



O MÉTODO SEMICLÁSSICO E SUAS APLICAÇÕES EM TEORIA QUÂNTICA DE CAMPOS

André Bessa Moreira

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Física, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências (Física).

Orientador: Carlos Alberto Aragão de Carvalho Filho.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil
novembro de 2007.

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

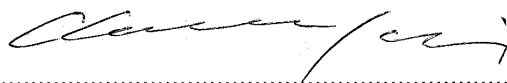
O MÉTODO SEMICLÁSSICO E SUAS APLICAÇÕES EM TEORIA QUÂNTICA DE CAMPOS

ANDRÉ BESSA MOREIRA

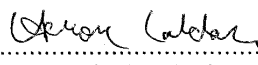
Carlos Alberto Aragão de Carvalho Filho

Tese de Doutorado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Física, da Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências (Física).

Aprovada por:



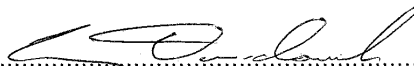
Prof. Carlos Alberto Aragão de Carvalho Filho
(Presidente e Orientador)



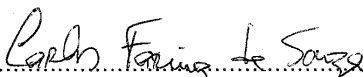
Prof. Heron Carlos de Godoy Caldas



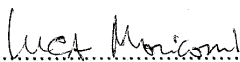
Prof. Silvio Paolo Sorella



Prof. Luiz Davidovich



Prof. Carlos Farina de Souza



Prof. Luca Roberto Augusto Moriconi

Moreira, André Bessa

M835m Método Semiclássico e suas Aplicações em Teoria Quântica de Campos / André Bessa Moreira - Rio de Janeiro: UFRJ/IF, 2007. xi, 173f.: 31cm.

Orientador: Carlos Alberto Aragão de Carvalho Filho

Tese (doutorado) - UFRJ / Instituto de Física / Programa de Pós-Graduação em Física, 2007.

Referências Bibliográficas: f. 166-173.

1. Método Semiclássico. 2. Funções de Green. 3. Interfaces. 4. Instantons. 5. Termodinâmica do campos escalares. I. de Carvalho Filho, Carlos Alberto Aragão. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Física, Programa de Pós-Graduação em Física. III. Método Semiclássico e suas Aplicações em Teoria Quântica de Campos.

RESUMO

O MÉTODO SEMICLÁSSICO E SUAS APLICAÇÕES EM TEORIA QUÂNTICA DE CAMPOS

André Bessa Moreira

Orientador: Carlos Alberto Aragão de Carvalho Filho.

Resumo da Tese de Doutorado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Física, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências (Física).

Apresentamos um método poderoso para a implementação da aproximação semiclássica em teorias quânticas de campos. Começamos com uma compilação de resultados fortes sobre a construção sistemática da série semiclássica em mecânica quântica e mecânica quântica estatística, incluindo a discussão das cústicas no caso de haver mais de uma solução clássica. Em seguida, mostramos como estender esse procedimento para uma teoria quântica de campos com simetria transversal ou radial. Aplicamos o método ao estudo de interfaces binárias, reproduzindo resultados para a tensão superficial, para o perfil da interface, e calculando pela primeira vez correlações de campos na presença de uma interface. Também mostramos como obter o propagador do instanton, calculado originalmente por meio de técnicas *ad hoc* sofisticadas. O resultado principal da tese é uma expressão analítica aproximada para a função de partição de teorias de campos escalares em contato com um banho térmico, um sistema para o qual os cálculos perturbativos produzem resultados até hoje inconsistentes.

Palavras-chave: 1. Métodos semiclássicos. 2. Funções de Green. 3. Interfaces. 4. Instantons. 5. Termodinâmica de campos escalares.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil
novembro de 2007.

RESUMO

THE SEMICLASSICAL METHOD AND ITS APPLICATIONS IN QUANTUM FIELD THEORY

André Bessa Moreira

Orientador: Carlos Alberto Aragão de Carvalho Filho.

Abstract da Tese de Doutorado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Física, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências (Física).

We present a powerful method to derive semiclassical approximations in quantum field theories. We start by developing a systematic construction of semiclassical series in quantum mechanical and quantum statistical mechanical contexts, including a treatment of caustics whenever classical solutions compete with each other. Then, we show how to extend the semiclassical construction for field theories wherein classical solutions have transverse or radial symmetries. We apply our method to the study of binary interfaces, deriving known results for the surface tension and interface profile. An original calculation of correlations around the interface is performed. We also apply our unified semiclassical approach to construct the scalar propagator around the instanton background in gauge theories, reproducing the expression previously obtained using ad-hoc methods. The main result of the thesis concerns the thermodynamics of a system of scalar fields. We use the semiclassical approximation to obtain an analytical formula for the partition function which goes beyond perturbation theory, and might be helpful in treating its inconsistencies.

Keywords: 1. Semiclassical methods. 2. Green's Functions. 3. Interfaces. 4. Instantons. 5. Thermodynamics of scalar fields.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil
novembro de 2007.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer àqueles que, de uma forma ou de outra, contribuíram para o sucesso desta tese: família, amigos, professores, estudantes e funcionários do Instituto de Física da UFRJ, da Universidade de Boston, nos Estados Unidos, e do SPhT/CEA de Saclay, na França. Meu muito obrigado a todos.

Esta tese é dedicada a Adailson Sampaio Moreira

(in memoriam)

Sumário

1	Introdução	1
2	A série semiclássica em mecânica estatística quântica	8
2.1	Teoria geral para potenciais do tipo poço simples	8
2.1.1	A série semiclássica em termos do propagador semiclássico . . .	8
2.1.2	O propagador semiclássico em termos da solução clássica . . .	14
2.1.3	A aproximação semiclássica quadrática	16
2.2	Aplicação: o oscilador anarmônico quártico (poço simples)	16
2.2.1	Casos limites da aproximação quadrática	18
2.2.2	A energia do estado fundamental e o calor específico	20
2.3	Correções à aproximação quadrática	21
2.4	Potenciais com mais de um mínimo	23
2.4.1	Aproximação semiclássica aprimorada	25
2.4.2	Tratamento alternativo das cáusticas	27
2.5	Aplicação: o oscilador anarmônico quártico (poço duplo)	29
2.6	Extensão para dimensões maiores	31
2.6.1	O propagador semiclássico	33
2.6.2	Potenciais centrais	35
2.7	Aplicações	36
2.7.1	O oscilador harmônico d -dimensional	36
2.7.2	Oscilador anarmônico quártico d -dimensional (poço simples) .	37

3	Teoria de campos com simetria transversal: correlações em interfaces	39
3.1	Propriedades fundamentais de uma interface	41
3.2	O modelo de teoria de campos	42
3.3	A aproximação semiclássica quadrática	43
3.3.1	O propagador em torno da interface	46
3.4	A física do modo nulo: ondas capilares	48
3.5	Coordenadas coletivas	51
3.6	Correções à aproximação quadrática	53
3.7	A tensão superficial	54
3.8	O perfil da interface	56
3.9	Correlações na interface	59
3.10	Conclusão	64
4	Teoria de campos com simetria radial: o propagador na presença do instanton	66
4.1	Decomposição em ondas parciais	67
4.2	Propagador escalar na presença do instanton	71
4.2.1	Harmônicos esféricos adaptados a $o(4) = su(2) \oplus su(2)$	74
4.2.2	Construção do propagador	76
4.3	Outros propagadores de instanton	78
4.4	Conclusão	79
5	Termodinâmica semiclássica de campos escalares	80
5.1	Integral sobre flutuações em torno de uma configuração clássica	82
5.2	Expansão em flutuações da fronteira	88
5.2.1	Discussão preliminar	88
5.2.2	Correção para ϕ_c devido a flutuações na condição de contorno	90
5.2.3	Propagador no campo de fundo ϕ_0	91
5.2.4	Cálculo do determinante funcional	93

5.3	Integração sobre flutuações da condição de contorno	95
5.3.1	Expansão da ação clássica	95
5.3.2	Cálculo de $C(\mathbf{k})$	98
5.3.3	Interpretação diagramática	100
5.3.4	Fórmula final para a função de partição	101
5.4	Renormalização	102
5.5	O caso livre	106
5.6	A função de dois pontos	107
5.7	Conclusão	109
6	Conclusão	111
6.1	Nota complementar sobre a trivialidade da fórmula (5.69) no limite termodinâmico	113
A	O potencial de Morse-Rosen	114
A.1	Autofunções do operador de Schrödinger	114
A.2	Comportamento assintótico das autofunções	117
A.3	O wronskiano	118
A.4	A função de Green	119
B	Apêndice do capítulo 3	121
B.1	Bolhas de vácuo e tensão superficial	124
B.2	A função a 1-ponto e o perfil da interface	129
B.3	A função de 2-pontos e correlações na interface	130
B.4	O procedimento de renormalização	132
B.5	Teorema sobre decomposição espectral	137
C	Apêndice do capítulo 4	139
C.1	Coordenadas na esfera S^3	139
C.2	Propriedades dos harmônicos esféricos H_{lmn}	143
C.3	Detalhes do cálculo do propagador do instanton	148

D	Apêndice do capítulo 5	152
D.1	Soluções analíticas da equação de flutuações	152
D.1.1	Expressão explícita para o propagador semiclássico	156
D.2	Exemplo 1: a interação quártica massiva	157
D.2.1	Solução clássica	157
D.2.2	Equação para as flutuações	158
D.3	Exemplo 2: A interação quártica sem massa	160
D.3.1	Solução clássica	160
D.3.2	Equação para as flutuações	161
D.4	Exemplo 3: o limite de temperatura zero de Z	161
D.5	Exemplo 4: potencial de sine-Gordon	165

1

Introdução

Métodos semiclássicos¹ são usados em diversas áreas da física, seja para incorporar flutuações quânticas a descrições clássicas, seja para analisar o limite clássico de descrições quânticas[4]. Ao longo deste texto, estaremos interessados na primeira via, em uma tentativa de entender a complexidade de uma teoria quântica a partir de seu setor clássico.

A aposta em abordagens semiclássicas é baseada nas propriedades não perturbativas dessa aproximação[1]. De fato, a aproximação semiclássica em geral não corresponde a um regime de acoplamento fraco se formos capazes de resolver o setor clássico para valores arbitrários do acoplamento. Resolver o setor clássico, encontrar as soluções para as equações de movimento — normalmente não-lineares — é, entretanto, tarefa não-trivial. Admitiremos como hipótese um conhecimento prévio do setor clássico (ou de uma parte dele que permita, por meio de métodos demonstrados no capítulo 5, conhecê-lo totalmente). No caso de mecânica quântica, quando conhecemos todas as soluções clássicas, as previsões da abordagem semiclássica que as incorporam se aproximam bastante dos resultados exatos, mesmo para os primeiros níveis do espectro ou para o estado fundamental. Veremos isso no capítulo 2, no cálculo da energia do estado fundamental para o oscilador anarmônico quártico ou no bom comportamento da curva do calor específico para o mesmo sistema, em todo o domínio de temperatura. Ainda quando a aproximação semiclássica recai em um regime de acoplamento fraco, o parâmetro que a controla não é simples-

¹Não nos preocupamos nesta tese em fazer uma introdução ao método semiclássico. Deixamos essa tarefa para o leitor, pois acreditamos que haja boas referências no assunto. Por exemplo, consultar [1, 2, 3].

mente a constante de acoplamento, mas uma combinação desta com \hbar e outros parâmetros do problema, como a temperatura. A capacidade de varrermos uma região de parâmetros pequenos, grandes e intermediários no âmbito de uma mesma aproximação pode trazer informações qualitativamente diferentes daquelas oriundas de abordagens puramente perturbativas que ignoram quase sempre a parte mais relevante do espaço dos parâmetros, por lá serem inconsistentes.

Além do interesse intrínseco nas propriedades da aproximação semiclássica — erroneamente confundida com uma aproximação quadrática — esta tese propõe um método unificado de construção de uma série semiclássica, da qual a aproximação quadrática corresponde apenas ao primeiro termo não-trivial.

Historicamente, as séries semiclássicas foram introduzidas em mecânica quântica nos trabalhos pioneiros de Brillouin [5], Kramers [6] e Wentzel [7]. Eles propuseram um *ansatz* para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo. Para o problema unidimensional, a função de onda proposta tem a forma:

$$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar}, \quad (1.1)$$

levando a uma equação para $S(x)$ que pode ser resolvida iterativamente para potenciais bem comportados. Esse procedimento dá origem a uma expansão para $S(x)$ em potências de \hbar , i.e., $S(x) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n(x)\hbar^n$, com $S_{n+1}(x)$ dado recursivamente em termos de $S_n(x)$ e com $S_0(x)$ satisfazendo a equação de Hamilton-Jacobi para uma partícula com a mesma energia e potencial do problema de Schrödinger. Assim, a aproximação em ordem zero da função de onda foi associada à trajetória clássica que une um ponto arbitrário x_0 a x . Os termos da série discutida nas referências [5, 6, 7] apresentam divergências junto aos pontos de retorno da trajetória clássica, um problema que passou a ser chamado de problema da conexão. Dunham [8] contornou esse problema complexificando a coordenada x e construindo a série de

$$S(z) = \int^z p(z') dz' \quad (1.2)$$

iterativamente por pedaços no plano complexo. Assim, no caso de um potencial com apenas dois pontos de retorno, x_a e x_b , com $x_a < x_b$, seria preciso resolver a equação em três trechos: $x < x_a$, $x_a < x < x_b$ e $x > x_b$. Impondo que $\psi(z)$ seja

real, limitada e unívoca no eixo real pode-se chegar à condição de quantização:

$$\oint p(z)dz = 2\pi n\hbar \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (1.3)$$

para qualquer contorno que contenha o segmento (x_a, x_b) . A série semiclássica para $\psi(z)$ leva a uma série semiclássica para $S(z)$ e $p(z)$ que, junto com (1.3), fornecem uma expressão para os níveis de energia como uma série de potências em \hbar , generalizando a condição de Bohr-Sommerfeld. Essa série foi usada como ponto de partida para os trabalhos de Bender, Olaussen e Wang [9] e Balian, Parisi e Voros [10, 11], que aprimoraram essas representações assintóticas para obter estimativas altamente acuradas dos níveis de energia do oscilador anarmônico quártico. Essas estimativas podem ser comparadas com as que Bender e Wu [12, 13, 14] obtiveram com o comportamento da teoria de perturbação em altas ordens [15, 16, 17, 3].

Também foi introduzida a série semiclássica para funções de Green, nos trabalhos de Balian e Bloch [18]. Definindo o operador resolvente \hat{G} para uma energia complexa² z , por meio de:

$$(\hat{H} - z)\hat{G} = \hat{1} \quad (1.4)$$

(sendo \hat{H} o hamiltoniano do sistema), foi usado um *ansatz* da forma:

$$G(x, x'; z) = A(x, x') e^{S(x, x'; z)/\hbar}. \quad (1.5)$$

Sob hipóteses análogas às discutidas no primeiro parágrafo, obtêm-se as contribuições em ordem zero: $S_0(x, x'; z)$ e $A_0(x, x')$. Como antes, S_0 satisfaz a equação de Hamilton-Jacobi, agora com energia complexa z , cuja solução é uma trajetória clássica saindo de x até x' . A amplitude $A_0(x, x')$ é relacionada a derivadas da ação clássica S_0 . Como antes, as contribuições em ordem zero podem ser usadas para gerar toda a série semiclássica por iteração.

Em toda essa discussão, o primeiro termo da série semiclássica foi obtido a partir de quantidades relacionadas à trajetória clássica. A representação de integrais de trajetória para amplitudes e funções de correlação [19, 20, 21, 22, 23] se apresenta naturalmente como a mais adequada para trabalhar com esse tipo de expansão. De fato, em uma solução aproximada usando o método da fase estacionária para resolver

²Novamente uma continuação analítica para energias complexas é necessária para contornar problemas com singularidades (pontos de retorno em dimensão 1 e cáusticas em dimensões maiores).

a integral de trajetória temos, como primeira contribuição, aquela correspondente aos caminhos clássicos, os pontos de sela da ação. Assim,

$$\langle x | e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t')} | x' \rangle = \int_{x(t')=x'}^{x(t)=x} [Dx] e^{iS[x]/\hbar}, \quad (1.6)$$

pode ser usada para se obter (1.5). A contribuição do ponto de sela e flutuações em torno dele reproduzem as quantidades S_0 e A_0 mencionadas acima.

Métodos de quantização semiclássica usando integrais de caminho tiveram sucesso e foram expandidos para domínios além da mecânica quântica (ver, por exemplo, os trabalhos de Gutzwiller [24] e a extensão à teoria de campos proposta por Dashen, Hasslacher e Neveu [25, 26, 27, 1]). Entretanto, quase todas as abordagens se resumiam ao primeiro termo da série semiclássica. Exceções notáveis são os trabalhos de DeWitt-Morette [28] para potenciais arbitrários em mecânica quântica, e de Mizrahi[29] e Roncadelli[30] para o oscilador anarmônico com poço simples em mecânica quântica. Mesmo assim, essas contribuições à literatura de física matemática não receberam a devida atenção a despeito de suas possibilidades de aplicação.

Métodos semiclássicos em teorias de campos a temperatura finita [31, 32, 33] também ficaram restritos à dedução do primeiro termo da série[34], mesmo quando o problema se reduzia a um problema de mecânica estatística quântica [35, 36], vista como uma teoria de campos a dimensão espacial zero. Essa lacuna nas aplicações dos métodos semiclássicos foi a motivação para a sequência de trabalhos que compõem esta tese.

O capítulo 2 contempla três trabalhos no contexto de mecânica estatística quântica e tem por base 4 artigos: [37], [38], [39] e [40]. Em sua primeira parte, nos detemos em sistemas unidimensionais na presença de um potencial do tipo poço simples. Mostramos que, para esses sistemas, existe um procedimento sistemático para gerar cada termo da série semiclássica para a função de partição na formulação de integrais de caminho a partir do conhecimento da trajetória clássica, que é única. O ingrediente fundamental dessa construção é um propagador semiclássico, obtido utilizando-se técnicas elementares do cálculo de uma variável.

Potenciais com um perfil diferente de um poço simples precisam de um tratamento especial. De fato, quando, ao mudarmos os parâmetros da teoria (como a tempe-

ratura), surge ou desaparece uma solução clássica, devemos considerar o problema da interpolação da série semiclássica nos diferentes regimes, algo que lembra o problema da conexão próximo a um ponto de retorno. Embora já existam tratamentos conhecidos para esse problema, apresentamos na segunda parte do capítulo 2 uma forma simples de tratá-lo, inspirada na teoria das catástrofes.

Para finalizar o capítulo, voltamos ao caso de um poço simples, porém considerando o caso multidimensional. Como no caso unidimensional, será possível escrever a série semiclássica em termos de um propagador completamente determinado pelo setor clássico. Entretanto, exceto em casos particulares — como aqueles envolvendo potenciais centrais, é preciso conhecer toda uma família de soluções clássicas para construir esse propagador.

Todos esses resultados do capítulo 2 correspondem a desenvolvimentos anteriores ao meu período de doutorado. O passo seguinte — a extensão dos resultados a teorias de campos, foi o desafio desta tese.

Após uma etapa de modelagem de um sistema físico, os desenvolvimentos teóricos nos conduzem recorrentemente a um problema matemático equivalente a uma equação diferencial. Os grandes avanços que a física experimentou nos últimos séculos decorrem, em parte, de nossa crescente capacidade de lidar com esses objetos matemáticos, seja pelo estudo analítico de suas propriedades, seja por meio de cálculos numéricos. Nesse ponto reside a primeira grande dificuldade imposta à nossa proposta de extensão: as equações que surgem nas teorias quânticas de campos são equações diferenciais parciais. Tal classe de equações não tem as propriedades das equações diferenciais ordinárias — próprias da mecânica quântica — que são essenciais para a determinação da série semiclássica a partir de seu setor clássico. Isso significa que não há uma extensão geral do que foi feito no capítulo 2 para teorias quânticas de campos. Por outro lado, nada impede que haja classes de teorias de campos para as quais a abordagem no formalismo de integrais funcionais nos moldes da mecânica quântica seja útil na construção de uma aproximação semiclássica sistemática. Os três capítulos que sucedem o capítulo 2 – disponíveis na literatura em três artigos independentes –, demonstram o êxito dessa construção em três classes particulares de teorias de campos. Felizmente, essas classes incluem alguns dos potenciais mais relevantes para a física, o que permitiu que ilustrássemos nossos desenvolvimentos com as respectivas aplicações. Podemos dizer que tais desenvolvimentos possuem uma linha de identidade com os trabalhos iniciais, completando-os, e justificam a

presente compilação de trabalhos na forma de uma tese.

