{C} são satisfeitos pela prescrição padrão

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \text{e} \quad \vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \text{e} \quad \vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

$$\vec{b}_1 = \frac{1}{a}\vec{i} \quad \text{e} \quad \vec{b}_2 = \frac{1}{a}\vec{j} \quad \text{e} \quad \vec{b}_3 = \frac{1}{a}\vec{k} \quad (2.135)$$

uma vez que a rede recíproca à rede cúbica simples direta também é uma rede cúbica simples.

Para evitar ambiguidades nos comprimentos de onda e nas frequências de vibração, uma zona é delimitada em torno da origem da rede recíproca. Esta zona é contornada por planos tais que são bissetores perpendiculares¹¹ das linhas de junção da rede recíproca, e é conhecida como a primeira zona de Brillouin, que inclui um período completo em todas as direções de vibração, bem como compreende todas as frequências permitidas. No presente caso, a primeira zona de Brillouin também é um cubo simples. Com a expressão para a lagrangiana

$$\begin{aligned} L_\theta(q_i, \dot{q}_i) &= \frac{m}{2\kappa} \dot{q}_i^2 - \frac{m}{2\kappa} \omega_0^2 q_i^2 + \frac{m}{2\kappa} m \omega_0^2 (\epsilon_{kji} \dot{q}_j q_k \theta_i) \\ &+ \frac{m}{2\kappa} \frac{m^2 \omega_0^2}{4} (\theta \cdot \dot{q})^2 - \frac{m}{2\kappa} \frac{(m \omega_0^2)^2}{4} (\theta \cdot q)^2 \end{aligned} \quad (2.136)$$

e generalizando convenientemente os deslocamentos por

$$\begin{aligned} q_i^2 &= (q_{\rho+a}^i - Q_\rho^i)^2 + (Q_\rho^i - q_{\rho-a}^i)^2 \\ &= (U_{l,m,n} - u_{l-a,m,n})^2 + (u_{l+a,m,n} - U_{l,m,n})^2 + (V_{l,m,n} - v_{l,m-a,n})^2 \\ &+ (v_{l,m+a,n} - V_{l,m,n})^2 + (W_{l,m,n} - w_{l,m,n-a})^2 + (w_{l,m,n+a} - W_{l,m,n})^2 \end{aligned} \quad (2.137)$$

tal que

$$\dot{q}_i = \dot{Q}_\rho^i : \begin{cases} \dot{Q}_\rho^1 = \dot{U}_{l,m,n} \\ \dot{Q}_\rho^2 = \dot{V}_{l,m,n} \\ \dot{Q}_\rho^3 = \dot{W}_{l,m,n} \end{cases}$$

então

$$\begin{aligned} L_\theta(q_i, \dot{q}_i) &= \frac{m}{2\kappa} (\dot{Q}_\rho^i)^2 - \frac{m}{2\kappa} \omega_0^2 [(q_{\rho+a}^i - Q_\rho^i)^2 + (Q_\rho^i - q_{\rho-a}^i)^2] + \frac{m}{2\kappa} m \omega_0^2 \left[\epsilon_{kji} (\dot{Q}_\rho^j) \times \right. \\ &\left. \times (2Q_\rho^k - q_{\rho-a}^k - q_{\rho+a}^k) \theta_i \right] + \frac{m}{2\kappa} \frac{m^2 \omega_0^2}{4} [\theta_i (\dot{Q}_\rho^i)]^2 - \frac{m}{2\kappa} \frac{(m \omega_0^2)^2}{4} [\theta_i (2Q_\rho^i - q_{\rho-a}^i - q_{\rho+a}^i)]^2 \end{aligned} \quad (2.138)$$

que conduz às equações de Euler-Lagrange

$$\left(\ddot{Q}_\rho^g \right) + 2m\omega_0^2 \left[\epsilon_{kgt} \left(\dot{Q}_\rho^k \right) \theta_t \right] + \omega^2 (2Q_\rho^g - q_{\rho-a}^g - q_{\rho+a}^g) = 0 \quad (2.139)$$

Aplicando as condições de contorno de Born-von Kármán (2.26) neste conjunto de equações

em que \vec{A} é perpendicular a \vec{b} e \vec{c} e satisfaz $\vec{A} \cdot \vec{a} = 2\pi$; o mesmo ocorre de forma análoga e cíclica com os vetores \vec{B} e \vec{C} .

¹¹Um bissetor perpendicular é uma linha que corta um segmento de linha conectado a dois pontos, exatamente na metade, em um ângulo de 90 graus.

diferenciais acopladas, as equações (2.139) podem ser determinadas a partir de funções periódicas da forma

$$U_{l,m,n} = u' \exp \left[i \left(2\pi\nu t + \vec{\sigma} \cdot \vec{R} \right) \right] \quad (2.140)$$

$$V_{l,m,n} = v' \exp \left[i \left(2\pi\nu t + \vec{\sigma} \cdot \vec{R} \right) \right] \quad (2.141)$$

$$W_{l,m,n} = w' \exp \left[i \left(2\pi\nu t + \vec{\sigma} \cdot \vec{R} \right) \right] \quad (2.142)$$

em que $\vec{\sigma}$ é o vetor de onda do espaço recíproco explicitamente escrito como

$$\vec{\sigma} = \sigma_x \vec{i} + \sigma_y \vec{j} + \sigma_z \vec{k} = \sigma_x \vec{b}_1 + \sigma_y \vec{b}_2 + \sigma_z \vec{b}_3 \quad (2.143)$$

e \vec{R} é o vetor posição dado por (2.134). Com os vetores recíprocos expressos por (2.135), se obtém imediatamente

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{R} = 2\pi a (l \sigma_x + m \sigma_y + n \sigma_z) \equiv l\phi_1 + m\phi_2 + n\phi_3. \quad (2.144)$$

Desta feita, particularizando as equações de movimento dadas por (2.139) para o caso $\rho = 1$

$$\left(\ddot{Q}_\rho^1 \right) + 2m\omega^2 \left[\epsilon_{k1t} \left(\dot{Q}_\rho^k \right) \theta_t \right] + \omega^2 (2Q_\rho^1 - q_{\rho-a}^1 - q_{\rho+a}^1) = 0 \quad (2.145)$$

com as soluções (2.140), (2.141) e (2.142) esta equação reverte-se em

$$\left[-4\pi^2\nu^2 + 2\omega_0^2 (1 - \cos(a\phi_1)) \right] u' + 4i\pi\nu m\omega_0^2 w' \theta_2 - 4i\pi\nu m\omega_0^2 v' \theta_3 = 0 \quad (2.146)$$

analogamente, para $\rho = 2$

$$\left[-4\pi^2\nu^2 + 2\omega_0^2 (1 - \cos(a\phi_2)) \right] v' + 4i\pi\nu m\omega_0^2 u' \theta_3 - 4i\pi\nu m\omega_0^2 w' \theta_1 = 0 \quad (2.147)$$

por fim e de forma análoga, para $\rho = 3$

$$\left[-4\pi^2\nu^2 + 2\omega_0^2 (1 - \cos(a\phi_3)) \right] w' - 4\pi i\nu m\omega_0^2 u' \theta_2 + 4\pi i\nu m\omega_0^2 v' \theta_1 = 0 \quad (2.148)$$

Para que as soluções u' , v' e w' , o determinante dos coeficientes de u' , v' e w' deve ser nulo, ou seja,

$$\begin{vmatrix} F_1 & -4i\pi\nu m\omega_0^2\theta_3 & 4i\pi\nu m\omega_0^2\theta_2 \\ 4i\pi\nu m\omega_0^2\theta_3 & F_2 & -4i\pi\nu m\omega_0^2\theta_1 \\ -4\pi i\nu m\omega_0^2\theta_2 & 4\pi i\nu m\omega_0^2\theta_1 & F_3 \end{vmatrix} = 0 \quad (2.149)$$

em que

$$F_1 = -4\pi^2\nu^2 + 2\omega_0^2 (1 - \cos(a\phi_1)) \quad (2.150)$$

$$F_2 = -4\pi^2\nu^2 + 2\omega_0^2 (1 - \cos(a\phi_2)) \quad (2.151)$$

$$F_3 = -4\pi^2\nu^2 + 2\omega_0^2(1 - \cos(a\phi_3)) \quad (2.152)$$

de forma que as possíveis frequências dos modos normais de vibração da rede são as raízes deste determinante, a saber

$$\begin{aligned} & \nu^6 - \frac{\omega_0^2}{\pi^2}\nu^4 \left[\frac{1}{2}(3 - \cos(a\phi_1) - \cos(a\phi_2) - \cos(a\phi_3)) + m^2\omega_0^2(\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2) \right] \\ & + \frac{\omega_0^4}{2\pi^4}\nu^2 \left[\frac{1}{2}(1 - \cos(a\phi_1))(1 - \cos(a\phi_2)) + \frac{1}{2}(1 - \cos(a\phi_1))(1 - \cos(a\phi_3)) \right. \\ & + \frac{1}{2}(1 - \cos(a\phi_2))(1 - \cos(a\phi_3)) + m^2\omega^2\theta_1^2(1 - \cos(a\phi_1)) \\ & \left. + m^2\omega^2[\theta_2^2(1 - \cos(a\phi_2)) + \theta_3^2(1 - \cos(a\phi_3))] \right] \\ & - \left(\frac{\omega_0^2}{2\pi^2} \right)^3 [(1 - \cos(a\phi_1))(1 - \cos(a\phi_2))(1 - \cos(a\phi_3))] = 0 \end{aligned} \quad (2.153)$$

em que é possível inferir, imediatamente, ao tomar $\phi_1 = \phi_2 = \phi_3 = 0$ a seguinte equação

$$\nu^6 - \frac{m^2\omega_0^4(\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2)}{\pi^2}\nu^4 = 0,$$

em que suas quatro raízes nulas representam os modos acústicos; e uma nova solução

$$\nu^2 = \frac{m^2\omega_0^4(\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2)}{\pi^2} \quad (2.154)$$

em que a raiz positiva representa o modo ótico que claramente surge como um efeito não comutativo (o limite $\theta \rightarrow 0$ recupera o caso usual em que apenas modos acústicos para uma rede de átomos de mesma massa são esperados).

A sistemática desenvolvida no estudo da rede bidimensional não comutativa será aplicada aqui para transpor o problema da resolução desta equação de sexto grau, e a tarefa agora se reduz à descoberta da superfície quádrlica descrita pela equação (2.153).

Na expansão $\cos \phi = 1 - \frac{1}{2}\phi^2$, esta equação agora se reescreve como

$$\begin{aligned} & \nu^6 - \frac{\omega_0^2}{\pi^2}\nu^4 \left[\frac{1}{4}a^2(\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2) + m^2\omega_0^2(\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2) \right] \\ & + \frac{\omega_0^4}{4\pi^4}\nu^2 a^2 \left[\frac{1}{2}a^2(\phi_1^2\phi_2^2 + \phi_1^2\phi_3^2 + \phi_2^2\phi_3^2) + m^2\omega^2(\theta_1^2\phi_1^2 + \theta_2^2\phi_2^2 + \theta_3^2\phi_3^2) \right] \\ & - \frac{1}{8} \left(\frac{\omega_0^2}{2\pi^2} \right)^3 a^6\phi_1^2\phi_2^2\phi_3^2 = 0 \end{aligned} \quad (2.155)$$

que vai ser reescrita, ao desprezar termos de ordens mais altas tal qual ϕ^4 , como

$$\left[\frac{m^2 \omega_0^6 \theta_3^2 a^2}{4\pi^4} - \frac{\omega_0^2 a^2}{4\pi^2} \nu^2 \right] (\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2) = \frac{m^2 \omega_0^4 (\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2)}{\pi^2} \nu^2 - \nu^4 \quad (2.156)$$

em que duas frequências são necessariamente nulas (basta observar que a equação é de quarto grau). Esta é a equação da superfície quádrlica desejada. Contudo, dois casos particulares serão abordados no presente estudo: o caso $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 \rightarrow 0$, que vai acarretar em uma densidade de estados proporcional a ν^2 , e o simples caso $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta$, que vai mostrar a surpreendente contribuição não comutativa para a densidade de estados na forma de uma divergência proporcional ao parâmetro θ .

