



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Maróivo Pereira Caldeira

Propriedades Termodinâmicas do Modelo de Yukawa Escalar

Salvador

2015

Maroívo Pereira Caldeira

Propriedades Termodinâmicas do Modelo de Yukawa Escalar

Dissertação apresentada ao Programa de Pesquisa e Pós-graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física.

Universidade Federal da Bahia – UFBA

Instituto de Física

Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Luciano Melo Abreu

Salvador

2015

Caldeira, Maróivo Pereira

Propriedades Termodinâmicas do Modelo de Yukawa Escalar/ Maróivo Pereira
Caldeira. – Salvador, 2015-

66 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. Luciano Melo Abreu

Dissertação de Mestrado – Universidade Federal da Bahia – UFBA

Instituto de Física

Programa de Pós-Graduação em Física, 2015.

1. Teoria Quântica de Campos. 2. Termodinâmica. 3. Yukawa Escalar. I.
Luciano Melo Abreu. II. Universidade Federal da Bahia. III. Instituto de Física. IV.
Termodinâmica do Modelo de Yukawa Escalar

CDU 555.55:555.55

A todos que me ajudaram neste trabalho.

Agradecimentos

Agradeço profundamente ao meu orientador, mestre, companheiro e as vezes psicólogo, Luciano Abreu, por sua paciência e dedicação ao me mostrar que o caminho é longo e árduo, mas com esforço chegamos muito mais longe do que imaginávamos. Agradeço a minha família, em particular, minha esposa Daiane, por me aturar e apoiar em momentos bastante complicados e estressantes. Agradeço a todos os meus colegas e professores do Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, em especial aos colegas do grupo de pesquisa, Antonio Lafaiete e Elenilson (Ojuara) Nery, por suas intervenções, críticas e sugestões neste trabalho. Sem qualquer um de vocês o meu universo não seria o mesmo.

“Se nada faz sentido, há muito o que fazer.”
(Humberto Gesinger)

Resumo

Neste trabalho, estudamos o comportamento termodinâmico do Modelo de Yukawa escalar, na aproximação de campo médio, mediante o formalismo das integrais funcionais em dois cenários distintos: primeiramente sem qualquer potencial de auto-interação, em seguida, com termos cúbico e quártico de auto-interação. Observamos que o potencial químico, as massas associadas aos campos e a presença de potenciais de auto-interações alteram a temperatura crítica na qual o sistema experimenta a transição de fase.

Palavras-chaves: Teoria Quântica de Campos. Termodinâmica. Modelo de Yukawa Escalar.

Abstract

In this work, we study the thermodynamic behavior of the Yukawa scalar model, in the mean-field approximation in two different scenarios: first without self-interaction, then with cubic and quartic terms. We observe that the chemical potential, the masses associated with the fields and the existence of self-interactions change the critical temperature at which the system experiences phase transition.

Keywords: Quantum Field Theory. Thermodynamics. Yukawa scalar model.

Lista de ilustrações

Figura 1 – [Massa efetiva em função da temperatura]	49
Figura 2 – [Densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva] . .	50
Figura 3 – [Massa efetiva em função da temperatura]	51
Figura 4 – [Densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva] . .	52
Figura 5 – [Massa efetiva em função da temperatura]	53
Figura 6 – [Densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva] . .	56
Figura 7 – [Densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva] . .	57
Figura 8 – [Massa efetiva em função da temperatura]	58
Figura 9 – [Densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva] . .	59

Lista de tabelas

Tabela 1	–	$[g_\sigma$ em relação a $T_C]$	50
Tabela 2	–	$[\mu$ em relação a $T_C]$	52
Tabela 3	–	$[m_\sigma$ em relação a $T_C]$	53
Tabela 4	–	$[\eta$ em relação a $T_C]$	57
Tabela 5	–	$[\lambda$ em relação a $T_C]$	59

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	NOÇÕES DE TEORIA QUÂNTICA DE CAMPOS	3
2.1	Teoria Clássica dos Campos	3
2.2	Quantização via Formalismo Funcional	7
2.2.1	Integrais Funcionais na Mecânica Quântica	7
2.2.2	Quantização do Campo Escalar	12
3	TQC À TEMPERATURA FINITA	24
3.1	Teoria de Ensemble na Mecânica Quântica	24
3.1.1	Ensemble Microcanônico	25
3.1.2	Ensemble Canônico	26
3.1.3	Ensemble Grande Canônico	28
3.2	O Campo Escalar a Temperatura Finita	30
3.2.1	Campo Escalar Real	32
3.2.2	Campo Escalar Complexo	35
4	TERMODINÂMICA DO MODELO DE YUKAWA ESCALAR	40
4.1	Formalismo	41
4.2	Resultados	47
4.2.1	A dependência das quantidades do modelo sem auto-interação	48
4.3	Presença de Termos de Auto-interação Cúbico e Quártico	54
4.3.1	A dependência das quantidades do modelo com auto-interação	56
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS:	60
	APÊNDICE A – TEOREMA DE NOETHER	61
	REFERÊNCIAS	64

1 Introdução

Nas últimas décadas, tem havido um grande interesse por estudos sobre diagramas de fase em sistemas interagentes relativísticos sob condições extremas [1–22]. E a ferramenta teórica mais eficiente usada para realizar tais estudos são baseadas no formalismo das teorias de campos relativísticas a temperatura e densidade finitas [1, 2]. São esses tipos de estudos abrem portas para inúmeras aplicações dentro da física, como por exemplo, na cosmologia e física nuclear, apenas para citar alguns.

Em particular, as teorias quânticas de campos escalares têm sido frequentemente utilizadas como um campo de testes para descrever sistemas relativísticos e elaborar teorias mais realistas. Pois, como ela não considera os spins envolvidos, torna-se uma teoria relativamente simples sob o ponto de vista matemático [1].

Neste cenário, o modelo de Yukawa escalar é o modelo que descreve a interação entre bósons escalares carregados e bósons escalares nêutros. Este é o modelo mais simples da interação entre campos, e é frequentemente usado como o protótipo das teorias mais realísticas em muitas situações [4–23]. Este modelo nos possibilita investigar o comportamento termodinâmico de sistemas e os seus diagramas de fase, alterando certos parâmetros que são relevantes, para assim, analiticamente, vislumbrarmos o comportamento dos sistemas relativísticos. Há uma vasta literatura tratando deste tema, caso o leitor tenha interesse em se aprofundar na teoria [1–23].

Assim, no espírito de um “laboratório” teórico, neste trabalho estudamos o comportamento termodinâmico de uma versão do modelo de Yukawa escalar, constituída de um campo escalar complexo interagindo com um campo escalar real, com a presença de termos de auto-interação cúbica e quártica. Neste contexto, estamos interessados nas propriedades termodinâmicas deste gás de bósons, e em como cada parâmetro influencia nessas propriedades e na temperatura crítica do sistema. Investigamos as transições de fase induzidas pela variação do potencial químico, temperatura e dos demais parâmetros relevantes, considerando a interação entre os campos escalares real via aproximação de campo médio. Aqui, esta aproximação nos indica que estamos ignorando quaisquer flutuações do campo escalar real. Ou seja, estamos tratando de partículas escalares (associada a um campo escalar complexo) imersas em um meio representado pelo campo escalar real na referida aproximação.

A motivação para a produção deste trabalho é a utilização de modelos efetivos para estudar as propriedades da matéria hadrônica com interações do tipo Yukawa, em que os bósons podem interagir com um meio constituído de outras partículas.

O trabalho está organizado da seguinte forma: no capítulo 1 faremos uma rápida

introdução a teoria clássica de campos (TCC), para a partir daí, quantizarmos o campo escalar, via formalismo funcional. No capítulo 2, restringiremos a nossa discussão a uma TQC a temperatura finita e preparamos caminho para a inserção da termodinâmica, através da mecânica estatística (ME), onde discutiremos brevemente os ensembles mais importantes (microcanônico, canônico e grande canônico). Já na seção 2 deste mesmo capítulo, calcularemos a função de partição para o campo escalar real e complexo. E no capítulo 3, aplicaremos isso tudo na teoria escalar de Yukawa e discutiremos os resultados obtidos. E por fim, mostraremos algumas conclusões que foram obtidas com este trabalho e faremos a análise de possíveis extensões do mesmo.

2 Noções de Teoria Quântica de Campos

Neste capítulo apresentaremos os fundamentos básicos da TQC. É importante notar que o procedimento de quantização de um campo (um sistema físico com um número infinito de graus de liberdade) é análogo àquele realizado no cenário de um sistema discreto. Assim, é conveniente iniciarmos com uma breve discussão da Teoria Clássica dos Campos (TCC), e, na sequência apresentarmos a sua forma quantizada. Como o propósito deste trabalho é no contexto da TQC a Temperatura Finita, por conveniência, optaremos pela versão do formalismo funcional. Não pretendemos que esta apresentação seja ampla ou aprofundada, pois seguiremos uma linha de raciocínio objetiva, que pretende apenas justificar as ideias essenciais do formalismo para o desenvolvimento deste trabalho. Caso interesse ao leitor um nível de profundidade maior, há uma extensa literatura publicada em diversos materiais didáticos, alguns deles citaremos ao longo do texto.

Na seção seguinte, apresentaremos a TCC; e a seção 2.2 é voltada a discussão da quantização dos campos via formalismo funcional.

2.1 Teoria Clássica dos Campos

Iniciamos este capítulo com uma breve discussão sobre a TCC, construída em analogia à formulação analítica da mecânica. Nesta formulação Hamiltoniana e Lagrangiana da mecânica clássica, cada estado de um sistema físico é representado por um ponto (q, p) no seu espaço de fase, em que $q = (q_1, q_2, \dots, q_N)$ indica coletivamente seus N graus de liberdade e $p = (p_1, p_2, \dots, p_N)$ os seus respectivos momenta conjugados [24]. A evolução temporal deste sistema, assumidamente contínuo, é descrito pelas equações de Hamilton e Lagrange, respectivamente.

Este procedimento é realizado notando-se que a mecânica analítica pode ser aplicada em um sistema com um número infinito mas contável de graus de liberdade. Tais sistemas serão o alvo dos nossos estudos neste momento: buscaremos um ente matemático (o que chamaremos de campo clássico) para descrever tais graus de liberdade.

A mecânica analítica é formulada a partir do objeto conhecido como função Lagrangiana $L(q, \dot{q})$, ou simplesmente a Lagrangiana, dada pela equação (2.1) [24, 25]:

$$L = T - V, \tag{2.1}$$

onde $T = T(\dot{q})$ e $V = V(q)$ são as energia cinética e a energia potencial, respectivamente; é importante observar que adotamos a notação: $q = q_i$ para um conjunto de coordenadas

generalizadas e $\dot{q} = \dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt}$, que são denominadas de velocidades generalizadas. Onde i são os graus de liberdade do sistema.

Evocando o princípio da mínima ação de Hamilton [24, 25], obtemos as equações de Euler-Lagrange do movimento:

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = 0 \quad \text{onde:} \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.2)$$

As equações de Euler-Lagrange desempenham papel fundamental neste contexto, por fornecerem as equações de movimento que descrevem a dinâmica do sistema em estudo. Para exemplificar esta afirmação, vamos considerar o seguinte sistema: uma partícula de massa m que se move verticalmente paralela ao eixo y , com uma velocidade $v = \frac{dq}{dt} = \dot{q}$, no interior de um campo gravitacional fraco, de módulo g . Logo, as energias cinética e potencial são, respectivamente:

$$T = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 \quad \text{e} \quad V = mgq.$$

Aplicando a equação (2.1), a Lagrangiana para este sistema será:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - mgq, \quad (2.3)$$

voltando para a equação (2.2), obtemos:

$$\frac{\partial L}{\partial q} = -mg \equiv -F, \quad (2.4)$$

e também:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q} \equiv p, \quad (2.5)$$

onde F é o módulo da força gravitacional (neste caso, o mesmo que o peso) e p é o momento linear ou apenas momentum. Vemos deste exemplo que o formalismo Lagrangiano da mecânica não consiste de uma teoria mecânica diferente da teoria Newtoniana; pois as Leis de Newton estão todas contidas dentro deste formalismo, sendo que as derivadas da função Lagrangiana, definida na equação (2.1) são os momenta e as forças que estão presentes no sistema estudado.

Podemos também construir o formalismo Hamiltoniano, a partir da relação entre a Lagrangiana e a chamada função Hamiltoniana H , definida por [2]:

$$H \left(q, p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}, t \right) = \sum_{k=1}^n \dot{q}_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - L(q, \dot{q}, t), \quad (2.6)$$

onde, novamente, n é o número de graus de liberdade do sistema. Para o caso de um partícula sujeita ao campo gravitacional, temos $n = 1$. Logo, calculando a derivada e substituindo as equações (2.3) e (2.5) na equação (2.6), obtemos:

$$H = \dot{q}p - L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + mgq. \quad (2.7)$$

Assim, podemos ver que a Hamiltoniana pode ser interpretada como a soma das energias cinética e potencial de um sistema mecânico.

Neste ponto vamos buscar generalizar o formalismo introduzido anteriormente a um sistema físico com um número infinito de graus de liberdade. Neste cenário, um campo $\phi = \phi(x, t)$ é a uma função contínua que atribui uma quantidade a cada ponto do espaço a cada instante. Note que em nossa notação ϕ pode representar uma quantidade com uma ou várias componentes. Nosso objetivo é chegar a uma teoria de campos relativísticos; logo, o espaço-tempo a ser considerado aqui é o espaço de Minkowski, isto é, o espaço-tempo típico da física relativística. A nossa notação das coordenadas neste espaço serão definidas como:

$$x^0 = ct, \quad x^1 = x, \quad x^2 = y, \quad x^3 = z. \quad (2.8)$$

Assim, na notação covariante definimos a quadri-coordenada:

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3).$$

Deste modo, um campo ϕ é definido no espaço de Minkowski e tem a dependência $\phi = \phi(x)$, onde assumimos que x representa um ponto no espaço de Minkowski.

Vamos então introduzir a Lagrangiana de um campo relativístico. Pelo fato do campo ser um sistema contínuo, é conveniente escrever a Lagrangiana em termos de sua densidade. Ou seja:

$$L = \int \mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi) d^3x, \quad (2.9)$$

onde $\mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi)$ é denominada de densidade de Lagrangiana.

Da mesma forma que nos sistemas discretos, podemos redefinir a equação de Euler-Lagrange para sistemas contínuos e redefinir os momenta e a função Hamiltoniana, de maneira análoga. A quadri-derivada sobre o campo será denotada de modo:

$$\partial_\mu \phi = \frac{\partial \phi}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x^0}, \frac{\partial \phi}{\partial x^1}, \frac{\partial \phi}{\partial x^2}, \frac{\partial \phi}{\partial x^3} \right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t}, \nabla \phi \right), \quad (2.10)$$

sendo que os índices podem ser levantados ou baixados pelo uso do tensor métrico $g^{\mu\nu}$, que é assim definido, na métrica de Minkowski:

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Logo, (2.10) pode ser transformada da seguinte forma:

$$\partial^\mu \phi = g^{\mu\nu} \partial_\nu \phi = \frac{\partial \phi}{\partial x_\mu} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_0}, \frac{\partial \phi}{\partial x_1}, \frac{\partial \phi}{\partial x_2}, \frac{\partial \phi}{\partial x_3} \right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t}, -\nabla \phi \right), \quad (2.12)$$

onde (2.12) define a derivada contravariante.

Portanto, podemos definir a ação S , como:

$$S \equiv \int \mathcal{L} d^4x,$$

e evocando o princípio da mínima ação [26, 27]:

$$\delta S = \delta \int \mathcal{L} d^4x = 0,$$

e realizando um procedimento análogo ao caso discreto, obtemos as equações de Euler-Lagrange, que descrevem a dinâmica de um campo relativístico. Portanto, já utilizando a notação covariante, as equações de Euler-Lagrange (2.2) podem ser escritas da seguinte maneira:

$$\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_\alpha)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, N, \quad (2.13)$$

onde α são as componentes do campo ϕ .

Também podemos definir a função Hamiltoniana:

$$H = \int d^3x \mathcal{H},$$

onde \mathcal{H} é a densidade de Hamiltoniana, que é dada por:

$$\mathcal{H} = \sum_\alpha \pi^\alpha \dot{\phi}_\alpha - \mathcal{L},$$

onde:

$$\pi^\alpha(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_\alpha(x)}, \quad (2.14)$$

sendo que $\pi^\alpha(x)$ é denominado de momentum canonicamente conjugado.

Neste contexto, há um resultado de extrema importância para este trabalho: o teorema de Noether, que explica a conexão fundamental entre as simetrias e as leis de conservação. A demonstração deste teorema será mostrada no apêndice A, no qual obtemos o seguinte resultado:

$$Q_\nu = \int_V j_\nu^0 d^3x, \quad (2.15)$$

onde Q_ν é conhecida como carga de Noether. Note que a quantidade j_ν^0 , que está definida na equação (A.19) é denotada com corrente noetheriana.

O resultado da equação (2.15) é de extrema importância para a mecânica analítica, e conseqüentemente para a TQC, pois nos garante que para cada simetria na ação S , há uma quantidade física que se conserva.

2.2 Quantização via Formalismo Funcional

Na MQ, para a descrição de um sistema físico, necessitamos conhecer o espaço de estados e quais os operadores correspondentes a cada observável. E, normalmente, isso é feito a partir de uma teoria clássica. Matematicamente, este caminho é feito considerando-se uma teoria clássica que descreve a situação em estudo, para objetos macroscópicos e então quantiza-se esta teoria [26–34].

Assim, em analogia ao caso discreto, a partir da teoria clássica dos campos, ilustrada na seção anterior, realizaremos o procedimento de quantização para a obtenção da teoria quântica dos campos. Há duas formas bem estabelecidas de se fazer a quantização: a quantização canônica e a quantização funcional. A quantização canônica foi a primeira forma de quantização desenvolvida; ela foi proposta da década de 20 do século passado, e é utilizada quando o campo tem uma forma matemática mais simples. Para o desenvolvimento deste trabalho, utilizaremos a quantização funcional, que é uma forma menos intuitiva, porém mais conveniente ao objetivo deste trabalho.

Nesta seção, vamos apresentar o formalismo funcional no contexto da mecânica quântica. Posteriormente desenvolveremos de forma análoga este formalismo para o caso do campo escalar. Em seguida, vamos realizar algumas aplicações relevantes a este trabalho, como por exemplo a correspondência entre a formulação funcional da TQC e a ME.

2.2.1 Integrais Funcionais na Mecânica Quântica

A formulação das integrais de trajetória da MQ é diretamente baseada na noção de propagador $k(q_f, t_f; q_i, t_i)$. Dado uma função de onda $\Psi(q_i, t_i)$, no tempo t_i [27]; o

propagador nos fornece uma função de onda, após um tempo t_f , ($t_f > t_i$) [27, 29, 35]. Pelo princípio de Huygens:

$$\Psi(q_f, t_f) = \int k(q_f, t_f; q_i, t_i) \Psi(q_i, t_i) dq_i. \quad (2.16)$$

Essa equação é bastante geral e expressa meramente a causalidade. Ainda de acordo com a interpretação mais usual da MQ, $\Psi(q_f, t_f)$ é a amplitude de probabilidade da partícula está no ponto q_f , no tempo t_f , assim $k(q_f, t_f; q_i, t_i)$ é a amplitude de probabilidade para uma transição de q_i no tempo t_i para q_f no tempo t_f . A probabilidade que é observada em q_f, t_f , é dada por [26, 29]:

$$P(q_f, t_f; q_i, t_i) = |k(q_f, t_f; q_i, t_i)|^2. \quad (2.17)$$

No caso de um experimento de difração em dupla fenda com elétrons, não podemos afirmar se um elétron atravessou uma ou outra fenda, mas sim ambas as fendas. O que é bastante estranho e até paradoxal, uma vez que estamos tratando o elétron no sentido clássico. O que podemos pensar é que há dois caminhos possíveis para o elétron percorrer. Esta noção de todas as possíveis trajetórias é importante no formalismo da integral de caminho, já que é a sua ideia primordial [36].

Note que a função de onda $\Psi(q, t)$ pode ser escrita como:

$$\Psi(q, t) = \langle q | \Psi t \rangle_S, \quad (2.18)$$

onde o vetor $|\Psi t\rangle_S$ é um estado na descrição de Schrödinger, que é relacionado com a descrição de Heisenberg $|\Psi\rangle_H$, por:

$$|\Psi t\rangle_S = e^{-iHt/\hbar} |\Psi\rangle_H.$$

Definindo o vetor:

$$|qt\rangle \equiv e^{-iHt/\hbar} |q\rangle, \quad (2.19)$$

obtemos,

$$\Psi(q, t) = \langle qt | \Psi \rangle_H. \quad (2.20)$$

A propriedade de completeza dos estados nos permite escrever:

$$\langle q_f t_f | \Psi \rangle = \int \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle \langle q_i t_i | \Psi \rangle dq_i, \quad (2.21)$$

a qual, observando (2.20), fica:

$$\Psi(q_t, t_t) = \int \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle \Psi(q_i, t_i) dq_i.$$

Comparando a expressão acima com a equação (2.16), podemos notar que:

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = k(q_f, t_f; q_i, t_i), \quad (2.22)$$

como esperado.

O propagador k resume a MQ do sistema [8, 27]. Na formulação usual da MQ, dada uma função de onda inicial, podemos encontrar a função de onda final resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo. Nesta formulação, contudo, o propagador nos fornece a solução diretamente. Buscaremos aqui uma maneira de melhor expressar a quantidade $\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle$.