O capítulo 3 apresenta a aproximação semiclássica para teorias de campos escalares com potenciais em sistemas com simetria transversal. Esse é o caso dos modelos que estudam a interface de separação entre duas fases de uma mistura binária. Em particular, a solução clássica será função de apenas uma direção e, conseqüentemente, as equações se simplificam. Utilizando os métodos do capítulo 2, obteremos uma expressão simples para o propagador semiclássico e, com ela, obteremos a tensão superficial, o perfil e correlações na interface em um cálculo que vai além da aproximação quadrática habitual. O procedimento utilizado reforça a possibilidade de se escrever, ordem a ordem, as correções na aproximação semiclássica em termos do propagador. Detalhes do cálculo dos diagramas de Feynmann correspondentes às primeiras correções, bem como a renormalização da teoria, são apresentados no apêndice B. Paralelamente à ênfase na construção semiclássica, e fazendo uso de sua simplicidade, aproveitamos para discutir mais demoradamente alguns aspectos da fenomenologia das interfaces.

O capítulo 4 trata da expansão semiclássica em torno de soluções clássicas com simetria radial. Tal como no caso da simetria transversal, temos um problema essencialmente unidimensional. Portanto, podemos construir explicitamente o propagador das flutuações quadráticas usando uma expansão em ondas parciais e as técnicas usuais do cálculo de uma variável para a direção radial. Como exemplo, o método simples que propomos permite uma construção alternativa para o propagador (sem massa) em torno do instanton, que deve ser comparado às construções anteriores encontradas na literatura, fruto de elaborados argumentos matemáticos decorrentes da natureza particular do instanton. Além de ser geral, nossa abordagem é colocada em um contexto que permite a utilização desse propagador para o cálculo sistemático de quantidades em uma aproximação semiclássica no formalismo de integrais funcionais. Na demonstração da fórmula para o propagador foi necessário o uso de uma base conveniente de autofunções para o espaço das funções integráveis sobre a esfera S^3 . Não encontramos uma tal base na literatura e, por isso, foi preciso construí-la explicitamente. Essas funções e algumas de suas propriedades são discutidas no apêndice C. Esse apêndice contém também detalhes das passagens algébricas do capítulo 4.

O capítulo 5 apresenta, pela primeira vez, uma aproximação semiclássica para as quantidades termodinâmicas de uma teoria quântica de campos. Por simplicidade,

nos concentramos no caso de campos escalares. Aqui, temos o problema técnico associado às peculiares condições de contorno no tempo imaginário que varia no intervalo compacto $[-\beta/2, \beta/2]$, sendo β o inverso da temperatura. Pelo fato de o domínio ser compacto, haverá infinitas configurações de mínimo com ação finita. Mostramos em um belo desenvolvimento matemático como chegar a uma expressão simples, renormalizada, para a função de partição e a função de dois pontos em uma aproximação semiclássica. Mais uma vez, o ingrediente básico dessa construção é um propagador semiclássico determinado por um par de soluções linearmente independentes de uma equação diferencial ordinária. No apêndice D, apresentamos um método para expressar de modo muito conveniente e sugestivo as soluções dessa equação diferencial ordinária. A obtenção de tais soluções se resume, para os casos relevantes, ao cálculo de uma integral que deve ser feito numericamente. Alguns detalhes técnicos úteis a esse capítulo também estão presentes no apêndice D.

Observe que os capítulos 3, 4 e 5, são baseados nos artigos: [41], [42] e [43]. Por esse motivo, são apresentados de maneira auto-consistente, com introduções, motivações e conclusões³ próprias.

O capítulo 6 traz alguns comentários finais e algumas propostas de temas em conexão com a tese a serem investigados.

Finalmente, o apêndice A traz uma discussão do chamado potencial de Morse-Rosen que será utilizado em diferentes momentos do texto.

³Infelizmente, a notação também muda bastante de um capítulo para o outro.

2

A série semiclássica em mecânica estatística quântica

Neste capítulo faremos uma breve discussão do método semiclássico no contexto de mecânica estatística quântica. Os desenvolvimentos aqui apresentados têm por base as referências: [37] (seções 2.1-2.3), [38] e [39] (seções 2.4 e 2.5) e [40] (seção 2.6 e 2.7).

2.1 Teoria geral para potenciais do tipo poço simples

2.1.1 A série semiclássica em termos do propagador semiclássico

Utilizaremos, sem demonstrar, a expressão em termos de integrais de caminho para a função de partição¹ de um sistema unidimensional que consiste de uma partícula de massa m na presença de um potencial $V(x)$ em equilíbrio com um banho térmico a temperatura $T = 1/\beta$ no formalismo da mecânica quântica. Ou seja, partiremos de

$$Z(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_{x(0)=x_0}^{x(\beta\hbar)=x_0} [\mathcal{D}x] e^{-S[x]/\hbar}, \quad (2.1)$$

¹Para deduções dessa expressão, ver as referências [19, 20, 23].

onde

$$S[x] = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x(t)) \right]. \quad (2.2)$$

A expressão (2.1) não contém aproximações e, em resolvendo a integral que a define, obtemos exatamente as propriedades termodinâmicas do sistema em questão. Entretanto, não é possível resolver essa integral, em geral, sem recorrer a algum tipo de aproximação. Na verdade, ao propor um esquema sistemático de aproximação, como uma série perturbativa, estamos quase sempre dando um significado à expressão (2.1). Uma classe de abordagens propõe uma expansão na constante de acoplamento; a abordagem semiclássica corresponde a uma expansão em um parâmetro envolvendo a constante \hbar .

Na aproximação semiclássica, incorporamos flutuações térmicas e quânticas à descrição clássica, tendo-se, como ponto de partida, uma ou mais soluções da equação de movimento euclídeana. O caráter euclídeano é de crucial importância: primeiro, por que privilegia as soluções clássicas que são mínimos globais da ação (a contribuição dos mínimos locais à eq. (2.1) é exponencialmente suprimida); além disso, as equações de movimento são análogas às de um problema mecânico cujo potencial é menos o potencial físico. Todas essas características reduzem enormemente o número de soluções clássicas relevantes. Nos exemplos específicos que analisaremos — o oscilador harmônico e o potencial quártico — apenas uma solução clássica existe quando a posição inicial (idêntica à final) e o tempo de percurso estão fixos.

Para fazer a expansão semiclássica de (2.1) é conveniente definirmos as seguintes quantidades adimensionais: $q \equiv x/x_N$, $\theta \equiv \omega_N \tau$, $\Theta \equiv \beta\hbar\omega_N$, $U(q) \equiv V(x_N q)/m\omega_N^2 x_N^2$ e $g \equiv \hbar/m\omega_N x_N^2$, onde ω_N^{-1} e x_N são escalas naturais de tempo e distância, respectivamente. Em termos dessas quantidades, escrevemos a função de partição da seguinte maneira:

$$Z(\Theta) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \int_{q(0)=q_0}^{q(\Theta)=q_0} [\mathcal{D}q] e^{-I[q]/g}, \quad (2.3)$$

$$I[q] = \int_0^{\Theta} d\theta \left[\frac{1}{2} \dot{q}^2 + U(q(\theta)) \right], \quad (2.4)$$

onde o ponto denota diferenciação com relação a θ .

O procedimento para gerar a série semiclássica para $Z(\Theta)$ é:

(i) encontrar os mínimos q_c da ação euclídeana, i.e., as soluções clássicas estáveis

da equação de Euler-Lagrange sujeitas às condições de contorno² indicadas;

- (ii) expandir a ação euclideana em torno dessas soluções clássicas;
- (iii) obter o propagador semiclássico na aproximação que leva em conta apenas termos quadráticos na expansão da ação;
- (iv) usar o propagador semiclássico para calcular perturbativamente as contribuições em ordem superior à aproximação quadrática.

Por questão de simplicidade, nos restringiremos à análise de potenciais do tipo poço simples, duplamente diferenciáveis e tais que $U'(q) = 0$ somente no mínimo de U , que admitiremos estar na origem [veja figura 2.1]. Isso garante que, dados q_0 e Θ , haverá uma única³ solução clássica que satisfaz as condições de contorno. Por ser um mínimo da ação, o peso da solução clássica, $\exp -I[q_c]/g$, será o maior dentre as trajetórias na integral em (2.3). A idéia contida no roteiro (i) – (iv) descrito acima é: trajetórias próximas⁴ a uma trajetória q que difere muito da solução clássica contribuem pouco para a integral de caminho; assim, não erraremos muito se substituirmos $\exp -I[q]/g$ por algo também pequeno, embora simples de integrar. Note que, com esse procedimento, continuamos a integrar sobre todas as trajetórias inicialmente contidas em (2.3), e não apenas sobre as flutuações pequenas.

A equação de Euler-Lagrange:

$$\ddot{q} - dU/dq = 0, \quad (2.5)$$

sujeita à condição de contorno: $q(0) = q(\Theta) = q_0$, descreve o movimento de uma partícula no potencial *menos* U . Sua integral é

$$\frac{1}{2} \dot{q}^2 = U(q) - U(q_t), \quad (2.6)$$

onde q_t indica o ponto de retorno do movimento, que é único para o potencial

²Utilizaremos nesta tese a expressão “condição de contorno” também para a variável temporal τ .

³Potenciais com mais de um mínimo exigem um tratamento envolvendo mais de uma solução clássica para certas escolhas de q_0 e Θ . Esse fenômeno será analisado ainda nesse capítulo, na seção 2.4.

⁴Em alguma norma no espaço das funções.

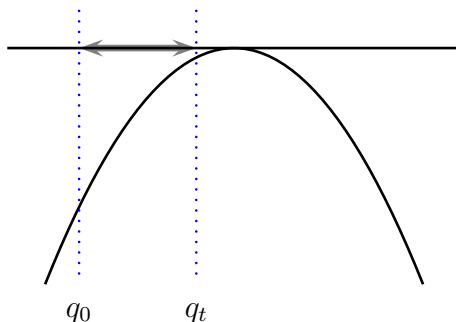


Figura 2.1: A curva em linha cheia é o esboço de um potencial invertido do tipo poço simples. Em cinza, está indicada a curva correspondente à solução clássica. Ela começa ($\tau = 0$) em q_0 , passa em $\tau = \Theta/2$ por q_t e termina ($\tau = \Theta$) novamente q_0 .

invertido [ver figura (2.1)], e dado implicitamente por

$$\Theta = 2 \int_{q_0}^{q_t} \frac{dq}{v(q, q_t)}, \quad (2.7)$$

onde $v(q, q') \equiv \text{sign}(q' - q) \sqrt{2[U(q) - U(q)]}$. A equação (2.7) é uma consequência da integral de (2.6). Assim, para um poço simples, dados q_0 e Θ , o caminho clássico sai de q_0 , em $\theta = 0$, passa por $q_t = q_t(q_0, \Theta)$, em $\theta = \Theta/2$, e retorna a q_0 em $\theta = \Theta$. (Note que $\text{sign}(q_t) = \text{sign}(q_0)$.)

A ação clássica para esse caminho clássico tem uma expressão simples em termos de seu ponto de retorno:

$$I[q_c] = \Theta U(q_t) + 2 \int_{q_0}^{q_t} dq v(q, q_t), \quad (2.8)$$

onde usamos (2.6). O primeiro termo em (2.8) corresponde ao limite de alta temperatura de $Z(\Theta)$, onde o caminho clássico colapsa a um ponto: ($q_t \rightarrow q_0$). O último termo será pequeno para potenciais que variam pouco ao longo de um comprimento de onda térmico: $\tilde{\lambda} = \hbar \sqrt{\beta/m}$. Entretanto, diminuindo-se a temperatura, ele será mais importante e introduzirá efeitos quânticos.

Seguindo os passos do método semiclássico, é preciso fazer uma expansão da ação em torno de seu valor na solução clássica. Escrevendo: $q = q_c + \eta$, com

$\eta(0) = \eta(\Theta) = 0$, obtemos:

$$I[q] = I[q_c] + I_2[\eta] + \delta I[\eta], \quad (2.9)$$

onde

$$I_2[\eta] \equiv \frac{1}{2} \int_0^\Theta d\theta \{ \dot{\eta}^2(\theta) + U''[q_c(\theta)] \eta^2(\theta) \}, \quad (2.10)$$

e

$$\delta I[\eta] \equiv \int_0^\Theta d\theta \delta U(\theta, \eta) = \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_0^\Theta d\theta U^{(n)}[q_c(\theta)] \eta^n(\theta). \quad (2.11)$$

Substituindo a decomposição (2.9) em (2.3) e usando a definição de $\exp -\delta I/g$ em série de potências, teremos

$$Z(\Theta) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 e^{-I[q_c]/g} \int_{\eta(0)=0}^{\eta(\Theta)=0} [\mathcal{D}\eta] e^{-I_2[\eta]/g} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(-\frac{\delta I[\eta]}{g} \right)^m. \quad (2.12)$$

A soma em (2.12) é dada explicitamente por

$$1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{g^m m!} \prod_{j=1}^m \left[\sum_{n_j=3}^{\infty} \frac{1}{n_j!} \int_0^\Theta d\theta_j U^{(n_j)}[q_c(\theta_j)] \eta^{n_j}(\theta_j) \right]. \quad (2.13)$$

É simples verificar que, mudando a ordem da soma e das integrações, a função de partição fica dada em termos de quantidades tais como

$$\langle \eta(\theta_1) \cdots \eta(\theta_k) \rangle \equiv \int_{\eta(0)=0}^{\eta(\Theta)=0} [\mathcal{D}\eta] e^{-I_2[0, \Theta; \eta]/g} \eta(\theta_1) \cdots \eta(\theta_k). \quad (2.14)$$

Essas integrais se escrevem naturalmente como derivadas funcionais do seguinte funcional gerador:

$$\mathcal{Z}[J] = \int_{\eta(0)=0}^{\eta(\Theta)=0} [\mathcal{D}\eta] e^{-\frac{1}{g} \{ I_2[0, \Theta; \eta] - \int_0^\Theta d\theta J(\theta) \eta(\theta) \}}. \quad (2.15)$$

De fato,

$$\langle \eta(\theta_1) \cdots \eta(\theta_k) \rangle = g^k \frac{\delta^k \mathcal{Z}[J]}{\delta J(\theta_1) \cdots \delta J(\theta_k)} \Big|_{J=0}. \quad (2.16)$$

Assim, a função de partição Z fica determinada se conseguirmos calcular o funcional

gerador \mathcal{Z} . Para calculá-lo, definimos:

$$\eta(\theta) = \tilde{\eta}(\theta) + \int_0^\Theta d\theta' \mathcal{G}(\theta, \theta') J(\theta'), \quad (2.17)$$

onde $\tilde{\eta}(0) = \tilde{\eta}(\Theta) = 0$, e $\mathcal{G}(\theta, \theta')$ satisfaz:

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + U''[q_c(\theta)] \right\} \mathcal{G}(\theta, \theta') = \delta(\theta - \theta'), \quad \mathcal{G}(0, \theta') = \mathcal{G}(\Theta, \theta') = 0. \quad (2.18)$$

Substituindo (2.17) em (2.15), e notando que $[\mathcal{D}\eta] = [\mathcal{D}\tilde{\eta}]$, obtemos

$$\mathcal{Z}[J] = \Delta^{-1/2} e^{\frac{1}{2g} \int_0^\Theta d\theta \int_0^\Theta d\theta' J(\theta) \mathcal{G}(\theta, \theta') J(\theta')}, \quad (2.19)$$

com

$$\Delta^{-1/2} = \int_{\tilde{\eta}(0)=0}^{\tilde{\eta}(\Theta)=0} [\mathcal{D}\tilde{\eta}] e^{-I_2[0, \Theta; \tilde{\eta}]/g}, \quad (2.20)$$

onde Δ é o chamado determinante de Van Vleck, comumente chamado de determinante das flutuações. A integral de caminho em (2.19) é obtida usando métodos das referências [3, 44]. Obtemos para o determinante:

$$\Delta = 2\pi g \Omega(0, \Theta), \quad (2.21)$$

onde

$$\Omega(\theta, \theta') \equiv \eta_a(\theta) \eta_b(\theta') - \eta_a(\theta') \eta_b(\theta), \quad (2.22)$$

e, por sua vez, as funções η_a e η_b são duas soluções linearmente independentes da equação homogênea:

$$-\frac{\partial^2 \eta}{\partial \theta^2} + U''[q_c(\theta)]\eta = 0. \quad (2.23)$$

Portanto, usando (2.21) chegamos à expressão:

$$\langle \eta(\theta_1) \cdots \eta(\theta_k) \rangle = g^{k/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi g \Omega(0, \Theta)}} \sum_P \mathcal{G}(\theta_{i_1}, \theta_{i_2}) \cdots \mathcal{G}(\theta_{i_{k-1}}, \theta_{i_k}), \quad (2.24)$$

se k é par, e zero, se k é ímpar. \sum_P denota a soma sobre todos os possíveis pareamentos de θ_{i_j} . Finalmente, substituindo (2.24) em (2.12) e (2.13), obtemos a série semiclássica para a função de partição em termos do propagador \mathcal{G} , que ainda precisa ser obtido.

2.1.2 O propagador semiclássico em termos da solução clássica

Construiremos a função de Green da equação (2.18) utilizando um método elementar encontrado na literatura[45, 46]. Primeiramente, pela definição da delta, nas regiões $\theta > \theta'$ e $\theta' > \theta$ a função de Green será solução da equação homogênea (2.23). Portanto, em cada uma dessas regiões, \mathcal{G} é alguma combinação linear de duas soluções independentes de (2.23):

$$\mathcal{G}(\theta, \theta') = a_1 \eta_1(\theta) + a_2 \eta_2(\theta), \quad \text{quando } \theta > \theta' \quad (2.25)$$

e, analogamente,

$$\mathcal{G}(\theta, \theta') = b_1 \eta_1(\theta) + b_2 \eta_2(\theta), \quad \text{quando } \theta' > \theta. \quad (2.26)$$

Tentaremos construir uma função de Green contínua⁵ em $\theta = \theta'$. Integrando a equação (2.18) na variável θ no intervalo $(\theta' - \epsilon, \theta' + \epsilon)$, obtemos:

$$- \int_{\theta' - \epsilon}^{\theta' + \epsilon} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \mathcal{G}(\theta, \theta') d\theta + \int_{\theta' - \epsilon}^{\theta' + \epsilon} U''[q_c(\theta)] \mathcal{G}(\theta, \theta') d\theta = 1. \quad (2.27)$$

Resolvendo a primeira integral e usando que a segunda derivada do potencial e a solução clássica (além de \mathcal{G} , por hipótese) são funções contínuas, obtemos:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \theta} \mathcal{G}(\theta, \theta') \right|_{\theta = \theta' + \epsilon} - \left. \frac{\partial}{\partial \theta} \mathcal{G}(\theta, \theta') \right|_{\theta = \theta' - \epsilon} = -1. \quad (2.28)$$

Usando essa relação e a continuidade de \mathcal{G} , determinamos dois dos coeficientes a_1, a_2, b_1 e b_2 . Ficamos com

$$\mathcal{G}(\theta, \theta') = b_1 \eta_1(\theta) + b_2 \eta_2(\theta) - \frac{\eta_1(\theta) \eta_2(\theta') - \eta_2(\theta) \eta_1(\theta')}{W(\theta')} \quad (\theta > \theta')$$

e

$$\mathcal{G}(\theta, \theta') = b_1 \eta_1(\theta) + b_2 \eta_2(\theta) \quad (\theta' > \theta), \quad (2.29)$$

⁵Não temos garantia de que uma tal solução exista. Porém, já podemos ver que se \mathcal{G} não fosse contínua, o termo em derivada segunda de \mathcal{G} traria uma contribuição proporcional à derivada da delta, o qual não está presente em (2.18).

onde

$$W = \eta_1 \frac{d\eta_2}{d\theta} - \eta_2 \frac{d\eta_1}{d\theta} \quad (2.30)$$

e é conhecido como o wronskiano do par ordenado de soluções (η_1, η_2) . É muito simples verificar que, para a equação (2.18), W é uma constante. De fato, basta diferenciar a equação de definição do wronskiano e usar o fato de η_1 e η_2 serem soluções de (2.23). Finalmente, as condições de contorno determinam completamente os coeficientes em (2.29). No caso das condições de contorno que aparecem em (2.18), podemos escrever a função de Green de maneira compacta:

$$\mathcal{G}(\theta, \theta') = \frac{\Omega(0, \theta_{<}) \Omega(\theta_{>}, \Theta)}{\Omega(0, \Theta)}, \quad (2.31)$$

onde $\theta_{<}(\theta_{>}) \equiv \min(\max)\{\theta, \theta'\}$ e Ω foi introduzido em (2.22).

