§ A Matriz de Transferência para o OH.

Temos para o propagador (ou Função Partição)

$$\mathcal{Z} = \int \prod_i \left[dx_i \; T(x_{i+1}, x_i) \right] \qquad (10)$$

com

$$T(x_{i+1}, x_i) = \exp\left\{ -\frac{m\Delta\tau}{2\hbar} \left[\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta\tau} \right)^2 + \frac{1}{2}\omega^2 x_{i+1}^2 + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{1}{2}\omega^2 x_i^2 \right] \right\} \qquad (11)$$

$T(x_{i+1}, x_i)$ pode ser pensado como o elemento de matriz de um operador, chamado **MATRIZ de TRANSFERÊNCIA**, que estabelece a equivalência entre a formulação de Feymann e a formulação Hamiltoniana da mecânica Quântica. Seja $\hat{T}$ tal operador. Na representação de coordenadas

$$\langle x' | \hat{T} | x \rangle = T(x', x) \,. \qquad (12)$$

Evidentemente, para tempo real, $\hat{T}$ é o operador de evolução temporal da Mecânica Quântica avaliado sobre um intervalo $\Delta\tau$. Lembramos o processo que nos levou à formulação integral. A amplitude de probabilidade (ou função partição) é dada por

$$\mathcal{Z} = \int \prod_i dx_i \langle x_{i+1} | \hat{T} | x_i \rangle =$$

$$= \int\!\!\cdots\!\!\int \langle x_b|\hat{T}|x_{n-1}\rangle dx_{n-1} \langle x_{n-1}|\hat{T}|x_{n-2}\rangle dx_{n-2} \langle x_{n-2}|\cdots$$
$$\cdots dx_2 \langle x_2|\hat{T}|x_1\rangle dx_1 \langle x_1|\hat{T}|x_a\rangle \quad .$$

$$= \langle x_b|(\hat{T})^n|x_a\rangle \qquad (13)$$

Impondo condições periódicas de contorno e somando sobre todas as posições iniciais possíveis da partículas, obtemos o resultado familiar da mecânica estatística

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{x_a\}} \langle x_a|(\hat{T})^n|x_a\rangle = Tr\{\hat{T}^n\} \qquad (14)$$

Do desenvolvimento feito na seção anterior e da expressão simetrizada dada por (11), escrevemos a forma de $\hat{T}$ que resolve em princípio o nosso problema. Notamos outra vez que

$$im\frac{x_{i+1}-x_i}{\Delta\tau} \xrightarrow[\Delta\tau\to 0]{} m\dot{x} = p$$

$$m\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\Delta\tau}\right)^2 \xrightarrow[\Delta\tau\to 0]{} -\frac{p^2}{m}$$

Escrevemos então

Se encontrarmos a forma de T nosso problema está resolvido. Notar que o elemento de matriz abaixo, pode ser calculado na rep. de momentum:

$$\langle x_{i+1} | \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2\hbar m}\hat{p}^2\right) | x_i \rangle =$$

$$= \int dp \langle x_{i+1} | \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2\hbar m}\hat{p}^2\right) | p \rangle \langle p | x_i \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp \; e^{-\frac{\Delta\tau}{2\hbar m} p^2} \frac{1}{2\pi} e^{\frac{i}{\hbar} p (x_{i+1} - x_i)}$$

$$= \frac{1}{2\pi}\left(\frac{\pi}{\Delta\tau/2\hbar m}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m\Delta\tau}{2\hbar}\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\Delta\tau}\right)^2\right]$$

$$= \left(\frac{\hbar m}{2\pi\Delta\tau}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m\Delta\tau}{2\hbar}\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\Delta\tau}\right)^2\right]$$

O prefator da integração é incorporado na medida da integração.

Agora é facil ver que a matriz de Tranferência é dada por

$$(15) \quad \hat{T} = e^{-\frac{m\Delta\tau\omega^2}{4\hbar}\hat{x}^2} \; e^{-\frac{\Delta\tau}{2\hbar m}\hat{p}^2} \; e^{-\frac{m\Delta\tau\omega^2}{4\hbar}\hat{x}^2}$$