2.7.1 O caso em que $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 \rightarrow 0$

Tomando $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 \rightarrow 0$ na expressão da equação principal (2.156) se obtém

$$\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2 = \frac{4\pi^2}{\omega_0^2 a^2} \nu^2 \quad (2.157)$$

que é a forma canônica da equação da esfera com raio $\frac{2\pi}{\omega} \nu$. Seu volume é dado por

$$V = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2\pi}{\omega_0 a} \nu \right)^3 \quad (2.158)$$

e, como a densidade de estados pode ser diretamente obtida pela derivada do volume em relação a ν , se obtém a expressão

$$g(\nu) = 32 \frac{\pi^4}{\omega_0^3 a^3} \nu^2 \quad (2.159)$$

proporcional a ν^2 , como é esperado para o caso usual¹² (comutativo), que representa fisicamente a densidade de estados de um cristal - o sólido no qual seus constituintes estão organizados em um padrão bem definido (ordenado e periódico). Não há a presença de divergências nesta densidade de estados, e este resultado será tomado como um padrão para que os efeitos não-comutativos sejam observados.

2.7.2 O caso em que $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta$

Da equação principal (2.156), tomando $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta$, se obtém a expressão

$$\left[\frac{m^2 \omega_0^6 \theta^2 a^2}{4\pi^4} - \frac{\omega_0^2 a^2}{4\pi^2} \nu^2 \right] (\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2) = 3 \frac{m^2 \omega_0^4 \theta^2}{\pi^2} \nu^2 - \nu^4 \quad (2.160)$$

que, reescrita em termos da (conveniente) variável ω_θ se torna

¹²Este resultado confirma a previsão da teoria de Debye para a descrição do comportamento das vibrações em uma rede tridimensional [60].

$$\left[\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} \right] a^2 (\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2) = 12 \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} \right) - \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4}, \quad (2.161)$$

que é a forma canônica da equação da esfera, reescrita na forma mais familiar como

$$\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2 = \frac{1}{a^2} \frac{12 \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} \right) - \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2}} \quad (2.162)$$

Portanto, a partir da expressão geral para o raio

$$r = \left| \frac{1}{a^2} \frac{12 \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} \right) - \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2}} \right|^{\frac{1}{2}} \quad (2.163)$$

uma expressão para o volume é imediatamente obtida por

$$V = \frac{4}{3}\pi \left| \frac{1}{a^2} \frac{12 \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} \right) - \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2}} \right|^{\frac{3}{2}} \quad (2.164)$$

e a densidade de estados é obtida diferenciando este volume com respeito à frequência ν , ou seja,

$$g(\nu) = \frac{4}{3}\pi \frac{\partial}{\partial \nu} \left| \frac{12 \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} \right) - \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2}} \right|^{\frac{3}{2}} \quad (2.165)$$

Portanto

$$g(\nu) = \frac{2\pi}{a^3} \left| \sqrt{\frac{12 \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} - \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2}}} \times \left[48 \frac{\pi}{\omega_\theta} \frac{\frac{2\pi\nu}{\omega_\theta}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2}} - 8 \frac{\pi}{\omega_0} \frac{\frac{8\pi^3\nu^3}{\omega_0^3}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2}} + \frac{4\pi}{\omega_0} \left(\frac{2\pi\nu}{\omega_0} \right) \frac{\left(12 \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} - \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} \right)}{\left(\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} \right)^2} \right] \right| \quad (2.166)$$

em que é imediata a constatação de que uma divergência ocorre para o valor de frequência

$$\nu_{\text{div}} = \frac{\omega_0^2}{\pi\omega_\theta} \quad (2.167)$$

e está intrinsecamente relacionada ao parâmetro não comutativo θ , uma vez que o limite $\theta \rightarrow 0$ (que conduz a $\omega_\theta \rightarrow \infty$) resulta em $\nu \rightarrow 0$, e a divergência desaparece. A divergência é, portanto, causada exclusivamente por θ - um notório e surpreendente efeito não comutativo: a criação de uma singularidade de van Hove, ou uma divergência na densidade de estados.

Para plotar o gráfico da densidade de modos normais de vibração versus a frequência, é ne-

cessário determinar o máximo valor para a frequência ν , correspondendo a mais alta frequência na qual o sólido pode vibrar. Da expressão (2.153), se obtém o máximo para a frequência tomando $\frac{\partial \nu}{\partial \phi_1} = 0$, $\frac{\partial \nu}{\partial \phi_2} = 0$ e $\frac{\partial \nu}{\partial \phi_3} = 0$, que leva à condição

$$\sin(a\phi_1) = 0 \rightarrow \phi_1 = 0, \frac{\pi}{a} \quad (2.168)$$

analogamente para ϕ_2 e ϕ_3 . Desta feita, ao substituir os valores

$$\phi_1 = \phi_2 = \phi_3 = \frac{\pi}{a}, \quad (2.169)$$

em (2.161) se obtém o valor da frequência máxima

$$\nu_{\max} = \left[\frac{\omega_0^2}{\pi^2} + \frac{3}{2} \frac{\omega_0^4}{\pi^2 \omega_\theta^2} + \sqrt{\frac{3\omega_0^4}{\pi^2 \omega_\theta^2} \left(\frac{4\omega_0^2}{\pi^2} + \frac{3\omega_0^4}{\pi^2 \omega_\theta^2} \right)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.170)$$

2.7.3 O calor específico reduzido e o pico de Bóson

O calor específico pode ser determinado a partir da expressão para a energia

$$E = \int_0^{\nu_{\max}} g(\nu) \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} d\nu \quad (2.171)$$

Derivando esta expressão com relação à temperatura se obtém uma expressão para o calor específico volumétrico dada por

$$C = \int_0^{\nu_{\max}} \frac{h^2 \nu^2}{k_B T^2} \frac{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1\right]^2} g(\nu) d\nu \quad (2.172)$$

que, com $g(\nu)$ dado por (2.166) conduz a

$$C = \int_0^{\nu_{\max}} d\nu \frac{2\pi}{a^3} \frac{h^2 \nu^2}{k_B T^2} \frac{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1\right]^2} \left| \sqrt{\frac{12 \frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_\theta^2} - \frac{16\pi^4 \nu^4}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_0^2}}} \times \right. \\ \left. \times \frac{8\pi^2 \nu}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_0^2}} \left[\frac{12}{\omega_\theta^2} - \frac{8\pi^2 \nu^2}{\omega_0^4} + \frac{1}{\omega_0^2} \frac{\frac{6\nu}{\omega_\theta^2} - \frac{2\pi^2 \nu^2}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_0^2}} \right] \right| \quad (2.173)$$

que está nas unidades do SI, $[C] = \frac{J}{m^3 K}$, caracterizando o calor específico volumétrico, uma propriedade intensiva de (ou intrínseca a) um sólido.

A curva desejada para que uma comparação com dados experimentais seja possível é a curva do calor específico reduzido, ou $\frac{C}{T^3}$ versus T , com unidades $\frac{J}{mol \cdot K^4}$. Para que a curva seja obtida nas unidades desejadas, é necessário então que se faça a conversão do volume V_{cell} ,

$V_{cell} = \frac{1}{\sigma^3}$, para *mol*. Esta conversão será obtida com a inserção “à mão” da concentração molar ou molaridade c_m

$$\frac{1}{V_{cell}} \rightarrow \frac{1}{c_m V_{cell}} \quad (2.174)$$

em que

$$c_m = \frac{Z}{N_A V_{cell}} \quad (2.175)$$

onde N_A é a constante de Avogadro e Z é o número de unidades da fórmula na célula unitária. E a expressão (2.173), agora escrita como $\frac{C}{T^3}$, se reescreve como

$$\begin{aligned} \frac{C}{T^3} = & \frac{2\pi}{Z} \frac{1}{T^3} \int_0^{\nu_{\max}} d\nu N_A \frac{h^2 \nu^2}{k_B T^2} \frac{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1\right]^2} \left| \sqrt{\frac{48\pi^2 \nu^2}{\omega_\theta^2} - \frac{16\pi^4 \nu^4}{\omega_0^4}} \right| \times \\ & \times \frac{8\pi^2 \nu}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_0^2}} \left[\frac{12}{\omega_\theta^2} - \frac{8\pi^2 \nu^2}{\omega_0^4} + \frac{1}{\omega_0^2} \frac{\frac{6\nu}{\omega_\theta^2} - \frac{2\pi^2 \nu^2}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_0^2}} \right] \quad (2.176) \end{aligned}$$

nas desejadas unidades $\frac{J}{mol \cdot K^4}$. Contudo, os resultados experimentais têm suas grandezas físicas dadas em unidades recíprocas, ou unidades cm^{-1} . Nestas unidades

$$\frac{h\nu}{k_B T} = 1.439 \frac{\nu}{T} \quad (2.177)$$

em que

$$h = 1 \text{ e } k_B = \frac{k_B}{100hc} = 0.69503 cm^{-1} K^{-1}. \quad (2.178)$$

de tal maneira que, ao reescrever (2.176) convenientemente como

$$\begin{aligned} \frac{C}{T^3} = & \frac{1}{Z} \frac{1}{T^3} \int_0^{\nu_{\max}} \left(\frac{h}{k_B T} d\nu \right) \left(\frac{h\nu}{k_B T} \right) (100hc N_A) \left(\frac{k_B}{100hc} \right) \frac{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1\right]^2} \times \\ & \times \left\{ \frac{2\pi\nu}{\omega_\theta} \left| \sqrt{\frac{12\frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_\theta^2} - \frac{16\pi^4 \nu^4}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_0^2}}} \left[48\pi \frac{\frac{2\pi\nu}{\omega_\theta}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_0^2}} \right] \right| \right. \\ & \left. + \frac{2\pi\nu}{\omega_0} \left| \sqrt{\frac{12\frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_\theta^2} - \frac{16\pi^4 \nu^4}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_0^2}}} \left[4\pi \left(\frac{2\pi\nu}{\omega_0} \right) \frac{\left(12\frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_\theta^2} - \frac{16\pi^4 \nu^4}{\omega_0^4} \right)}{\left(\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_0^2} \right)^2} - 8\pi \frac{\frac{8\pi^3 \nu^3}{\omega_0^3}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2 \nu^2}{\omega_0^2}} \right] \right| \right\}, \end{aligned}$$

É imediata a adaptação às unidades recíprocas

$$\frac{C}{T^3} = \frac{17.2173}{Z} \frac{1}{T^5} \int_0^{\nu_{\max}} d\nu \frac{\exp\left(1.439 \frac{\nu}{T}\right)}{\left[\exp\left(1.439 \frac{\nu}{T}\right) - 1\right]^2} \nu \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ \frac{2\pi\nu}{\omega_\theta} \left| \sqrt{\frac{12\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} - \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2}}} \left[48\pi \frac{\frac{2\pi\nu}{\omega_\theta}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2}} \right] \right| \right. \\
& \left. + \frac{2\pi\nu}{\omega_0} \left| \sqrt{\frac{12\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} - \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2}}} \left[4\pi \left(\frac{2\pi\nu}{\omega_0} \right) \frac{\left(12\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} - \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} \right)}{\left(\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} \right)^2} - 8\pi \frac{\frac{8\pi^3\nu^3}{\omega_0^3}}{\frac{4\omega_0^2}{\omega_\theta^2} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2}} \right] \right| \right\} \quad (2.179)
\end{aligned}$$

e esta expressão pode ser numericamente determinada. Analogamente, para a expressão em que $\theta \rightarrow 0$, com $g(\nu)$ dada por (2.159), o calor específico reduzido em unidades recíprocas é expresso por

$$\frac{C}{T^3} = \frac{17.2173}{Z} \frac{1}{T^5} \int_0^{\nu_{\max}} d\nu \frac{32\pi^4\nu^4}{\omega_0^3} \frac{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1\right]^2} \quad (2.180)$$

em que a frequência máxima é dada por

$$\nu_{\max} = \frac{\omega_0}{\pi} \quad (2.181)$$

é importante ressaltar que as expressões (2.180) e (2.181) são também obtidas a partir do limite $\theta \rightarrow 0$ nas expressões (2.179) e (2.170), respectivamente. Um gráfico comparativo entre o calor específico reduzido não comutativo, (2.180), e o calor específico reduzido, (2.179), é então plotado na figura a seguir

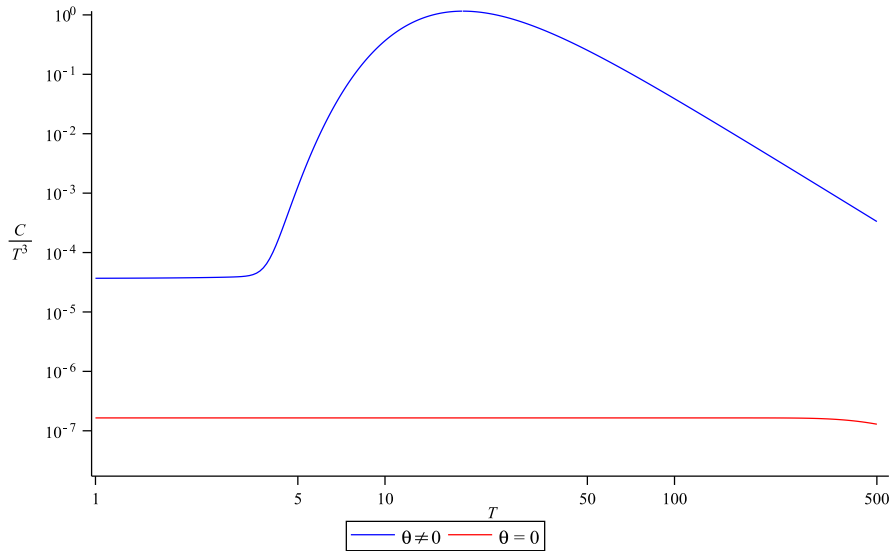


Figura 2.9: Curva $\frac{C}{T^3}$ versus T para $\frac{\omega_0}{\omega_\theta} = 0.1$, $Z = 4$ moléculas e $\omega_0 = 2000 \text{ rad.s}^{-1}$. A curva em vermelho representa o caso em que $\theta \rightarrow 0$, ao passo que a curva em azul representa a contribuição não comutativa, $\theta \neq 0$.

donde se observa imediatamente a presença de um pico - o aludido pico de Bóson - para o gráfico com $\theta \neq 0$, além do acréscimo em calor específico em relação ao gráfico com $\theta \rightarrow 0$, que representa um cristal usual, com a típica densidade de estados proporcional à ν^2 .