Dividiremos o intervalo de tempo entre t_i e t_f em $(n + 1)$ partes iguais τ . Então, podemos escrever:

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \int \dots \int dq_1 dq_2 \dots dq_n \langle q_f t_f | q_n t_n \rangle \langle q_n t_n | q_{n-1} t_{n-1} \rangle \dots \langle q_1 t_1 | q_i t_i \rangle, \quad (2.23)$$

sendo que a integral é sobre todas as possíveis trajetórias. Vamos calcular o propagador sobre um pequeno segmento na integral de trajetória. Pela equação (2.19), temos:

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1} t_{j+1} | q_j t_j \rangle &= \langle q_{j+1} | e^{-iH\tau/\hbar} | q_j \rangle \\ &= \langle q_{j+1} | 1 - \frac{i}{\hbar} H\tau + O(\tau^2) | q_j \rangle \\ &= \delta(q_{j+1} - q_j) - \frac{i\tau}{\hbar} \langle q_{j+1} | H | q_j \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \left[\frac{1}{\hbar} p(q_{j+1} - q_j) \right] - \frac{i\tau}{\hbar} \langle q_{j+1} | H | q_j \rangle. \end{aligned} \quad (2.24)$$

O Hamiltoniano H é uma função dos operadores \hat{p} e \hat{q} . Para um caso particular onde H seja da forma:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}), \quad (2.25)$$

temos:

$$\left\langle q_{j+1} \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| q_j \right\rangle = \int dp' dp \left\langle q_{j+1} | p' \right\rangle \left\langle p' \left| \frac{p^2}{2m} \right| p \right\rangle \langle p | q_j \rangle,$$

substituindo $\langle q_{j+1} | p' \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ip'q_{j+1}/\hbar)$, obtemos:

$$\begin{aligned}
\left\langle q_{j+1} \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| q_j \right\rangle &= \int \frac{dp' dp}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p' q_{j+1} - p q_j) \right] \frac{p'^2}{2m} \delta(p - p') \\
&= \int \frac{dp}{\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} p (q_{j+1} - q_j) \right] \frac{p^2}{2m}.
\end{aligned} \tag{2.26}$$

De maneira similar, temos:

$$\begin{aligned}
\langle q_{j+1} | V(\hat{q}) | q_j \rangle &= V \left(\frac{q_{j+1} + q_j}{2} \right) \langle q_{j+1} | q_j \rangle \\
&= V \left(\frac{q_{j+1} + q_j}{2} \right) \delta(q_{j+1} - q_j) \\
&= \int \frac{dp}{\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} p (q_{j+1} - q_j) \right] V(\bar{q}_j),
\end{aligned} \tag{2.27}$$

onde $\bar{q}_j = 1/2(q_j + q_{j+1})$. Combinando as duas equações, (2.26) e (2.27), obtemos:

$$\langle q_{j+1} | H | q_j \rangle = \int \frac{dp}{\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} p (q_{j+1} - q_j) \right] H(p, \bar{q}_j).$$

E, pela equação (2.24), temos:

$$\langle q_{j+1} t_{j+1} | q_j t_j \rangle = \frac{1}{\hbar} \int dp_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [p_j (q_{j+1} - q_j) - \tau H(p, \bar{q}_j)] \right\}, \tag{2.28}$$

onde p_j é o momentum entre os tempos t_j e t_{j+1} . Este é o propagador sobre um segmento de uma possível trajetória.

O propagador total é encontrado substituindo a equação (2.22) na equação (2.23), e, fazendo o limite contínuo, onde p_j é o momentum ao longo da trajetória entre q_j e q_{j+1} ,

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^n dq_j \prod_{j=0}^n \frac{dp_j}{\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n [p_j (q_{j+1} - q_j) - \tau H(p_j, \bar{q}_j)] \right\}, \tag{2.29}$$

com $q_0 = q_i$, $q_{n+1} = q_f$. Podemos também escrever da seguinte maneira:

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \int \frac{\mathcal{D}q \mathcal{D}p}{\hbar} \exp \frac{i}{\hbar} \left[\int_{t_i}^{t_f} dt [p \dot{q} - H(p, q)] \right], \tag{2.30}$$

com $q(t_i) = q_i$, $q(t_f) = q_f$. Onde:

$$\frac{\mathcal{D}q \mathcal{D}p}{\hbar} \equiv \prod_j \frac{dq_j dp_j}{\hbar}$$

No limite contínuo, q torna-se uma função de t , e a integral torna-se uma integral funcional; uma integral sobre todas as funções. E a expressão (2.30) é a expressão da

integral de trajetória para a amplitude de transição de (q_i, t_i) para (q_f, t_f) . Cada função $q(t)$ e $p(t)$ define uma trajetória no espaço de fase. Na formulação da integral de trajetória temos uma expressão explícita para a amplitude de transição. As quantidades p e q que ocorrem na integral são quantidades clássicas, no sentido de não serem operadores, c-números ou q-números [37].

Para o caso citado anteriormente, onde H tem a forma expressa em (2.25), a equação (2.29) será da forma:

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_1^n dq_j \prod_0^n \frac{dp_j}{h} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \left[p_j (q_{j+1} - q_j) - \frac{p_j^2}{2m} \tau - V(\bar{q}_j) \tau \right] \right\}.$$

Note que a integração sobre p , é uma integral ordinária gaussiana, que pode ser resolvida com:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ax^2 + bx + c) dx = \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right) \left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2}.$$

Então, obtemos:

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{i\hbar\tau}\right)^{(n+1)/2} \int \prod_1^n dq_j \exp \left\{ \frac{i\tau}{\hbar} \sum_0^n \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\tau}\right)^2 - V \right] \right\}, \quad (2.31)$$

que fazendo o limite contínuo:

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = N \int \mathcal{D}q \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(q, \dot{q}) dt \right], \quad (2.32)$$

onde $L = T - V$, é a Lagrangiana clássica. No limite $n \rightarrow \infty$, N torna-se infinito, mas isto é irrelevante, pois as amplitudes de transição devem sempre ser normalizadas.

Na MQ, a transição entre o clássico e o quântico é obtida fazendo o limite $\hbar \rightarrow 0$. E, para valores muito grande de S , a exponencial de iS/\hbar sofre grande flutuação. Consequentemente, a contribuição da trajetória que maximiza a ação S não contribui muito para a soma sobre as trajetórias:

$$\delta S \gg \hbar \quad e : \quad \sum_{\text{trajetórias}} e^{iS/\hbar} \approx 0.$$

No limite clássico, a trajetória que domina a soma é a única onde $\delta S/\hbar$ é o menor possível. Contudo, a trajetória para a qual δS é minimizado é, justamente, a trajetória clássica.

$$\delta S = 0.$$

Com isso, recuperamos a Mecânica clássica, no limite $\hbar \rightarrow 0$.

O método das integrais de trajetória nos fornece um formalismo elegante para aplicarmos na TQC. E, com esta ideia em mente, vamos agora aplicar as integrais de trajetória para quantizar o campo escalar.

2.2.2 Quantização do Campo Escalar

Neste momento, desejamos encontrar a função de partição para o campo escalar, que é um campo onde os seus quanta têm spin nulo e obedecem a estatística de Bose-Einstein, segundo o teorema Spin-Estatística ¹ [38]. Para isso vamos estabelecer que $\hat{\phi}(\vec{x}, 0)$ seja o operador de campo na representação de Schrödinger no tempo $t = 0$ e $\pi(\vec{x}, 0)$ seja o operador momentum canonicamente conjugado. Os autoestados do operador campo são rotulados por $|\phi\rangle$ e satisfazem a:

$$\hat{\phi}(\vec{x}, 0)|\phi\rangle = \phi(\vec{x})|\phi\rangle, \quad (2.33)$$

onde $\phi(\vec{x})$ é um autoestado, em função da posição \vec{x} . Eles também obedecem ao princípio de completude e a condição de ortogonalidade:

$$\int d\phi(\vec{x})|\phi\rangle\langle\phi| = 1 \quad (2.34)$$

$$\langle\phi_a|\phi_b\rangle = \prod_{\vec{x}} \delta(\phi_a(\vec{x}) - \phi_b(\vec{x})). \quad (2.35)$$

De maneira análoga, os autoestados dos momenta conjugados devem obedecer relações semelhantes a (2.33), (2.34) e (2.35), que são:

$$\hat{\pi}(\vec{x}, 0)|\phi_b\rangle = \pi(\vec{x})|\phi_b\rangle \quad (2.36)$$

$$\int \frac{d\pi(\vec{x})}{2\pi} |\pi\rangle\langle\pi| = 1 \quad (2.37)$$

$$\langle\pi_a|\pi_b\rangle = \prod_{\vec{x}} \delta(\pi_a(\vec{x}) - \pi_b(\vec{x})). \quad (2.38)$$

Da mesma forma que na MQ, nós podemos trabalhar no espaço das coordenadas ou no espaço dos momenta e a passagem de um para o outro se dar por:

$$\langle x|p\rangle = e^{ipx}. \quad (2.39)$$

¹ O teorema Spin-Estatística estabelece uma relação direta entre o spin de uma espécie de partícula e a estatística que ela obedece. Foi demonstrado pelos físicos Markus Fierz e Wolfgang Pauli em 1940.

No caso da TQC, essa passagem é dada por:

$$\langle \phi | \pi \rangle = \exp \left(i \int d^3 x \pi(\vec{x}) \phi(\vec{x}) \right). \quad (2.40)$$

Esta é uma generalização natural para um sistema com infinitos graus de liberdade. Pois as quantidades discretas passam a ser contínuas, por meio de:

$$\sum_{i=1}^N p_i x_i \rightarrow \int d^3 x \pi(\vec{x}) \phi(\vec{x}).$$

Para encontrar uma Hamiltoniana, teremos agora um funcional dos campos e dos momenta conjugados:

$$H = \int d^3 x \mathcal{H}(\hat{\pi}, \hat{\phi}). \quad (2.41)$$

Suporemos agora que o sistema está no estado $|\phi_a\rangle$ no tempo $t = 0$. E, após decorrido um tempo t_f , ele evolui por $e^{-iHt_f}|\phi_a\rangle$. E vamos assumir também que a Hamiltoniana não depende explicitamente do tempo.

A amplitude de transição que leva de um estado $|\phi_a\rangle$ para um estado $|\phi_b\rangle$ após um tempo t_f será então $\langle \phi_b | e^{-iHt_f} | \phi_a \rangle$. Estamos interessados nos casos em que o sistema retorna ao seu estado original após o tempo t_f .

Vamos então pegar o intervalo de tempo $(0, t_f)$ e dividi-lo em N intervalos de igual duração $\Delta t = t_f/N$. E, então, para cada intervalo de tempo, vamos inserir um conjunto completo de estados alternando entre (2.34) e (2.36):

$$\begin{aligned} \langle \phi_a | e^{-iHt_f} | \phi_a \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{i=1}^N d\pi_i d\phi_i / 2\pi \right) \cdot \\ &\times \langle \phi_a | \pi_N \rangle \langle \pi_N | e^{-iH\Delta t} | \phi_N \rangle \langle \phi_N | \pi_{N-1} \rangle \cdot \\ &\times \langle \pi_{N-1} | e^{-iH\Delta t} | \phi_{N-1} \rangle \dots \\ &\times \langle \phi_2 | \pi_1 \rangle \langle \pi_1 | e^{-iH\Delta t} | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | \pi_a \rangle, \end{aligned} \quad (2.42)$$

sendo que já sabemos que:

$$\langle \phi_1 | \phi_a \rangle = \delta(\phi_1 - \phi_a), \quad (2.43)$$

e que:

$$\langle \phi_{i+1} | \pi_i \rangle = \exp \left(i \int d^3 x \pi_i(\vec{x}) \phi_{i+1}(\vec{x}) \right). \quad (2.44)$$

Fazendo $\Delta t \rightarrow 0$, podemos expandir numa série de Taylor e ignorar os termos de potências maiores que 1. O que nos fornece:

$$\begin{aligned} \langle \pi_i | e^{-iH_i \Delta t} | \phi_i \rangle &\approx \langle \pi_i | (1 - iH_i \Delta t) | \phi_i \rangle \\ &= \langle \pi_i | \phi_i \rangle (1 - iH_i \Delta t) \\ &= (1 - iH_i \Delta t) \exp \left(-i \int d^3x \pi_i(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}) \right), \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde:

$$H_i = \int d^3x \mathcal{H}(\pi_i(\vec{x}) \phi_i(\vec{x})), \quad (2.46)$$

juntando tudo:

$$\langle \phi_a | e^{-iH t_f} | \phi_a \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{i=1}^N \frac{d\pi_i d\phi_i}{2\pi} \right) \delta(\phi_1 - \phi_a) \exp \left\{ -i\Delta t \sum_{j=1}^N \int d^3x \left[\mathcal{H}(\pi_j, \phi_j) - \frac{\pi}{j(\phi_{j+1} - \phi_j)} \Delta t \right] \right\},$$

onde $\phi_{N+1} = \phi_a = \phi_1$. Agora é só fazer o limite contínuo, o que nos fornece:

$$\begin{aligned} \langle \phi_a | e^{-iH t_f} | \phi_a \rangle &= \int \mathcal{D}\pi \int_{\phi(\vec{x},0)=\phi_a(\vec{x})}^{\phi(\vec{x},t_f)=\phi_a(\vec{x})} \mathcal{D}\phi \\ &\times \exp \left\{ i \int_0^{t_f} dt \int d^3x \left(\pi(\vec{x},t) \frac{\partial \phi(\vec{x},t)}{\partial t} - \mathcal{H}(\pi(\vec{x},t), \phi(\vec{x},t)) \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.47)$$

onde $\mathcal{D}\pi$ e $\mathcal{D}\phi$ são símbolos para a integração funcional. Não há qualquer restrição na integral sobre $\pi(\vec{x},t)$; mas a integração sobre $\phi(\vec{x},t)$ parte de $\phi_a(\vec{x})$ em $t=0$ e vai até $\phi_a(\vec{x})$ em $t=t_f$.

Neste ponto, vamos introduzir a versão quantizada da teoria de campos. Escolhere-mos por simplicidade em um primeiro momento a teoria quântica para o campo escalar real $\phi(x)$ [27, 29]. Neste sentido, iremos generalizar e estender o formalismo desenvolvido na seção anterior, no contexto de um sistema quântico discreto, para o caso de um campo escalar real. Para este caso (campo escalar real), o Hamiltoniano que caracteriza um sistema é dado por:

$$H = \mathcal{H}(\phi, \pi) = \int d^3x \left[\frac{1}{2} \pi^2 + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + V(\phi) \right]. \quad (2.48)$$

Assim, generalizando a expressão da amplitude de transição, dada na equação (2.30), para a presente situação de um campo escalar real, obtemos:

$$\langle \phi_b(\vec{x}) | e^{-iHT} | \phi_a(\vec{x}) \rangle = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi \exp \left[i \int_0^T d^4x \left(\pi \dot{\phi} - \frac{1}{2} \pi^2 - \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 - V(\phi) \right) \right],$$

onde as funções $\phi(x)$ sobre as quais integramos estão contidas nas configurações $\phi_a(\vec{x})$ a $x^0 = 0$ e $\phi_b(\vec{x})$ a $x^0 = T$. Como a exponencial é quadrática em π , podemos completar quadrados e calcular a integral $\mathcal{D}\pi$ e obter:

$$\langle \phi_b(\vec{x}) | e^{-iHT} | \phi_a(\vec{x}) \rangle = \int \mathcal{D}\phi \exp \left[i \int_0^T d^4x \mathcal{L} \right], \quad (2.49)$$

onde \mathcal{L} é a densidade de Lagrangiana:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 - V(\phi).$$

Note que a integração sobre $\mathcal{D}\phi$ na equação (2.49) envolve uma constante que não foi explicitamente escrita.

Assim como no caso do campo clássico, a relação entre a Hamiltoniana e a Lagrangiana de um sistema é dada pela transformada de Legendre:

$$\mathcal{H} = \pi(x) \dot{\phi}(x, t) - \mathcal{L}(\dot{\phi}, \phi), \quad (2.50)$$

onde $\pi(x)$ é o momentum conjugado de ϕ , que é definido, como:

$$\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(x, t)}. \quad (2.51)$$

Podemos utilizar o presente formalismo no intuito de obter as funções de correlação de n pontos. No caso da função de correlação de dois pontos (a função de Green da teoria do campo escalar), podemos encontrá-la fazendo uso da quantidade:

$$\int \mathcal{D}\phi(x) \mathcal{D}\phi(x_1) \mathcal{D}\phi(x_2) \exp \left[i \int_{-T}^T d^4x \mathcal{L}(\phi) \right], \quad (2.52)$$

onde as condições de contorno sobre a integral de trajetória são $\phi(-T, \vec{x}) \equiv \phi_a$ e $\phi(T, \vec{x}) = \phi_b$. Gostaríamos de relacionar estas quantidades com as funções de correlação de dois pontos, $\langle \Omega | T \phi_H(x_1) \phi_H(x_2) | \Omega \rangle$. Vamos inserir uma notação para distinguir operadores de números ordinários: escreveremos operadores na descrição de Heisenberg com um subscrito explícito: $\phi_H(x)$. Similarmente, escreveremos operadores na descrição de Schrödinger $\phi_S(\vec{x})$.

Vamos quebrar a funcional integral em produtos de integrais:

$$\int \mathcal{D}\phi(x) = \int \mathcal{D}\phi_1(\vec{x}) \int \mathcal{D}\phi_2(\vec{x}) \int_{\phi(x_1^0, \vec{x}) = \phi_j(\vec{x})} \mathcal{D}\phi(x), \quad \text{com: } j = 1, 2, \quad (2.53)$$

a integral funcional principal $\int \mathcal{D}\phi(x)$ está vinculada aos tempos x_1^0 e x_2^0 , além das extremidades $-T$ e T , mas devemos integrar separadamente sobre as configurações intermediárias $\phi_1(\vec{x})$ e $\phi_2(\vec{x})$. Após esta decomposição, os fatores extra $\phi(x_1)$ e $\phi(x_2)$ em (2.52) tornam-se $\phi_1(\vec{x}_1)$ e $\phi_2(\vec{x}_2)$, e podem ser tirados da integral principal. A integral principal tem três pedaços, cada um sendo uma simples transição de amplitude, de acordo com (2.49). Os tempos x_1^0 e x_2^0 automaticamente caem na ordem; por exemplo, se $x_1^0 < x_2^0$, então, (2.52) torna-se:

$$\int \mathcal{D}\phi_1(\vec{x}) \int \mathcal{D}\phi_2(\vec{x}) \phi_1(\vec{x}_1) \phi_2(\vec{x}_2) \langle \phi_b | e^{-iH(T-x_2^0)} | \phi_2 \rangle \\ \times \langle \phi_2 | e^{-iH(x_2^0-x_1^0)} | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | e^{-iH(x_1^0+T)} | \phi_a \rangle.$$

Podemos transformar o campo $\phi_1(\vec{x}_1)$ dentro de operador de Schrödinger usando $\phi_S(\vec{x}_1) | \phi_1 \rangle = \phi_1(\vec{x}_1) | \phi_1 \rangle$. A relação de completeza $\int \mathcal{D} | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | = 1$ nos permite eliminar os estados intermediários $| \phi_1 \rangle$. Fazendo o mesmo para ϕ_2 , chegamos a expressão:

$$\langle \phi_b | e^{-iH(T-x_2^0)} \phi_S(\vec{x}_2) e^{-iH(x_2^0-x_1^0)} \phi_S(\vec{x}_1) e^{-iH(x_1^0+T)} | \phi_a \rangle.$$

Muitos destes fatores exponenciais se combinam com os operadores de Schrödinger para formarem os operadores de Heisenberg. No caso onde $x_1^0 > x_2^0$, a ordem de x_1 e x_2 seria simplesmente trocada. Então, a expressão (2.52) é igual a:

$$\langle \phi_b | e^{-iHT} T \{ \phi_H(x_1) \phi_H(x_2) \} e^{-iHT} | \phi_a \rangle. \quad (2.54)$$

Agora aplicaremos o limite $T \rightarrow \infty(1-i\epsilon)$. Este truque matemático permite projetar o estado $| \phi_a \rangle$ e $| \phi_b \rangle$ no estado de vácuo, o qual denotaremos $| \Omega \rangle$, (assumimos que estes estados tem alguma sobreposição com $| \Omega \rangle$). Em nossa notação, $| \Omega \rangle$ é o estado fundamental do Hamiltoniano de uma teoria de modo geral, enquanto que $| 0 \rangle$ será o estado fundamental do Hamiltoniano livre da teoria (isto é, o Hamiltoniano sem os termos de interação). Por exemplo, decompondo em autoestados $| n \rangle$ de H , temos:

$$e^{-iHT} | \phi_a \rangle = \sum_n e^{-iE_n T} | n \rangle \langle n | \phi_a \rangle \xrightarrow{T \rightarrow \infty(1-i\epsilon)} \langle \Omega | \phi_a \rangle e^{-iE_0 \cdot \infty(1-i\epsilon)} | \Omega \rangle,$$

onde $| \Omega \rangle$ é o vácuo.

Obtemos uma fase indesejada e com fatores sobrepostos. Mas, estes fatores se cancelam se dividirmos pela quantidade (2.52), mas sem os produtos dos campos ϕ_1 e ϕ_2 .