De fato, tomando elementos de matriz obtemos

$$\langle x_{i+1} | \hat{T} | x_i \rangle =$$

$$= \exp\left[-\frac{m\Delta\tau\omega^2}{4\hbar} x_{i+1}^2\right] \times \langle x_{i+1} | e^{-\frac{\Delta\tau}{2\hbar m}\hat{p}^2} | x_i \rangle \cdot$$

$$\cdot \exp\left[-\frac{m\Delta\tau\omega^2}{4\hbar} x_i^2\right] =$$

$$= \left(\frac{\hbar m}{2\pi\Delta\tau}\right)^{1/2} \cdot \exp\left\{-\frac{m\Delta\tau}{2\hbar}\left[\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\Delta\tau}\right)^2 + \frac{1}{2}\omega^2(x_{i+1}^2+x_i^2)\right]\right\}$$

que é o resultado requerido. Expandindo os operadores em ordem de $\Delta\tau$, para $\Delta\tau \to 0$, obtemos

$$\hat{T} \approx \left[1 - \Delta\tau \frac{m\omega^2}{4\hbar}\hat{x}^2 + o(\Delta\tau)\right] \cdot \left[1 - \Delta\tau \frac{\hat{p}^2}{2\hbar m} + o()\right] \cdot$$

$$\cdot \left[1 - \Delta\tau \frac{m\omega^2}{4\hbar}\hat{x}^2 + o(\Delta\tau)\right]$$

$$\approx 1 - \frac{\Delta\tau}{\hbar}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2\right) + o(\Delta\tau)$$

$$\approx \exp\left\{-\frac{\Delta\tau}{\hbar}\left[\mathcal{H} + o(\Delta\tau)\right]\right\}$$

Assim no limite

$$\lim_{\Delta\tau\to 0}\left\{-\frac{\hbar}{\Delta\tau}\ln\hat{T}\right\} = \hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

A equação de Schrödinger segue da relação:

$$\langle x',t'|\psi\rangle = \psi(x',t') = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x',t'|x,t\rangle\langle x,t|\psi\rangle\,dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{Z}(x',t',x,t)\,\psi(x,t)\,dx$$

escolhendo um tempo infinitesimal $t'=t+\Delta t = t+i\Delta\tau$

$$\mathcal{Z}(x',t',x,t) = \langle x'|\hat{T}|x\rangle \simeq \langle x'|\exp\left(-\frac{\Delta\tau}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}\right)|x\rangle$$

$$\simeq \langle x'|\left(1-\frac{\Delta\tau}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}\right)|x\rangle$$

$$= \delta(x-x') - \frac{\Delta\tau}{\hbar}\mathcal{H}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\langle x'|x\rangle$$

$$= \delta(x-x') - \frac{\Delta\tau}{\hbar}\mathcal{H}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\delta(x-x')$$

e assim

$$\psi(x',t') = \psi(x',t) - \frac{\Delta\tau}{\hbar}\mathcal{H}\left(x',-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi(x',t)$$

$$-\hbar\,\frac{\psi(x',t+\Delta t)-\psi(x',t)}{\Delta\tau} = \hat{\mathcal{H}}\,\psi(x',t)$$

tomando limite $\Delta\tau \to 0$

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial\tau} \psi(x',t) = \hat{\mathcal{H}} \psi(x',t),$$

que passando para tempo real $t = \frac{\tau}{i}$,

fornece a equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x',t) = \hat{\mathcal{H}} \psi(x',t)$$

§ De um modelo de rede para uma Teoria de Campo.

Definimos uma variável $\phi(\vec{x})$, que toma valores reais de $-\infty$ a $+\infty$ em sítios de uma rede. Neste caso $\vec{x}$ percorre os sítios da rede. Seja $\vec{b}$ um vetor que liga com primeiros vizinhos:

$$|\vec{b}| \equiv b$$

é a constante da rede. Inspirados no modelo de Ising, propomos o seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} I \sum_{\vec{x},\vec{b}} \left[\phi(\vec{x}) - \phi(\vec{x}+\vec{b})\right]^2 + \lambda \sum_{\vec{x}} \left[\phi^2(\vec{x}) - \phi_0^2\right]^2 . \quad (1)$$

O acoplamento é dado através do termo:

$$-I\,\phi(\vec{x})\,\phi(\vec{x}+\vec{b}),$$ entre primeiros vizinhos.

No limite $\lambda \to \infty$, o estado fundamental satisfaz

$$\phi^2(\vec{x}) = \phi_0^2 \quad \forall \vec{x} \quad \Rightarrow \quad \phi(\vec{x}) = \pm \phi_0 ,$$

mas a solução uniforme fornece a menor energia, considerando os outros termos do Hamiltoniano.

Para os estados fracamente excitados $\phi(\vec{x})$ varia lentamente no espaco.