Expressões explícitas para η_a e η_b em termos da solução clássica podem ser obtidas. De fato⁶, diferenciando (2.5) com respeito a θ , vemos diretamente que $\eta_a = \dot{q}_c$ satisfaz a eq. (2.23). Para a segunda solução, tomamos $\eta_b = \dot{q}_c Q$, onde Q é definido por

$$Q(\theta) = Q(0) + \int_0^\theta \frac{d\theta'}{\dot{q}_c^2(\theta')}, \quad (2.32)$$

para $\theta < \Theta/2$, $Q(\theta) = -Q(\Theta - \theta)$ para $\theta > \Theta/2$, e $Q(0)$ é escolhido de modo que $\dot{\eta}_b$ seja contínuo em $\theta = \Theta/2$.

Assim, demonstramos o ponto central de todo o procedimento: como obter o propagador semiclássico a partir da solução clássica.

⁶Um outro modo de obter η_a e η_b seria seguir o procedimento introduzido por Cauchy[28, 29], e diferenciar a solução clássica $q_c(\theta)$ com respeito a qualquer um de seus dois parâmetros, relacionados às suas duas constantes de integração. Esse procedimento será usado na seção 2.6.1.

2.1.3 A aproximação semiclássica quadrática

A partir da ação clássica e do determinante de Van Vleck⁷, definimos

$$Z_2(\Theta) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 e^{-I[q_c]/g} \Delta^{-1/2} \quad (2.34)$$

como a aproximação quadrática para Z . Para fazer a integral sobre q_0 é preciso escrever $I[q_c]$ e Δ somente em termos de q_0 (e Θ), mas, exceto em casos isolados, isso não é tarefa fácil. Geralmente, é muito mais simples escrever essas quantidades em termos de q_t [ver equação (2.6)], e assim é natural trocar q_0 por q_t como variável de integração em (2.34). Fazendo isso, é possível mostrar que

$$Z_2(\Theta) = -\frac{1}{4\pi g} \int_{q_{\Theta}^-}^{q_{\Theta}^+} dq_t \frac{U'(q_t) \Delta^{1/2}}{v(q_0, q_t)} e^{-I[q_c]/g} \equiv \int_{q_{\Theta}^-}^{q_{\Theta}^+} dq_t D(q_t, \Theta) e^{-I[q_c]/g}, \quad (2.35)$$

onde $q_{\Theta}^{\pm} \equiv \lim_{q_0 \rightarrow \pm\infty} q_t(q_0, \Theta)$.

2.2 Aplicação: o oscilador anarmônico quártico (poço simples)

Nesta seção, aplicaremos o formalismo desenvolvido nas primeiras seções à teoria com o seguinte potencial:

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{1}{4} \lambda x^4. \quad (2.36)$$

Escolhendo $\omega_N = \omega$ e $x_N = \sqrt{m\omega^2/\lambda}$, e introduzindo as quantidades adimensionais da seção (2.1), temos $g = \lambda\hbar/m^2\omega^3$ e

$$U(q) = \frac{1}{2} q^2 + \frac{1}{4} q^4. \quad (2.37)$$

⁷Usando as soluções η_a e η_b construídas na seção anterior é possível mostrar, a partir de (2.21), que

$$\Delta = \frac{4\pi g [U(q_t) - U(q_0)]}{U'(q_t)} \left(\frac{\partial \Theta}{\partial q_t} \right)_{q_0}. \quad (2.33)$$

Integrar (2.6) leva a [47, 48]

$$q_c(\theta) = q_t \operatorname{nc}(u_\theta, \mu), \quad (2.38)$$

onde $\operatorname{nc}(u, \mu) \equiv 1/\operatorname{cn}(u, \mu)$ é uma das doze funções elípticas de Jacobi⁸[47, 48, 49], e

$$u_\theta = \sqrt{1 + q_t^2} \left(\theta - \frac{\Theta}{2} \right), \quad \mu = \sqrt{\frac{2 + q_t^2}{2(1 + q_t^2)}}. \quad (2.39)$$

A relação entre q_0 e q_t é obtida tomando-se $\theta = \Theta$ em (2.38):

$$q_0 = q_c(\Theta) = q_t \operatorname{nc} u_\Theta. \quad (2.40)$$

A ação do caminho clássico (2.38) é

$$I[q_c] = \Theta U(q_t) + \sqrt{2} \int_{|q_t|}^{|q_0|} dq \sqrt{(q^2 + q_t^2 + 2)(q^2 - q_t^2)}. \quad (2.41)$$

Fazendo a integral [Ref. [47], fórmula 3.155.6] e trocando q_0 pela expressão no lado direito de (2.40), obtemos

$$\begin{aligned} I[q_c] = & \Theta \left(\frac{1}{2} q_t^2 + \frac{1}{4} q_t^4 \right) + \frac{4}{3} \left\{ -\sqrt{1 + q_t^2} \left[E(\varphi_\Theta, \mu) + \frac{1}{2} q_t^2 u_\Theta \right] \right. \\ & \left. + \operatorname{sn} u_\Theta \left(1 + \frac{1}{2} q_t^2 \operatorname{nc}^2 u_\Theta \right) \sqrt{1 + \frac{1}{2} q_t^2 (1 + \operatorname{nc}^2 u_\Theta)} \right\}, \quad (2.42) \end{aligned}$$

onde $E(\varphi, \mu)$ denota a integral elíptica do segundo tipo e $\varphi_\theta \equiv \arccos[q_c(\theta)/q_0] = \arccos(\operatorname{cn} u_\theta)$.

Para a construção do propagador semiclássico quártico precisaremos das relações:

$$\eta_a(\theta) = \dot{q}_c(\theta) = q_t \sqrt{1 + q_t^2} \operatorname{sn} u_\theta \operatorname{dn} u_\theta \operatorname{nc}^2 u_\theta \quad (2.43)$$

⁸Outras funções elípticas de Jacobi usadas nessa tese são sn e dn . Em [47] usa-se a notação k^2 no lugar de μ . Em geral omitiremos a dependência em μ nas funções elípticas de Jacobi.

e

$$Q(\theta) = q_t^{-2}(1 + q_t^2)^{-3/2} \left[\left(1 - \frac{1}{\mu^2}\right) u_\theta + \left(\frac{1}{\mu^2} - 2\right) E(\varphi_\theta, \mu) - \frac{\text{cn } u_\theta \text{ dn } u_\theta}{\text{sn } u_\theta} + (\mu^2 - 1) \frac{\text{cn } u_\theta \text{ sn } u_\theta}{\text{dn } u_\theta} \right]. \quad (2.44)$$

Podemos, então, obter $\eta_b = \dot{q}_c Q$ e, assim, a função Ω , dada por (2.22). Finalmente, usando (2.31) obtemos o propagador desejado.

O determinante das flutuações pode ser calculado com a expressão (2.20), obtendo-se:

$$\Delta = \frac{4\pi\hbar}{m\omega} \frac{\text{sn}^2 u_\Theta \text{ dn}^2 u_\Theta}{\sqrt{1 + q_t^2 \text{ cn}^4 u_\Theta}} \left[\frac{1 - \mu^2}{\mu^2} u_\Theta + \frac{2\mu^2 - 1}{\mu^2} E(\varphi_\Theta, \mu) + \frac{\text{cn } u_\Theta \text{ dn } u_\Theta}{\text{sn } u_\Theta} + (1 - \mu^2) \frac{\text{sn } u_\Theta \text{ cn } u_\Theta}{\text{dn } u_\Theta} \right]. \quad (2.45)$$

Para a expansão em série da função de partição (2.12), precisaremos de

$$\delta U(\theta, \eta) = q_c(\theta) \eta^3 + \frac{1}{4} \eta^4, \quad (2.46)$$

obtida a partir de (2.11). Portanto, devemos considerar não apenas o vértice quártico usual, mas também um termo cúbico que depende do tempo. Com isso, completamos os ingredientes necessários para escrever a série semiclássica para qualquer correlação. Na próxima subseção, nos concentraremos no primeiro termo da série (2.12) para Z , que corresponde à aproximação quadrática.

2.2.1 Casos limites da aproximação quadrática

A expressão (2.35) pode ser usada para calcular $Z_2(\Theta)$ numericamente para cada valor de Θ . Contudo, certos casos limites podem ser calculados analiticamente e é instrutivo considerá-los primeiro, re-obtendo alguns resultados conhecidos que servem como testes de consistência. Esses casos são: (1) o oscilador harmônico ($g \rightarrow 0$), (2) altas temperaturas ($\Theta \rightarrow 0$), e (3) baixas temperaturas ($\Theta \rightarrow \infty$).

Oscilador harmônico

Como $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ quando $g = 0$, obtemos a função de partição do oscilador harmônico no limite $g \rightarrow 0$. Nesse limite, é possível fazer a integral (2.35) usando o método de ponto de sela. Para isso, precisamos apenas do primeiro termo não-trivial da expansão em série de $I[q_c]$ e de $D(q_t, \Theta)$. Fazendo cuidadosamente essa expansão, obtemos o limite esperado para a função de partição:

$$Z_2(\Theta) \stackrel{g \rightarrow 0}{\sim} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(1/2g) q_t^2 \sinh \Theta}}{\sqrt{4\pi g \tanh(\Theta/2)}} dq_t = \frac{1}{2 \sinh(\Theta/2)}. \quad (2.47)$$

Limite de altas temperaturas

A temperaturas altas, temos:

$$I[q_c] = \Theta U(q_t) + \mathcal{O}(\Theta^2) \quad (2.48)$$

e

$$D(q_t, \Theta) = [4\pi g \tanh(\Theta/2)]^{-1/2} + \mathcal{O}(q_t^2). \quad (2.49)$$

Nesse limite, segue que

$$Z_2(\beta) \stackrel{\beta \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta V(x)}, \quad (2.50)$$

com $V(x)$ e $U(q)$ definidos em (2.112) e (2.37). Esse é claramente o limite clássico para a função de partição com um pré-fator que incorpora flutuações quânticas.

Limite de baixas temperaturas

Na expansão de (2.35) a baixas temperaturas, podemos ignorar termos como $\Theta U(q_t)$ e $q_t^2 u_\Theta$ em (2.42), uma vez que ambos se comportam como $\Theta e^{-\Theta}$. Entretanto, é preciso ter cuidado com a combinação $q_t^2 n c^2 u_\Theta (= q_0^2)$, pois ela cresce rapidamente com q_t (em realidade, diverge quando $|q_t|$ tende a q_Θ^+) e, portanto, não pode ser tratada perturbativamente.

Deixando essa combinação intacta em (2.42), mas usando as aproximações citadas,

obtemos:

$$I[q_c] = \frac{4}{3} \left[\left(1 + \frac{1}{2} q_t^2 \text{nc}^2 u_\Theta \right)^{3/2} - 1 \right] + \mathcal{O}(\Theta e^{-\Theta}). \quad (2.51)$$

A análise de $D(q_t, \Theta)$ é muito mais simples. Podemos simplesmente aplicar o limite $\Theta \rightarrow \infty$ de (2.49), que foi obtido sob a hipótese que $q_t \ll 1$. Juntando tudo, chegamos a:

$$Z_2(\Theta) \stackrel{\Theta \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2 e^{-\Theta/2}}{\sqrt{\pi g}} \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \frac{\exp \left\{ -\frac{4}{3g} \left[\left(1 + \frac{1}{2} q_0^2 \right)^{3/2} - 1 \right] \right\}}{\sqrt{1 + \frac{1}{2} q_0^2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{1}{2} q_0^2} \right)}. \quad (2.52)$$

2.2.2 A energia do estado fundamental e o calor específico

Podemos aplicar a aproximação semiclássica quadrática para obter a energia do estado fundamental e a curva do calor específico como função da temperatura. Essas duas aplicações vão nos dar informações sobre a utilidade da aproximação.

Podemos comparar (2.52) com o comportamento esperado para o limite de baixas temperaturas da função de partição: $Z(\Theta) \sim e^{-\Theta \varepsilon_0(g)}$ (onde $\varepsilon_0(g) \equiv E_0(g)/\hbar\omega$ é a energia adimensional do estado fundamental). Vê-se que $\varepsilon_0(g) = 1/2$, indicando que a aproximação quadrática é insuficiente para produzir correções à energia do estado fundamental do oscilador harmônico. Por outro lado, lembrando que a função de partição pode ser escrita como

$$Z(\Theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\Theta; q, q) dq, \quad (2.53)$$

onde

$$\rho(\Theta; q, q) = \sum_n e^{-\Theta \varepsilon_n} |\psi_n(q)|^2 \stackrel{\Theta \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\Theta \varepsilon_0} |\psi_0(q)|^2 \quad (2.54)$$

é o elemento diagonal da matriz densidade, podemos extrair a raiz quadrada do integrando em (2.52) como uma aproximação para a função de onda não-normalizada do estado fundamental. Para testar a acurácia dessa aproximação, calculamos os valores esperados da energia para alguns valores de g e comparamos com os resultados de alta precisão encontrados na literatura. Como mostra a tabela 2.1, a energia do estado fundamental calculada com essa função de onda semiclássica difere do valor exato apenas por menos de 1%, mesmo para valores de g da ordem de 2.

g	$E_0(\text{semiclássico})^a$	$E_0(\text{exato})^b$	erro(%)
0.4	0.559258	0.559146	0.02
1.2	0.639765	0.637992	0.28
2.0	0.701429	0.696176	0.75
4.0	0.823078	0.803771	2.40
8.0	1.011928	0.951568	6.34

^a $\langle \phi_0 | H | \phi_0 \rangle / \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle$, onde $\phi_0(q_0)$ é a raiz quadrada do integrando da eq. (2.52).

^bValores colhidos na ref. [50].

Tabela 2.1: Energia do estado fundamental do oscilador anarmônico para diferentes valores de g ($\hbar = m = \omega = 1$).

Outro problema concreto que pode ser tratado é o cálculo do calor específico do oscilador anarmônico. Ele pode ser escrito em termos de Z como:

$$C = \Theta^2 \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \Theta^2} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \Theta} \right)^2 \right]. \quad (2.55)$$

Essa expressão foi calculada para alguns valores de Θ e para constante de acoplamento igual a $g = 0.3$. O resultado está ilustrado na figura 2.2 em comparação com resultados de alta precisão, bem como com as curvas do calor específico para o oscilador anarmônico clássico e para o oscilador harmônico. Como esperado, os resultados se aproximam no limite de altas temperaturas mas, ao contrário da curva clássica, a curva semiclássica é qualitativamente correta também a baixas temperaturas, caindo a zero quando $T \rightarrow 0$.

Esse resultado, junto com a estimativa para o estado fundamental obtida anteriormente, mostra que a aproximação quadrática funciona bem, sendo bastante acurada a altas temperaturas e ainda confiável a baixas temperaturas. Na próxima seção discutimos as razões desse comportamento.

2.3 Correções à aproximação quadrática

Nesta subseção, calcularemos a primeira correção à aproximação quadrática, que corresponde ao termo com $m = 1$ em (2.12), usando (2.46) em (2.11). Essa correção envolve a integral:

$$\int_0^\Theta d\theta \left[q_c(\theta) \langle \eta^3(\theta) \rangle + \frac{1}{4} \langle \eta^4(\theta) \rangle \right]. \quad (2.56)$$

Usando (2.24), obtemos que a integral acima é dada por:

$$\frac{3}{4} g^2 \frac{1}{\sqrt{4\pi g \dot{q}_c^2(0) Q(0)}} \int_0^\Theta d\theta \mathcal{G}^2(\theta, \theta). \quad (2.57)$$

($\langle \eta^3 \rangle$ se anula e o fator 3 vem das três possibilidades de pareamento dos quatro η em $\langle \eta^4 \rangle$.) Substituindo (2.57) em (2.35) e mudando a variável de integração de q_0 para q_t , temos

$$Z(\Theta) = \int_{q_\Theta^-}^{q_\Theta^+} dq_t D(q_t, \Theta) e^{-I|q_c|/g} [1 - g a_1(q_t, \Theta) + \dots], \quad (2.58)$$

onde

$$a_1(q_t, \Theta) = \frac{3}{4} \int_0^\Theta d\theta \mathcal{G}^2(\theta, \theta). \quad (2.59)$$

Apesar da forma compacta de $\mathcal{G}(\theta, \theta)$, não é fácil o cálculo de $a_1(q_t, \Theta)$. Contudo, podemos estimar a magnitude desse termo sem muito esforço. De fato, pode-se mostrar que $\mathcal{G}(\theta, \theta)$ obedece a seguinte desigualdade:

$$\mathcal{G}(\theta, \theta) \leq \frac{\theta(\Theta - \theta)}{\Theta} \quad (0 \leq \theta \leq \Theta). \quad (2.60)$$

Portanto,

$$a_1(q_t, \Theta) \leq \frac{\Theta^3}{40}. \quad (2.61)$$

Isso mostra que, no caso do oscilador anarmônico quártico, a aproximação quadrática para a função de partição, dada pela equação (2.34) ou (2.35), pode ser usada com confiança sempre que a condição $g\Theta^3/40 \ll 1$ for satisfeita; isso concorre para o sucesso da aproximação quadrática mostrado anteriormente em comparação com dados numéricos.

O próximo termo da expansão para $Z(\Theta)$ tem um pedaço com um fator g e outro com um fator g^2 . O primeiro vem do produto de $\langle \eta^6 \rangle \sim g^3$ com o fator global g^{-2} , enquanto o último envolve $\langle \eta^8 \rangle \sim g^4$. Essa é outra indicação de que não estamos lidando com uma série perturbativa.

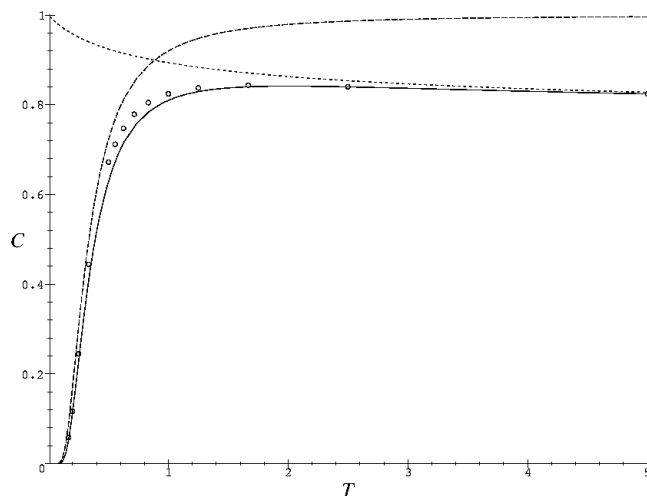


Figura 2.2: Calor específico (em unidades de k_B) versus temperatura ($T \equiv 1/\beta\hbar\omega$) para o oscilador harmônico unidimensional (traços longos) e para o oscilador anarmônico quártico (poço simples): resultado clássico (traços curtos), aproximação semiclássica (círculos) e cálculo baseado no método WKB (linha cheia). Usamos $g \equiv \hbar\lambda/m^2\omega^3 = 0.2$.

2.4 Potenciais com mais de um mínimo

Até aqui consideramos, por simplicidade, apenas potenciais do tipo poço simples. Deixamos de lado, por exemplo, potenciais como o da figura 2.3, usados em diversos modelos fenomenológicos[51]. Na aproximação semiclássica desses potenciais, deveríamos, em princípio, simplesmente somar sobre todas as soluções clássicas. Na aproximação quadrática, obteríamos:

$$Z_2(\Theta) \equiv \sum_{j=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 e^{-I[q_c^j]/g} \Delta^{-1/2}. \quad (2.62)$$

Entretanto, diferentemente do caso de um poço simples, a quantidade N de soluções clássicas — mínimos da ação euclideana I — depende, em geral, de q_0 e β . Na fronteira que separa regiões com diferentes quantidades de mínimos — uma cáustica —, as expressões na aproximação semiclássica divergem devido ao anulamento do determinante de flutuações em torno do mínimo que surge (ou desaparece) ali. Essa divergência é, entretanto, um artefato da aproximação semiclássica e pode ser devi-

damente tratada, como faremos nesta seção.