2.7.4 A interação entre primeiros e segundos vizinhos de uma rede cristalina

Os sólidos cristalinos também podem apresentar um pico de Bóson a temperaturas intermediárias, embora o patamar do calor específico permaneça em concordância com uma densidade de estados proporcional à ν^2 . Este fenômeno também é uma manifestação de uma singularidade de van Hove, neste caso gerada pela interação entre segundos vizinhos (detalhadamente calculado em [75]). Por isso é conveniente ressaltar aqui que o pico de Bóson no caso de sólidos desordenados tem a mesma natureza do pico de Bóson em sólidos cristalinos: uma singularidade de van Hove.

Recorrer à interação entre segundos vizinhos foi a saída teórica encontrada para que o estudo sobre a dinâmica de uma rede produzisse conclusões satisfatórias para explicar os resultados experimentais. De fato, considerar apenas interações entre primeiros vizinhos em redes cristalinas descreverá apenas modos desacoplados, em que as vibrações dos átomos não acomplam entre si. Todavia, quando se leva em conta a interação entre os segundos vizinhos, as vibrações dos átomos se acoplam; desta maneira, o limite em que a interação entre os segundos vizinhos é desprezível ante a interação entre primeiros vizinhos conduz a uma densidade de estados em satisfatória concordância com os dados experimentais.

O caso mais simples será novamente considerado: uma rede cúbica com átomos iguais de massa m com interação harmônica entre primeiros e segundos vizinhos dada por α e γ , respectivamente, em que $\alpha > \gamma$. São 6 primeiros vizinhos e 12 segundos vizinhos, com equações de movimento explicitamente escritas como (ver também [69], [71], [72], [73], [74])

$$\left[1 - \frac{2\pi^2\nu^2}{\omega_\alpha^2} + 4\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} - 4\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \cos(a\phi_1) - 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \cos(a\phi_1) \cos(a\phi_2) - 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \cos \times \right. \\ \left. \times (a\phi_1) \cos(a\phi_3) \right] u' + 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \sin(a\phi_1) \sin(a\phi_2) v' + 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \sin(a\phi_1) \sin(a\phi_3) w' = 0 \quad (2.182)$$

$$\left[1 - \frac{2\pi^2\nu^2}{\omega_\alpha^2} + 4\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} - 4\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \cos(a\phi_2) - 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \cos(a\phi_2) \cos(a\phi_1) - 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \cos \times \right. \\ \left. \times (a\phi_2) \cos(a\phi_3) \right] v' + 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \sin(a\phi_1) \sin(a\phi_2) u' + 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \sin(a\phi_1) \sin(a\phi_3) w' = 0 \quad (2.183)$$

$$\left[1 - \frac{2\pi^2\nu^2}{\omega_\alpha^2} + 4\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} - 4\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \cos(a\phi_3) - 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \cos(a\phi_3) \cos(a\phi_1) - 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \cos \times \right. \\ \left. \times (a\phi_3) \cos(a\phi_2) \right] w' + 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \sin(a\phi_3) \sin(a\phi_1) u' + 2\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} \sin(a\phi_3) \sin(a\phi_2) v' = 0 \quad (2.184)$$

em que as frequências naturais

$$\omega_\alpha^2 = \frac{\alpha}{m} \text{ para os primeiros vizinhos,} \quad (2.185)$$

$$\omega_\gamma^2 = \frac{\gamma}{m} \text{ para os segundos vizinhos,} \quad (2.186)$$

foram pertinentemente introduzidas se são tais que $\frac{\omega_\gamma^2}{\omega_\alpha^2} < 1$. A equação secular, em analogia à expressão (2.149), pode então ser determinada; contudo o caminho para se determinar a densidade de estados não é nada trivial, e fogem do escopo deste estudo. O particular interesse está em tomar $\phi_1 = \phi_2 = \phi_3 = 0$ e então verificar que todas as frequências são nulas neste limite. Portanto, *o não surgimento de modos óticos* é o que se espera da teoria usual (não comutativa) quando se considera uma rede composta de átomos de mesma massa m , ainda que a interação entre segundos vizinhos seja considerada. O surgimento de modos óticos é, portanto, um fenômeno unicamente não comutativo. Por este fato, é intuitivo creditar aos modos óticos de frequências muito baixas, como sugerido experimentalmente em [70], serem os responsáveis pelo incremento no patamar do calor específico para os sólidos desordenados.

2.8 Observações finais

A interpretação de uma rede desordenada em termos do espaço não comutativo, em que a cada átomo que pertence a rede é permitido uma incerteza em torno de sua posição tal que o efeito dessas incertezas nas posições resulta em uma rede desordenada, mostrou ser um modelo que compreende de forma natural os fenômenos do pico de Bóson e o incremento no patamar do calor específico de sólidos desordenados à temperaturas intermediárias.

Ainda que a origem da ideia de um espaço não-comutativo, à primeira vista, pareça ser bastante distante da física cotidiana - principalmente porque a imensa maioria dos estudos em espaço não-comutativo se concentra na área da física à altas energias - o presente estudo mostra que esta teoria pode ser trazida ao mundo ordinário por meio do estudo dos osciladores harmônicos não comutativos clássicos, em que o limite clássico é obtido na substituição do comutador da mecânica quântica pelos parênteses de Poisson clássicos. Ainda que os novos parênteses de Poisson surjam deformados pela álgebra não comutativa, uma transformação linear apropriada resultou na Hamiltoniana usual do oscilador harmônico acrescida de uma interação proporcional ao parâmetro não comutativo que, via uma transformação de Legendre, resultou em uma lagrangiana não comutativa pronta para a aplicação em um modelo de uma

rede desordenada.

Um estudo detalhado da lagrangiana não comutativa mostrou que cada átomo da rede experimenta uma força de restauração proporcional ao seu deslocamento mais uma nova força que aparece como efeito da não comutatividade na posição dos átomos na rede, com uma forma análoga à força de Lorentz, e que tem como principal efeito causar uma divergência na densidade de estados - uma singularidade de van Hove - e o surgimento de modos óticos onde são esperados apenas modos acústicos. Ainda que não seja possível atribuir diretamente o incremento no patamar do calor específico aos modos óticos de baixas frequências, as evidências experimentais são corroboradas aqui com a verificação de que mesmo considerando a interação entre segundos vizinhos em uma rede cristalina ordinária (que também apresenta pico de Bóson), modos óticos não aparecem e tampouco o incremento em calor específico. De qualquer maneira, o fato é que o surgimento de modos óticos é um efeito unicamente não comutativo.

É também interessante pontuar que uma divergência na densidade de estados ocorre quando a velocidade de grupo tende a ser nula, o que indicaria a presença de ondas estacionárias. Como as ondas estacionárias são formadas por interferências entre ondas progressivas, existe nessa região do espectro um acúmulo de modos normais de vibração. Como estes modos normais transportam energia, talvez toda essa energia esteja sendo gasta para mudar a fase do sistema, atribuindo aos átomos constituintes uma posição fixa na rede desordenada.

Por fim, o modelo para o calor específico de sólidos desordenados a temperaturas intermediárias baseado em um espaço não comutativo compreendeu indubitavelmente a natureza do pico de Bóson como sendo devida a uma singularidade de van Hove e reafirmou a sugestão experimental de que o incremento em calor específico provém de modos óticos de frequência muito baixas. Mais que isso, o modelo parte de primeiros princípios, ou seja, da dinâmica de uma rede, em que as posições dos átomos apresentam uma incerteza descrita pelo parâmetro espacial não comutativo. Não há, até o presente momento, nenhuma teoria baseada em primeiros princípios com tamanho alcance na literatura.

Capítulo 3

Uma aplicação em biologia para o modelo não comutativo

3.1 O modelo não comutativo e a anomalia do calor específico da *L*-cisteína

A cisteína é um α -aminoácido com fórmula química $HO_2CCH(NH_2)CH_2SH$. Basicamente, um aminoácido é qualquer molécula que contenha simultaneamente os grupos funcionais amina ($-NH_2$) e ácido carboxílico ($-COOH$). O prefixo α indica que as funções amina e carboxilato estão ligadas ao mesmo carbono. O prefixo *L* em *L*-cisteína indica que a cisteína é um composto quiral e que a forma em que ela se apresenta abundante na natureza é na forma *L*, de levógiro, indicando que quando tal composto é exposto à luz polarizada desvia esta luz para a esquerda¹. Ilustrativamente [76] a *L*-cisteína pode ser visualizada como



Figura 3.1: Uma ilustração da *L*-cisteína. A bolinha amarela simboliza o elemento enxofre. Analogamente, as bolinhas brancas, vermelhas e cinzas representam os elementos hidrogênio, oxigênio e carbono, respectivamente. Imagem obtida em <https://pt.wikipedia.org>.

A estrutura cristalina da forma ortorrômbica da *L*-cisteína, determinada a partir da difração por raios-X, estabelece que sua cristalização ocorre no grupo espacial $P2_12_12_1$ com quatro moléculas em uma célula unitária. Esquemáticamente,

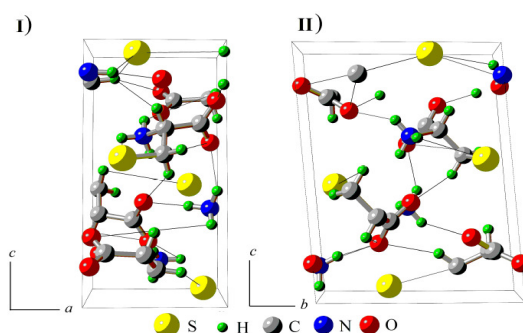


Figura 3.2: A célula primitiva da cisteína. À esquerda: configuração ortorrômbica. À direita: configuração monoclinica. Imagem obtida em [76].

É fato também que a *L*-cisteína é um aminoácido que se comporta de forma similar a materiais vítreos [77], e por esta característica foi escolhida para testar o alcance do modelo não

¹Ao que parece a natureza tem certa predileção por compostos quirais levógiros; dos vinte aminoácidos principais (ou aminoácidos padrão), dezenove estão na forma *L*. O único que não está na forma *L* é a glicina, e isso porque a glicina não é um composto quiral.

comutativo na descrição de materiais biológicos que apresentem fenômenos vítreos, partindo apenas das simetrias presentes em seu grupo espacial.