Tomando o limite $b \to 0$ (limite contínuo), iremos a obter uma teoria de campo. Escrevemos perto do limite:

$$\phi(\vec{x}+\vec{b}) - \phi(\vec{x}) = \vec{b} \cdot \nabla \phi(\vec{x})$$

$$\Rightarrow \quad \left[\phi(\vec{x}) - \phi(\vec{x}+\vec{b})\right]^2 = \left[\vec{b} \cdot \nabla \phi(\vec{x})\right]^2$$

Para uma estrutura hipercúbica simples:

$$\vec{b}_i \cdot \nabla \phi(\vec{x}) = b \frac{\partial}{\partial x_i} \phi(\vec{x})$$

$$\Rightarrow \quad \sum_{\vec{b}} (\vec{b} \cdot \nabla \phi)^2 = b^2 \sum_i \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i}\right)^2 = b^2 (\nabla \phi)^2,$$

logo:

$$\frac{I}{2} \sum_{\vec{x},\vec{b}} \left[\phi(\vec{x}) - \phi(\vec{x}+\vec{b})\right]^2 \simeq \sum_{\vec{x}} \frac{I}{2} b^{2-d} (\nabla \phi)^2 b^d$$

no limite:

$$\sum_{\vec{x}} b^d \longrightarrow \int d^{(d)}_{(x)} \quad ,$$

portanto

$$\frac{I}{2} \sum_{\vec{x},\vec{b}} \left[\phi(\vec{x}) - \phi(\vec{x}+\vec{b})\right]^2 \longrightarrow \int d^d_{(x)} \frac{1}{2} C (\nabla \phi)^2,$$

onde o coeficiente é

$$C = I\, b^{2-d}$$, considerado finito no limite $b \to 0$. Procedemos da mesma maneira para o termo em λ:

$$\lambda \sum_{\vec{x}} \left[\phi^2(\vec{x}) - \phi_0^2\right]^2 = \lambda \sum_{\vec{x}} b^d \left[\phi^4(\vec{x}) - 2\phi_0^2 \phi^2(\vec{x})\right] b^{-d} +$$

$$+ \text{conte}.$$

no limite

$$\xrightarrow[b \to 0]{} \int d^d(x) \left[\frac{1}{2} a\, \phi^2(\vec{x}) + \frac{1}{2}\mu_0\, \phi^4(\vec{x})\right] + \text{cte}.$$

com coeficientes:

$$a = -4\lambda \phi_0^2 b^{-d}, \quad \mu_0 = 2\lambda b^{-d},$$

ambos finitos no limite $b \to 0$. O Hamiltoniano do sistema no limite contínuo fica:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int d^d(x) \left[c(\nabla\phi)^2 + a\,\phi^2(\vec{x}) + \mu_0\, \phi^4(x)\right]$$

$$= \int d^d(x)\; \mathcal{H}(\phi, \nabla\phi) \qquad (2)$$

onde $\mathcal{H}$ é uma densidade Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} c (\nabla \phi)^2 + \mathcal{V}(\phi) \, , \qquad (3)$$

com o potencial $\mathcal{V}(\phi) = \frac{1}{2} a \phi^2 + \frac{1}{2} \mu_0 \phi^4$.
Para termos estabilidade, $\mu_0 > 0$. Nesse caso procuramos os mínimos do potencial:

$$\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \phi} = 0 = (a + 2\mu_0 \phi^2) \phi$$

i) Seja o coeficiente $a > 0$. Nesse caso só temos um mínimo em $\phi_0 \equiv 0$;

ii) $a < 0$, temos dois mínimos em:

$$\pm \phi_0 = \pm \left(- \frac{a}{2\mu_0} \right)^{1/2}$$

e um máximo local em $\phi_0 = 0$.

ϕ pode ser pensado como 'parâmetro de ordem'.

i) para $a > 0$ não existe ordem de longo alcance;

$$\phi_0 = 0 \quad (\text{vácuo 'normal'})$$

ii) para $a < 0$, temos ordem de longo alcance com $\phi_0 \neq 0$, e o estado fundamental é duplamente degenerado, com