Então, obtemos uma fórmula bem mais simples:

$$\langle \Omega | T \phi_H(x_1) \phi_H(x_2) | \Omega \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty(1-i\epsilon)} \frac{\int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \phi(x_2) \exp \left[i \int_{-T}^T d^4x \mathcal{L} \right]}{\int \mathcal{D}\phi \exp \left[i \int_{-T}^T d^4x \mathcal{L} \right]}. \quad (2.55)$$

Portanto, a equação (2.55) é a função de correlação de dois pontos em termos das integrais funcionais. Notemos que também podemos obter funções de correlação de ordens maiores bastando para isso incluir produtos adicionais do campo ϕ em ambos os lados da equação (2.55).

Vamos agora calcular a função de dois pontos na teoria livre de Klein-Gordon, e, então generalizar para funções de correlação de mais pontos ainda na teoria livre. Para isso, primeiro vamos considerar um campo escalar real não-interagente:

$$S_0 = \int d^4x \mathcal{L}_0 = \int d^4x \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi^2 \right], \quad (2.56)$$

como \mathcal{L}_0 é quadrático em ϕ , a integral funcional da equação (2.55) assume a forma de uma integral gaussiana dimensionalmente infinita generalizada. Por conseguinte, somos capazes de calcular as integrais funcionais exatamente. Vamos então, primeiro definir a medida de integração $\mathcal{D}\phi$ sobre as configurações do campo. Após isto, usamos o método da equação (2.57):

$$\int \mathcal{D}x(t) \equiv \frac{1}{C(\epsilon)} \int \frac{dx_1}{C(\epsilon)} \int \frac{dx_2}{C(\epsilon)} \dots \int \frac{dx_{N-1}}{C(\epsilon)} = \frac{1}{C(\epsilon)} \prod_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_k}{C(\epsilon)}, \quad (2.57)$$

onde $C(\epsilon)$ é uma constante a ser determinada. Considerando a integral contínua como um limite para um grande número (finito) de integrais. Trocamos as variáveis $\phi(x_i)$ definida nos pontos x_i de uma rede de quadrada. Seja o espaçamento da rede ϵ , e seja o volume no espaço-tempo quadrimensional dado por L^4 , e definindo:

$$\mathcal{D}\phi = \prod_i d\phi(x_i), \quad (2.58)$$

a menos de uma constante global irrelevante.

Os valores do campo $\phi(x_i)$ podem ser representados por uma série de Fourier discreta:

$$\phi(x_i) = \frac{1}{V} \sum_n e^{-ik_n x_i} \phi(k_n), \quad (2.59)$$

onde:

$$k_n^\mu = \frac{2\pi n^\mu}{L},$$

com n^μ inteiro,

$$|k^\mu| < \frac{\pi}{\epsilon}$$

e $V = L^4$. E, os coeficientes de Fourier, $\phi(k)$ são complexos. Contudo, $\phi(x)$ é real, também esses coeficientes devem obedecer ao vínculo $\phi^*(k) = \phi(-k)$. Consideraremos também que as partes real e imaginárias de $\phi(k_n)$ são variáveis independentes, com $k_n^0 > 0$. A troca das variáveis $\phi(x_i)$ por $\phi(k_n)$ é uma transformação unitária, então podemos reescrevê-la como uma integral:

$$\mathcal{D}\phi(x) = \prod_{k_n^0 > 0} dRe[\phi(k_n)]dIm[\phi(k_n)].$$

Agora vamos aplicar o limite $L \rightarrow \infty$, $\epsilon \rightarrow 0$. O efeito deste limite é converter a soma discreta sobre k_n numa integral contínua sobre k :

$$\frac{1}{V} \sum_n \rightarrow \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4}. \quad (2.60)$$

Tendo definido a medida de integração, vamos agora calcular o funcional integral sobre ϕ . A ação (2.56) pode ser reescrita em termos dos coeficientes de Fourier, como:

$$\begin{aligned} \int d^4x \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi^2 \right] &= -\frac{1}{V} \sum_n \frac{1}{2} (m^2 - k_n^2) |\phi(k_n)|^2 \\ &= \frac{1}{V} \sum_{k_n^0 > 0} (m^2 - k_n^2) [(Re[\phi_n])^2 + (Im[\phi_n])^2], \end{aligned}$$

onde, para não sobrecarregar a notação, definiremos: $\phi(k_n) \equiv \phi_n$. A quantidade $m^2 - k_n^2 = m^2 + |k_n|^2 - k_n^{02}$ é positiva, pois k_n^0 não é muito grande. Trataremos esta quantidade como sendo positiva. Mais precisamente, a estudaremos tal expressão analiticamente na região onde $|k_n| > k_n^0$.

O denominador da equação (2.55) agora assume a forma de um produto de integrais gaussianas:

$$\begin{aligned}
 \int \mathcal{D}\phi e^{iS_0} &= \left(\prod_{k_n^0 > 0} \int d\text{Re}\phi_n d\text{Im}\phi_n \right) \exp \left[-\frac{i}{V} \sum_{n|k_n^0 > 0} (m^2 - k_n^2) |\phi_n|^2 \right] \\
 &= \prod_{k_n^0 > 0} \left(\int d\text{Re}\phi_n \exp \left[-\frac{i}{V} (m^2 - k_n^2) (\text{Re}\phi_n)^2 \right] \right) \\
 &\quad \times \left(\int d\text{Im}\phi_n \exp \left[-\frac{i}{V} (m^2 - k_n^2) (\text{Im}\phi_n)^2 \right] \right) \\
 &= \prod_{k_n^0 > 0} \sqrt{\frac{-i\pi V}{m^2 - k_n^2}} \sqrt{\frac{-i\pi V}{m^2 - k_n^2}} \\
 &= \prod_{\text{todas } k_n} \sqrt{\frac{-i\pi V}{m^2 - k_n^2}}. \tag{2.61}
 \end{aligned}$$

Para justificar a utilização da fórmula de integração gaussiana quando o expoente aparece puramente imaginário, relembramos que a integral no tempo na equação (2.55) ao longo do contorno é rotacionada no sentido horário, no plano complexo: $t \rightarrow t(1 - i\epsilon)$. Isso significa que devemos trocar $k^0 \rightarrow k^0(1 + i\epsilon)$ na equação (2.61) e em todas as outras subsequentes. Em particular, devemos alterar $k^2 - m^2 \rightarrow k^2 - m^2 + i\epsilon$. O termo $i\epsilon$ garante o fator de convergência necessário para a integral gaussiana.

Para entendermos melhor o resultado obtido na equação (2.61), consideraremos como analogia a integral gaussiana generalizada:

$$\left(\prod_k \int d\xi_k \right) \exp[-\xi_i B_{ij} \xi_j],$$

onde B é uma matriz simétrica com autovalores b_i . Para calcular esta integral, escreveremos $\xi_i = O_{ij} x_j$, onde O é uma matriz ortogonal de autovetores que diagonalizam B . Trocando as variáveis ξ_i nos coeficientes x_i , temos:

$$\begin{aligned}
 \left(\prod_k \int d\xi_k \right) \exp[-\xi_i B_{ij} \xi_j] &= \left(\prod_k \int dx_k \right) \exp \left[-\sum_i b_i x_i^2 \right] \\
 &= \prod_i \int dx_i \exp [b_i x_i^2] \\
 &= \prod_i \sqrt{\frac{\pi}{b_i}} \\
 &= \alpha [\det B]^{-\frac{1}{2}},
 \end{aligned}$$

onde α é uma constante. A analogia fica clara se realizarmos uma integração por partes e escrevermos a ação de Klein-Gordon como:

$$S_0 = \frac{1}{2} \int d^4x \phi (-\partial^2 - m^2) \phi + (\text{termo de superfície}).$$

Assim a matriz B corresponde ao operador $m^2 + \partial^2$, e podemos escrever formalmente o resultado como:

$$\int \mathcal{D}\phi e^{iS_0} = \alpha [\det(m^2 + \partial^2)]^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.62)$$

Este objeto é denominado de determinante funcional.

Considerando o numerador da equação (2.55), precisamos expandir os dois fatores extras de ϕ numa série de Fourier:

$$\phi(x_1)\phi(x_2) = \frac{1}{V} \sum_m e^{-ik_m x_1} \phi_m \frac{1}{V} \sum_l e^{-ik_l x_2} \phi_l.$$

Logo, o numerador na equação (2.55) pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V^2} \sum_{m,l} e^{-i(k_m x_1 + k_l x_2)} \left(\prod_{n|k_n^0 > 0} \int dRe(\phi_n) dIm(\phi_n) \right) \\ & \quad \times [Re(\phi_m) + iIm(\phi_m)] [Re(\phi_l) + iIm(\phi_l)] \\ & \times \exp \left[-\frac{i}{V} \sum_{n|k_n^0 > 0} (m^2 - k_n^2) [(Re(\phi_n))^2 + (Im(\phi_n))^2] \right]. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Para os demais valores de k_m e k_l esta expressão é zero, pois os fatores extra de ϕ tornam o integrando ímpar. A situação é mais complicada quando $k_m \pm k_l$. Supondo por exemplo que $k_m^0 > 0$. Então, se $k_l = k_m$, o termo envolvendo $(Re\phi_m)^2$ não é zero, mas é cancelado pelo termos envolvendo $(Im\phi_m)^2$. Se $k_l = -k_m$, a relação $\phi(-k) = \phi^*(k)$ gera um sinal negativo extra no termo $(Im\phi_m)^2$, então os dois termos se somam. Quando $k_m^0 < 0$ obtemos a mesma expressão, logo o numerador na equação (2.55) torna-se:

$$\frac{1}{V^2} \sum_m e^{-ik_m(x_1 - x_2)} \left(\prod_{k_n^0 > 0} \frac{-i\pi V}{m^2 - k_n^2} \right) \frac{-iV}{m^2 - k_m^2 - i\epsilon}.$$

O fator entre parenteses é idêntico ao denominador da equação (2.61), enquanto o restante desta expressão é a forma discretizada do propagador de Feynman. Fazendo o limite contínuo da equação (2.60), encontramos:

$$\langle 0|T\phi(x_1)\phi(x_2)|0\rangle = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{ie^{-ik(x_1 - x_2)}}{k^2 - m^2 + i\epsilon} = D_F(x_1 - x_2). \quad (2.64)$$

A equação (2.64) é a forma usual do propagador de Feynman do campo escalar, que é a função de correlação de dois pontos da teoria livre. Esta quantidade também tem a propriedade de ser a função de Green do operador de Klein-Gordon [6].

Agora calcularemos as funções de correlação de ordem maiores na teoria livre de Klein-Gordon.

Inserindo um fator extra de ϕ na equação (2.55), vemos que a função de três pontos desaparece, pois o integrando torna-se uma função ímpar. Todas as outras funções de correlação com um produto de campos de número ímpar desaparecem pela mesma razão. A função de quatro pontos tem um produto de quatro campos ϕ no numerador. Expandindo os campos numa série de Fourier, obtemos uma expressão similar a equação (2.63), mas com a soma quádrupla sobre os índices, que denominaremos: $m, l, p, e q$. O integrando contém o produto:

$$(Re\phi_m + iIm\phi_m)(Re\phi_l + iIm\phi_l)(Re\phi_p + iIm\phi_p)(Re\phi_q + iIm\phi_q),$$

novamente, os demais termos de desaparecem, pois o integrando deixa de fazer sentido. Um dos termos não nulos ocorre quando $k_l = -k_m$ e $k_q = -k_p$. Após a integração gaussiana, este termo do numerador é:

$$\frac{1}{V^4} \sum_{m,p} e^{-ik_m(x_1-x_2)} e^{-ik_p(x_3-x_4)} \left(\prod_{n|k_n^0>0} \frac{-i\pi V}{m^2 - k_n^2} \right) \frac{-iV}{m^2 - k_m^2 - i\epsilon} \frac{-iV}{m^2 - k_p^2 - i\epsilon},$$

quando $V \rightarrow \infty$, fica:

$$\left(\prod_{n|k_n^0>0} \frac{-i\pi V}{m^2 - k_n^2} \right) D_F(x_1 - x_2) D_F(x_3 - x_4).$$

O fator entre parenteses é novamente cancelado pelo denominador. Obtemos termos similares para cada um das outras duas maneiras de agrupar os quatro pares de momenta. Para manter o controle do agrupamento, definiremos a contração de dois campos:

$$\phi(x_1)\phi(x_2) = \frac{\int \mathcal{D}\phi e^{iS_0} \phi(x_1)\phi(x_2)}{\int \mathcal{D}\phi e^{iS_0}} = D_F(x_1 - x_2). \quad (2.65)$$

Consequentemente a função de quatro pontos é simplesmente:

$$\begin{aligned} \langle 0|T\phi_1\phi_2\phi_3\phi_4|0\rangle &= \text{soma de todas as contrações} \\ &= D_F(x_1x_2)D_F(x_3x_4) + D_F(x_1x_3)D_F(x_2x_4) \\ &+ D_F(x_1x_4)D_F(x_2x_3). \end{aligned} \quad (2.66)$$

Este mesmo método nos permite calcular funções de correlação de ordem maiores ainda. Em cada caso, a resposta é justamente a soma de todas as possíveis contrações totais dos campos.

O método discutido acima, apesar de gerar corretamente as funções de correlação, torna-se trabalhoso e complexo no contexto de teorias interagentes. Não obstante, há um método muito mais útil e simples que nos permite obter as funções de correlação de modo bem mais direto. Tal método é baseado no funcional gerador das funções de correlação, $Z[J]$, que no caso do campo escalar é definido como:

$$Z[J] \equiv \int \mathcal{D}\phi \exp \left[i \int d^4x [\mathcal{L} + J(x)\phi(x)] \right]. \quad (2.67)$$

$Z[J]$ é um funcional integral sobre ϕ em que adicionamos a \mathcal{L} no expoente um termo que chamaremos um termo de fonte, onde $J(x)$ é uma função auxiliar sem significado físico em nosso contexto. As variáveis de integração no expoente vão de $-T$ até T , com $T \rightarrow \infty(1 - i\epsilon)$. De acordo com esta abordagem, uma função de correlação como na equação (2.55), pode ser reescrita como:

$$\langle 0|T\phi(x_1)\phi(x_2)|0\rangle = Z[J]^{-1} \left(-i \frac{\delta}{\delta J(x_1)} \right) \left(-i \frac{\delta}{\delta J(x_2)} \right) Z[J] |_{J=0}. \quad (2.68)$$

Generalizando, as funções de correlação são obtidas de acordo com este método a partir da aplicação de derivadas funcionais em relação a $J(x)$ no funcional gerador.

O funcional gerador definido na equação (2.67) nos faz lembrar da função de partição da mecânica estatística (ME). Ele tem a mesma estrutura de uma integral sobre todas as possíveis configurações de um peso estatístico exponencial. Para o cálculo das funções de correlação, derivamos em relação a $J(x)$, da mesma forma que na ME diferenciamos com relação às variáveis pressão ou campo magnético, por exemplo.

Esta analogia pode ser feita com mais precisão manipulando a variável temporal de integração na equação (2.67). A derivação da fórmula da integral funcional implica que a integração temporal foi ligeiramente levada ao plano complexo, numa direção que permita o contorno ser girado no sentido horário em torno do eixo imaginário. Notamos então que a rotação infinitesimal original $i\epsilon$ dá a prescrição correta para produzir o propagador de Feynman. A rotação finita é análoga, na configuração dos espaços, a uma rotação de Wick.²

$$x^2 = t^2 - |x|^2 \rightarrow -(x^0)^2 - |x|^2 = -|x_E|^2. \quad (2.69)$$

² Rotação de Wick, é um método para se encontrar uma solução para um problema no espaço de Minkowski de uma solução a um problema relacionado no espaço euclidiano, por extensão analítica. A rotação de Wick é motivada pela observação de que a métrica de Minkowski e a métrica quadridimensional euclidiana são equivalentes, e, então, se permite que a coordenada t assuma valores imaginários. A métrica euclidiana torna-se de Minkowski quando t for restrito ao eixo imaginário, e vice-versa. Esta rotação também conecta mecânica estatística a mecânica quântica, substituindo temperatura por tempo imaginário.

Para entender melhor o que conseguimos com esta rotação, vamos considerar, por exemplo a teoria com auto-interação quártica ϕ^4 , que é governada pela Lagrangiana:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 - \frac{\lambda}{4!}\phi^4.$$

A ação desta teoria adicionada so termo de fonte é dada por:

$$\int d^4x(\mathcal{L} + J\phi) = \int d^4x \left[\frac{1}{2}(\partial_\mu\phi)^2 - \frac{1}{2}m^2\phi^2 - \frac{\lambda}{4!}\phi^4 + J\phi \right]. \quad (2.70)$$

Após a rotação de Wick da equação (2.69), esta expressão assume a forma:

$$i \int d^4x_E(\mathcal{L}_E + J\phi) = i \int d^4x_E \left[\frac{1}{2}(\partial_{E_\mu}\phi)^2 + \frac{1}{2}m^2\phi^2 + \frac{\lambda}{4!}\phi^4 - J\phi \right]. \quad (2.71)$$

Esta expressão tem a forma idêntica à energia livre de Gibbs de um ferromagnético na teoria de Landau. O campo $\phi(x_E)$ atua como uma flutuação do campo de spin $S(x)$, e a fonte $J(x)$ atua como um campo magnético externo. é interessante notar que neste caso o ferromagnético existe em quatro dimensões, em vez de em três dimensões espaciais.

Portanto o funcional gerador $Z[J]$ obtido a partir da rotação de Wick, é dado por:

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\phi \exp \left[- \int d^4x_E(\mathcal{L}_E - J\phi) \right]. \quad (2.72)$$

O funcional $\mathcal{L}_E[\phi]$ tem uma forma de energia: tem um limite inferior e se torna grande quando o campo ϕ aumenta de amplitude ou de gradiente. A exponencial pode ser interpretada como um peso estatístico para as flutuações de ϕ . Nesta nova forma, $Z[J]$ é a função de partição que descreve a ME de um sistema macroscópico, descrito aproximadamente pelo tratamento da flutuação das variáveis como um campo contínuo.

Esta correspondência entre a ME e a TQC exercem um papel essencial neste trabalho. E, no capítulo seguinte isso ficará mais claro, quando escolhermos o ensemble estatístico onde essas ideias serão aplicadas.

3 TQC à Temperatura Finita

Os efeitos da temperatura começaram a ser incorporados à TQC em meados de 1950, sendo que neste período, existia um grande esforço na direção de se entender melhor os sistemas quânticos de muitos corpos. Um dos principais trabalhos nesta linha foi apresentado por Matsubara em 1955 e posteriormente tornou-se a base do formalismo de tempo imaginário [39].

Em linhas gerais, o objetivo deste ramo da teoria é unir em uma mesma abordagem a TQC e a Mecânica Estatística (ME), levando, conseqüentemente, em conta as diferentes características de sistemas bosônicos e fermiônicos: usando a TQC pode-se considerar os efeitos das estatísticas dos campos envolvidos, através dos comutadores e anticomutadores, e usando a ME, com a escolha dos ensembles, pode-se introduzir efeitos térmicos ao sistema. A realização desta união dá-se através de uma generalização da teoria de campos usual, onde o tempo é transformado no plano complexo de uma maneira específica e passa a ser interpretado como temperatura [39]. Como consequência, este formalismo é ideal para lidar com sistemas em equilíbrio, onde o tempo não assume papel importante. Um dos motivos do grande sucesso desta abordagem foi a possibilidade de se utilizar técnicas desenvolvidas na TQC usual para se estudar efeitos térmicos.

Neste capítulo, faremos um breve apanhado sobre os ensembles mais importantes da ME, com o objetivo de justificar o uso do ensemble grande canônico para o desenvolvimento deste trabalho, apontando as características físicas que diferenciam cada um deles. Na seção seguinte, aplicaremos a teoria dos ensembles e a quantização via formalismo funcional para calcular a função de partição para os campos escalares real e complexo.

3.1 Teoria de Ensemble na Mecânica Quântica

O estudo de sistemas consistindo de muitas partículas é um dos temas mais ativos da física atual, pois há aplicações destes estudos em cosmologia, astrofísica, sistemas complexos, física de partículas, matéria condensada, etc [1–6, 31–33, 37].

No intuito de descrever estes sistemas com uma quantidade de partículas da ordem de 10^{23} componentes desenvolveu-se a mecânica estatística, que tem a finalidade de entender os processos microscópicos que emergem como as leis da termodinâmica, em escala macroscópica [40]. A ME se propõe a descrever o comportamento dos sistemas a partir do conceito de microestados, os quais podem ser dados em termos de variáveis clássicas (se os constituintes do sistema obedecem à mecânica clássica) ou quânticas. Foi então que, com os estudos sobre a radiação emitida por um corpo negro quando aquecido,

no início do século XX, Einstein, Planck, Fermi e Bose, entre outros, desenvolveram a mecânica estatística quântica (MEQ) [10, 41].

No nosso caso, estamos interessados nos conceitos fundamentais da MEQ, para aplicá-los a sistemas de muitos corpos (partículas); pois estes conceitos encontram bastante similaridade com alguns dos tratados no capítulo anterior. O interessante é notar que mesmo partindo de estruturas matemáticas bastante diferentes, ao fim há uma grande semelhança entre as ferramentas.