Como o problema das cústicas surge em outros contextos em física, é instrutivo ver de que forma esse problema aparece e é tratado. Em óptica, cústicas ocorrem sempre que raios de luz coalescem. Assim, eles separam regiões com diferentes números de extremos (os raios de luz) da distância óptica (o análogo da ação). Para se ir além da óptica geométrica, é preciso levar em conta flutuações em torno desses raios de luz. Mais uma vez, singularidades surgem quando se calculam flutuações quadráticas sobre as cústicas. Algumas maneiras de evitar esses problemas foram desenvolvidas[52, 53, 54, 55, 56]. Devido à tradicional analogia entre óptica ondulatória e mecânica quântica, as técnicas envolvidas são similares às usadas para se obter fórmulas de conexão na aproximação WKB[18]. Essencialmente, essas técnicas consistem em substituir uma ou mais integrais de Fresnel na aproximação de fase estacionária pela chamada integral de difração, cuja forma é especificada pela classificação de cústicas de acordo com a teoria das catástrofes[57, 58]; no caso mais simples, é uma integral de Airy. Um procedimento geral foi também desenvolvido na formulação de integrais de caminho da mecânica quântica[59]. Poderíamos aplicar esse formalismo, mas as características de nosso contexto permitem um tratamento mais simples e direto. De fato, pela natureza euclídeana da integral de caminho, somente mínimos da ação são considerados na aproximação semiclássica; pontos de sela são descartados. Por exemplo, no caso do potencial de poço duplo que analisaremos, apenas um único novo mínimo local é introduzido no espaço das funções à medida em que as várias catástrofes acontecem ao mudarmos a temperatura; como esse mínimo já aparece na primeira catástrofe, ele é o único que precisaremos considerar.

As cústicas aparecem também quando se tenta descrever o decaimento de estados metaestáveis em sistemas de mecânica estatística quântica fora do equilíbrio. O sistema tem uma partícula em um potencial com um mínimo local separado por meio de uma barreira de uma região na qual ele é ilimitado inferiormente. O fenômeno das cústicas está associado à transição do regime clássico para o regime quântico da taxa de decaimento [60, 61, 62]. Prescrições gerais para lidar com essas cústicas também foram desenvolvidas[62, 63, 64]. Nosso caso novamente traz simplificações pelo fato de analisarmos um sistema em equilíbrio.

Métodos variacionais (por vezes combinados com técnicas perturbativas) vêm sendo empregados[65, 66] com sucesso em aplicações de física da matéria conden-

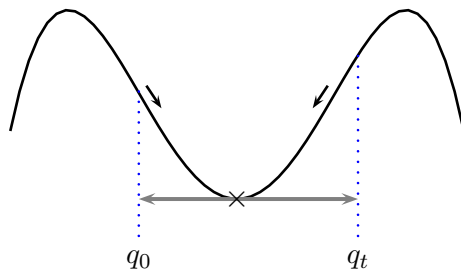


Figura 2.3: Esboço de um potencial invertido do tipo poço duplo. Em cinza, está indicada uma curva correspondente a uma solução clássica. A cruz indica a solução que fica parada no fundo do poço (para outro valor de q_0).

sada. Existem também trabalhos anteriores sobre a aproximação semiclássica para o potencial de duplo-poço a temperatura finita[35, 36]. Nossa abordagem complementa e estende esses estudos dando uma receita explícita para se lidar com as cáusticas e abrindo caminho para uma comparação com resultados numéricos de outros tratamentos.

2.4.1 Aproximação semiclássica aprimorada

Analisando um potencial do tipo poço simples, como o da figura 2.1, percebemos que só há uma maneira de sair de q_0 e voltar a q_0 . Analisando agora o potencial da figura (2.3), podemos visualizar outras possibilidades. Começemos pela análise do caso em que q_0 é o fundo do poço. Há, é claro, a solução constante: $q(\tau) \equiv q_0$. Além dessa existe uma que escala o potencial pela esquerda e retorna ao fundo no tempo Θ . Analogamente, existe uma simétrica, saindo para a direita. Outra possibilidade seria sair para a esquerda, passar pelo fundo, subir à direita e voltar ao fundo no tempo Θ . No caso em que q_0 está no poço mas não em seu fundo, não existe a solução constante, mas passa a haver a possibilidade de soluções periódicas.

Diante da possibilidade da existência de mais de uma solução clássica é preciso saber, para cada par (q_0, Θ) , quantas soluções existem e qual ou quais soluções correspondem a mínimos globais da ação, ou a pontos de sela com uma direção instável, com duas direções instáveis, etc.

Quando cruzamos uma cáustica, uma trajetória clássica é criada ou anulada. O

aparecimento das soluções para um potencial como o poço duplo obedece à seguinte estrutura de cáusticas [ver figura 2.4]: para valores pequenos de Θ há apenas um mínimo global (a solução parada no fundo do poço ou a solução análoga a do poço simples); após cruzar a primeira cáustica, esse mínimo global se divide em três soluções clássicas: um ponto de sela simples (com uma direção instável) e dois mínimos simétricos globais; na segunda cáustica, o ponto de sela simples se divide novamente em três soluções: um ponto de sela duplo (isto é, instável em uma segunda direção no espaço das funções) e dois novos pontos de sela simples; na terceira cáustica, o ponto de sela duplo se divide em um ponto de sela triplo e dois pontos de sela duplo; e assim por diante.

Precisamente sobre a cáustica pode-se mostrar que o menor autovalor do operador

$$-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + U''[q_c(\theta)] \quad (2.63)$$

se anula e, portanto, o determinante de Van Vleck Δ também se anula. Como consequência, a aproximação semiclássica apresenta problemas já em ordem mais baixa [ver a expressão (2.34)]. Esse problema pode ser remediado mantendo-se flutuações além da aproximação quadrática no subespaço gerado pelo autovetor associado ao autovalor que se anula. Em vez de (2.62), teremos (no caso de apenas um mínimo global):

$$\tilde{Z}_2(\Theta) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 e^{-I[q_c]/g} \mathcal{F}, \quad (2.64)$$

onde

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_0}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{\mathcal{V}(a_0)}{\hbar}\right) \equiv \lambda_0^{-1/2} \mathcal{F}, \quad (2.65)$$

e

$$\mathcal{V}(a_0) = \frac{1}{2} \lambda_0 a_0^2 + \sum_{n=3}^M \frac{1}{n!} C_0^{(n)} a_0^n. \quad (2.66)$$

O inteiro M é o menor inteiro par tal que $C_0^{(n)}$ seja positivo para todos os valores de q_0 e Θ . Com isso, a integral em (2.65) é bem definida mesmo quando λ_0 se anula. Entretanto, esse procedimento não é conveniente, pois na prática precisamos encontrar λ_0 e $\varphi_0(\theta)$, o que não é simples, em geral. Por isso, passamos agora a descrever um procedimento alternativo.

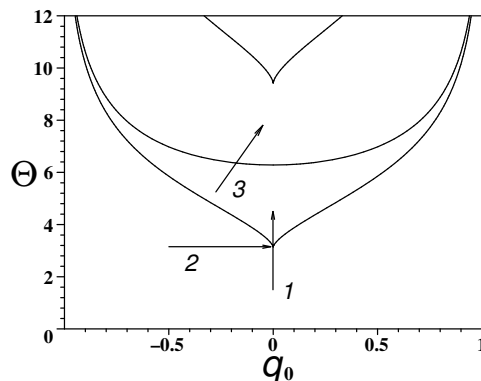


Figura 2.4: Estrutura de cáusticas para o duplo-poço quártico

2.4.2 Tratamento alternativo das cáusticas

Vamos admitir que $M = 4$ na equação (2.66); este é o caso para o potencial quártico com um poço duplo que discutiremos em seguida. Então, a “ação efetiva” $\mathcal{A}(a_0) \equiv S[x_{\text{mg}}] + \mathcal{V}(a_0)$ para o modo “crítico” φ_0 é um polinômio do quarto grau em a_0 .

Baseado na estrutura dos mínimos que vimos, vamos admitir por um momento que \mathcal{A} tenha três extremos: um mínimo global em $a_0 = 0$, um máximo local em $u > 0$, e um mínimo local em $v > u$. Isso nos permite escrever $\mathcal{A}(a_0)$ como

$$\mathcal{A}(a_0) = S[x_{\text{mg}}] + \alpha \left[\frac{1}{2} uv a_0^2 - \frac{1}{3} (u + v) a_0^3 + \frac{1}{4} a_0^4 \right] \quad (2.67)$$

(pode-se verificar facilmente que $\mathcal{A}'(0) = \mathcal{A}'(u) = \mathcal{A}'(v) = 0$).

Agora devemos relacionar α , u , e v a quantidades calculáveis. Fazemos isso impondo que $\mathcal{A}(v) = S[x_{\text{ml}}]$ e $\mathcal{A}(u) = S[x_{\text{ps}}]$, onde $x_{\text{ml}}(\tau)$ e $x_{\text{ps}}(\tau)$ são o mínimo local e ponto de sela de mais baixo valor da ação, respectivamente. Teremos:

$$\frac{S[x_{\text{ml}}] - S[x_{\text{mg}}]}{S[x_{\text{ps}}] - S[x_{\text{mg}}]} = \frac{\mathcal{A}(v) - \mathcal{A}(0)}{\mathcal{A}(u) - \mathcal{A}(0)} = \frac{\xi^3(2 - \xi)}{2\xi - 1}, \quad (2.68)$$

onde $\xi \equiv v/u$. Segue da definição de x_{mg} , x_{ml} e x_{ps} que o lado esquerdo de (2.68) pertence ao intervalo $[0, 1]$. Um gráfico do lado direito da mesma equação mostra que (2.68) possui uma única solução real em $1 \leq \xi \leq 2$.

Uma vez determinado ξ , podemos fixar outra combinação de parâmetros, a saber

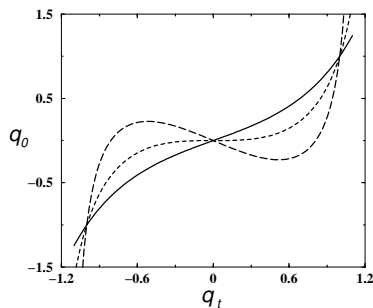


Figura 2.5: $q_0(q_t, \Theta)$ [eq. (2.40)] para $\Theta = 2.0$ (linha cheia), $\Theta = \pi$ (linha com traços curtos), e $\Theta = 4.5$ (linha com traços longos). Para $\Theta < \pi$ essa função é unívoca. Para $\Theta > \pi$ e $|q_0|$ suficientemente pequeno, há três (ou mais) valores reais de q_t correspondendo a um dado q_0 .

$\mu \equiv \alpha u^4$:

$$S[x_{\text{ps}}] - S[x_{\text{mg}}] = \mathcal{A}(u) - \mathcal{A}(0) = \frac{\mu}{12} (2\xi - 1). \quad (2.69)$$

Podemos reescrever (2.67) como $\mathcal{A}(a_0) = S[x_{\text{mg}}] + \mathcal{V}_3(a_0/u)$, onde

$$\mathcal{V}_3(z) \equiv \mu \left[\frac{1}{2} \xi z^2 - \frac{1}{3} (1 + \xi) z^3 + \frac{1}{4} z^4 \right]. \quad (2.70)$$

O parâmetro u que ainda precisaria ser determinado pode ser suprimido por uma mudança de variável de integração. Obtemos, finalmente:

$$\mathcal{F} = \sqrt{\frac{\mu\xi}{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp\left(-\frac{\mathcal{V}_3(z)}{\hbar}\right). \quad (2.71)$$

O caso em que S tem apenas um extremo pode ser analisado da mesma maneira. Nesse caso, $\mathcal{A}'(a_0)$ tem uma raiz real ($a_0 = 0$), correspondendo ao mínimo $x_{\text{mg}}(\tau)$ de $S[x]$, e um par de raízes complexas conjugadas: w e w^* , correspondendo ao par de trajetórias complexas $x_{\text{tc}}(\tau)$ e $x_{\text{tc}}^*(\tau)$. Agora, temos: $\mathcal{A}(a_0) = S[x_{\text{mg}}] + \mathcal{V}_1(a_0/|w|)$, onde

$$\mathcal{V}_1(z) \equiv \chi \left[\frac{1}{2} z^2 - \frac{2}{3} (\cos \phi) z^3 + \frac{1}{4} z^4 \right], \quad (2.72)$$

com $\chi \equiv \alpha|w|^4$ e $\phi \equiv \arg(w)$. Identificando $\mathcal{A}(w)$ com $S[x_{\text{tc}}]$, obtemos

$$S[x_{\text{tc}}] - S[x_{\text{mg}}] = \frac{\chi}{12} (2e^{2i\phi} - e^{4i\phi}), \quad (2.73)$$

de onde calculamos χ e ϕ . Finalmente, identificando $\mathcal{V}_1(a_0/|w|)$ com $\mathcal{V}(a_0)$ obtemos

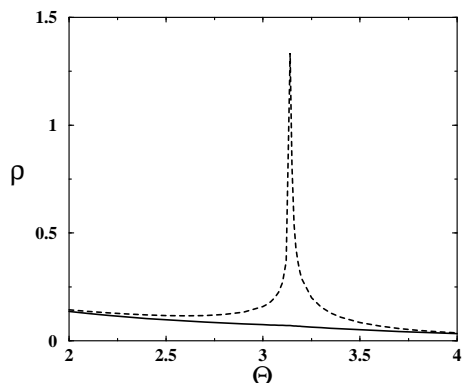


Figura 2.6: $\rho(0,0)$ vs. Θ para $g = 0.3$. A aproximação semiclássica usual é a linha tracejada e a aprimorada é linha cheia.

$\lambda_0 = \chi/|w|^2$, que nos leva (após uma mudança de variável de integração) a

$$\mathcal{F} = \sqrt{\frac{\chi}{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp\left(-\frac{\mathcal{V}_1(z)}{\hbar}\right). \quad (2.74)$$

2.5 Aplicação: o oscilador anarmônico quártico (poço duplo)

De (2.20), vemos que há duas maneiras de o determinante se anular: (i) quando $(\partial q_0/\partial q_t)_\Theta = 0$; (ii) quando $U(q_0) = U(q_t)$. Uma análise qualitativa da equação de movimento mostra que, na borda entre as regiões com $N = 1$ e $N = 2$ do plano (q_0, Θ) , o determinante se anula por (i). Resolvendo a equação $(\partial q_0/\partial q_t)_\Theta = 0$ para q_t e substituindo o resultado $\tilde{q}_t(\Theta)$ em (2.40), obtemos a curva inferior da figura 2.4.

Para ilustrar o funcionamento do método, vamos analisar o que se passa com a primeira cáustica. Quando $q_0 = 0$ e $\Theta < \pi$, a única solução real de (2.40) é $q_t = 0$ (ver a figura 2.5). Nesse limite, obtemos para a aproximação semiclássica usual:

$$(2\pi g \sin \Theta)^{-1/2} \exp\left(-\frac{\Theta}{4g}\right) \quad (\Theta < \pi). \quad (2.75)$$

Essa expressão exhibe claramente uma divergência quando $\Theta \rightarrow \pi^-$.

Para $\Theta > \pi$ há três soluções: $q_t = 0$, correspondendo à solução $q_c(\theta) \equiv 0$ (que é agora um ponto de sela simples), mais um par de soluções localizadas simetricamente

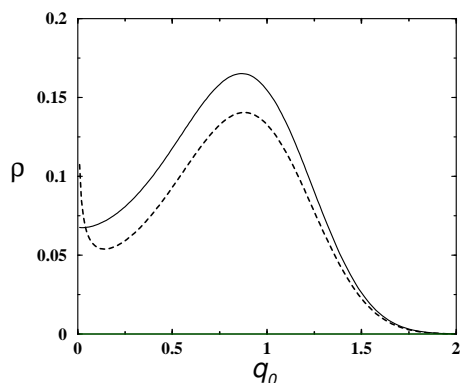


Figura 2.7: $\rho(q_0, q_0)$ vs. q_0 para $\Theta = \pi$. A aproximação semiclássica usual é a linha tracejada e a aprimorada é linha cheia.

com relação à origem, e que correspondem ao par de mínimos degenerados da ação. Essas soluções podem ser mapeadas em trajetórias puramente imaginárias para $\Theta < \pi$.

Nas figuras⁹ 2.6, 2.7 e 2.8 mostramos o comportamento do integrando da aproximação quadrática usual e da aprimorada em diferentes cenários.

Note que, na figura 2.8, a divergência ocorre somente na região de dois mínimos da cáustica, devido à coalescência do mínimo local com um ponto de sela da ação; a contribuição do mínimo global permanece finita na cáustica.

Como discutido acima, outra cáustica aparece quando $\Theta \geq 2\pi$. Desta vez, o determinante se anula pois $U(q_0) = U(q_t)$, ou seja, quando $q_t = -q_0$. Essa catástrofe está associada ao aparecimento de soluções clássicas periódicas.

Como discutido anteriormente, o procedimento para tratar as cáusticas não muda com o aparecimento de uma nova catástrofe. O que muda quando uma segunda catástrofe ocorre é a identidade do ponto de sela com mais baixa ação. É possível mostrar que, sendo $A(\Theta)$ a solução positiva da equação $q_0(q_t, \Theta) = -q_t$, temos: para $|q_0| > A(\Theta)$, o ponto de sela mais baixo está entre as soluções da equação 2.40; para $|q_0| < A(\Theta)$ ele é uma das duas soluções periódicas que satisfazem $q_c(0) = q_0$ (uma vez que elas possuem a mesma ação).

⁹Todos os cálculos numéricos foram feitos usando MAPLE.

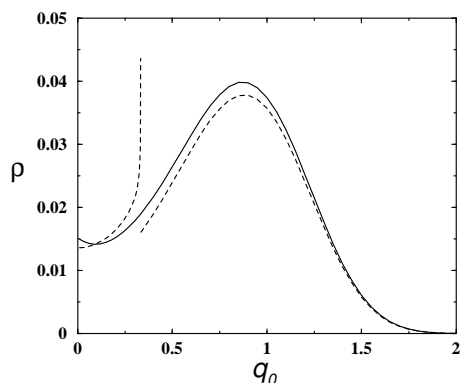


Figura 2.8: $\rho(q_0, q_0)$ vs. q_0 para $\Theta = 5.0$ and $g = 0.3$. A aproximação semiclássica usual é a linha tracejada e a aprimorada é linha cheia.

2.6 Extensão para dimensões maiores

Essa seção discute a extensão d -dimensional do método semiclássico desenvolvido nesse capítulo para mecânica quântica unidimensional. Mostraremos que, tal como no caso unidimensional, é possível calcular cada termo da série semiclássica para a função de partição em termos de soluções clássicas. Por questão de simplicidade, nos concentraremos no caso de potenciais centrais atrativos. Sob tais potenciais, como veremos, as únicas soluções clássicas que contribuem para a função de partição são aquelas com momento angular igual a zero. Como exemplo, consideraremos o caso do oscilador harmônico isotrópico e o oscilador anarmônico quártico (poço simples). Em particular, calculamos o calor específico do oscilador quártico para dimensão igual a 1, 2 e 3 na aproximação quadrática. No apêndice fazemos a construção do propagador semiclássico no caso de um potencial arbitrário em dimensão d .