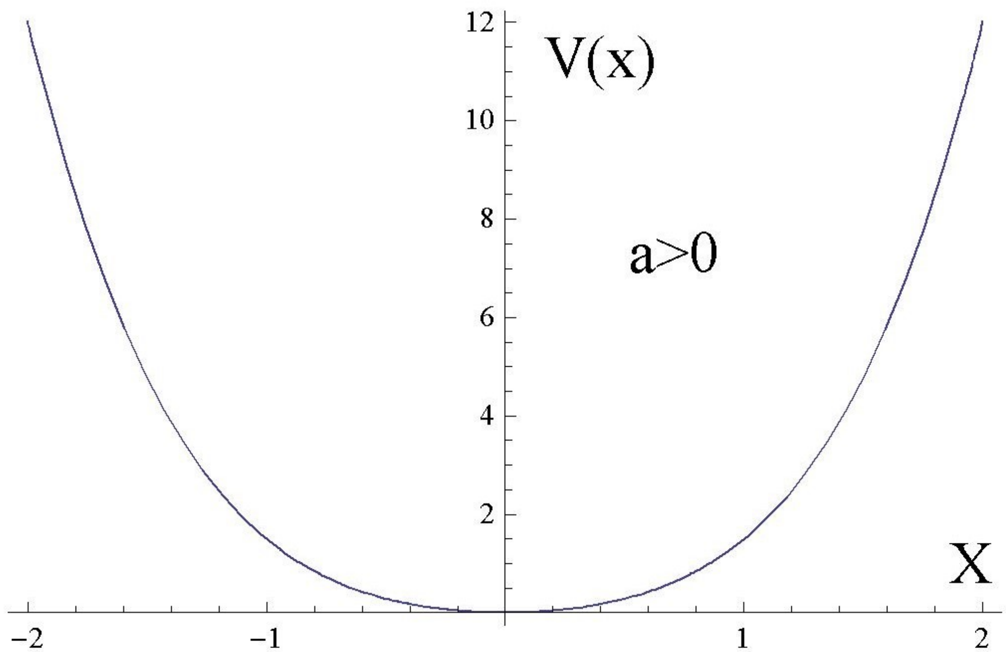
$$\phi_0 = \pm \left(\frac{-a}{2\mu_0} \right)^{1/2}$$

```
* (Potencial de simetria quebrada) *
```

In[1]:= $V[a\_, x\_] = \frac{1}{2} a x^2 + \frac{1}{2} x^4$

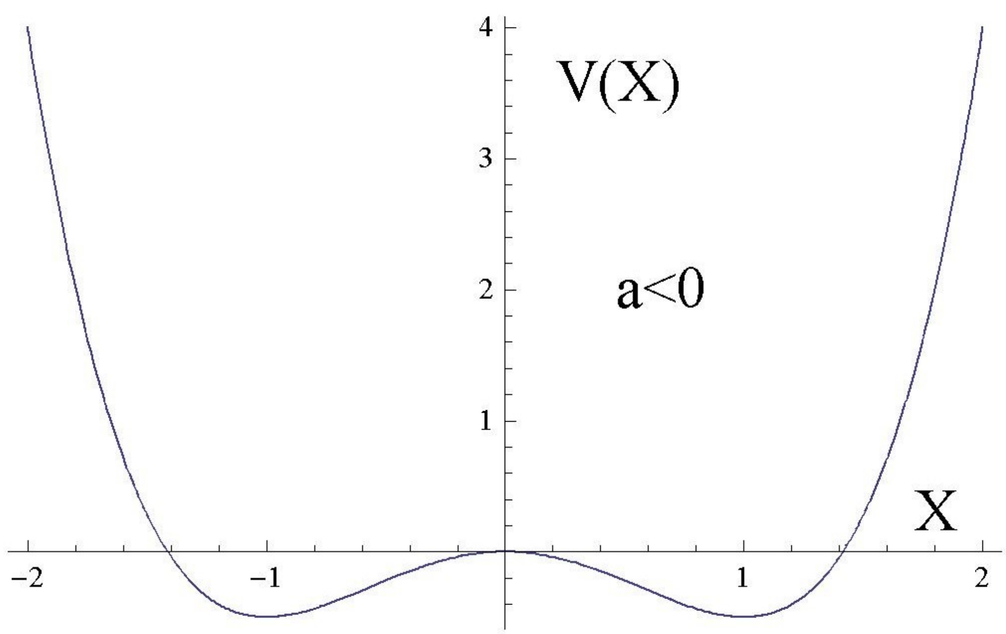
Out[1]= $\frac{a x^2}{2} + \frac{x^4}{2}$

In[6]:= `Plot[V[2., x], {x, -2, 2}]`



In[5]:=

`Plot[V[-2., x], {x, -2, 2}]`



$$\phi_0 = \pm \left(\frac{-a}{2\mu_0}\right)^{1/2}$$ representa um 'vácuo com simetria quebrada'.