3.1.1 Ensemble Microcanônico

O ensemble microcanônico é utilizado no estudo de sistemas isolados por paredes adiabáticas, rígidas e impermeáveis [41]. Nenhuma interação entre o sistema em estudo e sua vizinhança é permitida. Considerando um sistema isolado constituído de um número N de partículas em um volume V . A energia constante do sistema é conhecida e distribuída entre E e $E + \Delta E$. O postulado fundamental da mecânica estatística da igual probabilidade nos diz que no equilíbrio, o sistema em estudo tem igual probabilidade de ser encontrado em qualquer um dos seus estados acessíveis. Assim, se a energia de um sistema no estado r é E_r , a probabilidade de encontrarmos o sistema no estado r é dada por:

$$P_r = \begin{cases} C, & \text{se: } E < E_r < E + \Delta E; \text{ onde: } \Delta E \ll E \\ 0, & \text{para todos os outros casos;} \end{cases} \quad (3.1)$$

onde C é uma constante de normalização, que pode ser obtida de forma que:

$$\sum P_r = 1. \quad (3.2)$$

Os estados acessíveis do sistema são definidos pelos vínculos impostos sobre ele mesmo. Estes vínculos podem ser a energia, o número de partículas, etc. Eles limitam o número de estados nos quais o sistema pode ser encontrado. Podemos descrever estes vínculos por meio de um conjunto de parâmetros: y_1, y_2, \dots, y_n , que caracterizam o sistema em escala macroscópica. Como o número de estados acessíveis é limitado pelos vínculos, podemos escrever:

$$\Omega = \Omega(y_1, y_2, \dots, y_n), \quad (3.3)$$

onde Ω é o número de estados compatíveis com o ensemble definido por E , cujos parâmetros y assumem os valores y_k , variando entre y_k e $y_k + \Delta y_k$.

Em um sistema isolado, em equilíbrio, sujeito a uma determinada quantidade de vínculos, há uma certa quantidade de estados acessíveis Ω_i . Quando estes vínculos são

retirados, esperamos que a quantidade de estados acessíveis aumente para Ω_f . Ou seja:

$$\Omega_f \geq \Omega_i, \quad (3.4)$$

mas, pela hipótese de igual probabilidade dos estados é exigido que ao retirarmos os vínculos, tenhamos uma situação de não-equilíbrio. Com isso, podemos definir reversibilidade e irreversibilidade em termos do número de estados acessíveis: se $\Omega_f = \Omega_i$ os sistemas dentro do ensemble estão distribuídos com igual probabilidade. Logo, o sistema está em equilíbrio e o processo é reversível. Mas se $\Omega_f > \Omega_i$ o sistema tende a uma distribuição mais provável de equilíbrio, então, não está em equilíbrio. Logo o processo é dito irreversível.

3.1.2 Ensemble Canônico

O ensemble canônico é usado para descrever sistemas que estão em contato com um reservatório térmico [11, 41, 42]. Ou seja, este sistema está separado da vizinhança por uma parede diatérmica, mas impermeável. Pois, apesar da sua energia poder variar, a quantidade N de partículas é fixa. E, como está em contato com o reservatório térmico, a temperatura de todo o sistema é a mesma, T .

Vamos agora considerar o sistema composto: $A^{(0)} = A + A'$, onde $A^{(0)}$ está “isolado”, no sentido que a parede que o separa da vizinhança é adiabática. A energia do sistema seria dada por: $E^{(0)} = E_r + E'$, onde E_r é a energia do estado r no qual o sistema A se encontra, e E' é a energia do reservatório A' . Então, o número de estados acessíveis ao sistema composto é dado por:

$$\Omega^{(0)} = \Omega(E)\Omega'(E'), \quad (3.5)$$

onde A tem energia no intervalo entre E e $E + \Delta E$. Pela hipótese das iguais probabilidades, no equilíbrio, $A^{(0)}$ pode ser encontrado em qualquer estado acessível, com a probabilidade de:

$$P(E) = C\Omega^{(0)}(E), \quad (3.6)$$

sendo C uma constante de normalização. Para uma configuração onde A tem energia no intervalo dado acima, temos:

$$P(E) = C\Omega(E)\Omega'(E)\Omega'(E^{(0)} - E). \quad (3.7)$$

Fixando $A^{(0)}$ em um estado particular, r , de energia E_r , fica que: $\Omega(E) = 1$, o que produz:

$$P(E) = C\Omega'(E)\Omega'(E^{(0)} - E). \quad (3.8)$$

Notemos que C é uma constante de normalização, que é encontrada obedecendo à condição:

$$\sum_r P_r = 1. \quad (3.9)$$

Por definição de reservatório térmico, A deve ser muito menor que A' , então $E_r \ll E^{(0)}$. Deste modo, podemos expandir $\Omega'(E')$ na equação (3.8) em torno de $E' = E^{(0)}$, ou, em termos do seu logaritmo. Consequentemente, obtemos:

$$\ln \Omega'(E^{(0)} - E_r) = \ln \Omega'(E^{(0)}) - \left. \frac{\partial \ln \Omega'}{\partial E'} \right|_{E'=E^{(0)}} E_r + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \ln \Omega'}{\partial E'^2} \right|_{E'=E^{(0)}} E_r^2 + \dots, \quad (3.10)$$

onde:

$$\beta = \frac{1}{k_B T},$$

como para o reservatório A' a temperatura T' é fixa, o termo quadrático pode ser escrito como:

$$\frac{\partial^2 \ln \Omega'}{\partial E'^2} = \frac{\partial}{\partial E'} \left(\frac{\partial \ln \Omega'}{\partial E'} \right) = \frac{\partial \beta'}{\partial E'} = \frac{1}{k_B} \frac{\partial}{\partial E'} \left(\frac{1}{T'} \right) \rightarrow 0 \quad (3.11)$$

portanto, agora a equação (3.10) pode ser escrita como:

$$\ln \Omega'(E^{(0)} - E_r) = \ln \Omega'(E^{(0)}) - \beta E_r \Rightarrow \Omega'(E^{(0)} - E_r) = \Omega'(E^{(0)}) e^{-\beta E_r}. \quad (3.12)$$

Como o sistema A está em equilíbrio com o reservatório A' , $T = T'$, logo: $\beta = \beta'$. E, como $\Omega'(E^{(0)})$ é uma constante que não depende de r , podemos escrever a equação (3.8), como:

$$P_r = C e^{-\beta E_r}. \quad (3.13)$$

Como consequência, a equação (3.13) nos permite calcular a constante de normalização C , como:

$$C = \frac{1}{\sum_r e^{-\beta E_r}}. \quad (3.14)$$

Obtemos portanto a expressão da probabilidade:

$$P_r = \frac{e^{-\beta E_r}}{Z} \quad (3.15)$$

onde:

$$Z = \sum_r e^{-\beta E_r}. \quad (3.16)$$

A função Z , definida na equação (3.16) é chamada de função de partição canônica do sistema. Assim, uma definição mais rigorosa para ensemble canônico seria: “O ensemble canônico é constituído pelo conjunto de microestados r , associados à distribuição de probabilidades dada pela equação (3.15), acessíveis ao sistema, em contato com um reservatório térmico de temperatura T .”

Diferentemente do ensemble microcanônico, o ensemble canônico pode ser usado em sistemas abertos, desde que em contato com um reservatório térmico, ou seja, à temperatura fixa, porém com um número fixo de constituintes.

3.1.3 Ensemble Grande Canônico

Até este momento consideramos os ensembles microcanônico e canônico. E na descrição de ensemble microcanônico, tivemos de considerar um sistema isolado, não trocando nem energia e nem partículas com a vizinhança. Este sistema então foi descrito por meio das grandezas E, V e N . Já para o ensemble canônico, tivemos de assumir que o sistema encontrava-se em contato com um reservatório térmico, que por definição, é muito grande, e estava delimitado por paredes diatérmicas e impermeáveis, que permitiam a troca de energia, mas não permitiam a troca de partículas, e, em equilíbrio, ou seja, a temperatura T constante. As grandezas T, V e N descreviam o sistema.

Vamos agora considerar sistemas abertos. Neste caso, definimos um sistema aberto como um sistema que está em contato com um reservatório e pode trocar energia e partículas com a vizinhança.

Considere um sistema S em contato com um reservatório de calor e de partículas R ; o sistema composto $S + R$ está isolado com energia total E_n e número de partículas N_0 . Cabe lembrar que a temperatura e o potencial químico são fixados. A parede que separa S de R é permeável, diatérmica e rígida, de forma que permite a livre passagem de energia e de partículas, mas não permite alterações no volume de S . Pela hipótese de que é igualmente provável que o sistema se encontre em qualquer estado, a probabilidade do sistema R ser encontrado num estado j , com energia E_j e número de partículas N_j , pode ser escrito como:

$$P_j = C \Omega_R(E_0 - E_j, N_0 - N_j), \quad (3.17)$$

onde C é uma constante de normalização e $\Omega_R(E, N)$ é o número de estados microscópicos acessíveis ao reservatório R com energia E e número de partículas N . Repetindo o

procedimento anterior, vamos aplicar o operador logaritmo e expandi-lo numa série de Taylor, até os termos de primeira ordem.

$$\ln P_j = \alpha + \left(\frac{\partial \ln \Omega_R}{\partial E} \right)_{E_0, N_0} (-E_j) + \left(\frac{\partial \ln \Omega_R}{\partial N} \right)_{E_0, N_0} (-N_j), \quad (3.18)$$

onde α é uma constante. Definimos:

$$\frac{\partial \ln \Omega_R}{\partial E} \equiv \frac{1}{k_B T} \quad \text{e} \quad \frac{\partial \ln \Omega_R}{\partial N} \equiv -\frac{\mu}{k_B T}, \quad (3.19)$$

onde T e μ são a temperatura e o potencial químico do reservatório, respectivamente. Assim, substituindo a equação (3.18) na equação (3.17), obtemos:

$$\ln P_j = \alpha - \frac{E_j}{k_B T} + \frac{\mu N_j}{k_B T}. \quad (3.20)$$

Ou seja:

$$P_j = \frac{1}{\Xi} \exp(-\beta E_j + \beta \mu N_j), \quad (3.21)$$

e:

$$\Xi = \sum_j \exp(-\beta E_j + \beta \mu N_j). \quad (3.22)$$

A função Ξ é chamada de função de grande partição.

A equação (3.21) pode ser rearrumada, somando primeiro sobre os estados com número de partículas fixados e depois fazendo a soma sobre todos os valores de N :

$$\Xi = \sum_N \exp(\beta \mu N) \sum_j \exp(-\beta E_j(N)), \quad (3.23)$$

onde a soma em j deve ser vinculada aos microestados de um número de partículas N determinado. Sendo que esta soma nos fornece a função de partição a qual denominaremos de $Z_C = Z_C(\beta, N)$. Deste modo, a equação (3.23) pode ser reescrita como:

$$\Xi = \sum_N \exp(\beta \mu N) Z_C(\beta, N). \quad (3.24)$$

Podemos estimar o valor máximo da função de grande partição:

$$\Xi = \sum_N \exp(\beta \mu N + \ln Z) \approx \exp \left[-\beta \stackrel{min}{N} (-k_B T Z - \mu N) \right]. \quad (3.25)$$

Assim, a quantidade no expoente da equação (3.25), $k_B T \ln Z$ pode ser identificada e interpretada após tomar o limite termodinâmico como a energia livre de Helmholtz F . Vamos então reescrever a equação (3.25) como:

$$\Xi \approx \exp \left[-\beta \min_N (F - \mu N) \right]. \quad (3.26)$$

Assim, a conexão com a termodinâmica neste cenário pode ser realizada a partir do uso da função de grande partição no limite termodinâmico. Neste sentido, o grande potencial termodinâmico $U(T, \mu)$ é obtido a partir de uma transformação de Legendre da função energia livre de Helmholtz, em relação ao número de partículas N , mantendo a temperatura T e o potencial químico μ fixos, temos:

$$U(T, \mu) = -\frac{1}{\beta} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln \Xi(T, V, \mu), \quad (3.27)$$

onde $U = U(T, \mu)$ é denominado grande potencial termodinâmico por unidade de volume.

O ensemble grande canônico é de grande utilidade na aplicação em sistemas quânticos, devido a uma características sua: o número de partículas pode variar. Como em TQC partículas podem ser criadas ou destruídas o tempo todo, o ensemble grande canônico foi o escolhido para ser aplicado no nosso trabalho. Mais adiante, veremos que o grande potencial termodinâmico, dado pela equação (3.27) exercerá um papel essencial no estudo das transições de fase.

Só por questão de conveniência, a partir deste ponto usaremos um sistema de unidades no qual as constantes serão reduzidas à unidade. Ou seja: $c = k_B = \hbar = 1$, onde c é a velocidade da luz, k_B é a constante de Boltzmann e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, sendo h a constante de Planck.

3.2 O Campo Escalar a Temperatura Finita

Tendo em vista o exposto no capítulo 1 e nas seções precedentes do presente capítulo, estamos agora habilitados a discutir os aspectos inerentes ao formalismo do campo escalar a temperatura finita.

Vamos trabalhar daqui em diante sempre com o ensemble grande canônico. E, para encontrar a função de partição, vamos partir da matriz densidade estatística $\hat{\rho}$, que é um objeto fundamental da mecânica estatística do equilíbrio, que é definida como:

$$\hat{\rho} = \exp[-\beta(\hat{H} - \mu_i \hat{N}_i)]. \quad (3.28)$$

A matriz densidade estatística é utilizada para se calcular a média de qualquer observável, representada pelo operador \hat{A} , por:

$$A = \langle \hat{A} \rangle = \frac{Tr \hat{A} \hat{\rho}}{Tr \hat{\rho}}, \quad (3.29)$$

onde Tr é o operador traço. E, a função de partição grande canônica, pode ser escrita em função da matriz densidade estatística, como:

$$\Xi = \Xi(V, T, \mu_1, \mu_2, \dots) = Tr \hat{\rho}. \quad (3.30)$$

Assim, a partir do uso da equação (3.30), podemos escrever a equação (??) na forma:

$$\Xi = Tr \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu_i \hat{N}_i)} \right) = \sum_a \int d\phi_a \langle \phi_a | e^{-\beta(\hat{H} - \mu_i \hat{N}_i)} | \phi_a \rangle, \quad (3.31)$$

onde a soma em a é sobre todos os estados. Agora, devemos fazer a denominada prescrição de Matsubara [10, 11, 39], que é tornar o tempo imaginário, da seguinte forma: $\tau = it$, e compactificá-lo ao intervalo $\tau = [0, \beta]$. E se o sistema admite alguma carga conservada (se há simetria), podemos fazer a seguinte transformação na densidade de Hamiltoniana:

$$\mathcal{H}(\pi, \phi) \rightarrow \mathcal{H}(\pi, \phi) - \mu \mathcal{N}(\pi, \phi), \quad (3.32)$$

onde $\mathcal{N}(\pi, \phi)$ é a densidade de carga conservada. Agora sim, chegamos a uma equação fundamental:

$$\Xi = \int \mathcal{D}\pi \int_{\text{periódica}} \mathcal{D}\phi \cdot \exp \left[\int_0^\beta d\tau \int d^3x \left(i\pi \frac{\partial \phi}{\partial \tau} - \mathcal{H}(\pi, \phi) + \mu \mathcal{N}(\pi, \phi) \right) \right], \quad (3.33)$$

o termo periódico diz que a integral sobre os campos é vinculada de tal maneira que $\phi(\vec{x}, 0) = \phi(\vec{x}, \beta)$. E não há restrição sobre a integração em π .

A equação (3.33) é portanto a função de grande partição para o campo escalar, e explicita a maneira como construímos uma TQC a temperatura finita. Fisicamente, tal formalismo busca descrever o efeito da temperatura em um sistema constituído de um número grande de quanta do referido campo escalar (bósons massivos de spin zero) em equilíbrio termodinâmico.

É importante mencionar que apesar de introduzirmos o formalismo para o caso escalar, podemos generalizá-lo para outros tipos de campos.

3.2.1 Campo Escalar Real

O campo escalar real e massivo é o campo regido pela equação de Klein-Gordon. A densidade de Lagrangiana para um campo escalar ϕ é dada por [1, 2, 10, 28–33, 35, 43, 44]:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{1}{2} m^2 \phi^2. \quad (3.34)$$

Como notado no capítulo 1, esta densidade de lagrangiana caracteriza a teoria do campo escalar livre, isto é; sem termos associados a potenciais e/ou interações. O momentum conjugado deste campo, então será:

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \phi)} = \frac{\partial \phi}{\partial t}. \quad (3.35)$$

Assim como foi feito para o campo clássico, podemos encontrar a densidade de Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = \pi \frac{\partial \phi}{\partial t} - \mathcal{L} = \frac{1}{2} \pi^2 + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2. \quad (3.36)$$

Escrevendo a versão discreta para a função de partição, temos:

$$\begin{aligned} Z = \lim_{N \rightarrow \infty} & \left(\prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\pi_i}{2\pi} \int_{\text{Periódica}} d\phi_i \right) \exp \left\{ \sum_{j=1}^N \int d^3x \right. \\ & \left. \times \left[i\pi_j (\phi_{j+1} - \phi_j) - \Delta\tau \left(\frac{1}{2} \pi_j^2 + \frac{1}{2} (\nabla \phi_j)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi_j^2 \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

A integração sobre os momenta pode ser feita imediatamente, pois elas são o produto de integrais gaussianas. Dividindo o espaço M^3 em pequenos cubos com $V = L^3$, $L = aM$, $a \rightarrow 0$, $M \rightarrow \infty$ e, sendo M um número inteiro. Por conveniência e para assegurar que Z permanece com a dimensionalidade explícita a cada estágio do cálculo, faremos:

$$\pi_j = \frac{A_j}{(a^3 \Delta\tau)^{1/2}},$$

e integrando A_j de $-\infty$ até $+\infty$, fica:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dA_j}{2\pi} \exp \left[-\frac{1}{2} A_j^2 + i \left(\frac{a^3}{\Delta\tau} \right)^{1/2} (\phi_{j+1} - \phi_j) A_j \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[\frac{-a^3 (\phi_{j+1} - \phi_j)^2}{2\Delta\tau} \right]. \quad (3.38)$$

Logo, para cada cubo, quando nos afastamos, temos:

$$Z = \lim_{M, N \rightarrow \infty} (2\pi)^{-\frac{M^3 N}{2}} \int \left[\prod_{i=1}^N d\phi_i \right] \exp \left\{ \Delta\tau \sum_{j=1}^N \int d^3x \right. \\ \left. \times \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{(\phi_{j+1} - \phi_j)}{\Delta\tau} \right)^2 - \frac{1}{2} (\nabla\phi_j)^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi_j^2 \right] \right\}. \quad (3.39)$$

Podemos agora retornar ao limite contínuo:

$$Z = N' \int_{\text{Periódica}} \mathcal{D}\phi \exp \left(- \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_E \right), \quad (3.40)$$

onde \mathcal{L}_E nos diz que a densidade de lagrangiana ou apenas lagrangiana está euclidianizada; pois o espaço já está euclidianizado, via a rotação de Wick.

A expressão (3.40) pode ser interpretada como a função de partição associada ao campo escalar real livre.

A densidade de Lagrangiana é expressa como um funcional de ϕ e suas primeiras derivadas. Na equação (3.40) Z_E é expresso como uma integral sobre ϕ da exponencial da ação em um tempo imaginário. A constante de normalização N' é irrelevante. Então, a ação será dada por:

$$S_E = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[\left(\frac{\partial\phi}{\partial\tau} \right)^2 + (\nabla\phi)^2 + m^2\phi^2 \right], \quad (3.41)$$

onde S_E denominaremos de ação euclidianizada.

Integrando por partes e desprezando os termos de superfície, obtemos:

$$S = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^3x \phi \left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} - \nabla^2 + m^2 \right) \phi. \quad (3.42)$$

O campo pode ser expandido numa série de Fourier, como:

$$\phi(\vec{x}, t) = \left(\frac{\beta}{V} \right)^{1/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\vec{p}} e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - \omega_n\tau)} \phi_n(\vec{p}) \quad (3.43)$$

onde $\omega_n = 2\pi nT$ é o vínculo de periodicidade em que $\phi(\vec{x}, \beta) = \phi(\vec{x}, 0)$ para todo \vec{x} . A normalização dada na equação (3.43) deve ser escolhida de forma conveniente para que a amplitude de Fourier seja dimensionalmente compatível.