O presente estudo vai basear-se somente nas simetrias contidas no grupo espacial $P2_12_12_1^2$ para a descrição do calor específico a baixas temperaturas da *L*-cisteína. Um grupo espacial é o conjunto de elementos de simetria que caracteriza, em larga escala, os elementos de simetria pontuais característicos de uma rede de Bravais quando sucessivamente repetida no espaço, formando uma rede infinita³. O grupo espacial $P2_12_12_1$ representa uma estrutura ortorrômbica; P (Primitiva) simboliza a presença de pontos de rede apenas nos vértices e 2_1 indica uma rotação de 180 seguida de uma translação de $\frac{1}{2}$ da distância do vetor de rede. A conformação da *L*-cisteína ortorrômbica apresenta 4 moléculas em uma célula unitária [78], caracterizando Z , que é o número de unidades-fórmula na célula unitária. A ideia então é partir apenas das simetrias presentes neste grupo espacial e do número de unidades-fórmula para construir um modelo e determinar o calor específico da *L*-cisteína. Para isso, a seguinte aproximação será adotada

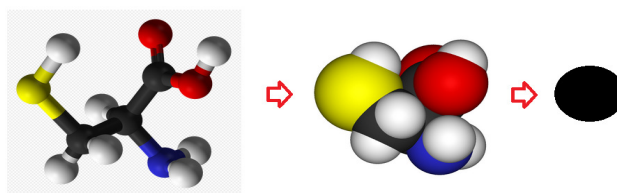


Figura 3.3: A forma para a molécula da *L*-cisteína considerada neste modelo. Imagem obtida em <https://pt.wikipedia.org>.

indicando que todas as características inerentes aos átomos que formam uma molécula de cisteína (tais como as suas massas, ou seus elétrons ou ligações entre estes átomos) serão ignoradas, e cada molécula de cisteína será tratada como uma bolinha de massa m . Assim, das simetrias do grupo espacial da *L*-cisteína, sua correspondente rede de Bravais é uma estrutura ortorrômbica de faces centradas composta de átomos iguais (de mesma massa). Mais ainda, esta estrutura ortorrômbica de faces centradas será agora aproximada a uma estrutura cúbica de faces centradas

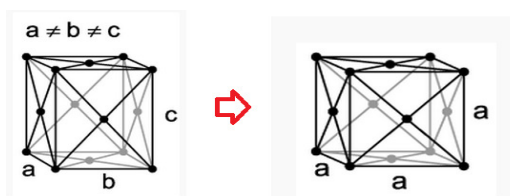


Figura 3.4: A aproximação da estrutura ortorrômbica de faces centradas em uma estrutura cúbica de faces centradas. Imagens obtidas em <https://pt.wikipedia.org>.

²Ao que parece a natureza também tem certa predileção por este grupo espacial: o grupo $P2_12_12_1$ ocorre em quase um terço de todos os cristais de proteínas conhecidos.

³Infinita no sentido que as dimensões dos cristais usados nas investigações experimentais são muito grandes em comparação com as distâncias características da rede de Bravais considerada.

tal que a repetição (ou sucessivas translações) desta rede de Bravais gera a estrutura cristalina ou rede direta, em que é assumido que cada átomo que compõe esta rede interage apenas com seus vizinhos mais próximos: 12 vizinhos mais próximos para o caso de um cristal cúbico de faces centradas, como pode ser observado na figura a seguir

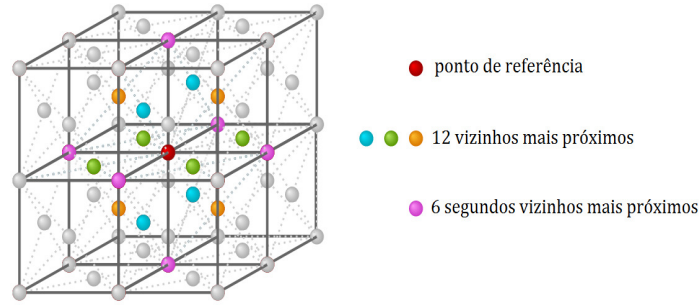


Figura 3.5: Ilustração do cristal cúbico de faces centradas para a visualização dos 12 primeiros vizinhos. A figura conta, ainda, com a identificação dos 6 segundos vizinhos. Imagem obtida em <http://www.physics-in-a-nutshell.com>.

e então a lagrangiana pode ser determinada a partir da expressão (2.126), sendo necessário apenas determinar os componentes dos deslocamentos tridimensionais de cada átomo. Considerando a como o comprimento das arestas deste cubo, os pontos da rede são identificados por três parâmetros (l, m, n) , tais que os componentes do deslocamento do átomo, a partir de sua posição de equilíbrio, são designados por $U_{l,m,n}$, $V_{l,m,n}$ e $W_{l,m,n}$ e se expressam por

$$\begin{aligned} U_{l,m,n}, V_{l,m,n}, W_{l,m,n} &= u', v', w' \exp \left[2\pi i \left(\nu t + \vec{\sigma} \cdot \vec{R} \right) \right] \\ &= u', v', w' \exp \left[i \left(2\pi \nu t + l\phi_1 + m\phi_2 + n\phi_3 \right) \right] \end{aligned} \quad (3.1)$$

em que u' , v' e w' são as amplitudes e ν é a frequência. Os componentes dos deslocamentos nas direções \vec{i} , \vec{j} e \vec{k} são

$$2\pi \vec{\sigma} \cdot \vec{R} \equiv \pi a \sigma_x l + \pi a \sigma_y m + \pi a \sigma_z n \quad (3.2)$$

ou seja

$$2\pi \vec{\sigma} \cdot \vec{R} \equiv l\phi_1 + m\phi_2 + n\phi_3 \quad (3.3)$$

tal que as expressões para σ_x , σ_y e σ_z são obtidas pelo produto vetorial das equações para $\vec{\sigma}$

$$\vec{\sigma} = \sigma_x \vec{i} + \sigma_y \vec{j} + \sigma_z \vec{k} = \sigma_1 \vec{b}_1 + \sigma_2 \vec{b}_2 + \sigma_3 \vec{b}_3 \quad (3.4)$$

tal que

$$\begin{aligned}\vec{i} \cdot \vec{\sigma} &= \sigma_x = \frac{1}{a} (\sigma_1 - \sigma_2 + \sigma_3) \\ \vec{j} \cdot \vec{\sigma} &= \sigma_y = \frac{1}{a} (\sigma_1 + \sigma_2 - \sigma_3) \\ \vec{k} \cdot \vec{\sigma} &= \sigma_z = \frac{1}{a} (-\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)\end{aligned}\tag{3.5}$$

As condições de contorno de Born-von Kármán implicam em

$$\sigma_i = \frac{m_i}{N_i}, \quad i = 1, 2, 3\tag{3.6}$$

ou seja

$$\begin{aligned}\sigma_x &= \frac{1}{a} \left(\frac{m_1}{N_1} - \frac{m_2}{N_2} + \frac{m_3}{N_3} \right) \\ \sigma_y &= \frac{1}{a} \left(\frac{m_1}{N_1} + \frac{m_2}{N_2} - \frac{m_3}{N_3} \right) \\ \sigma_z &= \frac{1}{a} \left(-\frac{m_1}{N_1} + \frac{m_2}{N_2} + \frac{m_3}{N_3} \right)\end{aligned}\tag{3.7}$$

o intervalo de variação dos inteiros (m_1, m_2, m_3) é tal que, se as quantidades (ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3) forem interpretadas como coordenadas cartesianas, os pontos que correspondem aos inteiros (m_1, m_2, m_3) estão todos dentro de uma região com a forma da primeira zona de Brillouin da rede cristalina [79].

A primeira rede de Brillouin é construída pela passagem de planos normais aos vetores de base \vec{b}_1, \vec{b}_2 e \vec{b}_3 , de tal maneira que os vetores de base são cortados. A zona tem atributos de simetria cúbica.

O vetor $\vec{\sigma}$ da rede recíproca, que ocorre na equação de deslocamento, é o vetor de onda. Oscilações térmicas do átomo propagam uma onda associada. A expressão para os deslocamentos (3.1) atesta que a onda é definida apenas em pontos discretos dos átomos. O vetor de onda $\vec{\sigma}$ tem a direção da frente de onda (normal a ele) e tem magnitude $|\vec{\sigma}| = \frac{1}{\lambda}$, em que λ é o comprimento de onda em números de onda. Sempre que um vetor de onda termina em um ponto da rede recíproca uma frequência característica é determinada. A zona é um contorno então de pontos que determinam as frequências permitidas. As zonas não restringem a direção de propagação e incluem um período completo da onda em qualquer direção do espaço recíproco. Portanto, existem $N_1 N_2 N_3$ pontos permitidos na primeira zona de Brillouin.

A generalização mais conveniente para os deslocamentos é dada por

$$\begin{aligned}q_i^2 &= (u_{l+a,m+a,n} - U_{l,m,n} + v_{l+a,m+a,n} - V_{l,m,n})^2 + (U_{l,m,n} - u_{l-a,m+a,n} + v_{l-a,m+a,n} - V_{l,m,n})^2 \\ &+ (u_{l+a,m-a,n} - U_{l,m,n} + V_{l,m,n} - v_{l+a,m-a,n})^2 + (U_{l,m,n} - u_{l-a,m-a,n} + V_{l,m,n} - v_{l-a,m-a,n})^2 \\ &+ (u_{l+a,m,n+a} - U_{l,m,n} + w_{l+a,m,n+a} - W_{l,m,n})^2 + (u_{l+a,m,n-a} - U_{l,m,n} + W_{l,m,n} - w_{l+a,m,n-a})^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (U_{l,m,n} - u_{l-a,m,n+a} + w_{l-a,m,n+a} - W_{l,m,n})^2 + (U_{l,m,n} - u_{l-a,m,n-a} + W_{l,m,n} - w_{l-a,m,n-a})^2 \\
& + (v_{l,m+a,n+a} - V_{l,m,n} + w_{l,m+a,n+a} - W_{l,m,n})^2 + (v_{l,m+a,n-a} - V_{l,m,n} + W_{l,m,n} - w_{l,m+a,n-a})^2 \\
& + (V_{l,m,n} - v_{l,m-a,n+a} + w_{l,m-a,n+a} - W_{l,m,n})^2 + (V_{l,m,n} - v_{l,m-a,n-a} + W_{l,m,n} - w_{l,m-a,n-a})^2
\end{aligned} \tag{3.8}$$

e

$$\dot{q}_i = \dot{Q}_a^i : \begin{cases} \dot{Q}_a^1 = \dot{U}_{l,m,n} \\ \dot{Q}_a^2 = \dot{V}_{l,m,n} \\ \dot{Q}_a^3 = \dot{W}_{l,m,n} \end{cases} \tag{3.9}$$

de tal maneira que substituindo estes deslocamentos na expressão para a lagrangiana para, por exemplo, $U_{l,m,n}$, por permutações cíclicas obtemos as lagrangianas para $V_{l,m,n}$ e $W_{l,m,n}$. Portanto, a partir da lagrangiana (2.126)

$$\begin{aligned}
L_\theta(q_i, \dot{q}_i) &= \frac{m}{2\kappa} \dot{q}_i^2 - \frac{m}{2\kappa} \omega^2 q_i^2 + \frac{m}{2\kappa} m \omega^2 (\epsilon_{kji} \dot{q}_j q_k \theta_i) + \frac{m}{2\kappa} \frac{m^2 \omega^2}{4} (\theta \cdot \dot{q})^2 \\
&\quad - \frac{m}{2\kappa} \frac{(m \omega^2)^2}{4} (\theta \cdot q)^2
\end{aligned} \tag{3.10}$$

e as equações de Euler-Lagrange são obtidas e se expressam por

$$\ddot{q}_i + \omega^2 q_i - m \omega^2 (\epsilon_{ijb} \dot{q}_j \theta_b) = 0 \tag{3.11}$$

para $i = 1$

$$\ddot{q}_1 + \omega^2 q_1 + m \omega^2 (\dot{q}_3 \theta_2 - \dot{q}_2 \theta_3) = 0, \tag{3.12}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
& \ddot{U}_{l,m,n} + 32\omega_0^2 U_{l,m,n} - 4\omega_0^2 u_{l\pm a, m\pm a, n} - 4\omega_0^2 u_{l\pm a, m, n\pm a} + 4\omega_0^2 v_{l+a, m-a, n} + 4\omega_0^2 v_{l-a, m+a, n} \\
& - 4\omega_0^2 v_{l+a, m+a, n} - 4\omega_0^2 v_{l-a, m-a, n} + 4\omega_0^2 w_{l+a, m, n-a} + 4\omega_0^2 w_{l-a, m, n+a} - 4\omega_0^2 w_{l+a, m, n+a} \\
& - 4\omega_0^2 w_{l-a, m, n-a} + m\omega_0^2 (\dot{W}_{l,m,n} \theta_2 - \dot{V}_{l,m,n} \theta_3) = 0
\end{aligned} \tag{3.13}$$