Note que a densidade Hamiltoniana definida em (2) e (3) possui a simetria

$$\phi \to -\phi .$$

Essa simetria é mantida pelo 'vácuo', quando $a > 0$ e $\phi_0 \equiv 0$, mas é quebrada para $a < 0$, quando o sistema escolhe um ou outro dos possíveis vácuos, com $\phi_0 = \pm \left(\frac{-a}{2\mu_0}\right)^{1/2}$. Nesse caso, o 'vácuo' tem simetria menor que o Hamiltoniano.

Colocar Dinâmica no Modelo:

Renormalizamos as constantes do modelo, de tal maneira que

$$C \equiv 1 .$$

Escrevemos:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2}a\,\phi^2 + \frac{1}{2}\mu_0\,\phi^4 \qquad (4)$$

Podemos introduzir dinâmica através de uma Densidade Lagrangiana, do tipo:

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2}(\partial_t\phi)^2 - \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 - \frac{1}{2}a\phi^2 - \frac{1}{2}\mu_0\phi^4, \quad (5)$$

com $\partial_t\phi = \frac{\partial}{\partial t}\phi = \dot{\phi}$. A densidade $\mathcal{L}_0$ fornece

$$\pi \equiv \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\phi}} = \dot{\phi},$$

com:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \pi\dot{\phi} - \mathcal{L}_0$$

$$= \frac{1}{2}(\partial_t\phi)^2 + \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2}a\phi^2 + \frac{1}{2}\mu_0\phi^4,$$

que para $\dot{\phi} = 0$, se reduz a (4). A eq. de Euler-Lagrange de (5) é:

$$0 = \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \phi} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\phi}} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \nabla\phi} =$$

$$= -a\phi - 2\mu_0\phi^3 - \ddot{\phi} + \nabla^2\phi$$

trocando sinal obtemos:

$$(\partial_t^2 - \nabla^2)\phi + a\phi = -2\mu_0\phi^3.$$

Usando o símbolo de D'Alembertiano

$$\Box \equiv \partial_t^2 - \nabla^2,$$

escrevemos:

$$(\Box + a)\phi = -2\mu_0 \phi^3 \,, \qquad (6)$$

que tem a forma de uma eq. de Klein-Gordon com fontes, com o parâmetro 'a' associado à massa:

$$a \longrightarrow m^2. \qquad (7)$$

Temos então que:

a) Se $a = m^2 > 0$, temos apenas um mínimo na configuração usual do vácuo com:

$$\langle 0|\phi|0\rangle = \phi_0 = 0 \,,$$

com o potencial $V(\phi)$ simétrico por $\phi \to -\phi$;

b) Se for $a = m^2 < 0$ (solução taquiônica), com

$$\langle 0|\phi|0\rangle = \phi_0 = \pm\left(-\frac{m^2}{2\mu_0}\right)^{1/2} \neq 0.$$

Normalmente, requeremos que o valor esperado do campo escalar no vácuo seja nulo.

<u>Idéia</u>: expandir o potencial em torno do novo vácuo.

Seja $\qquad \varphi \equiv \phi - \phi_0 \Leftrightarrow \phi = \varphi + \phi_0$

$$\phi^2 \longrightarrow (\varphi+\phi_0)^2 = \varphi^2 + 2\phi_0\varphi + \cancel{\phi_0^2}$$

$$\phi^4 \longrightarrow (\varphi+\phi_0)^2 = \varphi^4 + 4\phi_0\varphi^3 + 6\phi_0^2\varphi^2 + 4\phi_0^3\varphi + \cancel{\phi_0^4}$$

Vamos encontrar o termo quadrático em φ (associado à massa^2):

$$\varphi^2\left(\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}\mu_0 \cdot 6\phi_0^2\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\varphi^2\left(\cancel{\frac{1}{2}}a + \cancel{\frac{1}{2}}\cancel{\mu_0}\cdot 6\,\frac{\overbrace{(-m^2)}^{a}}{2\cancel{\mu_0}}\right) = \frac{1}{2}\varphi^2(a-3a)$$

$$= \frac{1}{2}\varphi^2(-2a)$$

e o termo linear é nulo, mas

e o potencial fica

$$\mathcal{V}(\phi) \longrightarrow V(\varphi) = \frac{1}{2}(-2a)\varphi^2 + \varphi^3\left(\frac{4}{2}\mu_0\phi_0\right) +$$

$$+ \frac{1}{2}\mu_0\varphi^{\cancel{2}4} + \text{cte}.,$$

que para o campo φ descreve uma partícula escalar 'ordinária' de massa $M^2 = -2a > 0$. Mas note que a simetria original, $\phi \to -\phi$, agora foi 'espontaneamente quebrada', $\phi_0 \neq 0$, porque o campo foi deslocado e temos um nova vácuo.