Substituindo a equação (3.43) na equação (3.42), e notando que $\phi_{-n}(-\vec{p}) = \phi_n^*(\vec{p})$, encontramos:

$$S = -\frac{1}{2} \beta^2 \sum_n \sum_{\vec{p}} (\omega_n^2 + \omega^2) \phi_n(\vec{p}) \phi_n^*(\vec{p}) \quad (3.44)$$

com $\omega = (p^2 + m^2)^{1/2}$. O integrando depende somente da amplitude de ϕ e não da fase. Deste modo, utilizando as equações (3.43) e (3.44) na equação (3.40), obtemos:

$$\begin{aligned} Z_E &= N' \prod_n \prod_{\vec{p}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dA_n(\vec{p}) \exp \left[-\frac{1}{2} \beta^2 (\omega_n^2 + \omega^2) A_n^2(\vec{p}) \right] \right] \\ &= N' \prod_n \prod_{\vec{p}} \left[\frac{2\pi}{\beta^2 (\omega_n^2 + \omega^2)} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Da expressão obtida acima, verificamos que para cada integração há um fator de $(2\pi)^{-1/2}$ para a integração do momentum. Então, ignorando por completo um fator multiplicativo independente de β e V , temos:

$$Z = N' \prod_n \prod_{\vec{p}} \left[\beta^2 (\omega_n^2 + \omega^2) \right]^{-1/2}. \quad (3.46)$$

Podemos também escrever a equação (3.46) como:

$$\begin{aligned} Z &= N' \int \mathcal{D}\phi \exp \left[-\frac{1}{2} (\phi, D\phi) \right] \\ &= N'' (\det D)^{-1/2}, \end{aligned} \quad (3.47)$$

onde N'' é uma constante, e $D = \beta^2 \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \nabla^2 + m^2 \right)$ no espaço (\vec{x}, τ) ou $D = \beta^2 (\omega_n^2 + \omega^2)$ no espaço (\vec{p}, ω_n) e $(\phi, D\phi)$ denota o produto interno no espaço das funções. A expressão (3.47) é análoga a integral de Riemann (com uma matriz D constante):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 dx_2 \dots dx_n e^{x_i D_{ij} x_j} = \pi^{n/2} (\det D)^{-1/2} \quad (3.48)$$

e tomando o logaritmo da equação (3.46), obtemos:

$$\ln Z = -\frac{1}{2} \sum_n \sum_{\vec{p}} \ln [\beta^2 (\omega_n^2 + \omega^2)]. \quad (3.49)$$

Observando-se que:

$$\ln[(2\pi n)^2 + \beta^2 \omega^2] = \int_1^{\beta^2 \omega^2} \frac{d\theta^2}{\theta^2 + (2\pi n)^2} + \ln[1 + (2\pi n)^2]. \quad (3.50)$$

Nota-se que o último termo da equação (3.50) é independente de β e então pode ser ignorado. Finalmente, utilizando a identidade:

$$\sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{n^2 + \left(\frac{\theta}{2\pi}\right)^2} = \frac{2\pi^2}{\theta} \left(1 + \frac{2}{e^\theta - 1} \right) \quad (3.51)$$

o que nos fornece:

$$\ln Z = - \sum_{\vec{p}} \int_1^{\beta\omega} d\theta \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^\theta - 1} \right). \quad (3.52)$$

Calculando agora a integral em θ e fixando β , finalmente chegamos a:

$$\ln Z = V \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left[-\frac{1}{2}\beta\omega - \ln(1 - e^{-\beta\omega}) \right]. \quad (3.53)$$

O resultado explicitado na equação (3.52) é relevante, pois as quantidades termodinâmicas estão diretamente relacionadas com o logaritmo da função de partição.

Este resultado é bem geral e veremos que no caso do campo complexo há uma similaridade muito grande a esse desenvolvimento.

3.2.2 Campo Escalar Complexo

Vamos agora considerar um campo escalar complexo Φ . Campos complexos são interessantes por que eles descrevem partículas e anti-partículas, ou seja, partículas com carga positivas e negativas. A densidade de Lagrangiana é dada por [4, 5, 10, 29]:

$$\mathcal{L} = \partial_\mu \Phi^* \partial^\mu \Phi - m^2 \Phi^* \Phi. \quad (3.54)$$

Este modelo apresenta uma simetria global no grupo $U(1)$, do tipo [45, 46]:

$$\Phi \rightarrow \Phi' = \Phi e^{-i\alpha} \quad (3.55)$$

onde α é uma constante real.

É conveniente decompor um campo complexo em sua parte real e imaginária, para daí poder tratá-lo como uma superposição de dois campos reais. Neste caso, seria:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + i\phi_2) \quad \text{e} \quad \Phi^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - i\phi_2). \quad (3.56)$$

Com isso, podemos escrever a transformação sofrida por ambas as partes (real e imaginária) do campo, como:

$$\Phi \rightarrow e^{-i\alpha}\Phi, \quad \Phi^* \rightarrow e^{i\alpha}\Phi^* \quad (3.57)$$

Esta transformação é chamada de transformação de gauge de primeiro tipo. Na sua forma infinitesimal, podemos escrever:

$$\delta\Phi = -i\alpha\Phi, \quad \delta\Phi^* = i\alpha\Phi^*, \quad (3.58)$$

e também:

$$\delta(\partial_\mu\Phi) = -i\alpha\partial_\mu\Phi, \quad \delta(\partial_\mu\Phi^*) = i\alpha\partial_\mu\Phi^*. \quad (3.59)$$

Uma vez que a transformação (3.57) não envolve espaço e tempo (ela é puramente interna), na notação de (A.14) podemos escrevê-la como:

$$\Phi = -i\Phi, \quad \Phi^* = i\Phi^* \quad X = 0. \quad (3.60)$$

O teorema de Noether nos fornece uma corrente conservada, a qual, pela equação (A.18) podemos escrever:

$$j^\mu = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)}(-i\Phi) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi^*)}(i\Phi^*). \quad (3.61)$$

Substituindo a equação (3.55) na equação (3.61), obtemos:

$$j^\mu = i(\Phi^*\partial^\mu\Phi - \Phi\partial^\mu\Phi^*). \quad (3.62)$$

j^μ é a corrente de Noether. Se ela se conserva, podemos escrever:

$$\partial_\mu j^\mu = 0. \quad (3.63)$$

Consequentemente, os momenta conjugados se tornam:

$$\pi_1 = \frac{\partial\phi_1}{\partial t} \quad \text{e} \quad \pi_2 = \frac{\partial\phi_2}{\partial t}, \quad (3.64)$$

e a densidade de Hamiltoniana será:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \left[\pi_1^2 + \pi_2^2 + (\nabla\phi_1)^2 + (\nabla\phi_2)^2 + m^2\phi_1^2 + m^2\phi_2^2 \right]. \quad (3.65)$$

Da equação (3.63), notamos que a componente $\mu = 0$ da corrente conservada é dada por:

$$\begin{aligned}
j_0 &= i(\phi^* \partial_0 \phi - \phi \partial_0 \phi^*) \\
&= i^2 [\phi_1 \partial_0 \phi_2 - \phi_2 \partial_0 \phi_1] \\
&= \phi_2 \pi_1 - \phi_1 \pi_2.
\end{aligned} \tag{3.66}$$

Logo, a carga conservada será:

$$\begin{aligned}
Q &= \int d^3x j_0(x) \\
&= \int d^3x (\phi_2 \pi_1 - \phi_1 \pi_2).
\end{aligned} \tag{3.67}$$

Portanto, a função de partição para o campo escalar complexo livre pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
Z &= \int \mathcal{D}\pi_1 \mathcal{D}\pi_2 \int \mathcal{D}\phi_1 \mathcal{D}\phi_2 \exp \left[\int_0^\beta d\tau \int d^3x \left(i\pi_1 \frac{\partial \phi_1}{\partial \tau} + i\pi_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial \tau} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \mathcal{H}(\pi_1, \pi_2, \phi_1, \phi_2) + \mu(\phi_2 \pi_1 - \phi_1 \pi_2) \right) \right], \tag{3.68}
\end{aligned}$$

onde o potencial químico μ está associado com a carga conservada Q . A integração sobre os momenta conjugados do campo pode ser feita seguindo o exemplo anterior do campo escalar, resultando em:

$$\begin{aligned}
Z &= N'^2 \int \mathcal{D}\phi_1 \mathcal{D}\phi_2 \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial \tau} - i\phi_2 \mu \right)^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_2}{\partial \tau} - i\phi_1 \mu \right)^2 - \frac{1}{2} (\nabla \phi_1)^2 - \frac{1}{2} (\nabla \phi_2)^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi_1^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi_2^2 \right] \right\}. \tag{3.69}
\end{aligned}$$

Observe também que esta integral se resume a uma integral gaussiana, que pode ser facilmente calculada, como vimos anteriormente.

As componentes do campo Φ podem ser expandidas em um série de Fourier da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\phi_1 &= \sqrt{2}\xi \cos(\theta) + \left(\frac{\beta}{V} \right)^{1/2} \sum_n \sum_{\vec{p}} e^{i(\vec{p} \cdot \vec{x} - \omega_n \tau)} \phi_{1;n}(\vec{p}) \\
\phi_2 &= \sqrt{2}\xi \sin(\theta) + \left(\frac{\beta}{V} \right)^{1/2} \sum_n \sum_{\vec{p}} e^{i(\vec{p} \cdot \vec{x} - \omega_n \tau)} \phi_{2;n}(\vec{p})
\end{aligned} \tag{3.70}$$

onde ξ e θ são independentes de (\vec{x}, τ) e foram inseridos aqui para poder caracterizar o comportamento dos campos, sendo que $\phi_{1;0}(\vec{p} = 0) = \phi_{2;0}(\vec{p} = 0) = 0$. Tal escolha, em princípio, permite identificar a contribuição de momentum zero ($n = 0, \vec{p} = 0$), abrindo a possibilidade de descrição do fenômeno de condensação de bósons neste cenário.

Substituindo a equação (3.70) na equação (3.69), após uma integração por partes, obtemos:

$$Z = (N')^2 \left[\prod_n \prod_{\vec{p}} \int d\phi_{1;n}(\vec{p}) d\phi_{2;n}(\vec{p}) \right] e^S, \quad (3.71)$$

onde:

$$S = \beta V(\mu^2 - m^2)\xi^2 - \frac{1}{2} \sum_n \sum_{\vec{p}} (\phi_{1;-n}(-\vec{p}), \phi_{2;-n}(-\vec{p})) D \begin{pmatrix} \phi_{1;n}(\vec{p}) \\ \phi_{2;n}(\vec{p}) \end{pmatrix}$$

e:

$$D = \beta^2 \begin{pmatrix} \omega_n^2 + \omega^2 - \mu^2 & -2\mu\omega_n \\ 2\mu\omega_n & \omega_n^2 + \omega^2 - \mu^2 \end{pmatrix}. \quad (3.72)$$

Realizando as integrações gaussianas sobre os campos na equação (3.71) e tomando o logaritmo, chegamos ao seguinte resultado:

$$\ln Z = \beta V(\mu^2 - m^2)\xi^2 + \ln(\det D)^{-1/2}. \quad (3.73)$$

O segundo termo pode ser algebricamente manipulado como:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \ln(\det D) &= -\frac{1}{2} \ln \left\{ \prod_n \prod_{\vec{p}} \beta^4 [(\omega_n^2 + \omega^2 - \mu^2)^2 + 4\mu^2\omega_n^2] \right\} \\ &= -\frac{1}{2} \ln \left\{ \prod_n \prod_{\vec{p}} \beta^2 [\omega_n^2 + (\omega - \mu)^2] \right\} - \\ &\quad \frac{1}{2} \ln \left\{ \prod_n \prod_{\vec{p}} \beta^2 [\omega_n^2 + (\omega + \mu)^2] \right\}. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Assim, substituindo a equação (3.74) na equação (3.73), temos:

$$\begin{aligned} \ln Z &= \beta V(\mu^2 - m^2)\xi^2 - \frac{1}{2} \sum_n \sum_{\vec{p}} \ln \left\{ \beta^2 [\omega_n^2 + (\omega - \mu)^2] \right\} - \\ &\quad \frac{1}{2} \sum_n \sum_{\vec{p}} \ln \left\{ \beta^2 [\omega_n^2 + (\omega + \mu)^2] \right\}. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Os últimos termos da equação (3.75) são precisamente da forma que vimos na seção anterior. Então, repetindo o mesmo processo, temos que:

$$\ln Z = \beta V (\mu^2 m^2) \xi^2 - V \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left[\beta \omega + \ln(1 - e^{-\beta(\omega - \mu)}) + \ln(1 - e^{-\beta(\omega + \mu)}) \right]. \quad (3.76)$$

A integral do momentum é convergente somente se $|\mu| \leq m$. Devido a simetria no grupo $U(1)$ da densidade de Lagrangiana, o parâmetro ξ se mantém, porém a dependência do parâmetro θ é suprimida.

E, como foi dito na seção anterior, o logaritmo da função de partição nos fornece todas as quantidades termodinâmicas necessárias. E, o nosso interesse está voltado justamente para estas quantidades termodinâmicas.

De posse de todas estas informações, vamos utilizar todo esse ferramental no sistema de interesse deste trabalho e com isso analisar o comportamento termodinâmico do mesmo.

4 Termodinâmica do Modelo de Yukawa Escalar

No início do século passado, um dos maiores desafios da Física era explicar a misteriosa interação que mantinha o núcleo atômico estável. Esta interação não poderia ser de origem eletromagnética, muito menos gravitacional [47]. Devido à inexistência de carga no nêutron, este não poderia sofrer a ação de uma força elétrica. E, devido às pequenas massas envolvidas, essa interação também não poderia ser de origem gravitacional [1]. Conclusão: havia alguma espécie de interação até então desconhecida que mantinha o núcleo atômico sempre coeso. E haviam experimentos que mostravam que esta força era extremamente forte e de curto alcance.

Até que em 1934, Hideki Yukawa propôs que estas propriedades seriam consequências de uma interação mediada pela troca de partículas massivas: que seriam denominadas de mésons. E apenas alguns anos depois, experimentos mostravam uma partícula que tinha as mesmas propriedades das partículas propostas por Yukawa. Posteriormente estas partículas foram denominadas de mésons π , ou, simplesmente píons. Daí então a teoria de Yukawa passou a ser a mais influente e decisiva na descrição dos processos nucleares neste período, sendo ela de vital importância para toda a Física Nuclear até os dias de hoje.

Atualmente, sabemos que a teoria de Yukawa não corresponde a uma teoria fundamental das interações fortes, do ponto de vista que tanto os mésons quanto os núcleos são constituídos de quarks, cuja interação ocorre através da troca de glúons [28, 44].

O propósito do presente trabalho é o estudo do comportamento termodinâmico do modelo de Yukawa em sua versão escalar, isto é, substituindo os graus de liberdade fermiônicos por campos sem spin.

Deste modo, neste capítulo vamos aplicar a teoria de Yukawa em um gás de bósons escalares, e, fazer a análise termodinâmica deste sistema, a partir do formalismo introduzido nos capítulos anteriores. Daí então, vamos analisar o diagrama de fases e partir para o estudo das quantidades físicas relevantes. Logo em seguida, repetiremos o mesmo procedimento, com o sistema sujeito a potenciais de auto-interação cúbico e quártico. A utilidade de adicionar mais dois parâmetros para o modelo é no sentido de ter mais dois graus de liberdade para melhor ajustar as previsões deste modelo à termodinâmica de um dado sistema físico em estudo.

4.1 Formalismo

A versão escalar do modelo de Yukawa tem como objetos elementares um campo escalar complexo Φ e um campo real pseudoescalar σ . A densidade de Lagrangiana é dada por:

$$\mathcal{L} = (\partial_\mu \Phi^*)(\partial^\mu \Phi) - m_\phi^2 \Phi^* \Phi + \frac{1}{2}(\partial_\mu \sigma)(\partial^\mu \sigma) - \frac{1}{2}m_\sigma^2 \sigma^2 + g_\sigma \Phi^* \Phi \sigma \quad (4.1)$$

onde m_ϕ e m_σ são as massas dos campos Φ e σ , respectivamente, e g_σ é a constante de acoplamento, tipo-Yukawa da interação entre $\Phi^* \Phi \sigma$.

Um campo complexo pode ser entendido como uma superposição de dois campos reais. Com base nisto, faremos:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + i\phi_2) \quad \text{e:} \quad \Phi^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - i\phi_2), \quad (4.2)$$

e, substituindo a equação (4.2) na equação (4.1), temos:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left\{ [(\partial_\mu \phi_1)(\partial^\mu \phi_1) + (\partial_\mu \phi_2)(\partial^\mu \phi_2)] - m_\phi^2(\phi_1^2 + \phi_2^2) + (\partial_\mu \sigma)(\partial^\mu \sigma) - m_\sigma^2 \sigma^2 + g_\sigma(\phi_1^2 + \phi_2^2)\sigma \right\}. \quad (4.3)$$

Da equação (4.3), podemos calcular os momenta canonicamente conjugado:

$$\begin{aligned} \pi_{\phi_1} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \phi_1)} = \partial_0 \phi_1 = \frac{\partial \phi_1}{\partial t} \\ \pi_{\phi_2} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \phi_2)} = \partial_0 \phi_2 = \frac{\partial \phi_2}{\partial t} \\ \pi_\sigma &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \sigma)} = \partial_0 \sigma = \frac{\partial \sigma}{\partial t}, \end{aligned}$$

o que nos dá a densidade de Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = \pi_{\phi_1} \frac{\partial \phi_1}{\partial t} + \pi_{\phi_2} \frac{\partial \phi_2}{\partial t} + \pi_\sigma \frac{\partial \sigma}{\partial t} - \mathcal{L}. \quad (4.4)$$

Substituindo a equação (4.3) na equação (4.4) obtemos:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \left\{ \pi_{\phi_1}^2 + \pi_{\phi_2}^2 + \pi_\sigma^2 - (\nabla \phi_1)^2 - (\nabla \phi_2)^2 - (\nabla \sigma)^2 + m_\phi^2(\phi_1^2 + \phi_2^2) + m_\sigma^2 \sigma^2 - g_\sigma(\phi_1^2 + \phi_2^2)\sigma \right\}. \quad (4.5)$$

Observa-se claramente que a densidade de Lagrangiana dada pela equação (4.1) exibe uma simetria global do tipo:

$$\Phi \rightarrow \Phi' = \Phi e^{-i\alpha}, \quad (4.6)$$

onde α é uma constante independente da coordenada x . E como vimos anteriormente, segundo o teorema de Noether, para cada simetria há uma carga conservada que está associada. Uma maneira de encontrar esta carga conservada, vamos fazer α depender de x , $\alpha = \alpha(x)$, e, aplicar na equação (4.1). Logo:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}' &= \partial_\mu(\Phi^* e^{i\alpha})\partial^\mu(\Phi e^{-i\alpha}) - m_\Phi^2(\Phi^* e^{i\alpha})(\Phi e^{-i\alpha}) + \frac{1}{2}(\partial_\mu\sigma)(\partial^\mu\sigma) \\ &\quad - \frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2 + g_\sigma(\Phi^* e^{i\alpha})(\Phi e^{-i\alpha})\sigma \end{aligned}$$

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} - i\Phi(\partial_\mu\Phi^*)(\partial^\mu\alpha) + i\Phi^*(\partial^\mu\Phi)(\partial_\mu\alpha) + \Phi^*\Phi(\partial_\mu\alpha)(\partial^\mu\alpha).$$

A equação de movimento para este campo auxiliar $\alpha(x)$ é:

$$\partial_\mu(i\Phi^*\partial^\mu\Phi - i\Phi\partial^\mu\Phi^* + 2\Phi^*\Phi\partial^\mu\alpha) = 0.$$

Assim, a corrente conservada será:

$$j^\mu = i\Phi^*(\partial^\mu\Phi) + 2\Phi^*\Phi(\partial^\mu\alpha) - i\Phi(\partial^\mu\Phi^*).$$

Para recuperar a densidade de Lagrangiana “original”, devemos voltar a fazer $\alpha = cte$. Logo:

$$j^\mu = i\Phi^*(\partial^\mu\Phi) - i\Phi(\partial^\mu\Phi^*). \quad (4.7)$$

Utilizando a equação (4.2) e, dos momenta canonicamente conjugados, temos que:

$$j_0 = \phi_2\pi_{\phi_1} - \phi_1\pi_{\phi_2}. \quad (4.8)$$

Deste modo, a carga noetheriana é dada por:

$$Q = \int j_0 d^3x = d^3x(\phi_2\pi_{\phi_1} - \phi_1\pi_{\phi_2}). \quad (4.9)$$

De posse da densidade de Hamiltoniana, equação (4.5) e da carga de Noether, equação (4.9), podemos escrever a função de partição Z , através de:

$$Z = \int \mathcal{D}\pi_{\phi_1} \mathcal{D}\pi_{\phi_2} \mathcal{D}\pi_{\sigma} \int \mathcal{D}\phi_1 \mathcal{D}\phi_2 \mathcal{D}\sigma \exp \left\{ \int d\tau \int d^3x \left[i\pi_{\phi_1} \frac{\partial \phi_1}{\partial \tau} + i\pi_{\phi_2} \frac{\partial \phi_2}{\partial \tau} + i\pi_{\sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial \tau} - \mathcal{H} + \mu Q \right] \right\}. \quad (4.10)$$

Com o intuito de estudar o comportamento termodinâmico de um sistema físico, estamos supondo que o sistema encontra-se a uma temperatura T e um potencial químico μ finitos e está em equilíbrio termodinâmico. Neste sentido, faremos uso do formalismo introduzido no capítulo anterior e da prescrição de Matsubara. E, substituindo os momenta canonicamente conjugados, dados pela equações (4.5), e (4.9) na equação (4.10), obtemos:

$$Z = \int \mathcal{D}\pi_{\phi_1} \mathcal{D}\pi_{\phi_2} \mathcal{D}\pi_{\sigma} \int \mathcal{D}\phi_1 \mathcal{D}\phi_2 \mathcal{D}\sigma \exp \left\{ \int d\tau \int d^3x \left[\frac{1}{2}\pi_{\phi_1}^2 + \frac{1}{2}\pi_{\phi_2}^2 + \frac{1}{2}\pi_{\sigma}^2 + \frac{1}{2}(\nabla\phi_1)^2 + \frac{1}{2}(\nabla\phi_2)^2 + \frac{1}{2}(\nabla\sigma)^2 - \frac{1}{2}m_{\phi}^2(\phi_1^2 + \phi_2^2) - \frac{1}{2}m_{\sigma}^2\sigma^2 + \frac{1}{2}g_{\sigma}(\phi_1^2 + \phi_2^2)\sigma + \mu(\phi_2\pi_{\phi_1} - \phi_1\pi_{\phi_2}) \right] \right\}. \quad (4.11)$$