que, com as expressões dadas por (3.1) se reescrevem como

$$\begin{aligned}
& [16\omega_0^2 - 2\pi^2 \nu^2 - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_1) \cos(a\phi_2) - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_1) \cos(a\phi_3)] u' \\
& + [8\omega_0^2 \sin(a\phi_1) \sin(a\phi_2) - \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_3] v' + [8\omega_0^2 \sin(a\phi_1) \sin(a\phi_3) + \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_2] w' = 0
\end{aligned} \tag{3.14}$$

usando a simetria cíclica do problema, para $i = 2$

$$\ddot{q}_2 + \omega_0^2 q_2 - m \omega_0^2 (\epsilon_{2jb} \dot{q}_j \theta_b) = 0, \tag{3.15}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
& [16\omega_0^2 - 2\pi^2\nu^2 - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_2) \cos(a\phi_1) - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_2) \cos(a\phi_3)] v' \\
& + [8\omega_0^2 \sin(a\phi_2) \sin(a\phi_3) - \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_1] w' + [8\omega_0^2 \sin(a\phi_2) \sin(a\phi_1) + \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_3] u' = 0
\end{aligned} \tag{3.16}$$

por fim, para $i = 3$

$$\ddot{q}_3 + \omega_0^2 q_3 - m \omega_0^2 (\epsilon_{3jb} \dot{q}_j \theta_b) = 0, \tag{3.17}$$

logo

$$\begin{aligned}
& [16\omega_0^2 - 2\pi^2\nu^2 - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_3) \cos(a\phi_1) - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_3) \cos(a\phi_2)] w' \\
& + [8\omega_0^2 \sin(a\phi_3) \sin(a\phi_1) - \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_2] u' + [8\omega_0^2 \sin(a\phi_3) \sin(a\phi_2) + \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_1] v' = 0
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Para que as soluções u' , v' e w' existam para as equações (2.146), (2.147) e (2.148), o determinante dos coeficientes de u' , v' e w' deve ser nulo

$$\begin{vmatrix}
\tilde{A} & F_{12} - \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_3 & F_{13} + \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_2 \\
F_{12} + \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_3 & \tilde{B} & F_{23} - \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_1 \\
F_{13} - \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_2 & F_{23} + \pi i \nu m \omega_0^2 \theta_1 & \tilde{C}
\end{vmatrix} = 0 \tag{3.19}$$

em que

$$\begin{aligned}
\tilde{A} & \equiv 16\omega_0^2 - 2\pi^2\nu^2 - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_1) \cos(a\phi_2) - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_1) \cos(a\phi_3) \\
\tilde{B} & \equiv 16\omega_0^2 - 2\pi^2\nu^2 - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_2) \cos(a\phi_1) - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_2) \cos(a\phi_3) \\
\tilde{C} & \equiv 16\omega_0^2 - 2\pi^2\nu^2 - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_3) \cos(a\phi_1) - 8\omega_0^2 \cos(a\phi_3) \cos(a\phi_2)
\end{aligned} \tag{3.20}$$

e

$$\begin{aligned}
F_{12} & = 8\omega_0^2 \sin(a\phi_1) \sin(a\phi_2) \\
F_{13} & = 8\omega_0^2 \sin(a\phi_1) \sin(a\phi_3) \\
F_{23} & = 8\omega_0^2 \sin(a\phi_2) \sin(a\phi_3).
\end{aligned} \tag{3.21}$$

As possíveis frequências dos modos normais de vibração da rede são as raízes deste determinante, explicitamente escrito como⁴

$$\begin{aligned}
& -8\pi^6\nu^6 + 64\pi^4\nu^4\omega_0^2 \left[3 + \frac{13}{32}m^2\omega_0^2 (\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2) - \cos(a\phi_2)\cos(a\phi_3) \right. \\
& \left. + \cos(a\phi_1)\cos(a\phi_3) + \cos(a\phi_1)\cos(a\phi_2) \right] \\
& -8\omega_0^4\pi^2\nu^2 \left\{ -192 - 2\omega_0^2m^2 [\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2 + \theta_1\theta_2 \sin(a\phi_1)\sin(a\phi_2) \right. \\
& + \theta_1\theta_3 \sin(a\phi_1)\sin(a\phi_3) + \theta_2\theta_3 \sin(a\phi_2)\sin(a\phi_3)] \\
& + \omega_0^2m^2 [(\theta_1^2 + \theta_2^2) (a\phi_1)\cos(a\phi_2) + (\theta_1^2 + \theta_3^2) \cos(a\phi_1)\cos(a\phi_3) \\
& + (\theta_2^2 + \theta_3^2) \cos(a\phi_2)\cos(a\phi_3)] + 104 [\cos(a\phi_2)\cos(a\phi_3) \\
& + \cos(a\phi_1)\cos(a\phi_3) + \cos(a\phi_1)\cos(a\phi_2)] \\
& -16 [\cos(2a\phi_1) + \cos(2a\phi_2) + \cos(2a\phi_3)] \\
& -24 [\cos(2a\phi_1)\cos(a\phi_2)\cos(a\phi_3) + \cos(2a\phi_2)\cos(a\phi_1)\cos(a\phi_3) \\
& \left. + (\cos(2a\phi_3)\cos(a\phi_1)\cos(a\phi_2)) \right] \left. \right\} \\
& + 64\omega_0^6 \left\{ 64 - \frac{97}{3} [\cos(a\phi_2)\cos(a\phi_3) + \cos(a\phi_1)\cos(a\phi_3)] \right. \\
& \cos(a\phi_1)\cos(a\phi_2) + 12 [\cos(2a\phi_1) + \cos(2a\phi_2) + \cos(2a\phi_3)] \\
& -2 [\cos(3a\phi_1)\cos(a\phi_3) + \cos(3a\phi_1)\cos(a\phi_2) + \cos(3a\phi_3)\cos(a\phi_1) \\
& + \cos(3a\phi_2)\cos(a\phi_3) + \cos(3a\phi_2)\cos(a\phi_1) + \cos(3a\phi_3)\cos(a\phi_2)] \\
& + 16 [\cos(2a\phi_1)\cos(a\phi_2)\cos(a\phi_3) + \cos(2a\phi_2)\cos(a\phi_1)\cos(a\phi_3) \\
& \left. + \cos(2a\phi_3)\cos(a\phi_1)\cos(a\phi_2)] - 4 [\cos(2a\phi_1)\cos(2a\phi_2)\cos(2a\phi_3)] \right\} = 0
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Agora, sejam as expansões

$$\cos \alpha = 1 - \frac{1}{2}\alpha^2 \tag{3.24}$$

e

$$\sin \alpha = \alpha \tag{3.25}$$

⁴Para a obtenção desta expressão, as identidades

$$\begin{aligned}
\cos^2 \alpha &= \frac{1}{2} (1 + \cos(2\alpha)) \\
\cos^3 \alpha &= \frac{1}{4} (\cos(3\alpha) + 3\cos(\alpha)) \\
\cos \alpha \cos \beta &= \frac{1}{2} [\cos(\alpha - \beta) + \cos(\alpha + \beta)] \\
\cos(\alpha + \beta) &= \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta
\end{aligned} \tag{3.22}$$

foram aplicadas.

aplicadas à equação anterior. A expressão simplificada é dada por

$$\begin{aligned}
& -8\pi^6\nu^6 + 2\pi^4\omega_0^2\nu^4 [13m^2\omega_0^2 (\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2) + 32a^2 (\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2)] \\
& -4\omega_0^4\pi^2a^2\nu^2 [4\omega_0^2m^2 (\theta_1\theta_2\phi_1\phi_2 + \theta_1\theta_3\phi_1\phi_3 + \theta_2\theta_3\phi_2\phi_3) \\
& +\omega_0^2m^2 (2\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2) \phi_1^2 + \omega_0^2m^2 (\theta_1^2 + 2\theta_2^2 + \theta_3^2) \phi_2^2 \\
& +\omega_0^2m^2 (\theta_1^2 + \theta_2^2 + 2\theta_3^2) \phi_3^2 + 416 (\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2)] \\
& -\frac{2240}{3}\omega_0^6a^2 (\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2) + 2240\omega_0^6 = 0
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Para suprimir os termos mistos desta equação, a saber $\phi_1\phi_2$, $\phi_1\phi_3$ e $\phi_2\phi_3$, são necessárias duas rotações: a primeira em torno do eixo z e a segunda em torno do eixo y ; compondo as duas rotações em termos de ângulos arbitrários α e β

$$M_{(\alpha,\beta)} = R_y(\beta) R_z(\alpha) \tag{3.27}$$

em que $R_z(\alpha)$ e $R_y(\beta)$ são as matrizes de rotação em torno dos eixos z e y , respectivamente. A matriz de rotação composta é

$$M_{(\alpha,\beta)} = \begin{pmatrix} \cos \beta \cos \alpha & -\cos \beta \sin \alpha & \sin \beta \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ -\sin \beta \cos \alpha & \sin \beta \sin \alpha & \cos \beta \end{pmatrix} \tag{3.28}$$

e as transformações em ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 são dadas por

$$\phi_1 = x \cos \beta \cos \alpha - y \cos \beta \sin \alpha + z \sin \beta \tag{3.29}$$

e

$$\phi_2 = x \sin \alpha + y \cos \alpha \tag{3.30}$$

e

$$\phi_3 = -x \sin \beta \cos \alpha + y \sin \beta \sin \alpha + z \cos \beta \tag{3.31}$$

e a expressão (3.26) se torna

$$\begin{aligned}
& -8\pi^6\nu^6 + 2240\omega_0^6 + 2\pi^4\omega_0^2\nu^4 [13m^2\omega_0^2 (\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2) + 32a^2 (x^2 + y^2 + z^2)] \\
& -16\omega_0^6\pi^2m^2\nu^2a^2 \{ \theta_1\theta_2 [x^2 \sin \alpha \cos \beta \cos \alpha - y^2 \cos \alpha \cos \beta \sin \alpha \\
& + xy (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) \cos \beta + zy \cos \alpha \sin \beta + zx \sin \alpha \sin \beta] \\
& + \theta_1\theta_3 [-x^2 \sin \beta \cos^2 \alpha \cos \beta - y^2 \sin \beta \sin^2 \alpha \cos \beta + z^2 \cos \beta \sin \beta \\
& - 2xy \sin \beta \sin \alpha \cos \beta \cos \alpha + xz (\cos^2 \beta - \sin^2 \beta) \cos \alpha + zy (\sin^2 \beta - \cos^2 \beta) \sin \alpha] \\
& + \theta_2\theta_3 [-x^2 \sin \alpha \sin \beta \cos \alpha + yx (\sin^2 \alpha - \cos^2 \alpha) \sin \beta + zx \sin \alpha \cos \beta \\
& + y^2 \cos \alpha \sin \beta \sin \alpha + zy \cos \alpha \cos \beta] \} \\
& -4\omega_0^4\pi^2\nu^2a^2 [+1664\omega_0^4\pi^2\nu^2a^2 + m^2\omega_0^2 (2\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2) (x^2 \cos^2 \beta \cos^2 \alpha \\
& - 2yx \cos^2 \beta \cos \alpha \sin \alpha + 2zx \cos \beta \cos \alpha \sin \beta + y^2 \cos^2 \beta \sin^2 \alpha \\
& - 2zy \cos \beta \sin \alpha \sin \beta + z^2 \sin^2 \beta) \\
& + m^2\omega_0^2 (\theta_1^2 + 2\theta_2^2 + \theta_3^2) (x^2 \sin^2 \alpha + 2yx \sin \alpha \cos \alpha + y^2 \cos^2 \alpha) \\
& + m^2\omega_0^2 (\theta_1^2 + \theta_2^2 + 2\theta_3^2) (x^2 \sin^2 \beta \cos^2 \alpha - 2yx \sin^2 \beta \cos \alpha \sin \alpha \\
& - 2zx \sin \beta \cos \alpha \cos \beta + y^2 \sin^2 \beta \sin^2 \alpha + 2zy \sin \beta \sin \alpha \cos \beta + z^2 \cos^2 \beta) \\
& - \frac{2240}{3}\omega_0^6a^2 (x^2 + y^2 + z^2) = 0 \tag{3.32}
\end{aligned}$$