§ TRANSIÇÕES de FASE (uma teoria de campos?)

A grandeza $\phi(\bar{x})$ é o parâmetro de ordem, e a sua dependência nas coordenadas leva em conta o fato que é uma grandeza flutuante. Deve-se lembrar também que o parâmetro de ordem é uma grandeza macroscópica

§ Teoria de Landau

O postulado básico da teoria proposta por Landau para as transições de fase é que o potencial termodinâmico F (energia livre) pode ser desenvolvido em série de potências do parâmetro de ordem ϕ, perto de uma transição de fase de 2ª ordem

Se quisermos levar em conta flutuações o parâmetro de ordem será função das coordenadas $\phi = \phi(\vec{x})$ e a energia livre dependerá também do gradiente $\nabla\phi$. Escrevemos

$$F = F_0 + \frac{1}{2}\int d^d(x)\left\{c(\nabla\phi)^2 + a\,\phi^2(\vec{x}) + \frac{1}{2}b\phi^4(\vec{x}) - 2h(\vec{x})\phi(\vec{x})\right\} \tag{5}$$

onde temos adicionado um termo devido à presença de um campo externo $h(\vec{x})$. A diferença com o Hamiltoniano do modelo de Ising contínuo é que os coeficientes da densidade lagrangeana aqui são dependentes da temperatura. Landau postulou que

$$a = \alpha\,\frac{T - T_c}{T_c}\quad,\ \alpha > 0\quad, \tag{6}$$

isto é, que $\underline{a}$ anula-se e troca de sinal no ponto crítico T_c. Todos os outros coeficientes são não nulos em T_c ($b>0$). Minimizamos à "ação" dada por (5)

$$F = F_0 + \int d^d(x)\,\mathcal{L}(\phi, \nabla\phi, \vec{x}) \tag{7}$$

A equação de Euler-Lagrange é

$$[\mathcal{L}]_\phi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{D}{Dx_i}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla_i \phi}\right) = 0 \qquad (8)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla_i \phi} = c\,\nabla_i \phi = c\,\partial_i \phi$$

Logo

$$\frac{D}{Dx_i}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla_i \phi}\right) = \frac{\partial}{\partial \nabla_j \phi}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla_i \phi}\right) \partial_j \partial_i \phi$$

$$= c\,\delta_{ij}\,\partial_j \partial_i \phi = c\,\partial_i^2 \phi = c\,\nabla^2 \phi$$

e finalmente

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = a\phi + b\phi^3 - h(\vec{x}) ,$$

e a equação do movimento é

$$\boxed{c\nabla^2\phi = a\phi + b\phi^3 - h(\vec{x})} \qquad (9)$$

Como aproximação de ordem <u>zero</u> procuramos uma solução uniforme , $\nabla^2\phi \equiv 0$, $h(\vec{x}) = h_0$

$$0 = \phi(a + b\phi^2) - h_0$$

A) Para campo nulo $h_0 \equiv 0$ obtemos

$$\phi(a + b\phi^2) = 0 \qquad (10)$$

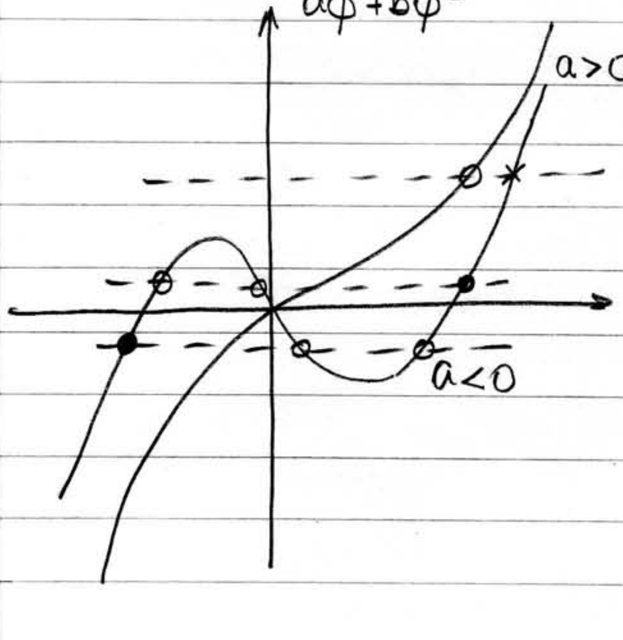
A_1) Se $T > T_c \Rightarrow a > 0 \Rightarrow \phi \equiv 0$