A generalização da expressão (2.1) da função de partição no formalismo de integrais de caminho para sistemas d -dimensionais é¹⁰:

$$Z(\beta) = \int_{\mathbb{R}^D} d^D \mathbf{x}_0 \rho(\beta; \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0), \quad (2.76)$$

onde

$$\rho(\beta; \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}(\beta\hbar)=\mathbf{x}_0} [\mathcal{D}\mathbf{x}] e^{-S[\mathbf{x}]/\hbar} \quad (2.77)$$

¹⁰Ao longo das próximas seções vamos retomar a notação usual com variáveis dimensionais.

e

$$S[\mathbf{x}] = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{d\mathbf{x}}{d\tau} \right)^2 + V(\mathbf{x}) \right]. \quad (2.78)$$

A equação de Euler-Lagrange tem a forma:

$$m\ddot{\mathbf{x}}_c - \nabla V(\mathbf{x}_c) = 0, \quad (2.79)$$

sujeita às condições de contorno $\mathbf{x}_c(0) = \mathbf{x}_c(\beta\hbar) = \mathbf{x}_0$; por simplicidade, vamos admitir que haja apenas um mínimo da ação. O próximo passo é expandir a ação. Escrevendo $\mathbf{x}(\tau) = \mathbf{x}_c(\tau) + \mathbf{u}(\tau)$, com $\mathbf{u}(0) = \mathbf{u}(\beta\hbar) = 0$, temos $S[\mathbf{x}] = S[\mathbf{x}_c] + S_2[\mathbf{u}] + \delta S[\mathbf{u}]$, onde

$$S_2[\mathbf{u}] \equiv \frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} d\tau u_i(\tau) \left[-m \frac{d^2}{d\tau^2} \delta_{ij} + \partial_i \partial_j V(\mathbf{x}_c) \right] u_j(\tau), \quad (2.80)$$

e

$$\delta S[\mathbf{u}] \equiv \int_0^{\beta\hbar} d\tau \delta V(\tau, \mathbf{u}) \equiv \int_0^{\beta\hbar} d\tau \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} \partial_{i_1} \dots \partial_{i_n} V(\mathbf{x}_c) u_{i_1}(\tau) \dots u_{i_n}(\tau); \quad (2.81)$$

os índices i, j, \dots variam de 1 a d , e índices repetidos indicam soma. Substituindo essa decomposição de S em (2.6) e expandindo $e^{-\delta S/\hbar}$ em série de potências, obtemos a expansão semiclássica de $Z(\beta)$:

$$Z(\beta) = \int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x}_0 e^{-S[\mathbf{x}_c]/\hbar} \int_{\mathbf{u}(0)=0}^{\mathbf{u}(\beta\hbar)=0} [\mathcal{D}\mathbf{u}] e^{-S_2[\mathbf{u}]/\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\delta S[\mathbf{u}]}{\hbar} \right)^n. \quad (2.82)$$

A aproximação quadrática fica:

$$\begin{aligned} Z_2(\beta) &\equiv \int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x}_0 e^{-S[\mathbf{x}_c]/\hbar} \int_{\mathbf{u}(0)=0}^{\mathbf{u}(\beta\hbar)=0} [\mathcal{D}\mathbf{u}] e^{-S_2[\mathbf{u}]/\hbar} \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x}_0 e^{-S[\mathbf{x}_c]/\hbar} \Delta^{-1/2}, \end{aligned} \quad (2.83)$$

onde Δ é o determinante do operador de flutuações \mathcal{F} :

$$\Delta = \text{Det } \mathcal{F}, \quad \mathcal{F}_{ij} = -m \frac{d^2}{d\tau^2} \delta_{ij} + \partial_i \partial_j V(\mathbf{x}_c). \quad (2.84)$$

Os outros termos da série (2.82) levam a integrais do tipo

$$\langle u_{i_1}(\tau_1) \dots u_{i_k}(\tau_k) \rangle \equiv \int_{\mathbf{u}(0)=0}^{\mathbf{u}(\beta\hbar)=0} [\mathcal{D}\mathbf{u}] e^{-S_2[\mathbf{u}]/\hbar} u_{i_1}(\tau_1) \dots u_{i_k}(\tau_k) . \quad (2.85)$$

que são escritas em termos de um propagador G como

$$\langle u_{i_1}(\tau_1) \dots u_{i_k}(\tau_k) \rangle = \hbar^{k/2} \Delta^{-1/2} \sum_P G_{i_{j_1} i_{j_2}}(\tau_{j_1}, \tau_{j_2}) \dots G_{i_{j_{k-1}} i_{j_k}}(\tau_{j_{k-1}}, \tau_{j_k}) , \quad (2.86)$$

se k é par e zero se k é ímpar. O propagador é solução de

$$\left[-m \frac{d^2}{d\tau^2} \delta_{ij} + \partial_i \partial_j V(\mathbf{x}_c) \right] G_{jk}(\tau, \tau') = \delta_{ik} \delta(\tau - \tau') , \quad (2.87)$$

satisfazendo as condições de contorno:

$$G_{jk}(0, \tau') = G_{jk}(\beta\hbar, \tau') = 0. \quad (2.88)$$

Mais uma vez, o propagador semiclássico pode ser construído em termos da solução clássica.

2.6.1 O propagador semiclássico

Seja $J(\tau, \tau')$ a solução da equação diferencial:

$$\left[-m \frac{d^2}{d\tau^2} \delta_{ij} + \partial_i \partial_j V(\mathbf{x}_c) \right] J_{jk}(\tau, \tau') = 0 \quad (2.89)$$

satisfazendo as condições iniciais:

$$J(\tau', \tau') = 0 , \quad \frac{\partial}{\partial \tau} J(\tau = \tau', \tau') = -\frac{1}{m} \mathbb{1} . \quad (2.90)$$

Essa função é conhecida como comutador de Jacobi [28, 29] e pode ser construída explicitamente, como segue. Seja $\mathbf{x}(\tau; \mathbf{a}, \mathbf{b})$ a solução geral da equação de movimento tal que: $\mathbf{x}(0) = \mathbf{a}$, $\dot{\mathbf{x}}(0) = \mathbf{b}$. Considere também A e B matrizes $d \times d$ definidas por

$$A_{jk}(\tau) = \frac{\partial}{\partial a_k} x_j(\tau; \mathbf{a} = \mathbf{x}_0, \mathbf{b} = \mathbf{v}_0), \quad (2.91)$$

$$B_{jk}(\tau) = \frac{\partial}{\partial b_k} x_j(\tau; \mathbf{a} = \mathbf{x}_0, \mathbf{b} = \mathbf{v}_0), \quad (2.92)$$

onde $\mathbf{v}_0 = \dot{\mathbf{x}}_c(0)$. Diferenciando a eq. (2.79) com relação a a_k e b_k (e tomando $\mathbf{a} = \mathbf{x}_0$, $\mathbf{b} = \mathbf{v}_0$), obtém-se duas soluções linearmente independentes de (2.89). Para τ pequeno o suficiente¹¹ (mas não-nulo) as funções A e B são invertíveis. De fato, $\mathbf{x}(\tau) = \mathbf{a} + \mathbf{b}\tau + O(\tau^2)$ quando $\tau \rightarrow 0$, de modo que $A(\tau) = \mathbb{1} + O(\tau^2)$ e $B(\tau) = \tau \mathbb{1} + O(\tau^2)$. Portanto, a expressão

$$J(\tau, \tau') = -\frac{1}{m} [A(\tau) A^{-1}(\tau') - B(\tau) B^{-1}(\tau')] \left[\dot{A}(\tau') A^{-1}(\tau') - \dot{B}(\tau') B^{-1}(\tau') \right]^{-1} \quad (2.93)$$

é bem definida e satisfaz (2.89) e (2.90), o que pode ser verificado diretamente.

A função de Green $G(\tau, \tau')$ que satisfaz a eq. (2.87) pode ser escrita assim:

$$G(\tau, \tau') = J(\tau, 0) M(0, \beta\hbar) J(\beta\hbar, \tau') \theta(\tau' - \tau) - J(\tau, \beta\hbar) M(\beta\hbar, 0) J(0, \tau') \theta(\tau - \tau'), \quad (2.94)$$

onde $M(\tau, \tau') = -J(\tau', \tau)^{-1}$ e $\theta(\tau)$ é a função de Heaviside. Para demonstrar (2.94) é preciso usar as seguintes identidades:

$$J(\tau, 0) M(0, \beta\hbar) J(\beta\hbar, \tau') + J(\tau, \beta\hbar) M(\beta\hbar, 0) J(0, \tau') = -J(\tau, \tau'), \quad (2.95)$$

$$\partial_\tau J(\tau, 0) M(0, \beta\hbar) J(\beta\hbar, \tau) + \partial_\tau J(\tau, \beta\hbar) M(\beta\hbar, 0) J(0, \tau) = \frac{1}{m} \mathbb{1}. \quad (2.96)$$

A primeira identidade segue do fato de ambos os lados da equação serem soluções da mesma equação (2.89) e coincidirem em $\tau = 0$ e $\tau = \beta\hbar$; a segunda segue de (2.90) e (2.95). Agora seguimos como na seção 2.1.2: (i) a função G definida em (2.94) é solução de (2.87) quando $\tau < \tau'$ ou $\tau > \tau'$; (ii) G satisfaz as condições de contorno (2.88); (iii) ela é contínua em $\tau = \tau'$,

$$G(\tau' + 0, \tau') = G(\tau' - 0, \tau') \quad (2.97)$$

[use (2.95) com $\tau = \tau'$], e (iv) sua derivada com relação a τ tem a descontinuidade do tipo delta:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} G(\tau = \tau' + 0, \tau') - \frac{\partial}{\partial \tau} G(\tau = \tau' - 0, \tau') = -\frac{1}{m} \mathbb{1} \quad (2.98)$$

¹¹Acreditamos que o mesmo valha em $(0, \beta\hbar)$ exceto em um número finito de pontos.

[use (2.96)]. Portanto, G satisfaz (2.87).

2.6.2 Potenciais centrais

Para ilustrar o formalismo das seções anteriores, vamos aplicá-lo no caso de potenciais centrais, i.e., $V = V(r)$, onde $r \equiv |\mathbf{x}|$. Devido à simetria radial, $\rho(\beta; \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0)$ depende apenas de $r_0 = |\mathbf{x}_0|$. Assim, sem perda de generalidade, consideramos $\mathbf{x}_0 = r_0 \mathbf{e}_1$, onde \mathbf{e}_1 é o vetor unitário que aponta na direção x_1 , e fazemos a integração angular de (3.1) para obter

$$Z(\beta) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \int_0^\infty dr_0 r_0^{d-1} \rho(\beta; r_0 \mathbf{e}_1; r_0 \mathbf{e}_1). \quad (2.99)$$

Em geral, há mais de uma solução clássica satisfazendo as condições de contorno $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(\beta\hbar) = r_0 \mathbf{e}_1$. Contudo, todas elas são radiais se o potencial é puramente atrativo [i.e., $V'(r) > 0$ para $r > 0$]. De fato, nesse caso o movimento euclidiano é equivalente ao de uma partícula em um potencial repulsivo, de modo que as trajetórias fechadas clássicas necessariamente têm momentum angular zero. Além disso, essa solução é única se o potencial é suave na origem, ou seja, se $V'(0) = 0$.

Para uma trajetória sobre o eixo x_1 , $\mathbf{x}_c(\tau) = r_c(\tau) \mathbf{e}_1$, o operador de flutuações \mathcal{F} é diagonal nos índices i, j . De fato, como $V = V(r)$, temos

$$\partial_i \partial_j V(r) = \frac{V'(r)}{r} \delta_{ij} + \left[V''(r) - \frac{V'(r)}{r} \right] \frac{x_i x_j}{r^2}, \quad (2.100)$$

que, para $x_i = r_c \delta_{i1}$, nos dá: $\partial_1 \partial_1 V(r_c) = V''(r_c)$, $\partial_i \partial_i V(r_c) = r_c^{-1} V'(r_c)$ para $i = 2, \dots, d$, e $\partial_i \partial_j V(r_c) = 0$ se $i \neq j$. Assim, $\Delta = \Delta_\ell \Delta_t^{d-1}$, onde

$$\Delta_\ell = \text{Det} [-m \partial_\tau^2 + V''(r_c)], \quad \Delta_t = \text{Det} [-m \partial_\tau^2 + r_c^{-1} V'(r_c)] \quad (2.101)$$

(ℓ e t indicam as direções longitudinal e transversal, respectivamente).

A função de Green também se torna diagonal nesse caso: $G_{11} = G_\ell$, $G_{ii} = G_t$ para $i = 2, \dots, d$, e $G_{ij} = 0$ se $i \neq j$, onde

$$[-m \partial_\tau^2 + V''(r_c)] G_\ell(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau'), \quad (2.102)$$

$$[-m \partial_\tau^2 + r_c^{-1} V'(r_c)] G_t(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau'). \quad (2.103)$$

Note que Δ_ℓ e $G_\ell(\tau, \tau')$ são os mesmos do problema unidimensional (equações (2.20) e (2.31), respectivamente). Para obter Δ_t e $G_t(\tau, \tau')$ basta trocar $\Omega_\ell(\tau, \tau')$ [da equação (2.22)] por

$$\Omega_t(\tau, \tau') \equiv \frac{\varphi_a(\tau) \varphi_b(\tau') - \varphi_a(\tau') \varphi_b(\tau)}{\varphi_a(\tau') \dot{\varphi}_b(\tau') - \dot{\varphi}_a(\tau') \varphi_b(\tau')}, \quad (2.104)$$

onde $\varphi_a(\tau)$ e $\varphi_b(\tau)$ são duas soluções linearmente independentes de

$$[-m \partial_\tau^2 + r_c^{-1} V'(r_c)] \varphi(\tau) = 0. \quad (2.105)$$

Segue da equação de movimento que $\varphi_a(\tau) = r_c(\tau)$ é uma solução. Uma outra é $\varphi_b(\tau) = r_c(\tau) \int_0^\tau d\tau' [r_c(\tau')]^{-2}$.

2.7 Aplicações

Na aproximação quadrática para a função de partição, temos:

$$Z_2(\beta) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \int_0^\infty dr_0 r_0^{d-1} e^{-S[\mathbf{x}_c]/\hbar} (\Delta_\ell \Delta_t^{d-1})^{-1/2}. \quad (2.106)$$

2.7.1 O oscilador harmônico d -dimensional

Como primeiro exemplo, vamos considerar o oscilador harmônico d -dimensional isotrópico: $V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$. Como o potencial é quadrático, $\delta V(\tau, \mathbf{u}) = 0$ e $Z(\beta) = Z_2(\beta)$. Além disso, $r^{-1} V'(r) = V''(r)$, de modo que $\Delta_t = \Delta_\ell$. Assim,

$$Z(\beta) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \int_0^\infty dr_0 r_0^{d-1} e^{-S[r_c]/\hbar} \Delta_\ell^{-d/2}. \quad (2.107)$$

A solução clássica é

$$r_c(\tau) = \frac{r_0 \cosh[\omega(\tau - \beta\hbar/2)]}{\cosh(\beta\hbar\omega/2)}. \quad (2.108)$$

e a ação correspondente é:

$$S[r_c] = m\omega r_0^2 \tanh(\beta\hbar\omega/2). \quad (2.109)$$

O propagador longitudinal pode ser calculado a partir das seguintes soluções de (2.23): $\eta_a(\tau) = \cosh(\omega\tau)$ e $\eta_b(\tau) = \sinh(\omega\tau)$. Obtemos (de (2.22)): $\Omega_\ell(\tau, \tau') = \omega^{-1} \sinh[\omega(\tau' - \tau)]$, de modo que

$$\Delta_\ell = \frac{2\pi\hbar \sinh(\beta\hbar\omega)}{m\omega}. \quad (2.110)$$

Substituindo (2.109) e (2.110) em (2.107) e fazendo a integral, obtemos:

$$Z(\beta) = [2 \sinh(\beta\hbar\omega/2)]^{-d}, \quad (2.111)$$

que é o conhecido resultado para a função de partição d -dimensional do oscilador harmônico.

2.7.2 Oscilador anarmônico quártico d -dimensional (poço simples)

O potencial do oscilador anarmônico d -dimensional com um poço simples é:

$$V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 + \frac{1}{4} \lambda r^4 \quad (\lambda > 0). \quad (2.112)$$

Como na seção 2.2, é conveniente substituir as coordenadas r e τ por $q \equiv (\lambda/m\omega^2)^{1/2} r$ e $\theta \equiv \omega\tau$, respectivamente.

O determinante longitudinal é o mesmo do problema unidimensional [equação (2.45) da seção 2.2]. Para construir Δ_t , usamos

$$\varphi_a(\theta) = q_t \operatorname{nc} u_\theta, \quad (2.113)$$

$$\varphi_b(\theta) = \frac{\operatorname{nc} u_\theta}{\omega\mu^2 q_t \sqrt{1 + q_t^2}} [E(\varphi_\theta, \mu) + (\mu^2 - 1) u_\theta - (\theta \rightarrow 0)]. \quad (2.114)$$

O resultado é

$$\Delta_t = \frac{4\pi\hbar}{m\omega} \frac{\operatorname{nc}^2 u_\Theta}{\mu^2 \sqrt{1 + q_t^2}} [E(\varphi_\Theta, \mu) + (\mu^2 - 1) u_\Theta]. \quad (2.115)$$

Com isso temos todos os ingredientes para construir a aproximação quadrática

para $Z(\beta)$:

$$Z_2(\beta) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{m\omega^2}{\lambda} \right)^{d/2} \int_0^\infty dq_0 q_0^{d-1} e^{-I[q_c]/g} (\Delta_\ell \Delta_t^{d-1})^{-1/2}, \quad (2.116)$$

onde $g \equiv \hbar\lambda/m^2\omega^3$.

3

Teoria de campos com simetria transversal: correlações em interfaces

Seguindo nossa linha de aplicação do método semiclássico, mostraremos neste capítulo como estendê-lo a um modelo de teoria de campos sob um potencial com simetria transversal utilizando um método simples de construção do propagador semiclássico. A existência de uma única direção relevante (a direção longitudinal) simplifica as equações diferenciais e permite desenvolvimentos analíticos semelhantes àqueles aplicados em mecânica quântica. A referência base deste capítulo é [41].

Ilustraremos essa construção no contexto do estudo de interfaces que separam duas fases homogêneas caracterizadas por um parâmetro de ordem escalar. Diversos sistemas físicos se encaixam nessa descrição. Os exemplos mais conhecidos são as interfaces de separação de duas componentes de uma mistura de um líquido binário e as paredes de domínio separando duas fases magnéticas. As interfaces surgem também em sistemas que vêm despertando interesse nos últimos anos, dentre os quais estão defeitos topológicos em cosmologia [67], paredes de domínio supersimétricas[68], interfaces $Z(N)$ em teorias de calibre $SU(N)$ a temperatura finita[69] e os diferentes tipos de condensados de Bose-Einstein[70].

Em função dos vários exemplos mencionados, o interesse no estudo de flutuações estatísticas e quânticas em torno de interfaces e paredes de domínio voltou à tona recentemente. A maioria dos cálculos são feitos a um laço, o que corresponde a cal-

cular o determinante de um operador de flutuações em torno de um campo clássico de fundo. Por exemplo, são conhecidos os cálculos em torno de uma solução do tipo *kink* em teorias escalares em várias dimensões[71], bem como em modelos supersimétricos[68]. Diferentes métodos são utilizados explorando conexões com propriedades especiais dos determinantes de operadores diferenciais[71], com dados de espalhamento[72] e com o espectro de operadores[68].

Todos esses trabalhos se restringem ao cálculo das chamadas bolhas de vácuo. No entanto, mostraremos que as técnicas semiclássicas que utilizamos permitem o cálculo de correlações. Todas as quantidades a serem calculadas (determinantes, bolhas de vácuo e correlações) serão dadas em termos de um propagador semiclássico que descreve o comportamento das flutuações em torno da interface. Tal abordagem serve não apenas como uma alternativa para os métodos usados em aplicações de física de partículas[68, 71, 72], mas também fornece uma abordagem unificada que estende resultados ao cálculo de correlações, permitindo a conexão com sistemas de mecânica estatística (para os quais as funções de 1 ponto foram obtidas por outros métodos), e introduz cálculos de funções de 2 pontos que levam a resultados originais.

Flutuações da interface foram tratadas em dimensão $4-\epsilon$ via métodos de grupo de renormalização[73, 74], bem como diretamente em cálculos em dimensão 3[75, 76]. Os cálculos da tensão superficial [74, 77, 76, 78, 79] e do perfil da interface[73, 75] modificados pela presença de flutuações quânticas, foram realizados com sucesso: a tensão superficial foi calculada até a ordem de dois laços[79], levando a previsões de quocientes universais para a interface em modelos de Ising em dimensão 3 (que pertence à mesma classe de universalidade do modelo de teoria de campos escalar); o perfil da interface foi calculado até 1-laço[73, 75], levando a uma comparação detalhada com resultados experimentais[80] para a refletividade de misturas de líquidos binários próximo a uma transição de fase.