Neste contexto, para estimarmos as quantidades que descrevem as propriedades termodinâmicas do sistema, usaremos a aproximação de campo médio sobre o campo σ . Isso significa que vamos negligenciar as flutuações do campo σ , e torná-lo aproximadamente uniforme; então as suas derivadas serão nulas, pois o campo é independente das coordenadas. Com isso, a função de partição poderá ser reescrita como:

$$Z = e^{-\frac{1}{2}m_{\sigma}^2\sigma^2} \int \mathcal{D}\pi_{\phi_1} \mathcal{D}\pi_{\phi_2} \int \mathcal{D}\phi_1 \mathcal{D}\phi_2 \exp \left\{ \int_0^{\beta} d\tau \int d^3x \left[-\frac{1}{2}\pi_{\phi_1}^2 + \left(i\frac{\partial \phi_1}{\partial \tau} + \mu\phi_2 \right) \pi_1 - \frac{1}{2}\pi_{\phi_2}^2 + \left(i\frac{\partial \phi_2}{\partial \tau} + \mu\phi_1 \right) \pi_2 + \frac{1}{2}(\nabla\phi_1)^2 + \frac{1}{2}(\nabla\phi_2)^2 - \frac{1}{2}m_{\phi}^2(\phi_1^2 + \phi_2^2) + \frac{1}{2}g_{\sigma}(\phi_1^2 + \phi_2^2)\sigma \right] \right\}. \quad (4.12)$$

Deste modo, a integral sobre os momenta é uma integral gaussiana do tipo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2 + bx + d) dx = \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right) \left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2},$$

onde $\left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2}$ é uma constante, que neste caso é irrelevante. Então, resolvendo a integral:

$$\begin{aligned}
Z = e^{-\frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2} \int \mathcal{D}\phi_1 \mathcal{D}\phi_2 \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[\left(i \frac{\partial\phi_1}{\partial\tau} + \mu\phi_2 \right)^2 \right. \right. \\
\left. \left. + \left(i \frac{\partial\phi_2}{\partial\tau} - \mu\phi_1 \right)^2 - (\nabla\phi_1)^2 - (\nabla\phi_2)^2 + m_\phi^2(\phi_1^2 + \phi_2^2) \right. \right. \\
\left. \left. - g_\sigma(\phi_1^2 + \phi_2^2)\sigma \right] \right\}. \quad (4.13)
\end{aligned}$$

Da equação (4.13), podemos definir a ação, como:

$$\begin{aligned}
S = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[\left(i \frac{\partial\phi_1}{\partial\tau} + \mu\phi_2 \right)^2 + \left(i \frac{\partial\phi_2}{\partial\tau} - \mu\phi_1 \right)^2 - (\nabla\phi_1)^2 - (\nabla\phi_2)^2 \right. \\
\left. + (m_\phi^2 - g_\sigma\sigma)(\phi_1^2 + \phi_2^2) \right]. \quad (4.14)
\end{aligned}$$

Os campos ϕ_1 e ϕ_2 podem ser expandidos em suas componentes por uma transformada de Fourier:

$$\phi_j = \left(\frac{\beta}{V} \right)^{1/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\vec{p}} e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - \omega_n\tau)} \phi_{j;n}(\vec{p}) \quad (4.15)$$

onde $\omega_n = 2\pi nT$, é denominado de frequências de Matsubara e estão vinculados com a periodicidade de forma que $\phi(\vec{x}, \beta) = \phi(\vec{x}, 0)$, para todo \vec{x} . Expandindo os termos quadráticos entre parênteses e aplicando a transformada definida na equação (4.15) na equação (4.14), podemos escrever Z da seguinte forma:

$$Z = e^{-\frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2} \left[\prod_n \prod_{\vec{p}} \int D\phi_{1;n}(\vec{p}) D\phi_{2;n}(\vec{p}) \right] e^S.$$

onde:

$$S = -\frac{1}{2} \sum_n \sum_{\vec{p}} \vec{p} [\phi_{1;-n}(-\vec{p}), \phi_{2;-n}(-\vec{p})] D \begin{bmatrix} \phi_{1;n}(-\vec{p}) \\ \phi_{2;n}(-\vec{p}) \end{bmatrix},$$

e:

$$D = \begin{bmatrix} \omega_n^2 + p^2 + m_\phi^2 - g_\sigma\sigma - \mu^2 & -2\mu\omega_n \\ 2\mu\omega_n & \omega_n^2 + p^2 + m_\phi^2 - g_\sigma\sigma - \mu^2 \end{bmatrix}. \quad (4.16)$$

A partir da equação (4.16), podemos definir: $\omega^2 = p^2 + m_\phi^2 - g_\sigma\sigma$, e reescrevê-la como:

$$D = \beta^2 \begin{bmatrix} \omega_n^2 + \omega^2 - \mu^2 & -2\mu\omega_n \\ 2\mu\omega_n & \omega_n^2 + \omega^2 - \mu^2 \end{bmatrix}.$$

Realizando a integração gaussiana sobre os campos ϕ_1 e ϕ_2 , obtemos:

$$Z = \exp(m_\sigma \sigma^2) \int \mathcal{D}\phi_j \exp\left[\frac{1}{2}(\phi_j, D\phi_j)\right] = \exp(m_\sigma \sigma^2) (\det D)^{-1/2}.$$

Logo, podemos escrever:

$$\ln Z = \ln[(\det D)^{-1/2}] \ln\left(e^{-\frac{1}{2}m_\sigma^2 \sigma^2}\right), \quad (4.17)$$

onde:

$$\ln(\det D) = \ln\left\{\prod_n \prod_{\vec{p}} \beta^4 \left[(\omega_n^2 + \omega^2 - \mu^2)^2 + 4\mu^2 \omega_n^2\right]\right\} - \frac{1}{2}m_\sigma^2 \sigma^2 \beta. \quad (4.18)$$

Reescrevendo a equação (4.18) de outro modo:

$$\begin{aligned} \ln(\det D) = \ln\left\{\prod_n \prod_{\vec{p}} \beta^2 \left[\omega_n^2 + (\omega - \mu)^2\right]\right\} + \ln\left\{\prod_n \prod_{\vec{p}} \beta^2 \left[\omega_n^2 + (\omega + \mu)^2\right]\right\} \\ - \frac{1}{2}m_\sigma^2 \sigma^2 \beta V. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Assim, a equação (4.17) pode ser escrita como:

$$\ln Z = -\frac{1}{2} \sum_n \sum_{\vec{p}} \left\{ \ln\left[\beta^2 \left(\omega_n^2 + (\omega - \mu)^2\right)\right] + \ln\left[\beta^2 \left(\omega_n^2 + (\omega + \mu)^2\right)\right] + m_\sigma^2 \sigma^2 \beta V \right\}. \quad (4.20)$$

De maneira similar ao procedimento realizado no capítulo anterior, podemos utilizar a identidade:

$$\begin{aligned} \ln[(2\pi n)^2 + \beta^2(\omega - \mu)^2] &= \int_1^{\beta(\omega - \mu)} \frac{d\theta^2}{\theta^2 + (2\pi n)^2} + \ln[1 + (2\pi n)^2] \\ \ln Z &= -\frac{1}{2} \sum_n \sum_{\vec{p}} \left\{ \int_1^{\beta(\omega - \mu)} \frac{2\theta d\theta}{\theta^2 + (2\pi n)^2} + \ln[1 + (2\pi n)^2] \right\} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_n \sum_{\vec{p}} \left\{ \int_1^{\beta(\omega + \mu)} \frac{2\theta d\theta}{\theta^2 + (2\pi n)^2} + \ln[1 + (2\pi n)^2] \right\} - \frac{1}{2}m_\sigma^2 \sigma^2. \end{aligned} \quad (4.21)$$

O primeiro termo entre as chaves na equação (4.21) pode ser reescrito a partir de uso da identidade:

$$\sum_n \frac{1}{\left(\frac{\theta}{2\pi}\right)^2 + n^2} = \frac{2\pi^2}{\theta} \left(1 + \frac{2}{e^\theta - 1}\right),$$

produzindo a expressão:

$$\begin{aligned} \ln Z = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \left\{ \int_1^{\beta(\omega-\mu)} d\theta \left(1 + \frac{2}{e^\theta - 1}\right) + \int_1^{\beta(\omega+\mu)} d\theta \left(1 + \frac{2}{e^\theta - 1}\right) \right. \\ \left. + \sum_n \ln[1 + (2\pi n)^2] + m_\sigma^2 \sigma^2 \beta V \right\}. \end{aligned}$$

Excluindo o termo independente da temperatura:

$$\ln Z = -\sum_{\vec{p}} \left\{ \int_1^{\beta(\omega-\mu)} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^\theta - 1}\right] d\theta + \int_1^{\beta(\omega+\mu)} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^\theta - 1}\right] d\theta \right\} - \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 \beta V. \quad (4.22)$$

Realizando a integração a equação (4.22) pode ser reescrita portanto como:

$$\ln Z = V \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left[-\beta\omega - \ln(1 - e^{-\beta(\omega-\mu)}) - \ln(1 - e^{-\beta(\omega+\mu)}) \right] - \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 \beta V. \quad (4.23)$$

Da expressão acima, podemos encontrar o potencial termodinâmico, que no ensemble grande-canônico, é dado por:

$$U(T, \mu) = -\frac{1}{\beta} \ln Z$$

$$U(T, \mu) = \frac{V}{\beta} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left[\beta\omega + \ln(1 - e^{-\beta(\omega-\mu)}) + \ln(1 - e^{-\beta(\omega+\mu)}) \right] + \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 V. \quad (4.24)$$

O termo $\beta\omega$ não contribui para a termodinâmica do sistema, pois um β no numerador será cancelado pelo do denominador, sobrando apenas o termo ω , que é independente da temperatura. Por isso, vamos ignorá-lo.

Desejamos estudar o comportamento termodinâmico do sistema, portanto é importante determinarmos as soluções da chamada equação de gap, ou seja, os valores de σ em função dos parâmetros T e μ que extremizam o potencial termodinâmico. Neste sentido, temos:

$$\frac{\partial U}{\partial \sigma} = \frac{1}{2} g_\sigma V \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{\omega} \left(\frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)} - 1} + \frac{1}{e^{\beta(\omega+\mu)} - 1} \right) \right] - m_\sigma^2 \sigma V. \quad (4.25)$$

Deste modo, fazendo:

$$\frac{\partial U}{\partial \sigma} = 0,$$

obtemos a expressão:

$$\frac{1}{2}g_\sigma \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{\omega} \left(\frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)} - 1} + \frac{1}{e^{\beta(\omega+\mu)} - 1} \right) \right] - m_\sigma^2 \sigma = 0, \quad (4.26)$$

onde a equação (4.25) é a equação de gap. Para resolvê-la, vamos utilizar a isotropia do espaço, e aproveitar a sua simetria com o sistema de coordenadas esféricas. O que nos leva a:

$$\frac{g_\sigma}{(2\pi)^2} \int_0^\infty p^2 \left[\frac{1}{\omega} \left(\frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)} - 1} + \frac{1}{e^{\beta(\omega+\mu)} - 1} \right) \right] dp - m_\sigma^2 \sigma = 0. \quad (4.27)$$

E, da mesma forma, transformando a equação (4.24) para o sistema de coordenadas esféricas, ela assume a seguinte forma:

$$U = \frac{V}{(2\pi)^2 \beta} \int_0^\infty p^2 \left[\ln(1 - e^{-\beta(\omega-\mu)}) + \ln(1 - e^{-\beta(\omega+\mu)}) \right] dp + \frac{1}{2}m_\sigma^2 \sigma^2 V. \quad (4.28)$$

As equações (4.28) e (4.27) são expressões fundamentais para o nosso objetivo, pois é a partir delas que realizamos a análise do comportamento termodinâmico do sistema em estudo.

4.2 Resultados

Tendo como base tudo o que foi discutido anteriormente, vamos neste momento partir para a análise dos dados, do ponto de vista termodinâmico. Ou seja, vamos analisar o comportamento termodinâmico do modelo apresentado acima. Para isso vamos fixar algumas quantidades físicas e observar como as outras se comportam.

Explicitamente, estamos interessados nas propriedades termodinâmicas do modelo de Yukawa escalar, na aproximação de campo médio. Uma motivação física que poderia ser citada aqui seria considerarmos o campo ϕ associado a partículas escalares (spin 0) carregadas interagindo com um meio constituído por outras partículas, representado aqui pelo campo σ na aproximação de campo médio.

Antes de partirmos para a análise do comportamento termodinâmico do modelo, é conveniente escrever as quantidades físicas em unidades de massa do campo ϕ , m_ϕ . O que fica da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{U}{m_\phi^4} &\rightarrow U, & \frac{T}{m_\phi} &\rightarrow T, & \frac{\sigma}{m_\phi} &\rightarrow \sigma \\ \frac{m_{eff}}{m_\phi} &\rightarrow m_{eff}, & \frac{g_\sigma}{m_\phi} &\rightarrow g_\sigma, & \frac{m_\sigma}{m_\phi} &\rightarrow m_\sigma, \end{aligned} \quad (4.29)$$

onde:

$$m_{eff} = \sqrt{m_\phi^2 - g_\sigma \sigma}, \quad (4.30)$$

é a chamada massa efetiva do campo ϕ . Introduzimos aqui esta quantidade devido ao seu papel relevante na discussão do comportamento termodinâmico do sistema em estudo. Isso pode ser notado da sua definição, pois, m_{eff} depende dos valores de σ , que por sua vez assume valores que são soluções da equação de gap explicitada na equação (4.25). Tal fato justifica a interpretação de que o valor da massa do campo ϕ modifica-se a partir da sua interação com o campo σ . Fisicamente, uma possível leitura disso é pensar que a massa do bóson de spin nulo têm sua massa física modificada a partir da interação com o meio (associado a σ na aproximação de campo médio).

Na física, uma transição de fase é caracterizada por uma quebra de simetria no sistema, ocasionada por uma brusca alteração das suas propriedades físicas. Essas transições de fases podem ser de primeira ordem, quando ocorrem de maneira descontínua ou de segunda ordem, quando ocorrem de maneira contínua. O que faremos agora é analisar o papel que cada quantidade exerce na temperatura para qual ocorre a transição de fase. Mais tarde, faremos o mesmo, mas com a adição de termos de auto-interação.

4.2.1 A dependência das quantidades do modelo sem auto-interação

Nesta seção analisaremos o papel desempenhado pela constante de acoplamento g_σ no modelo estudado neste trabalho, que é de um gás de bósons. Este acoplamento descreve a interação entre o campo σ e o campo ϕ . Fisicamente, a constante de acoplamento é a quantidade física que está associada com a interação entre os constituintes do sistema.

Neste sentido, a figura 1 mostra o gráfico da massa efetiva m_{eff} , definida na equação (4.30), em função da temperatura T , que são soluções da equação de auto consistência (4.27).

Para esboçar o gráfico, escolhemos $m_\phi = 1.0$ e $\mu = 0$. Com isso, as quantidades g_σ , m_σ , m_{eff} e T são dadas em termos de unidade de m_ϕ . O valor escolhido para m_ϕ , por definição, é a unidade. Já para μ , escolhemos o valor nulo no intuito de desconsiderar os efeitos provenientes do potencial químico. Os demais parâmetros foram escolhidos de maneira convenientes de modo que os gráficos deixem bem claro o comportamento do sistema. E, este critério foi adotado também para os demais gráficos deste trabalho.

A Figura 1 nos mostra que há uma certa região onde encontramos dois valores distintos da massa efetiva m_{eff} para uma mesma temperatura T . Isso significa que, por exemplo, para a temperatura de $T = 0.5$, quando $g_\sigma = 2.0$, podemos encontrar simultaneamente a massa efetiva de $m_{eff} \approx 0.18$ e $m_{eff} \approx 0.78$. Por conta disso, vamos analisar o potencial termodinâmico para verificar qual das duas está associada a um mínimo global. A partir desta análise mais completa (isto é, análise conjunta da equação de gap e do potencial termodinâmico) podemos ter um quadro mais completo sobre a termodinâmica deste sistema.

É relevante notar da figura 1 que a massa efetiva anula-se para valores acima de $T_D \equiv T \approx 0.95, 0.55$ e 0.35 , para $g_\sigma = 1.0, 2.0$ e 4.0 , respectivamente. Sendo que no valor T_D temos o desaparecimento da massa efetiva, m_{eff} . Então, T_D é uma quantidade que nos fornece a informação sobre a temperatura máxima na qual a massa efetiva está definida com valores não-nulos. Para esboçar o gráfico foram fixados os parâmetros: $m_\sigma = 0.25$ e $\mu = 0.0$.

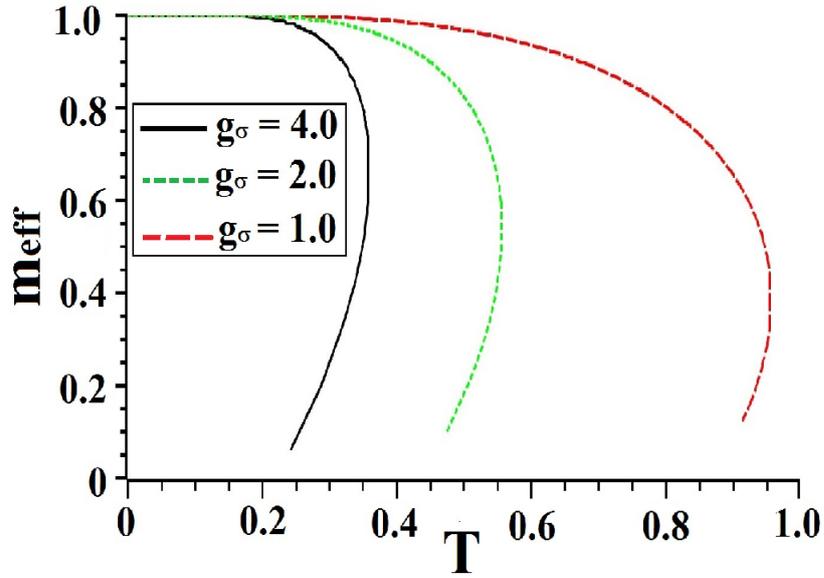


Figura 1: [Massa efetiva em função da temperatura]

Ainda pelo gráfico mostrado na Figura 1, podemos notar como o aumento de g_σ causa a redução de T_D . Ou seja, a presença de um meio provoca portanto a diminuição da massa efetiva dos bósons carregados.

Agora iremos tomar os intervalos para os quais há dois valores distintos de massa efetiva que correspondem a uma mesma temperatura, vamos escolher a situação intermediária, $g_\sigma = 2.0$ (curva verde) para fazer tal análise mais detalhada.

Neste sentido, plotamos na Figura 2 a densidade de potencial termodinâmico $U(T, \mu)/V$ dado pela equação (4.28), em função da massa efetiva m_{eff} , dada pela equação

(4.30). Neste gráfico foram plotadas três curvas para diferentes valores de temperatura $T = 0.53, 0.54$ e 0.55 , com as cores verde, vermelho e preto, respectivamente. Como já havíamos percebido na figura anterior, observamos uma transição de fase de primeira ordem ocorrendo em $T \approx 0.54$, quando a massa efetiva assume o valor $m_{eff} \approx 0,72$.

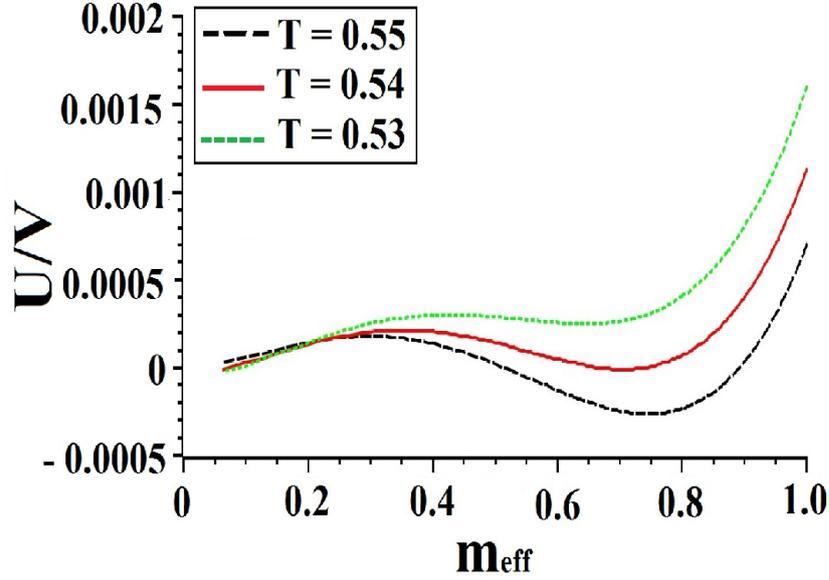


Figura 2: [Densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva]

Esperaríamos que todas as curvas convergissem para a origem do sistema de coordenadas. No entanto, isto não ocorre devido às limitações numéricas e computacionais.

Realizando uma análise similar para o sistema com diferentes valores da constante de acoplamento g_σ , percebemos portanto uma alteração significativa da temperatura na qual ocorre a transição de fase. A tabela 1 mostra de maneira mais clara como g_σ influencia na temperatura crítica para cada configuração do sistema.

Tabela 1: [g_σ em relação a T_C]

$g_\sigma = 1.0$	$T_C \approx 0.94$
$g_\sigma = 2.0$	$T_C \approx 0.54$
$g_\sigma = 4.0$	$T_C \approx 0.34$

Para a Tabela 1, mantivemos fixos os valores: $\mu = 0.0$; $m_\sigma = 0.25$.