A_2) Se for $T < T_c \Rightarrow a < 0$

$$\phi = \pm \phi_0 = \pm \left(-\frac{a}{b}\right)^{1/2} = \pm \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^{1/2} \left(\frac{\alpha}{b}\right)^{1/2},$$

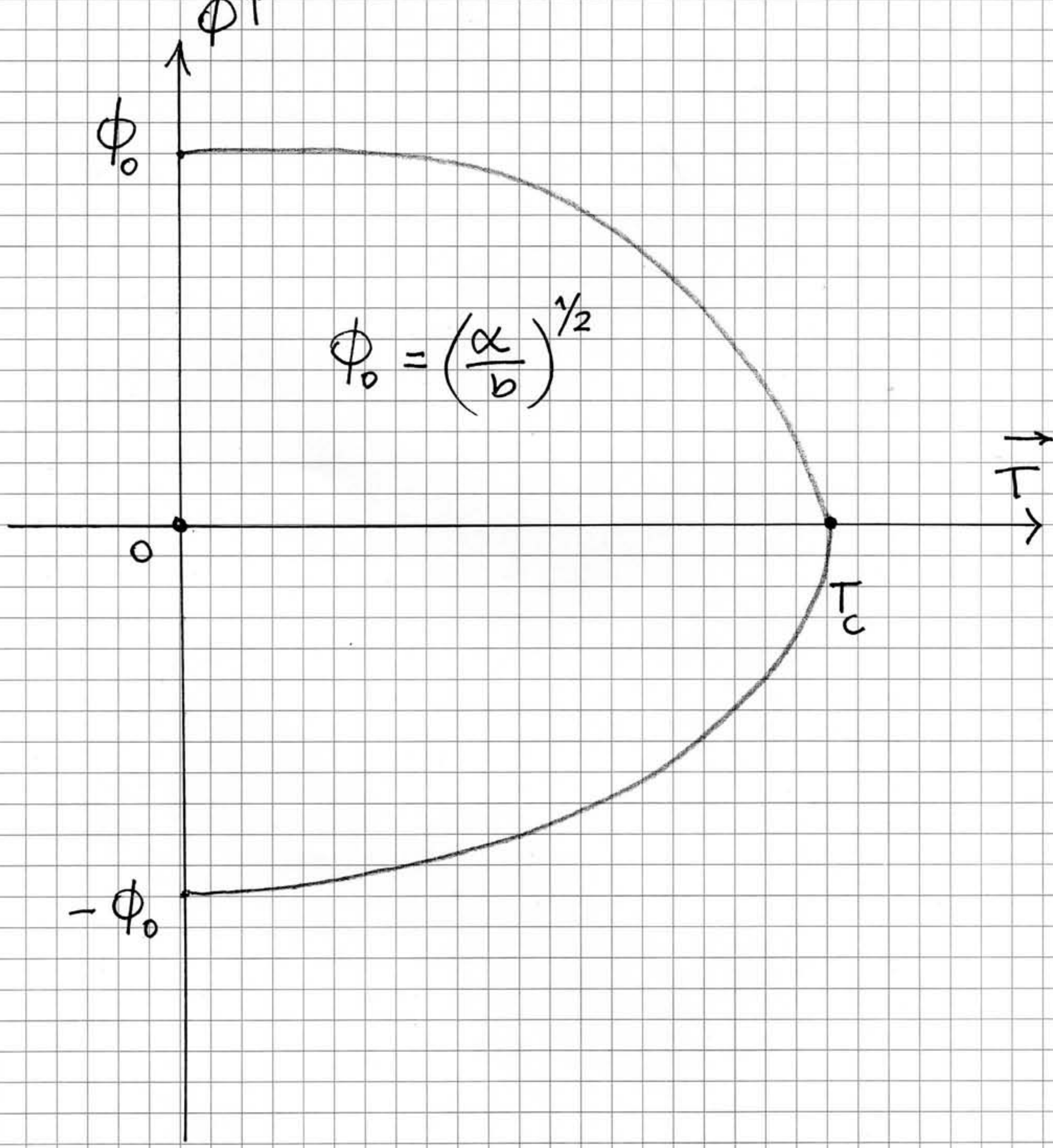
mostrando que a teoria de Landau fornece o expoente crítico $\beta = \frac{1}{2}$.