Os cálculos em dimensão 3 citados acima podem ser encarados como resultado do cálculo de diagramas de Feynman de uma expansão semiclássica[81]. Esses diagramas envolvem um propagador e vértices semiclássicos[37]: o primeiro é o inverso do hamiltoniano de um problema de Pöschl-Teller em dimensão 1; os últimos incluem um vértice cúbico dependente do campo clássico de fundo, além de um vértice quártico do poço duplo.

Neste trabalho, nós usamos uma expressão analítica fechada para o propagador se-

miclássico que foi obtida recentemente[81], e mostramos que ela corresponde à soma espectral para o inverso do hamiltoniano de um operador do tipo Pöschl-Teller. De fato, a partir de nossa expressão nós recuperamos os autovalores e as autofunções daquele problema. No apêndice B, mostramos que esse procedimento pode ser generalizado e o enunciamos como um teorema geral. Utilizamos nossa expressão mais simples e compacta do propagador para rededuzir resultados conhecidos, estendê-los para dimensões inferiores e obter, em um cálculo original, correlações de dois pontos até a ordem de 1 laço.

As funções de dois pontos que nós calculamos correspondem à auto-energia a grandes distâncias (momenta relativos iguais a zero). Elas dependem da posição desses pontos com relação à interface, uma consequência da quebra de simetria translacional. Tal autoenergia é a soma do quadrado de uma massa (inverso do comprimento de correlação) e de um potencial que reflete a influência da interface nos modos de flutuações. Ao final, sugerimos como comparar as previsões dessas quantidades com experimentos e simulações.

A obtenção dos diagramas de Feynman, bem como outros detalhes de cálculos utilizados neste capítulo podem ser encontrados no apêndice B.

3.1 Propriedades fundamentais de uma interface

Pensemos em um grande recipiente fechado, parcialmente preenchido com água em equilíbrio com seu vapor como protótipo para um sistema com duas fases macroscopicamente separadas. Aparentemente, há uma passagem súbita de uma fase para outra. Entretanto, a intuição e a experiência indicam que, microscopicamente, existe uma zona de transição, ou seja, uma interface de separação entre as duas fases. Dentro dessa região, as propriedades do sistema mudam continuamente das características de uma fase para as da outra fase. No caso do equilíbrio líquido-gás, a interface corresponde a um perfil de densidade que interpola a densidade do líquido com a do gás. Dizemos que a densidade é o parâmetro de ordem da transição líquido-gás. No caso de misturas binárias, esse parâmetro de ordem é a diferença de concentração de algum componente e, em materiais magnéticos anisotrópicos, a magnetização¹. Nesta tese, vamos nos restringir a sistemas com parâmetro de ordem

¹Em sistemas magnéticos, emprega-se o termo parede de domínio no lugar de interface.

escalar, com fases simétricas e com uma única direção relevante que denominaremos direção longitudinal, caracterizada pela coordenada z . As demais direções são ditas transversais.

As propriedades de uma interface podem ser medidas utilizando-se, por exemplo, experimentos de espalhamento na região crítica, como é feito para o hexafluoreto de enxofre² (SF₆). Não faremos aqui conexão direta com dados experimentais, mas resumiremos as propriedades fundamentais de uma interface binária para justificar a utilização de um modelo teórico amplamente usado na literatura na descrição de um tal sistema:

- (a) em cada uma das fases, bem como próximo à interface, as regiões estão correlacionadas dentro de um comprimento de correlação ξ ;
- (b) perto da temperatura crítica, o comprimento de correlação diverge conforme uma lei de potência: $\xi \propto (T_c - T)^{-\nu}$;
- (c) perto da temperatura crítica, a energia livre da interface, ΔF , tende a zero conforme uma lei de potência: $\Delta F \propto (T_c - T)^\mu$.

Em outros termos, a interface se torna cada vez mais difusa e larga à medida em que nos aproximamos da temperatura crítica, vista aqui como um parâmetro. Veremos que a tensão superficial, sendo proporcional à energia livre da interface, se anula na transição.

3.2 O modelo de teoria de campos

Um modelo que captura as propriedades fundamentais das interfaces que estamos estudando[74, 82] é descrito por uma teoria de um campo escalar ϕ sujeito a um potencial do tipo duplo-poço. Nosso cálculo começa com a expressão do funcional gerador de correlações:

$$Z[j] = \oint [\mathcal{D}\varphi] \exp \left\{ -\frac{S}{\lambda} + \int \frac{j\varphi}{\sqrt{\lambda}} d^d x \right\}, \quad (3.1)$$

²Curiosidade: em uma escala de medida da contribuição de uma substância para o aquecimento global, o hexafluoreto de enxofre aparece no topo da lista, sendo milhares de vezes mais potente que o dióxido de carbono.

cuja ação (em um espaço com dimensão espacial igual a d) próximo à temperatura crítica é dada por

$$S[\varphi] = \int d^d x \left[\frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + \frac{1}{4!} (\varphi^2 - \varphi_v^2)^2 \right], \quad (3.2)$$

onde λ é uma constante de acoplamento e j é uma corrente externa; $\varphi = \pm\varphi_v$ são mínimos globais da ação, correspondendo às duas fases simétricas de uma mistura binária líquida, ou às configurações com os spins totalmente alinhados para baixo ou para cima em um sistema de spins do tipo Ising. As configurações φ que entram na expressão do funcional gerador (3.1) satisfazem a uma determinada condição de contorno: são interpolações entre os dois vácuos $\pm\varphi_v$.

Vale notar que não estamos considerando efeitos dinâmicos na expressão (3.1), o que se manifesta na ausência de uma coordenada temporal. Tampouco temos um modelo de teoria de campos a temperatura finita (assunto discutido no capítulo 4). A equação (3.1) é uma expressão, na formulação de integral funcional, para o gerador das funções de correlação entre os vácuos $\pm\varphi_v$.

3.3 A aproximação semiclássica quadrática

A integral que aparece em (3.1) é dominada por configurações que extremizam a ação S , as configurações clássicas, que satisfazem:

$$\nabla^2 \varphi - V'[\varphi] = 0, \quad (3.3)$$

$$\varphi(z = \pm\infty) = \pm\varphi_v, \quad (3.4)$$

onde $V[\varphi] = (\varphi^2 - \varphi_v^2)/4!$ é o potencial. É um fato conhecido que tais soluções são da forma

$$\widehat{\varphi}(z) = \pm\varphi_v \tanh \theta(z), \quad (3.5a)$$

$$\theta(z) = \frac{M}{2} (z - \bar{z}), \quad (3.5b)$$

onde $M \equiv \varphi_v/\sqrt{3}$. Trata-se dos chamados *kinks*, que aqui dependem apenas da coordenada longitudinal, z . O ponto \bar{z} é o ponto onde $\widehat{\varphi}$ se anula. É natural identificar esse ponto com a posição do *kink*. A existência de uma família de soluções independentes, uma para cada escolha de \bar{z} , implicará a existência de um modo nulo,

complicando, em princípio, uma expansão perturbativa em torno dessas soluções. Entretanto, esse problema é contornável por meio do uso de coordenadas coletivas. Na seção 3.4 discutimos um pouco mais a física do modo nulo.

Por agora, admitamos uma escolha particular de \bar{z} , o que representa a quebra da invariância translacional ao longo da direção longitudinal. Para dimensão dois ou três, a dependência de \bar{z} na(s) coordenada(s) transversal(is) caracteriza a interface.

A solução clássica (3.5) é a contribuição de ordem zero para o perfil da interface a ser modificado por flutuações quânticas³. A expansão semiclássica introduz tais flutuações de modo sistemático[81, 37]. Fixemos a seguinte notação:

$$\varphi(x) = \widehat{\varphi}(z) + \lambda^{1/2}\eta(x) . \quad (3.6)$$

Como as condições de contorno já são satisfeitas por $\widehat{\varphi}(z)$, teremos para η :

$$\eta(z = \pm\infty) = 0 . \quad (3.7)$$

Em seguida, expandimos a ação em torno da solução clássica:

$$S[\varphi] = S[\widehat{\varphi}] + \delta S_2[\widehat{\varphi}, \eta] + \delta S[\widehat{\varphi}, \eta] , \quad (3.8)$$

onde agrupamos as contribuições quadráticas em

$$\delta S_2[\widehat{\varphi}, \eta] = \int d^d x \left[\frac{1}{2}(\partial_i \eta)^2 + \frac{1}{12}(3\widehat{\varphi}^2 - \varphi_v^2)\eta^2 \right] \quad (3.9)$$

e deixamos os termos restantes em

$$\delta S[\widehat{\varphi}, \eta] = \int d^d x \left[\frac{\sqrt{\lambda}}{3!}\widehat{\varphi}\eta^3 + \frac{\lambda}{4!}\eta^4 \right] . \quad (3.10)$$

É conveniente dar um nome às contribuições às flutuações que são no máximo quadráticas:

$$Z_2[j] = \int [\mathcal{D}\eta] \exp \left\{ \delta S_2 + \int d^d x j(x)\eta(x) \right\} . \quad (3.11)$$

³Um tratamento simultâneo de flutuações quânticas e térmicas é feito no capítulo 4.

Podemos facilmente resolver a integral em (3.11). Para isso, consideremos a equação

$$\begin{aligned} [-\nabla^2 + \frac{1}{2}(\hat{\varphi}^2 - M^2)] G(x, x') &= \delta^d(x - x') \\ G(z \rightarrow \pm\infty) &= 0, \end{aligned} \quad (3.12)$$

que define G , o propagador semiclássico das flutuações quadráticas em torno da solução de *kink*. Em termos de G , podemos escrever:

$$Z_2[j] = \int [\mathcal{D}\eta] \exp -\frac{1}{2} \left(\int d^d x d^d y \eta(x) G^{-1}(x, y) \eta(y) - 2 \int d^d x j(x) \eta(x) \right). \quad (3.13)$$

Mudando a variável de integração para $\zeta = \eta + \int d^d y G^{-1}(x, y) j(y)$ e integrando, obtemos:

$$Z_2[j] = Z_2[0] \exp \frac{1}{2} \langle j | G | j \rangle, \quad (3.14)$$

onde

$$Z_2[0] = \det^{-1/2} G \equiv \Delta^{-1/2}, \quad (3.15)$$

e

$$\langle j | G | j \rangle = \int d^d x d^d y j(x) G(x, y) j(y). \quad (3.16)$$

Em geral usaremos a notação:

$$\langle \psi | \phi \rangle \text{ para } \int d^d x \psi(x) \phi(x). \quad (3.17)$$

Observe que, para que a integral sobre ζ desse o mesmo resultado que a integral original sobre η na ausência de fontes foi essencial utilizar o fato de que, pela escolha de G , esses campos satisfazem a mesma condição de contorno.

Podemos melhorar a aproximação semiclássica considerando as contribuições em ordem superior nas flutuações. Devemos ainda tratar a questão da invariância translacional da teoria. Entretanto, antes de prosseguirmos, vamos obter uma expressão analítica para G , que será a quantidade chave para o estudo das propriedades da

interface.

3.3.1 O propagador em torno da interface

Usando a expressão para $\widehat{\varphi}$, e tomando a transformada de Fourier nas coordenadas transversais, obtemos a seguinte equação para o propagador:

$$\left[-\partial_z^2 + \vec{k}^2 + M^2 - \frac{3}{2}M^2 \operatorname{sech}^2\theta \right] G(\vec{k}; z, z') = \delta(z - z'), \quad (3.18)$$

onde \vec{k} é o momento transversal, e G é um propagador híbrido de *momentum* e posição. Como propagador das flutuações η , G deve satisfazer

$$G(\vec{k}; \pm\infty, z') = 0. \quad (3.19)$$

O propagador G pode ser visto como o operador inverso do Hamiltoniano para um problema de Schrödinger em dimensão 1 com um potencial de Pöschl-Teller $U(\theta) \equiv \vec{k}^2 + M^2 - (3/2)M^2 \operatorname{sech}^2\theta$, que é um caso especial do potencial de Morse⁴. Por se tratar matematicamente de um problema unidimensional, podemos usar o mesmo procedimento da seção 2.1.2 e construir G em termos de duas soluções linearmente independentes da versão homogênea da equação (3.18). No apêndice B, mostramos que tal equação é equivalente a uma equação hipergeométrica e suas soluções são escritas em termo de dois polinômios do segundo grau. Obtemos, assim, uma expressão para G em termos de funções elementares. Usando as quantidades adimensionais:

$$\vec{\kappa} \equiv 2\vec{k}/M, \quad u \equiv (1 - \tanh \theta)/2, \quad \text{e} \quad b \equiv \sqrt{4 + \vec{\kappa}^2}, \quad (3.20)$$

podemos escrever

$$G = \frac{2}{M} \left\{ \frac{1}{2b} [\phi(b, u)\phi(-b, u')\Theta(u' - u) + \phi(-b, u)\phi(b, u')\Theta(u - u')] \right\}, \quad (3.21a)$$

$$\phi(b, u) \equiv \left(\frac{u}{1-u} \right)^{b/2} \left[1 - \frac{6u}{b+1} + \frac{12u^2}{(b+1)(b+2)} \right] \equiv \left(\frac{u}{1-u} \right)^{b/2} f(b, u). \quad (3.21b)$$

⁴Ver detalhes no apêndice A.

A expressão anterior para G pode ser reescrita como

$$G = \frac{e^{-\sqrt{\vec{k}^2+M^2}(z-z')}}{2\sqrt{\vec{k}^2+M^2}} f(b, u) f(-b, u') \Theta(z-z') + \frac{e^{-\sqrt{\vec{k}^2+M^2}(z'-z)}}{2\sqrt{\vec{k}^2+M^2}} f(-b, u) f(b, u') \Theta(z'-z). \quad (3.22)$$

A última expressão aparece como um dos termos da integral

$$\mathcal{I} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \frac{\psi(q, z)\psi^*(q, z')}{q^2 + \vec{k}^2 + M^2}, \quad (3.23)$$

onde $\psi(q, z) \equiv e^{iqz} f(\frac{-2iq}{M}, u)$. De fato, sua parte em $\Theta(z-z')$ tem pólos no semiplano complexo superior (plano q) em $i\sqrt{\vec{k}^2+M^2}$, $-iM$ e $+iM$, com resíduos dados por

$$e^{-\sqrt{\vec{k}^2+M^2}(z-z')} f(b, u) f(-b, u') / 4\pi i \sqrt{\vec{k}^2+M^2}, \quad (3.24a)$$

$$-12M u(1-u)u'(1-u') / 4\pi i \vec{k}^2, \quad (3.24b)$$

$$-6M \sqrt{u(1-u)}(1-2u) \sqrt{u'(1-u')}(1-2u') / 4\pi i (\vec{k}^2 + \frac{3M^2}{4}), \quad (3.24c)$$

respectivamente. A parte em $\Theta(z-z')$ tem contribuições similares. Combinando-as, obtemos

$$\mathcal{I} = G(\vec{k}; z, z') - \left(\frac{M}{2}\right) \frac{\bar{\eta}_0(z)\bar{\eta}_0(z')}{\vec{k}^2} - \left(\frac{M}{2}\right) \frac{\bar{\eta}_1(z)\bar{\eta}_1(z')}{\vec{k}^2 + \frac{3M^2}{4}}, \quad (3.25)$$

que leva à decomposição espectral para G

$$G = \frac{M}{2} \left\{ \frac{\bar{\eta}_0(z)\bar{\eta}_0(z')}{\vec{k}^2} + \frac{\bar{\eta}_1(z)\bar{\eta}_1(z')}{\vec{k}^2 + \frac{3M^2}{4}} \right\} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \frac{\psi(q, z)\psi^*(q, z')}{q^2 + \vec{k}^2 + M^2}, \quad (3.26)$$

onde identifica-se claramente os autovalores e autofunções para o problema de Pöschl-Teller em questão. Usando a variável u , temos

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= \vec{k}^2; & \bar{\eta}_0(u) &= 2\sqrt{3}u(1-u), \\ \lambda_1 &= \vec{k}^2 + \frac{3M^2}{4}; & \bar{\eta}_1(u) &= \sqrt{6u(1-u)}(1-2u), \\ \lambda_q &= q^2 + \vec{k}^2 + M^2; & \bar{\eta}_q(u) &= e^{iqz} f(-2iq/M, u). \end{aligned} \quad (3.27)$$

No apêndice B, mostramos que esse método de obtenção da decomposição espectral de G por meio de integrais simples pode ser enunciado como um teorema geral.

De (3.27), vemos que existe um modo zero no espectro de G no limite em que

\vec{k} vai a zero. As flutuações na interface associadas a esse modo desempenham um papel especial na teoria de interfaces, como discutido na seção (3.4).

Para os cálculos das seções posteriores [especialmente da seção (3.9)], precisamos da expressão do propagador no subespaço ortogonal ao modo zero, no limite $\vec{k} \rightarrow 0$ ($b \rightarrow 2$). Infelizmente, nossa expressão para esse limite que aparece na referência [81] está incorreta (ele não é ortogonal ao subespaço do modo zero). Aproveitamos a oportunidade para mostrar a expressão correta

$$G(\vec{0}; u, u') = \frac{2}{M} \left\{ \frac{u(1-u')}{4u'(1-u)} \mathcal{G}(u, u') + \frac{3}{2} u(1-u)u'(1-u') \log \left[\frac{u(1-u')}{u'(1-u)} \right] - \frac{11}{2} u(1-u)u'(1-u') \right\} \Theta(u' - u) + (u \leftrightarrow u'), \quad (3.28)$$

onde

$$\mathcal{G}(u, u') = (1-u)^2 + 6u'(1-u)^2 + 6u'^2(1-u) + u'^2. \quad (3.29)$$

Que essa expressão G é de fato ortogonal ao subespaço de modo zero pode ser verificado num cálculo simples.

3.4 A física do modo nulo: ondas capilares

A invariância translacional é quebrada pela presença da interface [eq. (3.5)]. Essa quebra se manifesta na existência de um modo de energia zero $\bar{\eta}_0$, como vimos em (3.27). Na verdade, a esse modo estará associado um subespaço de flutuações do tipo

$$a_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_T} \bar{\eta}_0(z), \quad (3.30)$$

onde \vec{x}_T representa as coordenadas transversais. É simples verificar que $\bar{\eta}_0$ é proporcional à derivada de $\hat{\varphi}$:

$$\bar{\eta}_0(z) = \alpha \frac{d\hat{\varphi}}{dz}, \quad (3.31)$$



Figura 3.1: Diagramas mostrando as duas fases do campo (uma em preto e a outra em branco) separadas por uma interface (a estreita região difusa). Na figura da esquerda, a interface está localizada; na outra, o centro da interface flutua devido às chamadas ondas capilares. Sendo em $d = 2$, o perfil de deslocamento do centro da interface é uma linha.

de modo que a flutuação do perfil da interface associada a

$$f(x_T) = - \int \frac{d^{d-1}k}{(2\pi)^{d-1}} a_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_T} \quad (3.32)$$

é dada (para pequenas amplitudes de flutuação a_q) por:

$$\widehat{\varphi}(z) + \alpha \int \frac{d^{d-1}k}{(2\pi)^{d-1}} a_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_T} \frac{d\widehat{\varphi}}{dz} \approx \widehat{\varphi}(z - \alpha f(\vec{x}_T)) . \quad (3.33)$$

Fisicamente, há um custo energético pequeno em transladar a interface (3.5), inicialmente centrada em \bar{z} , ao longo do perfil f . Essas excitações de grande comprimento de onda e baixa energia são denominadas ondas capilares [ver figura (3.1)] e podem afetar bastante as propriedades da interface e mesmo torná-la instável (tal como as ondas de spin em modelos magnéticos).

Note que, ao contrário do modo zero, todos os demais modos são caracterizados por uma escala característica da interface (basicamente $1/M$), enquanto ao modo nulo estão associadas flutuações macroscópicas da ordem do tamanho do sistema. Pelas suas particularidades, o modo nulo deve ser tratado de forma separada.

A física do modo nulo é conhecida na literatura de interfaces como a teoria das ondas capilares. Diversos modelos semi-fenomenológicos foram propostos, sempre parametrizando a posição do centro da interface por funções f unívocas, suaves⁵, e

⁵O perfil f deve ser constante dentro de uma região com um tamanho da ordem da largura característica da interface.