de tal maneira que os ângulos α e β mais convenientes são

$$\alpha = -\arctan(\sqrt{2}) \quad \text{e} \quad \beta = -\frac{\pi}{4} \tag{3.33}$$

e a equação anterior é reescrita como

$$\begin{aligned}
& -8\pi^6\nu^6 + 2240\omega_0^6 + 2\pi^4\omega_0^2\nu^4 [13m^2\omega_0^2(\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2) + 32a^2] \\
& -4\omega_0^6\pi^2m^2\nu^2a^2 \left[4\theta_1\theta_2 \left(-x^2\frac{1}{6} + y^2\frac{1}{6} - xy\frac{\sqrt{2}}{6} - zy\frac{\sqrt{6}}{6} + zx\frac{\sqrt{12}}{6} \right) \right. \\
& + 4\theta_1\theta_3 \left(x^2\frac{1}{6} + y^2\frac{1}{3} - z^2\frac{1}{2} + xy\frac{\sqrt{2}}{3} \right) \\
& + 4\theta_2\theta_3 \left(-x^2\frac{1}{6} - yx\frac{\sqrt{2}}{6} - zx\frac{\sqrt{12}}{6} + y^2\frac{1}{6} + zy\frac{\sqrt{6}}{6} \right) \\
& + (2\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2) \left(x^2\frac{1}{6} + yx\frac{\sqrt{18}}{9} - zx\frac{\sqrt{3}}{3} + y^2\frac{1}{3} - zy\frac{\sqrt{6}}{3} + z^2\frac{1}{2} \right) \\
& + (\theta_1^2 + 2\theta_2^2 + \theta_3^2) \left(x^2\frac{2}{3} - 2yx\frac{\sqrt{18}}{9} + y^2\frac{1}{3} \right) \\
& \left. + (\theta_1^2 + \theta_2^2 + 2\theta_3^2) \left(x^2\frac{1}{6} + yx\frac{\sqrt{18}}{9} + zx\frac{\sqrt{3}}{3} + y^2\frac{1}{3} + zy\frac{\sqrt{6}}{3} + z^2\frac{1}{2} \right) \right] \\
& + \left[1664\omega_0^4\pi^2\nu^2a^2 - \frac{2240}{3}\omega_0^6a^2 \right] (x^2 + y^2 + z^2) = 0
\end{aligned} \tag{3.34}$$

em que não resta outra opção senão tomar $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta$ para que esta equação possa enfim ser simplificada em

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{64a^2} \left(\frac{64\pi^6\nu^6}{\omega_0^6} \right) + \frac{280}{a^2} + \frac{39}{64a^2} \left(\frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_\theta^2\omega_0^2} \right) \\
& + \left[\frac{1}{2} \left(\frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} \right) + 52 \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} \right) - \frac{280}{3} - \frac{1}{4} \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} \right) \right] x^2 \\
& + \left[\frac{1}{2} \left(\frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} \right) + 52 \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} \right) - \frac{280}{3} - \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} \right) \right] y^2 \\
& + \left[\frac{1}{2} \left(\frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} \right) + 52 \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} \right) - \frac{280}{3} - \frac{1}{4} \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} \right) \right] z^2 = 0
\end{aligned} \tag{3.35}$$

em que a notação $\omega_\theta = (m\theta)^{-1}$ foi adotada. Na conveniente definição

$$\begin{aligned}
A & \equiv \left[\frac{1}{2} \left(\frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} \right) + 52 \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} \right) - \frac{280}{3} - \frac{1}{4} \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} \right) \right] \\
B & \equiv \left[\frac{1}{2} \left(\frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} \right) + 52 \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} \right) - \frac{280}{3} - \left(\frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2} \right) \right] \\
C & \equiv \frac{1}{64a^2} \left(\frac{64\pi^6\nu^6}{\omega_0^6} \right) - \frac{280}{a^2} - \frac{39}{64a^2} \left(\frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_\theta^2\omega_0^2} \right)
\end{aligned}$$

esta equação se reescreve como

$$Ax^2 + By^2 + Az^2 - C = 0 \quad (3.36)$$

que é a equação canônica que representa um elipsoide. Mais ainda,

$$\frac{x^2}{b^2} + \frac{y^2}{c^2} + \frac{z^2}{b^2} = 1 \quad (3.37)$$

em que $b^2 = \frac{C}{A}$ e $c^2 = \frac{C}{B}$. O volume deste elipsoide (um esferóide em forma de charuto, ou elipsoide prolato) será

$$V = \frac{4}{3}\pi b^2 c \quad (3.38)$$

tal que a densidade de estados é a derivada do volume em relação a ν , resultando na desejada expressão

$$g(\nu) = \frac{4}{3} \frac{1}{a^3} \left(\frac{\pi^2}{\omega_0} \right) \left[\frac{F_4}{F_1} \sqrt{\frac{F_2}{F_1}} - \frac{F_2 F_3}{F_1^2} \sqrt{\frac{F_2}{F_1}} + \frac{F_2}{2F_1} \sqrt{\frac{F_2}{F_1}} \left(\frac{F_4}{F_1} - \frac{F_2 F_3}{F_1^2} \right) \right] \quad (3.39)$$

em que

$$F_1 = \frac{8\pi^4 \nu^4}{\omega_0^4} + 208 \frac{\pi^2 \nu^2}{\omega_0^2} - \frac{280}{3} - \frac{\pi^2 \nu^2}{\omega_\theta^2} \quad (3.40)$$

$$F_2 = \frac{\pi^6 \nu^6}{\omega_0^6} - 280 - \frac{39}{4} \frac{\pi^4 \nu^4}{\omega_\theta^2 \omega_0^2} \quad (3.41)$$

$$F_3 = \frac{32\pi^3 \nu^3}{\omega_0^3} + 416 \frac{\pi \nu}{\omega_0} - \frac{2\pi \nu}{\omega_\theta} \quad (3.42)$$

$$F_4 = \frac{6\pi^5 \nu^5}{\omega_0^5} - 39 \frac{\pi^3 \nu^3}{\omega_\theta^2 \omega_0} \quad (3.43)$$

O próximo passo consiste na obtenção de uma expressão para a frequência máxima, determinada a partir de (3.37) em completa analogia ao caso geral do capítulo anterior, resultando na expressão

$$\nu_{\max} = \frac{\omega_0}{2\pi\omega_\theta} \left[\left[8960\omega_\theta^6 + 2197\omega_0^6 + 16\sqrt{70}\sqrt{4480\omega_\theta^6 + 2197\omega_0^6\omega_\theta^3} \right]^{\frac{1}{3}} + \frac{169\omega_0^4}{\left[8960\omega_\theta^6 + 2197\omega_0^6 + 16\sqrt{70}\sqrt{4480\omega_\theta^6 + 2197\omega_0^6\omega_\theta^3} \right]^{\frac{1}{3}} + 13\omega_0^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.44)$$

3.1.1 O calor específico do modelo da cisteína

Do capítulo anterior, a expressão para o calor específico é dada por

$$C = \int_0^{\nu_{\max}} \frac{h^2 \nu^2}{k_B T^2} \frac{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1\right]^2} g(\nu) d\nu, \quad (3.45)$$

ou seja,

$$C = \int_0^{\nu_{\max}} d\nu \frac{4}{3} \frac{1}{a^3} \frac{\pi^2 \nu^2}{\omega_0} \frac{h^2}{k_B T^2} \frac{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1\right]^2} \times \left[\frac{F_4}{F_1} \sqrt{\frac{F_2}{F_1}} - \frac{F_2 F_3}{F_1^2} \sqrt{\frac{F_2}{F_1}} + \frac{F_2}{2F_1 \sqrt{\frac{F_2}{F_1}}} \left(\frac{F_4}{F_1} - \frac{F_2 F_3}{F_1^2} \right) \right] \quad (3.46)$$

em que F_1 , F_2 , F_3 e F_4 estão escritos explicitamente em 3.40, 3.41, 3.42 e 3.43, respectivamente, e C é tal que está descrito em unidades (no SI) $[C] = \frac{J}{m^3 K}$, caracterizando o calor específico volumétrico, em que a frequência máxima está explicitamente expressa em (3.44).

A curva desejada para comparação com os dados experimentais é a curva do calor específico reduzido da L -cisteína em unidades $\frac{J}{mol \cdot K^4}$. Como descrito no capítulo anterior, esta conversão é realizada pela substituição

$$\frac{1}{a^3} \rightarrow \frac{N_A}{Z} \quad (3.47)$$

em que Z é o número de unidades-fórmula na célula unitária, ou seja, o número de moléculas de L -cisteína em uma célula unitária. Como cada célula unitária apresenta 4 moléculas de L -cisteína, então

$$\frac{1}{a^3} \rightarrow \frac{N_A}{4} \quad (3.48)$$

em unidades $\frac{1}{mol}$. E a expressão (3.46), agora escrita como $\frac{C}{T^3}$, se reescreve como

$$\frac{C}{T^3} = \int_0^{\nu_{\max}} d\nu \frac{N_A}{3} \frac{\pi^2 \nu^2}{\omega_0} \frac{h^2}{k_B T^5} \frac{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1\right]^2} \times \left[\frac{F_4}{F_1} \sqrt{\frac{F_2}{F_1}} - \frac{F_2 F_3}{F_1^2} \sqrt{\frac{F_2}{F_1}} + \frac{F_2}{2F_1 \sqrt{\frac{F_2}{F_1}}} \left(\frac{F_4}{F_1} - \frac{F_2 F_3}{F_1^2} \right) \right] \quad (3.49)$$

nas desejadas unidades $\frac{J}{mol \cdot K^4}$. Por fim, é necessário que as grandezas sejam convertidas para as unidades recíprocas, ou unidades cm^{-1} , tais que

$$\frac{h\nu}{k_B T} = 1.439 \frac{\nu}{T} \quad (3.50)$$

onde

$$h = 1 \text{ e } k_B = \frac{k_B}{100hc} = 0.69503 \text{ cm}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad (3.51)$$

resultando na expressão para o calor específico reduzido

$$\begin{aligned} \frac{C}{T^3} = & \frac{1}{F} (9.01496) \frac{1}{T^5} \int_0^{\nu_{\max}} d\nu \left(\frac{2\pi\nu}{\omega_0} \right) \frac{\nu \exp\left(1.439\frac{\nu}{T}\right)}{\left[\exp\left(1.439\frac{\nu}{T}\right) - 1\right]^2} \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{8} \frac{\left(\frac{3}{2} \frac{32\pi^5\nu^5}{\omega_0^5} - 39 \frac{8\pi^3\nu^3}{\omega_\theta^2\omega_0}\right)}{\left(\frac{1}{2} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} + 52 \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} - \frac{280}{3} - \frac{1}{4} \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2}\right)} \sqrt{\frac{\frac{1}{64} \frac{64\pi^6\nu^6}{\omega_0^6} - 280 - \frac{39}{64} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_\theta^2\omega_0^2}}{\frac{1}{2} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} + 52 \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} - \frac{280}{3} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2}}} \right. \\ & \left. - \frac{\left(\frac{1}{64} \frac{64\pi^6\nu^6}{\omega_0^6} - 280 - \frac{39}{64} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_\theta^2\omega_0^2}\right) \left(4 \frac{8\pi^3\nu^3}{\omega_0^3} + 208 \frac{2\pi\nu}{\omega_0} - \frac{2\pi\nu}{\omega_\theta}\right)}{\left(\frac{1}{2} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} + 52 \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} - \frac{280}{3} - \frac{1}{4} \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2}\right)^2} \times \right. \\ & \times \sqrt{\frac{\frac{1}{64} \frac{64\pi^6\nu^6}{\omega_0^6} - 280 - \frac{39}{64} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_\theta^2\omega_0^2}}{\frac{1}{2} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} + 52 \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} - \frac{280}{3} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2}}} \\ & \left. + \frac{1}{2} \left[\frac{\left(\frac{1}{64} \frac{64\pi^6\nu^6}{\omega_0^6} - 280 - \frac{39}{64} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_\theta^2\omega_0^2}\right)}{\left(\frac{1}{2} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} + 52 \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} - \frac{280}{3} - \frac{1}{4} \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2}\right)} \sqrt{\frac{\frac{1}{64} \frac{64\pi^6\nu^6}{\omega_0^6} - 280 - \frac{39}{64} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_\theta^2\omega_0^2}}{\frac{1}{2} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} + 52 \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} - \frac{280}{3} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2}}} \right. \right. \\ & \left. \times \left(\frac{1}{8} \frac{\left(\frac{3}{2} \frac{32\pi^5\nu^5}{\omega_0^5} - 39 \frac{8\pi^3\nu^3}{\omega_\theta^2\omega_0}\right)}{\left(\frac{1}{2} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} + 52 \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} - \frac{280}{3} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2}\right)} \right) \right. \\ & \left. \left. - \frac{\left(\frac{1}{64} \frac{64\pi^6\nu^6}{\omega_0^6} - 280 - \frac{39}{64} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_\theta^2\omega_0^2}\right) \left(4 \frac{8\pi^3\nu^3}{\omega_0^3} + 208 \frac{2\pi\nu}{\omega_0} - \frac{2\pi\nu}{\omega_\theta}\right)}{\left(\frac{1}{2} \frac{16\pi^4\nu^4}{\omega_0^4} + 52 \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_0^2} - \frac{280}{3} - \frac{4\pi^2\nu^2}{\omega_\theta^2}\right)^2} \right] \right\} \quad (3.52) \end{aligned}$$

em que F é uma constante numérica arbitrária responsável por adequar o gráfico teórico à sua contraparte experimental, ao passo que a frequência máxima está explicitamente expressa em (3.44).