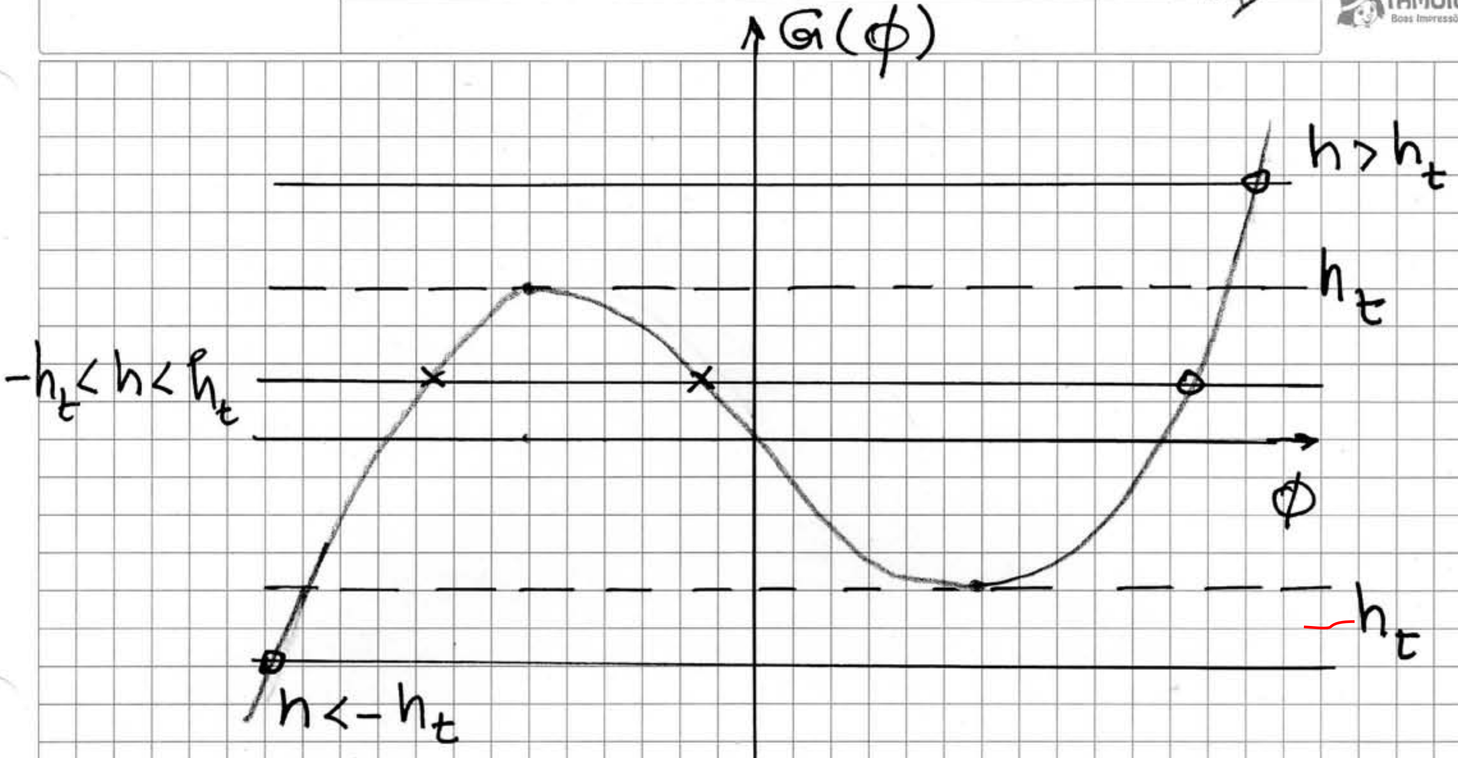
B) Para campo não nulo temos a equação



$$a\phi_0 + b\phi_0^3 = h_0 = G(\phi_0)$$

Para $T < T_c$ ou $a < 0$, temos uma região do campo com três soluções reais para ϕ. O mínimo da energia livre corresponde ao valor de ϕ com módulo maior. A transição vira uma transição de 1ª ordem com uma discontinuidade do parâmetro de ordem.


ϕ
ϕ_0
$\phi_0 = \left(\frac{\alpha}{b}\right)^{1/2}$
T
0
T_c
$-\phi_0$



A transição é
discontínua