Portanto, um dos principais resultados que obtivemos até este ponto é que a transição de primeira ordem ocorre a uma temperatura inferior, quando o valor da constante de acoplamento de g_σ aumenta.

Agora vamos analisar a influência da variação da magnitude do potencial químico, μ , na termodinâmica do sistema. Neste cenário μ está fisicamente associado à densidade de partículas (antipartículas) que compõe o sistema. Para isso, num procedimento análogo

ao anterior, vamos plotar o gráfico da massa efetiva m_{eff} em função da temperatura T . Contudo, neste momento, vamos plotar as curvas para diferentes valores de magnitude do potencial químico: $\mu = 0.1$; 0.2 e 0.4 , respectivamente, mantendo fixos os parâmetros: $m_\sigma = 0.25$ e $g_\sigma = 2.0$.

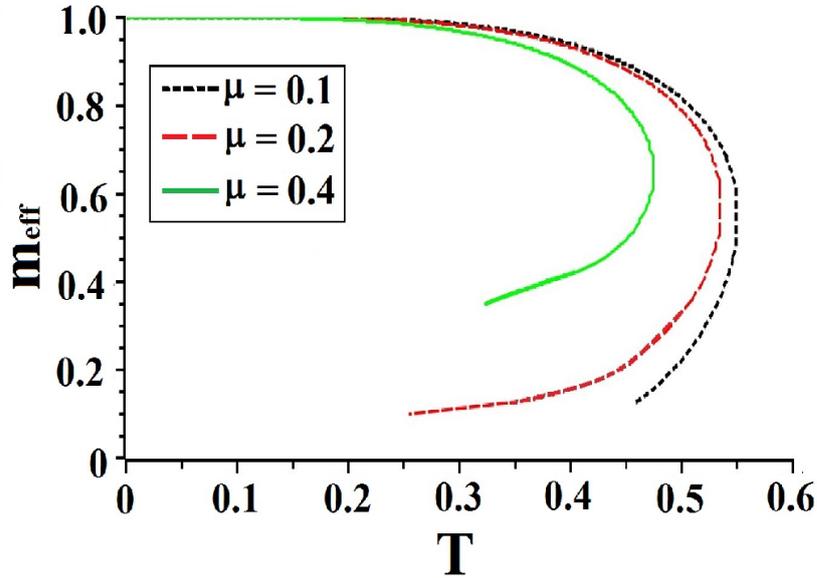


Figura 3: [Massa efetiva em função da temperatura]

Observe na Figura 3 que o valor de μ também altera a temperatura em que ocorre a transição de fase. Sendo que não existem valores de temperaturas acima de $T_D \approx 0.54$, 0.52 e 0.47 , para $\mu = 0.1$, 0.2 e 0.4 , respectivamente. Como dissemos antes, o potencial químico está associado à densidade de partículas que compõem o sistema, então, percebemos que num gás bosônico mais denso, a temperatura na qual ocorrerá a transição de fase é inferior a que seria se o gás fosse menos denso.

Outro ponto digno de menção é sobre o comportamento diferente das curvas da figura 3 em relação à figura 1; tal fato é provavelmente devido aos problemas de convergência nos estudos das soluções da equação de gap, definida na equação (4.25).

De posse desta informação, vamos agora plotar o gráfico da densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva, figura 4, que mostra o comportamento para o sistema a diferentes temperaturas. Neste caso, fixamos o valor do potencial químico em $\mu = 0.2$, percebendo que há um intervalo que fornece dois valores de temperatura para a mesma massa efetiva.

A linha preta na Figura 4 mostra que a temperatura crítica é em torno de 0.52 , quando a massa efetiva, $m_{eff} \approx 0.71$. Comparando este resultado com o anterior, percebemos que a temperatura caiu sensivelmente quando o potencial químico foi aumentado de zero para 0.2 . E para percebermos de modo mais completo esta mudança na temperatura

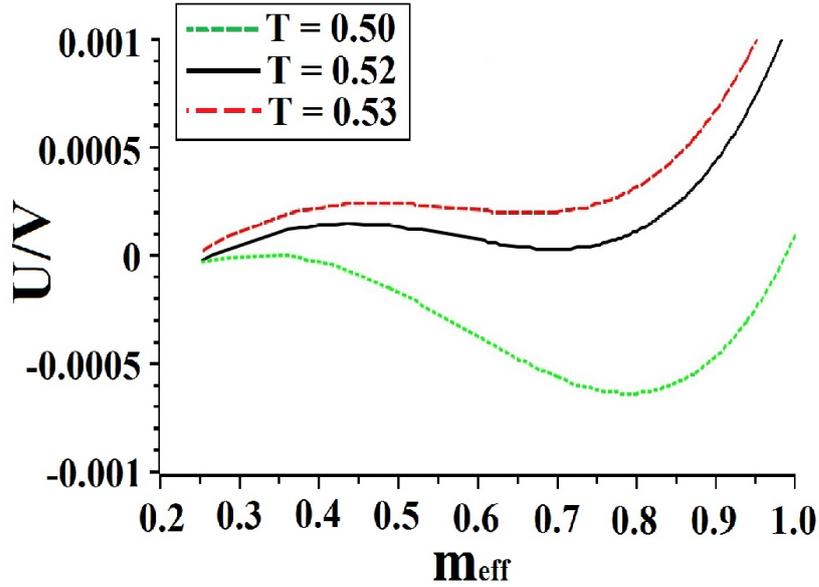


Figura 4: [Densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva]

crítica, causada unicamente pela mudança na magnitude de μ , construímos a Tabela 2:

Tabela 2: [μ em relação a T_C]

$\mu = 0.0$	$T_C \approx 0.54$
$\mu = 0.1$	$T_C \approx 0.53$
$\mu = 0.2$	$T_C \approx 0.52$
$\mu = 0.4$	$T_C \approx 0.45$

Para a Tabela 2, mantivemos fixos os valores: $m_\phi = 1.0$; $g_\sigma = 2.0$; e $m_\sigma = 0.25$.

Portanto, os resultados acima explicitam inequivocamente a influência do potencial químico na redução da temperatura crítica para qual o sistema está mudando a sua fase.

Agora, o nosso interesse se concentra em analisar a influência do parâmetro m_σ no comportamento termodinâmico do nosso modelo. Para isso, seguindo os mesmos passos que foram dados acima, vamos plotar o gráfico da massa efetiva, m_{eff} , em função da temperatura, T . Mas, diferentemente do que fizemos anteriormente, vamos fixar g_σ e μ em 2.0 e 0.0, respectivamente, e, variar os valor de m_σ em 0.1; 0.25 e 0.5, plotando assim o gráfico da Figura 5:

O que a Figura 5 nos mostra é que há uma dependência de m_σ para a temperatura na qual ocorre a transição de fase. Ou seja, para diferentes valores de m_σ a transição de fase ocorrerá a temperaturas diferentes. Observe que $T_D \approx 0.95$, 0.56 e 0.31 para $m_\sigma = 0.5$, 0.25 e 0.1, respectivamente. Ou seja, o aumento de m_σ ocasiona na diminuição de T_D . Com isso, concluímos que quanto maior for o parâmetro associado ao termo quadrático do campo σ , maior será a temperatura necessária para a massa efetiva dos bósons se anular,

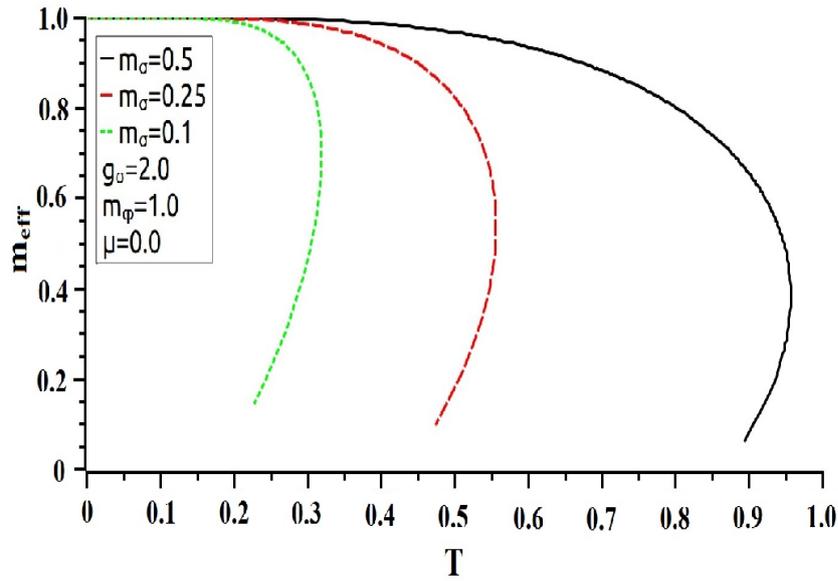


Figura 5: [Massa efetiva em função da temperatura]

e conseqüentemente, essas transições ocorrerão numa temperatura mais elevada.

E também, assim como anteriormente, observamos que há um intervalo em que para apenas um único valor da temperatura há duas massas efetivas possíveis. E, sabendo disso, vamos escolher a curva onde $m_\sigma = 0.25$, que é o mesmo gráfico mostrado na Figura 2, para encontrarmos a temperatura crítica para esta configuração, que é $T_C \approx 0.54$, como foi visto acima.

Para ficar mais claro como a temperatura crítica deve depender de m_σ , vamos construir a Tabela 3, que mostra os diferentes valores da temperatura crítica T_C para diferentes valores de m_σ :

Tabela 3: [m_σ em relação a T_C]

$m_\sigma = 0.1$	$T_C \approx 0.29$
$m_\sigma = 0.25$	$T_C \approx 0.54$
$m_\sigma = 0.5$	$T_C \approx 0.95$

Para a Tabela 3, mantivemos fixos os valores: $\mu = 0.0$; e $g_\sigma = 2.0$.

Com isso, verificamos que os resultados acima explicitam inequivocamente a influência da massa m_σ do campo σ no aumento da temperatura crítica para qual o sistema está mudando a sua fase.

4.3 Presença de Termos de Auto-interação Cúbico e Quártico

Nesta segunda etapa, vamos adicionar dois termos de interação na densidade de Lagrangiana (4.1). Este “potencial” é uma interação do tipo:

$$V(\sigma) = \frac{\lambda}{3}\sigma^3 + \frac{\eta}{4}\sigma^4, \quad (4.31)$$

onde λ e η são constantes e neste contexto, são dois parâmetros adicionais aos já existentes (g_σ , m_ϕ e m_σ) cujos valores podem ser determinados no intuito de melhor ajustar as predições deste modelo à termodinâmica de um dado sistema físico em estudo.

A densidade de Lagrangiana agora terá a seguinte forma:

$$\mathcal{L} = (\partial_\mu \Phi)(\partial^\mu \Phi) - m_\Phi^2 \Phi^* \Phi + \frac{1}{2}(\partial_\mu \sigma)(\partial^\mu \sigma) - \frac{1}{2}m_\sigma^2 \sigma^2 + g_\sigma \Phi^* \Phi \sigma - \frac{\lambda}{3}\sigma^3 - \frac{\eta}{4}\sigma^4. \quad (4.32)$$

Repetindo os mesmos procedimentos anteriores, encontramos uma densidade de Hamiltoniana bem parecida também, com o acréscimo dos termos associados à interação:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \left\{ \pi_{\phi_1}^2 + \pi_{\phi_2}^2 + \pi_\sigma^2 - (\nabla \phi_1)^2 - (\nabla \phi_2)^2 - (\nabla \sigma)^2 + m_\Phi^2(\phi_1^2 + \phi_2^2) + m_\sigma^2 \sigma^2 - g_\sigma(\phi_1^2 + \phi_2^2)\sigma \right\} + \frac{\lambda}{3}\sigma^3 + \frac{\eta}{4}\sigma^4. \quad (4.33)$$

Em essência, a densidade de Lagrangiana não sofre nenhuma modificação considerável, então ela ainda admite a mesma simetria global no grupo SU(1). Logo, também tem a mesma carga conservada, que é dada por:

$$Q = \int d^3x [\phi_2 \pi_{\phi_1} - \phi_1 \pi_{\phi_2}]. \quad (4.34)$$

Da mesma forma que fizemos na seção 4.1, realizaremos procedimentos análogos, observando apenas que há o acréscimo do termo $V(\sigma)$ nas expressões que se seguem.

A função de partição, após a ser executada a aproximação de campo médio e calculada a integral gaussiana, será dada por:

$$Z = e^{-\frac{1}{2}m_\sigma^2 \sigma^2 - \frac{\lambda}{3}\sigma^3 - \frac{\eta}{4}\sigma^4} \int \mathcal{D}\pi_{\phi_1} \mathcal{D}\pi_{\phi_2} \int \mathcal{D}\phi_1 \mathcal{D}\phi_2 \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[-\frac{1}{2}\pi_{\phi_1}^2 + \left(i \frac{\partial \phi_1}{\partial \tau} + \mu \phi_2 \right) \pi_1 - \frac{1}{2}\pi_{\phi_2}^2 + \left(i \frac{\partial \phi_2}{\partial \tau} + \mu \phi_1 \right) \pi_2 + \frac{1}{2}(\nabla \phi_1)^2 + \frac{1}{2}(\nabla \phi_2)^2 - \frac{1}{2}m_\Phi^2(\phi_1^2 + \phi_2^2) + \frac{1}{2}g_\sigma(\phi_1^2 + \phi_2^2)\sigma \right] \right\}. \quad (4.35)$$

Calculando o logaritmo:

$$\ln Z = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \left\{ \int_1^{\beta(\omega-\mu)} d\theta \left(1 + \frac{2}{e^\theta - 1} \right) + \int_1^{\beta(\omega+\mu)} d\theta \left(1 + \frac{2}{e^\theta - 1} \right) \right. \\ \left. + \sum_n \ln[1 + (2\pi n)^2] \right\} - \left(\frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 + \frac{\lambda}{3} \sigma^3 + \frac{\eta}{4} \sigma^4 \right) \beta V. \quad (4.36)$$

Excluindo o termo independente da temperatura, podemos escrever:

$$\ln Z = - \sum_{\vec{p}} \left\{ \int_1^{\beta(\omega-\mu)} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^\theta - 1} \right) d\theta + \int_1^{\beta(\omega+\mu)} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^\theta - 1} \right) d\theta \right\} \\ - \left(\frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 + \frac{\lambda}{3} \sigma^3 + \frac{\eta}{4} \sigma^4 \right) \beta V. \quad (4.37)$$

Após aplicar a transformada de Fourier, podemos escrever:

$$\ln Z = V \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left[-\beta\omega - \ln(1 - e^{-\beta(\omega-\mu)}) - \ln(1 - e^{-\beta(\omega+\mu)}) \right] \\ - \left(\frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 + \frac{\lambda}{3} \sigma^3 + \frac{\eta}{4} \sigma^4 \right) \beta V. \quad (4.38)$$

Assim, o potencial termodinâmico assumirá a seguinte forma:

$$U(T, \mu) = V \left\{ \int \frac{d^3 p}{\beta(2\pi)^3} \left[\ln(1 - e^{-\beta(\omega-\mu)}) + \ln(1 - e^{-\beta(\omega+\mu)}) \right] \right. \\ \left. - \left(-\frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 - \frac{\lambda}{3} \sigma^3 - \frac{\eta}{4} \sigma^4 \right) \right\}, \quad (4.39)$$

que em coordenadas esféricas, obtemos portanto:

$$U(T, \mu) = V \left\{ \int \frac{p^2}{\beta 2\pi^2} \left[\ln(1 - e^{-\beta(\omega-\mu)}) + \ln(1 - e^{-\beta(\omega+\mu)}) \right] dp \right. \\ \left. - \left(-\frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 - \frac{\lambda}{3} \sigma^3 - \frac{\eta}{4} \sigma^4 \right) \right\}. \quad (4.40)$$

Calculando a primeira derivada de U em função de σ , e, igualando a zero, encontramos a equação de gap, que após convertida em coordenadas esféricas fica:

$$\frac{g_\sigma}{(2\pi)^2} \int_0^\infty p^2 \left[\frac{1}{\omega} \left(\frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)} - 1} + \frac{1}{e^{\beta(\omega+\mu)} - 1} \right) \right] dp + m_\sigma^2 \sigma + \lambda \sigma^2 + \eta \sigma^3 = 0 \quad (4.41)$$

4.3.1 A dependência das quantidades do modelo com auto-interação

Neste momento vamos analisar o comportamento termodinâmico do modelo, quando ligado a um potencial de auto-interação dado por $\lambda\sigma^3$ e $\eta\sigma^4$. Vamos partir da equações (4.40) e (4.41), e, assim como foi feito anteriormente, fixaremos alguns valores das quantidades físicas e observaremos o comportamento das demais, procurando sempre observar as temperaturas onde ocorrerão as transições de fase. Note que devido a escolha da escala realizada de acordo com a equação (4.29), como o potencial termodinâmico foi dividido por m_ϕ^4 , e o campo σ tem dimensão $[massa]^1$, neste contexto a constante λ associada ao termo cúbico torna-se dada em termos de unidade de m_ϕ , enquanto que a constante η associada ao termo quártico permanece adimensional.

Neste momento, vamos analisar como η influencia na termodinâmica do modelo. Para isso, vamos utilizar os mesmos procedimentos de antes, fixando: g_σ e μ em 2.0 e 0.0, respectivamente. Vamos esboçar três curvas para três diferentes valores de η no gráfico da massa efetiva, m_{eff} , em função da temperatura, T , que são soluções da equação de gap (4.41). Este gráfico é da Figura 6, sendo que para a sua plotagem, fixamos os parâmetros: $g_\sigma = 2.0$, $m_\sigma = 0.25$, $\mu = 0.0$ e $\lambda = 0.0$:

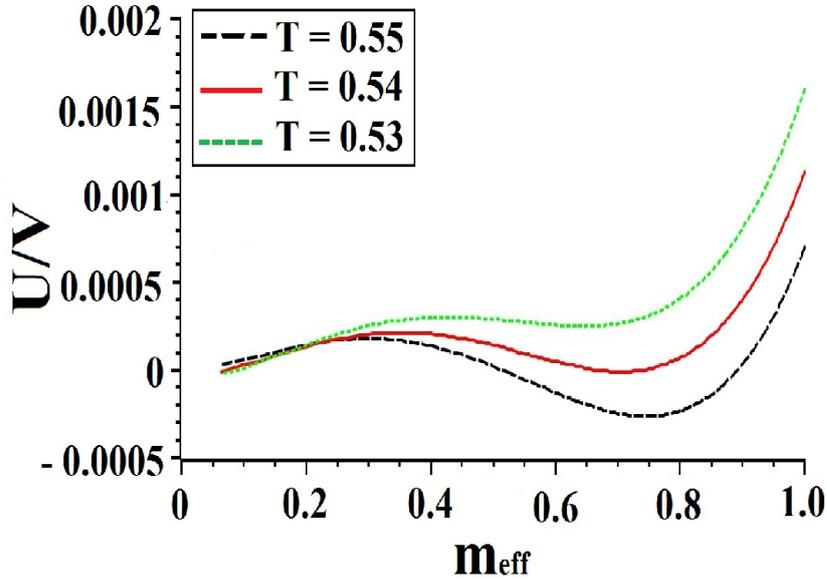


Figura 6: [Densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva]

Assim como nas análises feitas para o modelos sem os potenciais de auto-interação, podemos vê que há alguns valores de temperatura que correspondem a dois valores de massa efetiva, e que a massa efetiva é nula para valores de temperatura acima de $T_D \approx 0.81$, 0.69 e 0.54 para $\eta = 0.5$, 0.25 e 0.0, respectivamente. Ou seja, fica bem claro que T_D aumenta com o aumento de η .

Na sequência, vamos esboçar a curva da densidade de potencial termodinâmico

em função da massa efetiva, para verificarmos qual dos valores corresponde a um mínimo global.

Novamente vamos plotar o gráfico da densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva para diferentes valores de temperatura, mantendo fixas as quantidades: g_σ , m_σ , μ , η e λ em 2.0; 0.25; 0.0; 0.25 e 0.0, respectivamente:

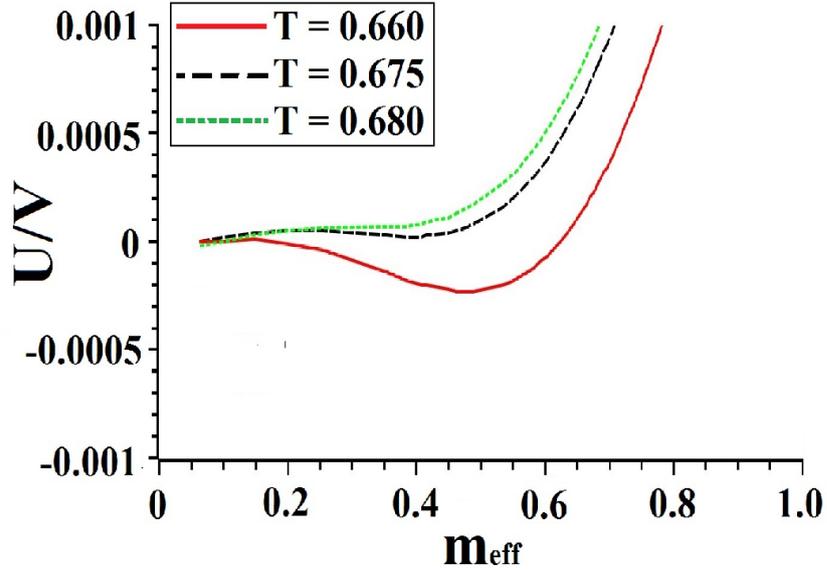


Figura 7: [Densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva]

Pela Figura 7, podemos verificar que a temperatura crítica ocorre em torno de 0.675. Podemos comparar este resultado com o obtido no modelo anterior, sem os termos de auto-interação, na Figura 2. no modelo anterior, a temperatura crítica foi $T_C \approx 0.54$, que é um valor sensivelmente menor comparado com o valor de T_C com o sistema na presença do termo de interação cúbica. Esse valor da temperatura crítica ocorre quando $m_{eff} \approx 0.38$. No intuito de melhor visualizarmos o efeito de η sobre a temperatura crítica, vamos construir a Tabela 4, que mostra o valor da temperatura crítica, T_C , correspondente a cada valor de η .