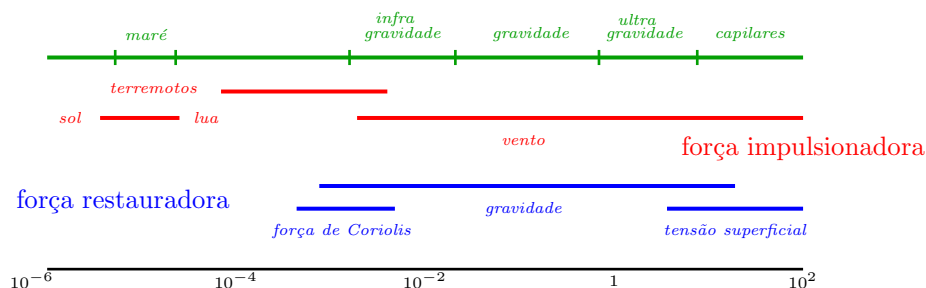


Figura 3.2: Diagrama de classificação de ondas do mar de acordo com a força impulsionadora e a força restauradora. Em particular, ondas capilares são impulsionadas pelo vento e estabilizadas pela tensão superficial. No contexto de interfaces, denominam-se ondas capilares as flutuações de grande comprimento de onda que são estabilizadas pela tensão superficial e também por uma força análoga à da gravidade.

controlando as divergências infravermelhas com a introdução de uma escala no problema. A essa escala podemos associar um significado físico: o efeito de uma força restauradora do perfil da eq. (3.5), como a gravidade, que estabiliza a interface, ou ainda, efeitos de tamanho finito. Resolve-se, em seguida, dentro de alguma aproximação, a termodinâmica nessa escala macroscópica. Finalmente, a contribuição do modo zero é adicionada às dos demais modos.

No modelo *drumhead*[74], a hamiltoniana efetiva para as ondas capilares tem a forma:

$$\mathcal{H}_{DH} = K \int d\vec{x}_T [1 + (\nabla_T f)^2]^{1/2} + \frac{1}{2} \mu^2 \int d\vec{x}_T f^2(\vec{x}_T). \quad (3.34)$$

A integral no primeiro termo do lado direito de (3.34) é a área da interface (o comprimento, na figura 3.1), de modo que esse primeiro termo representa uma força restauradora da interface, desfavorecendo suas deformações. O parâmetro K vai estar associado à tensão superficial. O segundo termo representa um efeito análogo à gravidade ⁶ (sendo μ uma massa associada ao modo zero), e vai ser responsável pela estabilização da interface em sistemas com dimensão menor que 3.

Apesar de não levarmos adiante a discussão de modelos semi-fenomenológicos como o *drumhead*, a abordagem que propomos e a forma fechada que obtivemos para o propagador facilitam a aplicação desses modelos, pois permitem uma separação do

⁶Em hidrodinâmica faz-se a seguinte distinção: ondas capilares são deformações com dinâmica dominada pela tensão superficial, enquanto ondas de gravidade são estabilizadas pela força gravitacional (ver a figura 3.2).

modo nulo que resulta em expressões simples. Utilizaremos essa separação no cálculo do perfil corrigido da interface e de suas correlações. Para dimensões maiores que 3, mostraremos na seção (3.8) que essa separação vai trazer divergências ultravioletas no setor sem o modo zero que eram inexistentes na teoria completa⁷, indicando que $d = 3$ é uma dimensão marginal no tratamento de interfaces.

Ainda não está claro na literatura se existe quebra da invariância translacional em sistemas tridimensionais e se um provável perfil não-invariante corresponde a uma interface do tipo que estamos considerando. Para $d = 2$, a interface não é estável, sendo dominada pela fase translacionalmente invariante. Analisamos esse regime na seção seguinte, onde apresentamos um procedimento para restaurar a simetria de translação usando as chamadas coordenadas coletivas para integrar sobre todos os valores de \bar{z} em (3.5).

3.5 Coordenadas coletivas

Matematicamente, a restauração da simetria é realizada por meio do procedimento de Faddeev-Popov, e introduz um jacobiano. A idéia é trocar a integração sobre o subespaço associado ao modo zero pela integração sobre a variável coletiva \bar{z} .

Para implementar o método, introduzimos a seguinte identidade:

$$\int \frac{dz}{L} \delta \left(\frac{1}{L\lambda^{1/2}} \int d^d x \eta_0(z - \bar{z}) [\varphi(x) - \widehat{\varphi}(x)] \right) J[\varphi] = 1, \quad (3.35)$$

onde

$$\begin{aligned} J[\varphi] &= \frac{1}{\lambda^{1/2}} d^d x \varphi(x) \frac{\partial}{\partial x} \eta(z - \bar{z}) \\ &= \frac{1}{\lambda^{1/2}} d^d x \eta(z - \bar{z}) \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \end{aligned}$$

após integração por partes. Note que, como $\eta_0 \propto \partial \widehat{\varphi} / \partial z$, então

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \eta_0(z - \bar{z}) \widehat{\varphi}(z - \bar{z}) \propto [\widehat{\varphi}^2]_{-\infty}^{\infty} = 0. \quad (3.36)$$

⁷Após tratar o modo zero separadamente e reincorporá-lo aos demais, essas divergências ultravioletas desaparecem.

Assim, podemos omitir o termo $\widehat{\varphi}$ em (3.35). Usando a seguinte relação:

$$S[\widehat{\varphi}] = \int d^d x \left(\frac{\partial \widehat{\varphi}}{\partial x} \right)^2, \quad (3.37)$$

simples de ser verificada, podemos escrever convenientemente o modo nulo normalizado da seguinte maneira:

$$\eta_0(z) = \frac{1}{S[\widehat{\varphi}]^{1/2}} \frac{\partial \widehat{\varphi}}{\partial z}. \quad (3.38)$$

Escrevendo a integração funcional em termos de $\eta = \varphi - \widehat{\varphi}$ e utilizando as relações (3.36) e (3.38), obtemos:

$$\begin{aligned} Z[j] = & \int \frac{dz}{L} \exp \left\{ -S[\widehat{\varphi}]/\lambda + \int d^d x j(x) \widehat{\varphi}(x)/\sqrt{\lambda} \right\} \times \\ & \int [\mathcal{D}\eta] \exp \left\{ -\delta S_2 - \delta S + \int d^d x j(x) \eta(x) \right\} \delta \left(\frac{1}{L} \int d^d x \eta(x) \eta_0(z) \right) J[\widehat{\varphi}, \eta], \end{aligned} \quad (3.39)$$

onde

$$J[\widehat{\varphi}, \eta] = \left(\frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} \right)^{1/2} - \int d^d x \frac{d\eta_0}{dz} \eta(x) \quad (3.40)$$

$$\equiv \left(\frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} \right)^{1/2} - (S[\widehat{\varphi}])^{-1/2} \int d^d x V'[\widehat{\varphi}] \eta, \quad (3.41)$$

No apêndice B, mostramos que o funcional gerador pode ser escrito na forma:

$$Z[j] = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{d\bar{z}}{L} \left(\frac{\widehat{S}}{2\pi\lambda} \right) (\Delta')^{-1/2} \mathcal{P} \left[\widehat{\varphi}, \frac{\partial}{\partial j} z'[j] \right] \exp \left\{ -\frac{\widehat{S}}{\lambda} + \int \frac{j \widehat{\varphi}}{\sqrt{\lambda}} d^d x \right\}. \quad (3.42)$$

onde

$$\mathcal{P}[\widehat{\varphi}, \eta] = \left(1 - \frac{\sqrt{\lambda}}{S[\widehat{\varphi}]} \int V'[\widehat{\varphi}] \eta \right) e^{-\delta S} \quad (3.43)$$

e $V'[\widehat{\varphi}]$ é a derivada do potencial de duplo poço $V \equiv (\varphi^2 - \varphi_v^2)^2/4!$ com relação a φ , calculado na solução de *kink*. Agrupando, como acima, os termos quadráticos,

obtemos:

$$Z'_2[j] = \int [\mathcal{D}\eta] \delta \left(\frac{1}{L} \int d^d x \eta(x) \eta_0(z) \right) \exp \left\{ \delta S_2 + \int d^d x j(x) \eta(x) \right\} . \quad (3.44)$$

Procedendo de maneira análoga, porém utilizando agora o propagador G'_{sc} que é a projeção de G_{sc} no subespaço ortogonal ao modo nulo, obtemos:

$$Z'_2[0] = \det^{-1/2}(G'_{sc})^{-1} \equiv (\Delta')^{-1/2} . \quad (3.45)$$

Assim, temos:

$$Z[j] = \int \frac{dz}{L} \left(\frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} \right)^{1/2} (\Delta')^{-1/2} e^{-S[\widehat{\varphi}]/\lambda + \langle j|\widehat{\varphi}\rangle/\sqrt{\lambda}} \left\{ \mathcal{P} \left[\widehat{\varphi}, \frac{\delta}{\delta j} \right] e^{\frac{1}{2}\langle j|G'_{sc}|j\rangle} \right\} ,$$

seguindo a notação introduzida em (3.17).

Note que a integral sobre z deve ser pensada como

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{L} . \quad (3.46)$$

Entretanto, devido à invariância por translação, o integrando não depende de z e, conseqüentemente, o resultado do limite reproduz o integrando.

3.6 Correções à aproximação quadrática

Os demais termos no funcional gerador de (3.1) podem em princípio ser calculados sistematicamente em uma série semiclássica infinita. Os termos cúbico e quártico na expansão funcional da ação definem os vértices da série semiclássica

$$V_3 = \frac{\lambda^{1/2}}{3!} \widehat{\varphi} \eta^3 ; \quad V_4 = \frac{\lambda}{4!} \eta^4 . \quad (3.47)$$

O termo cúbico envolve a solução clássica. Integrar pelo método de ponto de sela implica em expandir a exponencial em uma série de potências, e então fazer as integrais restantes, as quais se reduzem a produtos de potências da flutuação por uma função gaussiana, levando a uma série para o funcional gerador.

Funções de correlação conexas podem ser obtidas a partir do funcional de energia

livre $F[j] = -\lim_{L \rightarrow \infty} \{\log Z[j]\}$ por meio de derivadas funcionais com respeito à corrente externa $j(x)$. Uma transformada de Legendre leva ao funcional de ação efetiva (funcional de Gibbs) $\Gamma[\phi] = F[j] + \int j \phi / \sqrt{\lambda} d^d x$, onde $\phi(x) \equiv \langle \varphi(x) \rangle$ é o valor esperado do campo φ . Sua derivada funcional com relação a $\phi(x)$ produz funções de vértice irreduzíveis a uma partícula (funções de vértice *1PI*). Correlações conexas e funções de vértice *1PI* podem ser expressas na linguagem usual de diagramas de Feynman, como faremos nas seções que se seguem. Note que uma expansão semiclássica em torno de $\widehat{\varphi}$ (φ_v) leva naturalmente a funções de correlação e de vértice no setor da interface (do vácuo) quando tomamos derivadas funcionais a $j = 0$, para as primeiras, e a $\phi = \widehat{\varphi}$ (φ_v), para as últimas.

Finalmente, será necessário renormalizar a teoria para conectar as várias funções de correlação a parâmetros físicos. Como estamos interessados em comparar correlações na presença de interfaces com correlações na fase homogênea, (*i.e.*, com valores de volumes), usaremos contratermos no setor de vácuo. Os diagramas nos setores do *kink* e do vácuo serão relacionados a valores de parâmetros no interior do volume via um procedimento padrão de renormalização, como está feito no apêndice B.

3.7 A tensão superficial

A tensão superficial para a interface pode ser obtida a partir da diferença entre a energia livre da interface e do vácuo, sob corrente externa nula:

$$\sigma \equiv \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{\Delta F[0]}{A} = \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{F_i[0] - F_v[0]}{A}, \quad (3.48)$$

onde A denota a “área” varrida pelas direções transversais. Seu valor em ordem zero (zero laço) é dado pela diferença das ações clássicas nos dois setores: $\sigma_0 = \lim_{A \rightarrow \infty} (\widehat{S}/\lambda A) = 2M^3/\lambda$, valor que é independente da dimensão espacial.

Até ordem de um laço, a energia livre e o funcional de ação efetiva coincidem[2], de modo que

$$\Delta F[0] = \Gamma[\widehat{\varphi}] - \Gamma[\varphi_v] = \frac{\widehat{S}}{\lambda} + \frac{1}{2} \log \left(\frac{\Delta' 2\pi\lambda}{\Delta_v \widehat{S}} \right), \quad (3.49)$$

onde Δ_v é o determinante do operador de flutuações quadráticas G_v^{-1} no setor do

vácuo. Ignorando termos que se anulam como $(\log A/A)$, temos

$$\sigma = \sigma_0 + \sigma_1 = \sigma_0 + \lim_{A \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2A} \log \frac{\Delta'}{\Delta_v} \right) . \quad (3.50)$$

A contribuição σ_1 pode ser calculada a partir do propagador semiclássico, como mostrado no apêndice B. Obtém-se a seguinte expressão:

$$\sigma_1 = \frac{1}{2} \int \frac{d^{d-1}k}{(2\pi)^{d-1}} \log \left\{ \frac{[b(k) - 1][b(k) - 2]}{[b(k) + 1][b(k) + 2]} \right\} , \quad (3.51)$$

a qual é válida para $k > 0$.

Em $d = 2$ e $d = 3$, a expressão (3.51) precisa ser regularizada e renormalizada. Usamos um valor de corte no espaço de *momentum* transversal para regularizar: em $d = 2$, integramos sobre o intervalo $[-\Lambda, \Lambda]$, enquanto em $d = 3$, integramos sobre um disco de raio Λ . Ignorando termos que se anulam com $1/\Lambda$, obtemos

$$\sigma_1 = -\frac{3M}{2\pi} \log \left(\frac{2\Lambda}{M} \right) + \left(\frac{1}{4\sqrt{3}} - \frac{3}{2\pi} \right) , \quad d = 2 , \quad (3.52a)$$

$$\sigma_1 = -\frac{3M\Lambda}{4\pi} + \left(\frac{3}{8\pi} - \frac{3 \log 3}{32\pi} \right) M^2 , \quad d = 3 . \quad (3.52b)$$

O procedimento de renormalização é descrito em detalhe no apêndice B. Adotamos condições de renormalização a *momentum* zero

$$\bar{\Gamma}_R^{(1)}(0) = 0 \quad ; \quad \bar{\Gamma}_R^{(2)}(0) = M^2 , \quad (3.53)$$

especificando a transformada de Fourier das funções de vértice *1PI* de 1 e 2 pontos. Essas condições levam ao seguinte resultado

$$\sigma_{1R} = \left(\frac{1}{4\sqrt{3}} - \frac{3}{2\pi} \right) , \quad d = 2 , \quad (3.54a)$$

$$\sigma_{1R} = \frac{3}{32\pi} (\log 3 - 4) M^2 , \quad d = 3 . \quad (3.54b)$$

Para $d = 2$, o resultado coincide com a correção à massa do *kink* conhecida na literatura[1]. No apêndice B mostramos que os resultados para $d = 3$ coincidem com os conhecidos na literatura[74, 77, 76, 78, 68].

Podemos ir além da aproximação a 1-laço em nossa expansão, incluindo contri-

buições de primeira ordem nos vértices cúbico e quártico da expansão semiclássica. Usando as equações (3.42), (3.43) e (3.10) para calcular $F[0]$ até essa ordem, obtemos os diagramas de Feynman a dois laços e a contribuição do jacobiano mostradas na figura 3.3. Esses diagramas foram calculados na referência [79] usando-se a representação da soma espectral para o propagador semiclássico. Acreditamos que nossa expressão para o propagador vá confirmar esses resultados e simplificar os cálculos. Entretanto, vamos deixar essa verificação para um estudo futuro, concentrando-nos em correlações a 1-laço. Como os resultados a dois laços foram comparados com simulações de Monte Carlo[83], é importante realizar uma verificação independente. Provavelmente, os calculos serão mais diretos usando-se a expressão compacta para o propagador.

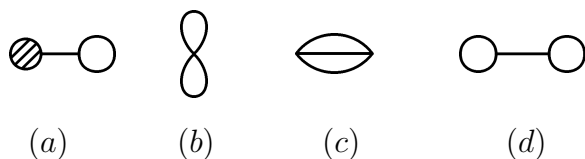


Figura 3.3: Diagramas que contribuem para a tensão superficial até dois laços.

3.8 O perfil da interface

O perfil da interface é dado pelo valor esperado do parâmetro de ordem $\phi(x) = \langle \varphi(x) \rangle$, obtido a partir da derivada de $F[j]$ com relação à corrente externa $j(x)$, a $j = 0$. O cálculo foi realizado no setor de *kink* usando a expansão semiclássica em torno de $\hat{\varphi}$. Podemos expressar as correções ao perfil da interface em termos dos diagramas de Feynman da figura 3.4. Como mostraremos, isso é equivalente a resolver uma equação para ϕ com correções a 1-laço, como está demonstrado nas referências [74, 73, 75]. Mais uma vez, esse cálculo pode ser feito de maneira mais simples e compacta utilizando-se nosso propagador semiclássico.

Antes de prosseguir, voltemos à discussão da invariância translacional iniciada na seção 3.4. Analisando os diagrams da figura 3.4, vemos que o diagrama (a) tem divergências ultravioletas para $d \geq 3$ quando calculado no subespaço ortogonal ao modo zero. De fato, a contribuição isolada do modo zero para $d = 3$ se comporta



Figura 3.4: Contribuições ao perfil da interface. O diagrama (b) representa o termo vindo do jacobiano.

como

$$\int_{\Lambda} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\bar{\eta}_0^2(z)}{\vec{k}^2} \propto \log \frac{2\Lambda}{M} , \quad (3.55)$$

produzindo a referida divergência que não será cancelada pelo processo de renormalização.

Para $d \leq 3$ existem problemas infravermelhos associados ao modo nulo, mas não há divergências ultravioletas. O caso tridimensional é um caso limite onde existem divergências (logaritmas) de ambos os tipos, sugerindo que $d = 3$ seja uma dimensão marginal[74]. Se utilizássemos a versão completa do propagador não teríamos problemas na região ultravioleta. Por outro lado, teríamos problemas na região infravermelha para pequenos valores de \vec{k} .

Seguindo a interpretação das referências [74, 73, 75] para o caso de misturas binárias, entendemos que essas divergências indicam uma instabilidade de uma interface com invariância translacional em dimensão 3. Para tratar esse problema, introduzimos⁸ uma pequena massa μ no subespaço do modo zero, quebrando explicitamente a invariância translacional. Note que a introdução de uma massa ao modo nulo não vai alterar as boas propriedades de convergência da teoria original no limite ultravioleta. A origem física dessa massa em misturas líquidas binárias poderia ser atribuída à ação de um campo gravitacional, ou algum outro efeito que fixe a interface, mas que fosse desprezível no subespaço ortogonal ao modo zero ($\mu \ll M$). Em outras aplicações físicas, o fato de a interface ou a parede de domínio se manterem fixadas por algum efeito externo que quebra a invariância translacional estará manifesto na dependência de μ em algum parâmetro característico desse efeito.

A quebra da invariância translacional traz as seguintes consequências ao nosso

⁸Pode-se mostrar que o tratamento em separado do modo nulo com a ação (3.2) e a introdução da massa μ é equivalente à aproximação gaussiana do modelo *drumhead* [ver eq. (3.34)].

cálculo: i) não é mais necessário trabalhar no subespaço ortogonal ao modo zero, de modo que não haverá termos do tipo jacobiano; ii) usaremos para o propagador semiclássico a expressão que obtivemos no subespaço ortogonal ao modo zero e acrescentaremos um termo correspondente a um modo zero massivo com massa μ

$$G(\vec{k}; z, z') = G'(\vec{k}; z, z') + \frac{M}{2} \frac{\bar{\eta}_0(z) \bar{\eta}_0(z')}{\mu^2}, \quad (3.56)$$

onde $\bar{\eta}_0$ é o modo zero normalizado [eq. (3.27)].