A frequência na qual ocorre a divergência na densidade de estados, responsável pelo pico na curva de calor específico reduzido, é localizada por meio da solução da equação

$$\left(\frac{8\pi^4\nu_{\text{div}}^4}{\omega_0^4} + \frac{208\pi^2\nu_{\text{div}}^2}{\omega_0^2} - \frac{280}{3} - \frac{\pi^2\nu_{\text{div}}^2}{\omega_\theta^2} \right) = 0 \quad (3.53)$$

cuja raiz real e positiva é explicitamente dada por

$$\nu_{\text{div}} = \frac{\omega_0}{12\pi^2\omega_\theta} \sqrt{9\pi^2\omega_0^2 - 1872\pi^2\omega_\theta^2 + 3\sqrt{9\pi^4\omega_0^4 - 3744\pi^4\omega_0^2\omega_\theta^2 + 416256\pi^4\omega_\theta^4}} \quad (3.54)$$

Assim, a integral entre 0 e ν_{max} compreende a divergência ν_{div} . Pelo teorema de Cauchy, é possível determinar uma integral com uma divergência assumindo um intervalo de integração que se aproxima *o quanto se queira da divergência*. Assim, o intervalo inicial que compreendia os valores de frequência entre 0 e ν_{max} , é agora substituído pela soma dos intervalos entre 0 e ϵ_- e ϵ_+ e ν_{max} , em que ϵ_- e ϵ_+ são valores arbitrários que envolvem a divergência ν_{div} .

Portanto, para a obtenção da curva teórica do calor específico reduzido através do software Maple, o valor de frequência para o qual a divergência ocorre foi determinado em termos dos parâmetros ω_0 e ω_θ , escolhidos de tal maneira que a temperatura para a ocorrência do pico de Bóson teórica e àquela obtida experimentalmente para a *L*-cisteína⁵ fossem as mesmas.

A previsão teórica da curva $\frac{C}{T^3}$ versus T e sua contraparte experimental estão expressas no gráfico a seguir

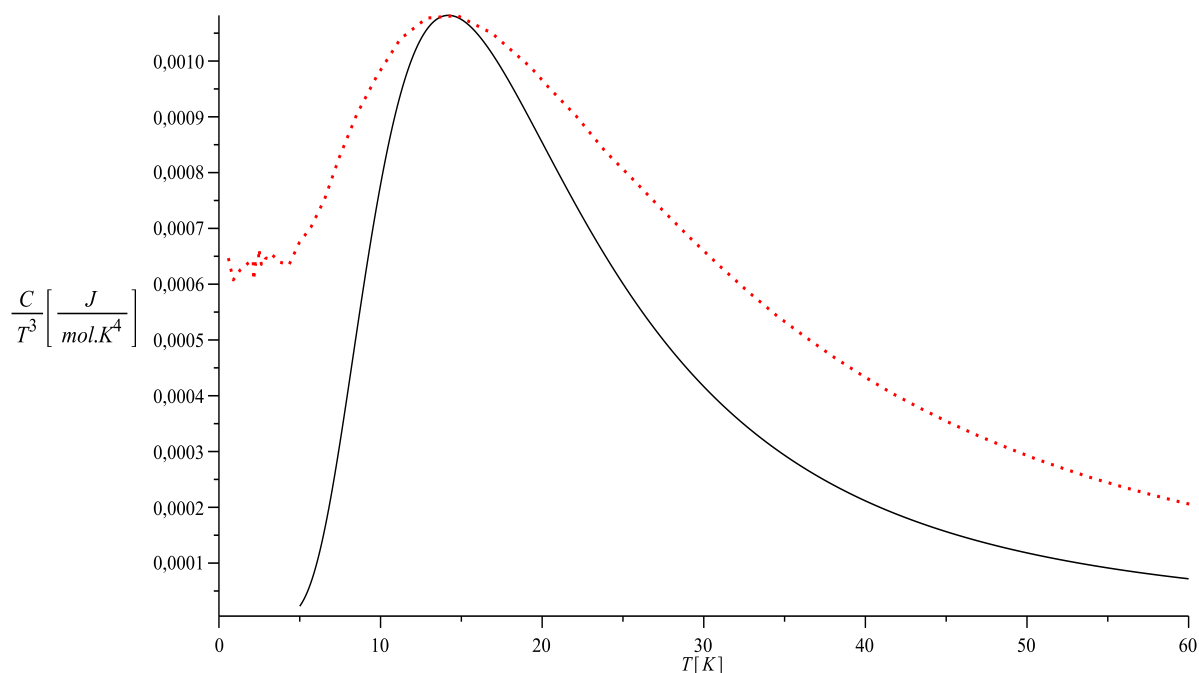


Figura 3.6: Curva $\frac{C}{T^3}$ versus T relativa à cisteína. A curva em vermelho representa os dados experimentais, enquanto a curva em preto representa a previsão teórica.

que mostra uma boa concordância entre a previsão teórica e os resultados experimentais. A divergência se localiza em $\nu_{\text{div}} = 48.63183153 \text{ cm}^{-1}$, quando os valores $\omega_0 = 230 \text{ cm}^{-1}$ e $\omega_\theta = 2300 \text{ cm}^{-1}$ são considerados. Os valores de ϵ_- e ϵ_+ da previsão teórica são, respectivamente,

⁵Os dados experimentais foram gentilmente cedidos pelo professor Herculano Martinho e seu grupo da Universidade Federal do ABC.

$\epsilon_- = 48.630$ e $\epsilon_+ = 48.640$. A frequência máxima tem valor $\nu_{\max} = 187.7236796 \text{ cm}^{-1}$. A constante F para a curva teórica tem valor $F = 2840000$. Como o teorema de Cauchy assegura a arbitrariedade de ϵ_- e ϵ_+ , a curva com a previsão teórica parece ser apropriada para descrever a curva experimental em vermelho.

3.2 Observações finais

O estudo de sólidos desordenados por intermédio das teorias usuais para sólidos cristalinos (ordenados) era inexecutável, uma vez que os sólidos desordenados perdem sua simetria translacional, premissa destas teorias. Contudo, o modelo de uma rede desordenada de átomos idênticos baseado em um espaço não comutativo, tal que a invariância translacional é assegurada pela teoria não comutativa, revelou ser um modelo bastante eficaz para o estudo de sólidos desordenados, particularmente aqueles sólidos que apresentam o pico de Bóson na curva de calor específico reduzido.

A extensão do estudo de uma rede desordenada de átomos idênticos para o aminoácido *L*-cisteína, apesar de algumas aproximações que à primeira vista pareciam descaracterizar a molécula da *L*-cisteína, foi baseado apenas nas simetrias de seu grupo espacial $P2_12_12_1$, corroborando e estendendo a afirmação de Wigner, sobre a dedução das propriedades dos cristais a partir do conhecimento de todas as suas simetrias [4], para sólidos desordenados. Em verdade, ainda que a estrutura ortorrômbica de faces centradas tenha sido simplificada em uma estrutura cúbica de faces centradas, a exigência de que o calor específico reduzido fosse expresso em unidades de $\frac{J}{\text{mol.K}^4}$ implicou na substituição de um valor para o volume pelo número de moléculas de *L*-cisteína em uma célula unitária, Z .

Como resultado, a previsão teórica das curvas $\frac{C}{T^3}$ versus T e sua contraparte experimental exhibe a forte sugestão de que o modelo não comutativo para sólidos desordenados pode também ser estendido a materiais biológicos que apresentem fenômenos vítreos, pressupondo apenas o conhecimento de seu grupo espacial e o número de unidades-fórmula de sua célula unitária.

Capítulo 4

Conclusões

Esta tese apresenta um estudo sobre o espaço-tempo não comutativo em diferentes áreas da física teórica: teoria quântica de campos, física da matéria condensada mole e física biológica, a última um recente e promissor subcampo da física teórica contemporânea.

O espaço-tempo não comutativo tem sua origem na teoria quântica de campos, e este é o ponto de partida deste estudo: os efeitos de um espaço-tempo não comutativo na eletrodinâmica quântica em duas e três dimensões, particularmente na massa que os fótons apresentam nestas particulares extensões da eletrodinâmica quântica usual (em quatro dimensões). Em duas dimensões, a massa do fóton é gerada dinamicamente, ou seja, por meio das correções quânticas ao propagador livre, a autoenergia do fóton, e é diretamente afetada por efeitos não comutativos. Em três dimensões, a massa para o fóton é admitida através do termo topológico de Chern-Simons, e mais uma vez a autoenergia do fóton sofreu efeitos não comutativos. Para os dois casos, as correções não comutativas se aplicam apenas à autoenergia do fóton - o propagador livre em ambas distintas dimensões não apresenta nenhum efeito devido ao espaço-tempo não comutativo.

Em física da matéria condensada mole, a interpretação de uma rede desordenada em termos do espaço não comutativo, em que a cada átomo que pertence a rede é permitido uma incerteza em torno de sua posição tal que o efeito dessas incertezas nas posições resulta em uma rede desordenada, mostra ser um modelo que compreende de forma natural os fenômenos do pico de bóson e o incremento no patamar do calor específico de sólidos desordenados a temperaturas intermediárias.

Neste modelo, cada átomo da rede experimenta uma força de restauração proporcional ao seu deslocamento mais uma nova força que aparece como efeito da não comutatividade na posição dos átomos na rede, com uma forma análoga à força de Lorentz, e que tem como principal efeito causar uma divergência na densidade de estados - uma singularidade de van Hove - e o surgimento de modos óticos onde são esperados apenas modos acústicos. Portanto, neste modelo, o surgimento de modos óticos é um efeito unicamente não comutativo. Cabe por fim ressaltar que este modelo parte de primeiros princípios, ou seja, da dinâmica de uma rede. Não havia, até o presente momento, nenhuma teoria baseada em primeiros princípios com

tamanho alcance na literatura.

A contribuição em física biológica se deve à aplicação do modelo não comutativo na descrição da anomalia do calor específico do aminoácido *L*-cisteína, apresentando uma satisfatória concordância com os dados experimentais.

Apesar de algumas aproximações que à primeira vista pareciam descaracterizar a molécula da *L*-cisteína, ao basear o modelo apenas nas simetrias de seu grupo espacial $P2_12_12_1$, e simplificar sua estrutura original, ortorrômbica de faces centradas, em uma estrutura cúbica de faces centradas, a exigência de que o calor específico reduzido fosse expresso em unidades de $\frac{J}{mol.K^4}$ implica na substituição de um valor para o volume pelo número de moléculas de *L*-cisteína em uma célula unitária, Z , desta forma independente do caráter ortorrômbico original. Como resultado, a previsão teórica das curvas $\frac{C}{T^3}$ versus T e sua contraparte experimental exhibe a forte sugestão de que o modelo não comutativo para sólidos desordenados é adequado inclusive para materiais biológicos que apresentem a tal anomalia em seu calor específico, presupondo apenas o conhecimento de seu grupo espacial e o número de unidades-fórmula de sua célula unitária.