Tabela 4: [η em relação a T_C]

$\eta = 0.0$	$T_C \approx 0.54$
$\eta = 0.25$	$T_C \approx 0.67$
$\eta = 0.5$	$T_C \approx 0.81$

Para a Tabela 4, mantivemos fixos os valores: $\mu = 0.0$; $m_\sigma = 0.25$; $g_\sigma = 2.0$ e $\lambda = 0.0$.

Observamos que, a temperatura crítica é maior quando o valor de η também é maior. Podemos observar também que quando o valor de η aumenta, essa interação também

aumenta forçando o sistema a alcançar temperaturas maiores para experimentar transições de fase.

Agora vamos analisar o papel desempenhado pelo parâmetro λ no comportamento termodinâmico deste modelo. Para isso, vamos seguir o mesmo roteiro e plotar o gráfico da massa efetiva em função da temperatura. Neste caso, como desejamos fazer a análise do parâmetro λ , vamos fixar então g_σ , m_σ , μ e η em 2.0; 0.25; 0.0 e 0.0, respectivamente. O gráfico é como mostrado na Figura 8.

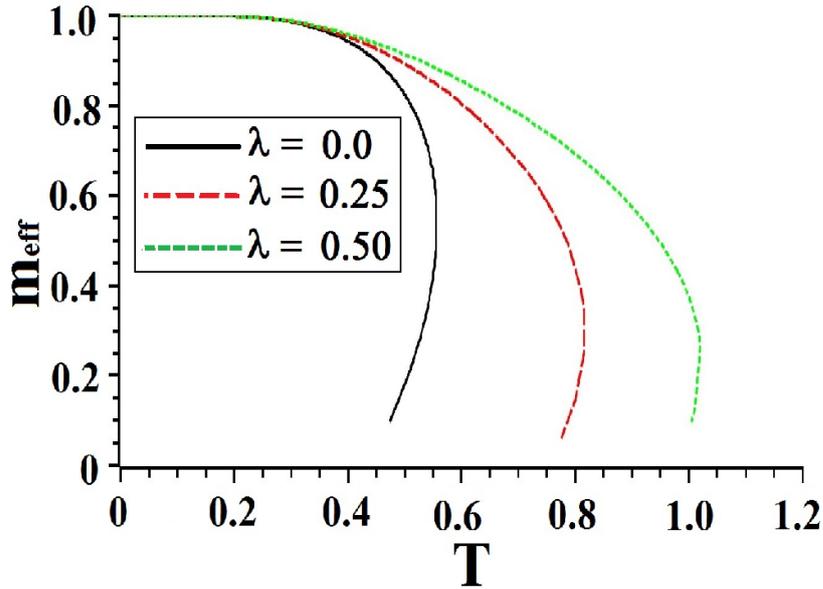


Figura 8: [Massa efetiva em função da temperatura]

Observe que assim como no caso de η , λ também faz a temperatura onde ocorre a transição de fase ser aumentada, com o seu aumento. Observamos também que a massa efetiva é nula para valores de temperatura acima de $T_D \approx 1.05, 0.83$ e 0.54 para $\lambda = 0.5, 0.25$ e 0.0 , respectivamente. Ou seja, assim como no caso de η , com o aumento de λ há o aumento também de T_D .

Seguindo o mesmo procedimento, vamos plotar o gráfico da densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva, para podermos encontrar o valor da temperatura crítica. Para isso, fixamos o valor de λ em 0.25, e g_σ , m_σ , μ e η em 2.0; 0.25; 0.0 e 0.0, respectivamente, e plotamos o gráfico para três temperaturas diferentes $T \approx 0.790, 0.812$ e 0.830 .

Neste caso, a temperatura crítica ocorre por volta de $T \approx 0.812$, onde $m_{eff} \approx 0.38$. Comparando com as situações onde não haviam potenciais de auto-interação, verificamos que a temperatura crítica T_C aumentou da mesma forma. Ou seja, tanto λ quanto η isoladamente influenciam no comportamento termodinâmico do sistema.

Para ficar mais claro, vamos então construir a Tabela 5 para podermos visualizar

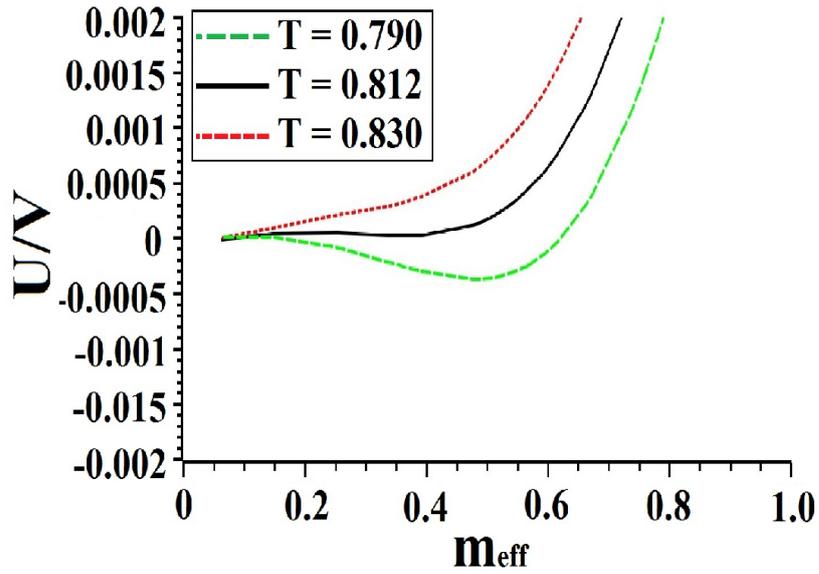


Figura 9: [Densidade de potencial termodinâmico em função da massa efetiva]

mais facilmente como a temperatura crítica se comporta com relação a λ . Para isso, vamos manter fixos os mesmos parâmetros que anteriormente: $\mu = 0.0$; $m_\sigma = 0.25$; $g_\sigma = 2.0$ e $\eta = 0.0$.

Tabela 5: [λ em relação a T_C]

$\lambda = 0.0$	$T_C \approx 0.54$
$\lambda = 0.25$	$T_C \approx 0.80$
$\lambda = 0.5$	$T_C \approx 1.02$

Portanto, podemos observar nas seções (3.2.1) e (3.3.1) o comportamento termodinâmico do modelo escalar de Yukawa, primeiramente livre, e após, com termos de auto-interação cúbico e quártico. Verificamos que a presença da auto-interação eleva a temperatura crítica na qual o sistema experimenta a transição de fase.

5 Conclusões e Perspectivas:

Neste trabalho efetuamos um estudo sobre o comportamento termodinâmico da versão escalar do modelo de Yukawa, onde consideramos um campo escalar complexo Φ interagindo com um campo escalar real externo σ , sob a aproximação de campo médio. Procuramos compreender a termodinâmica desse gás de bóson a temperatura e potencial químico finitos, bem como o diagrama de fase. Para isso, utilizamos a Teoria Quântica de Campos a Temperatura Finita, via formalismo de Matsubara, no intuito de obtermos uma função de partição que contivesse todas as informações sobre a termodinâmica do modelo.

Os resultados nos sugerem que a temperatura crítica do sistema é claramente dependente dos valores de cada parâmetro físico. Mostramos que o aumento da constante de acoplamento entre os campos, g_σ , assim como o aumento do potencial químico μ , reduz a temperatura crítica na qual o sistema experimenta a transição de fase. Bem como o aumento da massa do campo escalar real σ , m_σ , ocasiona o aumento da temperatura crítica do sistema.

Isso significa que a interação entre os campos, assim como a densidade de partículas e massa dos campos são bastante significativos na termodinâmica do sistema em estudo. Pois, eles são decisivos na temperatura na qual o sistema apresenta a transição de fase.

Num segundo cenário, abordamos o problema do comportamento termodinâmico do mesmo modelo, contudo, adicionando termos de auto-interação quártico e cúbico, com o objetivo de fornecer mais graus de liberdade ao modelo. Com isto, mostramos que além dos já mencionados potencial químico μ , constante de acoplamento g_σ e massa do campo externo m_σ , as quantidades η e λ , associadas aos potenciais quártico e cúbico, respectivamente, também exercem papel fundamental na termodinâmica do sistema. Pois o aumento de ambos, torna a temperatura crítica do sistema mais elevada.

Algumas possíveis aplicações deste trabalho podem ser realizadas nos seguintes cenários: a termodinâmica de mésons pseudo-escalares imersos em um meio de outras partículas, como píons ou káons pesados (D ou B), imersos em um meio constituído de outras partículas (mésons leves, nucleons, etc.). Uma possível extensão deste trabalho seria investigar os efeitos de tamanho finito sobre cada um dos sistemas estudados, bem como a influência de um campo magnético externo.

APÊNDICE A – Teorema de Noether

Vamos agora mostrar que partindo das definições mostradas na seção 1.1 algumas quantidades físicas se conservam, desde que se observem as simetrias que envolvem o sistema. Para mostrar isso, vamos considerar uma densidade de Lagrangiana $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\phi, \partial^\mu \phi)$ e que tem a correspondente ação $S = \int \mathcal{L} d^4x$. Vamos considerar também que este sistema sofra uma transformação infinitesimal, do tipo:

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = x^\mu + \delta x^\mu \quad (\text{A.1})$$

$$\phi(x) \rightarrow \phi'(x) = \phi(x) + \delta\phi(x). \quad (\text{A.2})$$

É importante notar que a $\delta\phi$ como definido nas equações (A.1) e (A.2) é meramente uma variação funcional em ϕ ; ϕ' é comparado com ϕ no mesmo ponto no espaço-tempo x^μ . A variação total de ϕ , $\Delta\phi$, definimos por:

$$\delta\phi'(x') = \phi(x) + \Delta\phi(x). \quad (\text{A.3})$$

Para os termos de primeira ordem em δx , obtemos:

$$\begin{aligned} \Delta\phi &= \phi'(x') - \phi(x') + \phi(x') - \phi(x) \\ &= \delta\phi + (\partial_\mu \phi) \delta x^\mu. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

A variação da ação será:

$$\delta S = \int \mathcal{L}(\phi', \partial_\mu \phi', x'^\mu) d^4x' - \int \mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi, x^\mu) d^4x, \quad (\text{A.5})$$

onde $d^4x' = J(x'/x) d^4x$, sendo $J(x'/x)$ a Jacobiana da transformação $x \rightarrow x'$. Pela equação (A.1), a derivada fica:

$$\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\lambda} = \delta_\lambda^\mu + \partial_\lambda \delta x^\mu, \quad (\text{A.6})$$

então:

$$J\left(\frac{x'}{x}\right) = \det\left(\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\lambda}\right) = 1 + \partial_\mu(\delta x^\mu) \quad (\text{A.7})$$

Consequentemente;

$$\delta S = \int (\delta \mathcal{L} + \mathcal{L} \partial_\mu \delta x^\mu) d^4 x, \quad (\text{A.8})$$

onde:

$$\delta \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \delta \phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \delta (\partial_\mu \phi) + \frac{\mathcal{L}}{\partial x^\mu} \delta x^\mu \quad (\text{A.9})$$

Os operadores δ e ∂_μ são lineares e comutam entre si. Ou seja, $\delta(\partial_\mu \phi) = \partial_\mu(\delta \phi)$. Portanto, as equações (A.8) e (A.9) nos fornecem:

$$\delta S = \int_R \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \delta \phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \partial_\mu (\delta \phi) + \partial_\mu (\mathcal{L} \delta x^\mu) \right] d^4 x, \quad (\text{A.10})$$

onde R é uma região do espaço-tempo. Podemos observar que o terceiro termos na equação (A.10) é um divergente total. O segundo termo deve ser reescrito de modo a introduzir um outro divergente total:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \partial_\mu (\delta \phi) = \partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \delta \phi \right] - \partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right] \delta \phi,$$

resultando na integral de divergente total sobre R , que pode ser escrita como uma integral de superfície, sobre Ω , usando o teorema de Gauss 4-dimensional. O que nos fornece:

$$\delta S = \int_R \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right] \right\} \delta \phi d^4 x + \int_\Omega \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \delta \phi + \mathcal{L} \delta x^\mu \right] d\sigma_\mu. \quad (\text{A.11})$$

Podemos reescrever os termos de superfície, simplesmente adicionando e subtraindo um termo:

$$\begin{aligned} \delta S = \int_R \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right] \right\} \delta \phi d^4 x + \int_\Omega \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} [\delta \phi + (\partial_\nu \phi) \delta x^\nu] \right. \\ \left. - \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} (\partial_\nu \phi) - \delta_\nu^\mu \mathcal{L} \right] \delta x^\nu \right\} d\sigma_\mu, \end{aligned}$$

onde o primeiro colchete na integral de superfície é a variação total $\Delta \phi$, definida na equação (A.5). E o segundo colchete é o tensor momentum-energia, θ_ν^μ , definido como:

$$\theta_\nu^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} (\partial_\nu \phi) - \delta_\nu^\mu \mathcal{L}. \quad (\text{A.12})$$

Portanto, podemos escrever:

$$\delta S = \int_R \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right] \right\} \delta \phi d^4 x + \int_\Omega \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \Delta \phi - \theta_\nu^\mu \delta x^\nu \right] d\sigma_\mu. \quad (\text{A.13})$$

Supondo que a ação seja invariante sob um grupo de transformações de x^μ e ϕ , a qual, uma transformação infinitesimal assume a forma:

$$\Delta x^\mu = X_\nu^\mu \delta\omega^\nu, \quad \Delta\phi = \Phi_\mu \delta\omega^\mu, \quad (\text{A.14})$$

caracterizada pelo parâmetro infinitesimal $\delta\omega^\nu$. Onde X_ν^μ é uma matriz e Φ_μ é um conjunto de números.

Assumindo agora que a equação (A.14) obedece à equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} - \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)} \right] = 0, \quad (\text{A.15})$$

e exigindo que $\delta S = 0$ as equações (A.13) e (A.14) nos fornecem o seguinte resultado:

$$\int_\Omega \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)} \Phi_\nu - \theta_\nu^\mu X_\nu^\kappa \right] \delta\omega^\nu d\sigma_\mu = 0, \quad (\text{A.16})$$

entretanto, $\delta\omega^\nu$ é arbitrário, o que nos permite escrever:

$$\int_\Omega j_\nu^\mu d\sigma_\mu = 0, \quad (\text{A.17})$$

onde:

$$j_\nu^\mu = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)} \Phi_\nu - \theta_\nu^\mu X_\nu^\kappa. \quad (\text{A.18})$$

Pelo teorema de Gauss, temos que $\int_R \partial_\mu j_\nu^\mu d^4x = 0$, daí, como R é arbitrário, obtemos:

$$\partial_\mu j_\nu^\mu = 0. \quad (\text{A.19})$$

Portanto, temos uma corrente conservada j_ν^μ devida a invariância da ação sob as transformações (A.14). Esta corrente origina uma carga conservada Q_ν , definida como:

$$Q_\nu = \int_V j_\nu^0 d^3x,$$

onde a integração é aplicada sobre o 3-volume V .

Referências

- [1] L.M. Abreu, A.P.C. Malbouisson, J.M.C. Malbouisson, E.S. Nery, R. Rodrigues da Silva, Nuclear Physics B 881 (2014) 327-342.
- [2] E.S. Nery, Dissertação de Mestrado, Comportamento Termodinâmico Mésons Pesados, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia. 2013.
- [3] L.M. Abreu, E.S. Nery, R.R. SILVA, ArXiv: 1211.5505v2 [hep-ph](2012).
- [4] L.M. Abreu, M. Gomes, A.J. da Silva, Physics Letters B 642 (2006) 551-562.
- [5] L.M. Abreu, A.P.C. Malbouisson, J.M.C. Malbouisson, Physical Review D 84, 065036 (2011).
- [6] L. M. Abreu, A.P.C. Malbouisson, J.M.C. Malbouisson, A.E. Santana, Nuclear Physics B 819 (2009) 127-138.
- [7] J.I. Kapusta, G. Charles, Finite Temperature Field Theory Principles and Applications, Cambridge Monographs on Mathematical Physics (Cambridge University Press, Cambridge, 2006).
- [8] J.I. Kapusta, Phys. Rev. D 24 (1981).
- [9] J.W. Darewych Can. J. Phys. 76 523 (1998).
- [10] G.V. Efimov, ArXiv: 9907483 [hep-ph] (1999).
- [11] B. Ding, J.W. Darewych . Phys G: Nucl. Part. Phys 26 907.
- [12] V. Shpytko, J.W. Darewych Phys. Rev. D 64 045012.
- [13] A. Duviryak, J.W. Darewych J. Phys. A: Math. Gen.378365.
- [14] K. Barro-Bergflodt, R. Rosenfelder, M. Stingl Few-Body Syst. 39 193 (2006).
- [15] M. Emami-Razavi, M. Kowalski Phys. Rev. D 76 045006 (2007).
- [16] M. Emami-Razavi, N. Bergeron, J.W. Darewych, M. Kowalski Phys. Rev. D 80 085006 (2009).
- [17] M. Emami-Razavi, N. Bergeron, J.W. Darewych J. Phys. G. Nucl. Part. Phys. 37 025007 (2010).
- [18] M. Emami-Razavi, N. Bergeron, J.W. Darewych J. Phys. G. Nucl. Part. Phys. 38 065004 (2011).

-
- [19] A. Chigodaev, J.W. Darewych *Can. J. Phys.* 91 279; 91 764 (2013).
- [20] G.V. Efimov, G. Ganbold *Phys. Rev. D* 65 054012 (2002).
- [21] G. Ganbold *Phys. Part. Nucl.* 43 79 (2012).
- [22] E.V. Rochev *Phys. A. ath. Theor.* 46 185401 (2013).
- [23] J.O. Andersen, ArXiv: 1205.6978v1 [hep-ph] (2012).
- [24] N.A. Lemos, *Mecânica Analítica*, (Editora Livraria da Física, Rio de Janeiro, 2007).
- [25] H. Goldstein, C. Poole, J. Safko, *Classical Mechanics* 3.ed.(Addison Wesley, San Francisco, 2000).
- [26] M. Maggiore, *A Modern Introduction to Quantum Field Theory*, (Oxford University Press, Oxford, 2005).
- [27] L.H. Ryder, *Quantum Field Theory* 2.ed., University of Kent at Canterbury (Cambridge University Press, Cambridge, 1996).
- [28] D. McMahon, *Quantum Field Theory Demystified*, (The McGraw-Hill Companies, Inc, New York, 2008)
- [29] M.E. Peskin, D.V. Schroeder, *An Introduction To Quantum Field Theory*, (Perseus Books Publishing L.L.C., Reading, Massachusetts, 1995).
- [30] D. Griffiths, *Introduction To Elementary Particles* (John Wiley Sons, inc., New York, 1987).
- [31] M. Kaku, *Quantum Field Theory, A Modern Introduction*, (Oxford University Press, Oxford, 1993).
- [32] D. Tong, *Quantum Field Theory*, University of Cambridge (Disponível em: <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/qft.html>).
- [33] A. Das, *Field Theory A Path Integral Approach*, University of Rochester, USA (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 2008).
- [34] R. Aldrovandi, J.G. Pereira, *Notes for a Course on Classic Fields*, (Instituto de Física Teórica, Universidade Estadual Paulista, São Paulo, 2008).
- [35] A.M.F. Endler, *Introdução à Física de Partículas* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2010).
- [36] G.V. Dunne, <http://arxiv.org/abs/0711.1178v1> [hep-th] (2007).

-
- [37] J.R. Pereira Jr, Dissertação de Mestrado, Invariância de rótulo, termos de superfície e simetria de calibre em diagramas de Feynman a um laço em eletrodinâmica quântica, Departamento de Física, Universidade Federal de Minas gerais. 2011.
- [38] W.E. Pauli, *Phys. Rev.* 58, 716-722 (1940).
- [39] T. Matsubara, *Prog. Theo. Phys.* 14, 351 (1955).
- [40] H.M. Nussenzveig, *Curso de Física Básica 2* 4.ed., (Edgard Bluncher, São Paulo, 2002).
- [41] R.S. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1997).
- [42] J.M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transition*, (Oxford University Press, Oxford, 1992).
- [43] T. Lancaster, S.J. Blundell, *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur*, (Oxford University Press, Oxford, 2014).
- [44] B. Zwiebach, *A first course in string theory* 2.ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2009).
- [45] H.F. Jones, *Groups, Representations and Physics* 2.ed., Department of Physics, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London (IOP Publishing Ltd., London 1998).
- [46] J.C. Baez, I.E. Segal, Z. Zhengfang, *Introduction To Algebraic and Constructive Quantum Field Theory* (Princeton University Press, New Jersey).
- [47] D.M. de Oliveira, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 33, n. 3, 3309 (2011)