Referências Bibliográficas

- [1] Snyder, H.S., **Quantized space-time**, Phys. Rev. **71**, 38 (1947).
- [2] Seiberg, N. e Witten, E., **String theory and noncommutative geometry**, J. High Energy Phys. **9**, **32** (1999).
- [3] Chaichian, M., Sheikh-Jabbari, M.M. e Tureanu, A., **Hydrogen atom spectrum and the Lamb shift in noncommutative QED**, Phys. Rev. Lett. **86**, 2716 (2001).
- [4] Wigner, E.P., **Symmetry principles in old and new physics**, Bull. Amer. Math. Soc. **74**, 793 (1968).
- [5] Sakurai, J.J., *Advanced Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, California, 1967.
- [6] Series, G.W., *Spectrum of atomic hydrogen*, Oxford University Press, London, 1957.
- [7] Huggins, W., **On the spectrum of the flame of hydrogen**, Proc. Roy. Soc. (London) **30**, 576 (1854).
- [8] Bohr, N., **On the constitution of atoms and molecules**, Philos. Mag. Series **26**, 6 (1913).
- [9] Schrödinger, E., **An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules**, Phys. Rev. **6**, 28 (1926).
- [10] Dirac, P.A.M., **The Quantum Theory of the electron**, Proc. Roy. Soc. (London) **117**, 610 (1928).
- [11] Lamb, W.E., e Retherford, R.C., **Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method**, Phys. Rev. **72**, 241 (1947).
- [12] Schweber, S.S., *QED and the Men who made it*, Princeton Series in Physics, 1994.
- [13] Hänsch, T.W., Schawlow, A.L. e Series, G.W., **The spectrum of atomic hydrogen**, Sci. Am. **240**, 94 (1979).
- [14] Schaposnik, F.A., **Three lectures on noncommutative field theories**, arXiv:0408132v1 [hep-th] (2004).
- [15] Schwinger, J., **Gauge invariance and mass**, Phys. Rev. **128**, 2425 (1962).

- [16] de Roo, M. e Stam, K., **Non-perturbative analysis of the infrared properties of QED₃**, Nucl. Phys. B **246**, 335 (1984).
- [17] Deser, S., Jackiw, R. e Templeton, S., **Topologically massive gauge theories**, Ann. Phys. (N.Y.) **140**, 372 (1982).
- [18] Källén, G., **On the definition of the renormalization constants in Quantum Electrodynamics**, Helv. Phys. Acta **25**, 417 (1952); Lehmann, H., **Über Eigenschaften von Ausbreitungsfunktionen und Renormierungskonstanten quantisierter Felder**, Nuovo Cim. **11**, 342 (1954).
- [19] Schweber, S., *An introduction to Relativistic Quantum Mechanics*, Harper & Row, Publishers, New York (1961); Nishijima, K., *Field Theory and Dispersion Relations*, W. A. Benjamin, Inc. (1969); Källén, G., *Quantum Electrodynamics*, Springer Science (1972); Peskin, M. e Schroeder, D., *An Introduction to Quantum Field Theory*, Westview Press (1995); Weinberg, S., *The Quantum Theory Of Fields - Vol 1: Foundations*, Cambridge University Press (2005).
- [20] Lehmann, H., Symanzik, K. e Zimmermann, W., **The formulation of quantized field theories**, Nuovo Cim. **1**, 205 (1955).
- [21] Nussenzveig, H.M., *Causality and Dispersion Relations*, Academic Press, 1972.
- [22] Heisenberg, W., **Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen**, Z. Phys. **33**, 879 (1925).
- [23] Dirac, P.A.M., **Quantum Mechanics**, PhD Thesis. Cambridge, 1926.
- [24] Kauffmann, S.K., **Unambiguous quantization from the maximum classical correspondence that is self-consistent: the slightly stronger canonical commutation rule Dirac missed**, Found. Phys. **41**, 805 (2011).
- [25] Groenewold, H.J., **On the principles of elementary Quantum Mechanics**, Physica **12**, 405 (1946).
- [26] van Hove, L., **Sur le problème des relations entre les transformations unitaires de la mécanique quantique et les transformations canoniques de la mécanique classique**, Acad. Roy. Belgique Bull. Cl. Sci. **37**, 610 (1951).
- [27] Weyl, H., **Quantenmechanik und Gruppentheorie**, Z. Phys. **46**, 1 (1927).
- [28] Moyal, J.E., **Quantum mechanics as a statistical theory**, Math. Proc. Cambridge Philos. Soc. **45**, 99 (1949).
- [29] von Neumann, C.W., **Die Eindeutigkeit der Schrödingerschen Operatoren**, Math. Annal. **104**, 570 (1931).

- [30] Tureanu, A., *Some aspects of Quantum Field and Gauge Theories on Noncommutative Space-Time*, PhD Thesis. University of Helsinki, 2004.
- [31] Gracia-Bondía, J.M., Várilly, J.C. e Figueroa, H., *Elements of noncommutative geometry*, Springer Science, 2001.
- [32] Galetti, D., *Mecânica Quântica no Espaço de Fase*, Notas de aula da III Escola Mário Schenberg do Departamento de Física da UFPB, João Pessoa, 1996.
- [33] Marcolli, M. e Khalkhali, M., *An invitation to noncommutative geometry*, World Scientific, 2008.
- [34] Pontryagin, L.S., **On dynamical systems close to Hamiltonian systems**, Zh. EKsp. Teor. Fiz. **4**, 234 (1934).
- [35] Bellissard, J., **NCG approach to topological invariants in Condensed Matter Physics: Lecture I**, Workshop "Topological Phases of Condensed Matter", Agosto, 2014.
- [36] Wightman, A.S., **Quantum field theory in terms of vacuum expectation values**, Phys. Rev. **101**, 860 (1956).
- [37] Streater, R.F. e Wightman, A.S., *PCT, spin and statistics, and all that*, Princeton University Press, 2000.
- [38] Rickayzen, G., *Green's Functions and Condensed Matter*, Academic Press, 1980.
- [39] Bjorken, J. e Drell, S., *Relativistic Quantum Fields*, Mc Graw-Hill, 1965.
- [40] Yang, C.N. e Feldman, D., **The S-matrix in the Heisenberg representation**, Phys. Rev. **79**, 972 (1950).
- [41] Barton, G., *Introduction to Dispersion Techniques in Field Theory*, W.A. Benjamin, INC., 1965.
- [42] Chaichian, M., Kulishb, P.P., Nishijima, K. e Tureanu, A., **On a Lorentz-invariant interpretation of noncommutative space-time and its implications on noncommutative QFT**, Phys. Lett. B **604**, 98 (2004);
- [43] Chaichian, M., Prešnajder, P. e Tureanu, A., **New concept of relativistic invariance in noncommutative space-time: twisted Poincaré symmetry and its implications**, Phys. Rev. Lett. **94**, 151602 (2005);
- [44] Tureanu, A., **Twist and spin-statistics relation in noncommutative quantum field theory**, Phys. Lett. B **638**, 296 (2006).
- [45] Grandi, N. e Silva, G.A., **Chern-Simons action in noncommutative space**, Phys. Lett. B **507**, 345 (2001).

- [46] Jackiw, R. e Templeton, S., **How super-renormalizable interactions cure their infrared divergences**, Phys. Rev. D **23**, 2291 (1981).
- [47] Berestetskii, V.B., Lifshitz, E.M. e Pitaevskii, L.P., *Quantum Electrodynamics*, Pergamon Press, 1982.
- [48] Dyson, F.J., **The radiation theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman**, Phys. Rev. **75**, 486 (1949).
- [49] Bufalo, R., Cardoso, T.R. e Pimentel, B.M., **Källén-Lehmann representation of non-commutative quantum electrodynamics**, Phys. Rev. D **89**, 085010 (2014).
- [50] Keita, K.M., Wu, F. e Zhong, M., **Higher derivative operators in the noncommutative Schwinger model**, Phys.Lett.B **681**, 367 (2009).
- [51] Das, A.K., Frenkel, J. e Schubert, C., **Infrared divergences, mass shell singularities and gauge dependence of the dynamical fermion mass**, Phys. Lett. B **720**, 414 (2013); Del Cima, O.M., Franco, D.H.T. e Piguet, O., **Ultraviolet and infrared perturbative finiteness of massless QED₃**, Phys. Rev. D **89**, 065001 (2014).
- [52] Jackiw, R., *Fields and Particles*, Springer-Verlag, 1990.
- [53] Hasan, M.Z. e Kane, C.L., Colloquium: Topological insulators, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
- [54] Scharf, G., Wreszinski, W.F., Pimentel, B.M. e Tomazelli, J.L., **Causal approach to $(2 + 1)$ -dimensional QED**, Ann. Phys. (N.Y.) **231**, 185 (1994); Pimentel, B.M. e Tomazelli, J.L., **What is wrong with Pauli-Villars regularization in QED₃?**, Prog. Theor. Phys. **95**, 1217 (1996).
- [55] Potting, R., **Källén-Lehmann representation for Lorentz-violating field theory**, Phys. Rev. D **85**, 045033 (2012).
- [56] Laughlin, R., **Quantized Hall conductivity in two dimensions**, Phys. Rev. B **23**, 10 (1981).
- [57] Qi, X.-L. e Zhang, S.-C., **Topological insulators and superconductors**, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
- [58] Petit, A.T. e Dulong, P.L., **Recherches sur quelques points importants de la Théorie de la Chaleur**, Ann. Chim. Phys. **10**, 395 (1819).
- [59] Einstein, A., **Beziehung zwischen dem elastischen Verhalten und der Spezifischen Wärme mit einatomigem Molekül**, Ann. d. Physik. **34**, 170 (1911).
- [60] P. Debye, **Zur Theorie der spezifischen Wärmen**, Ann. d. Physik. **39**, 789 (1912).

- [61] Born, M. e von Kármán, T., **Über Schwingungen in Raumgittern**, Physik. Zeits. **13**, 297 (1912).
- [62] van Hove, L., **The occurrence of singularities in the elastic frequency distribution of a crystal**, Phys. Rev. **89**, 1189 (1953).
- [63] Liu, X. e Löhneysen, H.V., **Specific heat anomaly of amorphous solids at intermediate temperature (1 to 30K)**, Europhys. Lett. **33**, 617 (1996).
- [64] Chumakov, A.I. et al, **Equivalence of the boson peak in glasses to the transverse acoustic van Hove singularity in crystals**, Phys. Rev. Lett. **106**, 225501 (2011).
- [65] Zeller, R.C. e Pohl, R.O., **Thermal conductivity and specific heat of noncrystalline solids**, Phys. Rev. B **4**, 2029 (1971).
- [66] Brillouin, L., *Wave Propagation in Periodic Structures*, McGraw-Hill, 1946.
- [67] Goldstein, H., *Classical Mechanics*, Pearson, Addison-Wesley, 1965.
- [68] Born, M., **Lattice dynamics and X-ray scattering**, Proc. London Phys. Soc. **54**, 362 (1942).
- [69] Webster, C.C., *The theory of the specific heat of a body centered cubic lattice*. Masters Thesis. Paper 6676, 1950.
- [70] Flubacher, P., A. J. Leadbetter, J. A. Morrison e Stoicheff, B.P., **The low-temperature heat capacity and the Raman and Brillouin spectra of vitreous silica**, J. Phys. Chem. Solids, **12**, 53 (1959).
- [71] Montroll, E.W., **Dynamics of a square lattice**, Journ. Chem. Phys. **15**, 575 (1947).
- [72] Blackman, M., **On the vibrational spectrum of cubical lattices and its application to the specific heat of crystals**, Proc. Roy. Soc. **148**, 384 (1934).
- [73] Blackman, M., **On the vibrational spectrum of a three-dimensional lattice**, Proc. Roy. Soc. **159**, 416 (1937).
- [74] Blackman, M., **Theory of the specific heat of crystals**, Proc. Roy. Soc. **148**, 365 (1935).
- [75] Smith, H.M.J., **The theory of the vibrations and the Raman spectrum of the Diamond Lattice**, Philos. Trans. R. Soc. Lond. A **241**, 105 (1948).
- [76] Lima, T.A. et al, **Anharmonic transitions in nearly dry L-cysteine I**, J. Phys.: Condens. Matter **24**, 195104 (2012).
- [77] Lima, T.A., Ishikawa, M.S. e Martinho, H.S., **Boson peak as a probe of quantum effects in a glassy state of biomolecules: The case of L-cysteine**, Phys. Rev. E **89**, 022715 (2014).

- [78] Kerr, A.K. e Ashmore, J.P., **Structure and conformation of orthorhombic L-Cysteine**, Acta Cryst. B **29**, 2124 (1973).
- [79] Bonnell, C.R., *The theory of the specific heat of a face-centered cubic lattice*. Masters Thesis. Paper 6761, 1950.