O parágrafo precedente implica no fato de o único diagrama a ser considerado a 1-laço ser o primeiro que consta na figura 3.4. Calculamos esse termo via integração direta sobre a coordenada longitudinal e sobre os *momenta* transversais. Com as condições de renormalização definidas em (3.53), obtemos o perfil renormalizado

$$\phi_R(\theta) = \sqrt{3}M \tanh \theta - \lambda (\alpha \theta \operatorname{sech}^2 \theta + \beta \tanh \theta \operatorname{sech}^2 \theta) \quad , \quad d = 2 \text{ or } 3. \quad (3.57)$$

Observe que na expressão do perfil apenas os coeficientes mudam com a dimensionalidade. Isso é uma consequência direta da forma do propagador semiclássico. Os coeficientes calculados são $\alpha = (2\pi - 3\sqrt{3})/(16\pi M)$, $\beta = -(6\sqrt{3} + 4\pi - 3\sqrt{3}\pi M/\mu)/(24\pi M)$, para $d = 2$, e $\alpha = 3\sqrt{3}(\log 3 - 1)/(32\pi)$, $\beta = (\sqrt{3}/16\pi) \times \log(4M/3\mu)$, para $d = 3$. Note que, para $d = 3$, nossos cálculos coincidem com os da referência [75] para uma escolha adequada das condições de renormalização. Essa última referência foi comparada com resultados experimentais[80], e mostrou-se compatível com os dados disponíveis até o momento. Nossos novos resultados para $d = 2$, mostrados na figura 3.5, ilustram a dependência do perfil da interface na razão μ/M . Obviamente, quanto menor a razão, maior será o efeito. Tais efeitos podem ser testados experimentalmente estudando-se a interface de filmes finos de misturas binárias[84], por exemplo. Aplicações mais recentes, tais como aquelas envolvendo condensados de Bose-Einstein, poderiam também ser usados como testes experimentais em $d = 2$ e $d = 3$ [85].

Como mencionado acima, apenas em $d = 3$ nós somos forçados a quebrar a invariância translacional. Em $d = 2$, a solução de campo médio translacionalmente invariante para a interface é bem definida, de modo que podemos computar suas flutuações usando G' , e incluindo o diagrama (b) da figura 3.4. Contudo, no limite de grande área transversa (no caso, um comprimento) essa contribuição é desprezível.

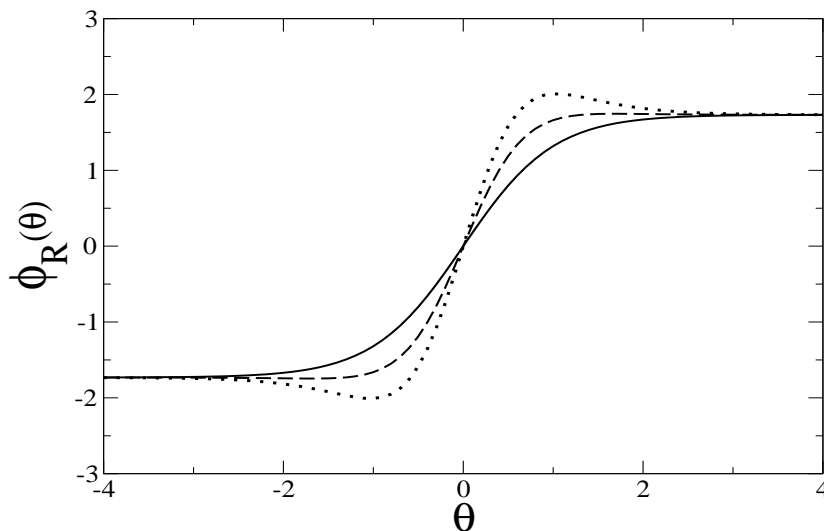


Figura 3.5: Diagramas do perfil em $d = 2$ para $\lambda = 0.1$. A linha sólida é a configuração de *kink*. A curva tracejada corresponde a $\mu/M = 0.01$ e a linha pontilhada a $\mu/M = 0.001$.

O resultado que nós obtivemos é dado em (3.57) com $\alpha = (2\pi - 3\sqrt{3})/(16\pi M)$ e $\beta = -(6\sqrt{3} + 4\pi)/(24\pi M)$ (que é equivalente a tomar $\mu \rightarrow \infty$ na expressão para β). Essa expressão deve ser comparada com o perfil obtido previamente, sem invariância translacional.

3.9 Correlações na interface

Podemos tomar a derivada segunda do funcional de energia livre F com relação à corrente externa j para obter a função conexa de dois pontos $G_c^{(2)}$. Os diagramas de Feynman correspondentes são mostrados na figura 3.6. Assim como na seção anterior, ignoramos o diagrama associado à contribuição do jacobiano se a invariância translacional for quebrada.

O cálculo da função de dois pontos $G_c^{(2)}$ até a ordem de 1-laço é bastante complicada e será deixado para uma publicação futura. Nos restringiremos aos resultados de campo médio obtidos da expansão em ordem mais baixa, correspondendo ao propagador semiclássico, e a correções a 1-laço para $\Gamma^{(2)}$.

Como consequência de o perfil da interface depender da coordenada coletiva \bar{z} , a

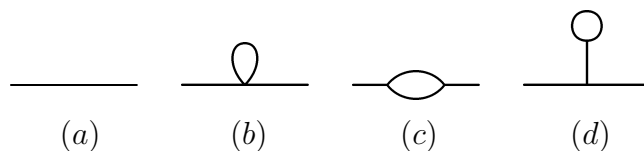


Figura 3.6: Diagramas que contribuem para a função de dois pontos até 1-laço.

transformada de Fourier híbrida $G(\vec{k}; z, z')$ depende explicitamente de z e z' , e não apenas de sua diferença. Introduzindo uma coordenada de centro de massa e uma coordenada coletiva

$$R = \frac{z + z'}{2} , \quad (3.58a)$$

$$\rho = z - z' , \quad (3.58b)$$

podemos reexpressar G em termos de R e ρ . A expressão tem uma forma particularmente simples para $\vec{k} = \vec{0}$

$$G(R, \rho, \vec{0}) = \frac{e^{M\rho}(6(M/\mu)^2 - 4 - 3M\rho) + 8e^{\frac{M}{2}\rho} \cosh(MR) + \cosh(2MR)}{M(1 + e^{M\rho} + 2e^{M\rho/2} \cosh(MR))^2} \Theta(\rho) + (\rho \leftrightarrow -\rho) \quad (3.59)$$

Se fizermos uma transformada de Fourier na coordenada relativa ρ , obtemos uma função \tilde{G} que depende de R , k_ρ e \vec{k} . Aplicando em $k_\rho = 0$ e $\vec{k} = \vec{0}$ corresponde a integrar sobre todas as coordenadas relativas.

Podemos definir uma susceptibilidade χ como

$$\chi = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dR \tilde{G}(R; 0, \vec{0}) . \quad (3.60)$$

Analogamente, podemos excluir o modo nulo e definir uma susceptibilidade χ' usando \tilde{G}' na fórmula anterior. Para ambos os casos, obtemos $\chi = 1/M^2$, como no setor de vácuo. Isso é consequência do fato de que os dois modos mais baixos são localizados, enquanto que os modos do contínuo se comportam assintoticamente como ondas planas de massa M . Desse modo, o decaimento exponencial de nosso propagador quando a distância relativa cresce é da forma $\exp(-M\sqrt{\rho^2 + \rho_T^2})$, onde $\vec{\rho}_T$ é a coordenada relativa transversa. O comprimento de correlação é dado por

$1/M$, que é independente de R , mesmo quando se atribui uma pequena massa μ ao modo de energia mais baixa. Em princípio, a susceptibilidade e o comprimento de correlação poderiam depender da posição dos dois pontos com respeito à interface, i.e., de R . Contudo, as fases em ambos os lados da interface são degeneradas em nosso modelo. Elas apresentam o mesmo comprimento de correlação $1/M$. Portanto, é natural que M seja a escala. Um modelo onde duas fases com diferentes massas (inversos do comprimento de correlação) coexistissem levaria provavelmente a quantidades dependentes da posição.

O cálculo da função de vértice de dois pontos $\Gamma^{(2)}$ até 1-laço envolve menos integrais que a do seu inverso, $G_c^{(2)}$. Fazendo

$$\Gamma^{(2)}(x, x') \equiv [G_c^{(2)}]^{-1}(x, x') = G^{-1}(x, x') + \Sigma(x, x') \quad , \quad (3.61)$$

onde o primeiro termo no lado direito da equação é o inverso do propagador semiclássico, então $\Sigma(x, x')$ será a contribuição para a auto-energia do setor de *kink*, e pode ser identificada com dois dos três diagramas da figura 3.6 sem patas externas, como mostrado na figura 3.7 (o diagrama (d) é obtido como combinação de $\Gamma^{(1)}$ e $\Gamma^{(3)}$ com G^{-1}).

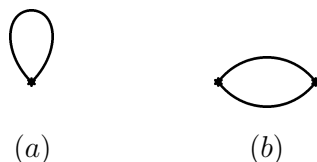


Figura 3.7: Diagramas que contribuem para a autoenergia até a ordem de 1-laço.

É importante enfatizar que o próprio propagador semiclássico já dá uma contribuição Σ_{sc} para a auto energia com relação ao setor do vácuo

$$G^{-1}(x, x') = G_v^{-1}(x, x') + \Sigma_{sc}(x, x') \quad , \quad (3.62)$$

onde G_v^{-1} é o inverso do propagador livre. A equação (3.62) define Σ_{sc} , da mesma maneira que a equação (3.61) define Σ . Além disso, os diagramas da figura 3.7, quando calculados com o propagador livre, e com φ_v no lugar de $\hat{\varphi}$ nos vértices cúbicos, produz $\Sigma_v(x, x')$, definido por

$$\Gamma_v^{(2)}(x, x') \equiv [G_v^{(2)}]^{-1}(x, x') = G_v^{-1}(x, x') + \Sigma_v(x, x') \quad . \quad (3.63)$$

As equações (3.61), (3.62) e (3.63) levam a

$$\Delta\Gamma^{(2)}(x, x') = \Gamma^{(2)}(x, x') - \Gamma_v^{(2)}(x, x') = \Sigma_{sc}(x, x') + \Sigma(x, x') - \Sigma_v(x, x') = \Delta\Sigma, \quad (3.64)$$

a diferença de auto-energia entre os setores do *kink* e de vácuo.

Como no caso da função de dois pontos, a transformada de Fourier híbrida $\Delta\bar{\Sigma}(\vec{k}; z, z')$ dependerá de z e de z' , e não apenas da diferença, de modo que podemos reescrever $\Delta\bar{\Sigma}$ em termos de R e ρ . Fazendo, como antes, uma transformada de Fourier na coordenada ρ , obtemos a função $\Delta\tilde{\Sigma}$ que depende de R , k_ρ e \vec{k}

$$\Delta\tilde{\Sigma}(R; k_\rho, \vec{k}) = \tilde{\Gamma}^{(2)}(R; k_\rho, \vec{k}) - \tilde{\Gamma}_v^{(2)}(R; k_\rho, \vec{k}) . \quad (3.65)$$

A dependência explícita na coordenada R do centro de massa significa que a correlação vai depender não apenas da distância relativa entre os pontos, mas também de se eles se encontram do mesmo lado ou de lados opostos à interface. Seria interessante propor um experimento para verificar esse efeito.

Para entender o significado físico da autoenergia nesse contexto é instrutivo considerar o termo de mais baixa ordem definido na equação (3.62). Da equação (3.18), temos que

$$G^{-1}(\vec{k}; z, z') = \left[-\partial_z^2 + \vec{k}^2 + M^2 - \frac{3}{2}M^2\text{sech}^2\theta \right] \delta(z - z'), \quad (3.66)$$

com o mesmo $\theta(z)$ definido acima. Em termos de R e de ρ , temos

$$\Sigma_{sc}(R, \rho) = \left[-\frac{3}{2}M^2\text{sech}^2\theta\left(R + \frac{\rho}{2}\right) \right] \delta(\rho) . \quad (3.67)$$

Integrando sobre a coordenada ρ , i.e., tomando a transformada de Fourier a $k_\rho = 0$, obtemos um potencial que depende de R , $V_{sc}(R) = -(3/2)M^2\text{sech}^2\theta(R)$, que se anula no infinito. Portanto, a contribuição de mais baixa ordem para $\tilde{\Gamma}^{(2)}(R; k_\rho, \vec{k})$ a *momentum* relativo igual a zero é dada pela massa ao quadrado mais um potencial de flutuação que se anula quando $R \rightarrow \infty$. A contribuição de primeira ordem pode ser separada de modo análogo: o termo constante quando $R \rightarrow \infty$ pode ser interpretado graficamente como oriundo dos diagramas da figura 3.7 calculados a *momentum* relativo nulo com propagadores do vácuo e com $\hat{\varphi}$ substituído por φ_v no diagrama (b). Essas são exatamente as correções à massa (inverso do comprimento

de correlação do *bulk*) ao quadrado. Nossas condições de renormalização (3.53) garantem que o termo constante é exatamente a massa renormalizada ao quadrado; por outro lado, a contribuição para a flutuação do potencial, que se anula quando $R \rightarrow \infty$, é dada por $\Delta\tilde{\Sigma}(R; 0, \vec{0})$. A flutuação do potencial reflete a presença da interface.

Usando nosso propagador para calcular os diagramas, obtemos para o diagrama (a) da figura 3.7

$$\frac{\lambda}{24} \operatorname{sech}^2\theta \left(\sqrt{3} \tanh^2\theta + \frac{9}{4} \left(\frac{M}{\mu} - \frac{2}{\pi} \right) \operatorname{sech}^2\theta \right), \quad d = 2, \quad (3.68a)$$

$$\frac{3\lambda M}{32\pi} \operatorname{sech}^2\theta \left((\log 3) \tanh^2\theta + \log \left(\frac{2M}{\mu} \right) \operatorname{sech}^2\theta \right), \quad d = 3. \quad (3.68b)$$

Esses cálculos foram feitos utilizando o programa Mathematica. As integrais para o diagrama (b) da figura 3.7 tiveram que ser feitas numericamente, repetindo-se o cálculo para diversos valores de R para traçar a curva do potencial modificado exibido na figura 3.8. Como antes, nós adotamos as condições de renormalização indicadas em (3.53). O potencial modificado é muito sensível ao valor da razão μ/M , especialmente no caso $d = 2$. Uma comparação entre as figuras 3.8 e 3.5 sugere que seria mais fácil medir efeitos de flutuações do potencial que flutuações no perfil da interface.

Espalhamento de radiação na interface pode ser usado para extrair os fatores de estrutura, que são uma medida da função de dois pontos. Um cálculo numérico de $\tilde{G}^{(2)}(R; k_\rho, \vec{k})$ permitirá uma comparação com dados de experimentos com misturas binárias ou de aplicações mais recentes envolvendo condensados de Bose-Einstein. Como foi dito acima, esse cálculo é bastante complicado, embora possível. Uma vez que $\tilde{\Gamma}^{(2)}(R; k_\rho, \vec{k})$ mede a mudança na energia livre (que coincide com a ação efetiva em primeira ordem em laços) quando o perfil muda, uma medida direta de nosso cálculo poderia ser efetuada medindo-se experimentalmente as mudanças obtidas para pontos distantes com diferentes valores de R . Alternativamente, simulações de Monte Carlo poderiam ser usadas como teste.

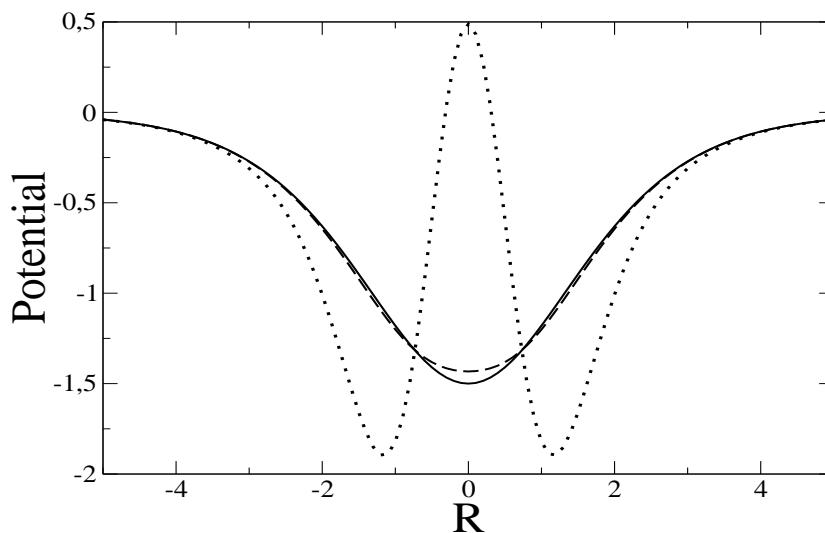


Figura 3.8: Potencial como função de R para $\mu/M = 0.1$ e $\lambda = 0.1$. A linha cheia é $V_{sc}(R)$; as demais linhas correspondem ao potencial modificado em $d = 3$ (tracejada) e $d = 2$ (pontilhada).

3.10 Conclusão

Analisamos neste capítulo o estudo de interfaces em um esquema unificado de uma expansão semiclássica. Além de reproduzir resultados conhecidos na literatura, estendemos esses resultados para uma dimensão mais baixa fazendo uso de uma forma fechada para o propagador semiclássico. Calculamos também susceptibilidades e correlações a dois pontos, cujas previsões podem ser comparadas com experimentos.

Com nosso ingrediente básico — o propagador semiclássico —, reduzimos o cálculo das quantidades físicas ao cálculo de diagramas de Feynman cujos propagadores e vértices carregam informação sobre a solução clássica de fundo.

Diversos sistemas de interesse podem se aproveitar do tratamento semiclássico que desenvolvemos. Assim, o cálculo de correlações em modelos supersimétricos é um trabalho futuro promissor. Analogamente, correlações para misturas de condensados de Bose-Einstein separados por uma interface são também aplicações relevantes. Nesse caso, a existência de técnicas experimentais abre a possibilidade de verificações da teoria. Também promissoras são as possíveis comparações com dados experimentais em líquidos binários mais tradicionais. Enfatizamos que nosso tratamento permite um tratamento completo, em separado, dos efeitos de capilari-

dade (aqueles no subespaço do modo zero) e de ondas não capilares. Refletividades e fatores de forma extraídos de técnicas de espalhamento são as quantidades físicas a serem medidas e submetidas a comparação. Simulações de Monte Carlo também podem ser usadas como teste.

Esperamos poder calcular outras correlações de interesse, se os diagramas de Feynman correspondentes levarem a integrais tratáveis. Como mencionado acima, o cálculo a dois laços feito anteriormente para a tensão superficial pode servir como um teste da simplificação introduzida por nossa expressão para o propagador.

Finalmente, é importante notar que nossa técnica de somar a decomposição espectral pode ser útil em outros contextos onde seja possível reduzir a equação diferencial para o propagador a uma equação diferencial ordinária. No caso analisado, uma simplificação adicional vem do fato de que a série hipergeométrica em questão tinha um número finito de termos não nulos. Em particular, campos de fundo com simetria esférica seriam candidatos naturais a serem investigados. Veremos isso no próximo capítulo.

4

Teoria de campos com simetria radial: o propagador na presença do instanton

Neste capítulo, discutiremos a construção do propagador semiclássico em problemas de teoria quântica de campos com simetria radial. O texto que apresentaremos é baseado em [42].

O estudo de sistemas com potenciais esfericamente simétricos inclui casos fisicamente relevantes envolvendo instantons, monopólos, vórtices, etc. Essas soluções topológicas desempenham papéis especiais em diferentes teorias. Em particular, expansões semiclássicas em torno de instantons contêm efeitos não perturbativos de tunelamento que são desprezados em todas as ordens numa teoria perturbativa em torno de um vácuo trivial, como acontece com a teoria de perturbação usual.

Abordagens envolvendo instantons em QCD voltaram a despertar interesse. O sucesso fenomenológico de cálculos com instantons indica que eles desempenham papel importante em diversos aspectos da interação forte, como a quebra espontânea da simetria quirais[86]. Outros trabalhos consideram novos efeitos dos instantons no espalhamento de partons de alta energia, bem como na supressão do tunelamento induzido por colisões[87].

Usaremos o método conhecido de construção da função de Green multidimensional a partir de uma função de Green radial mais simples[45, 46]. Como a direção radial é a única direção relevante, podemos fatorar a dependência angular, obtendo essenci-

almente um problema unidimensional, tratável. Essa técnica pode ser útil em casos não-triviais e, como aplicação, exibimos um cálculo simples, embora longo, de construção do propagador do instanton em uma teoria de calibre $SU(2)$ [88]. Esse propagador foi obtido originalmente utilizando-se métodos *ad hoc* muito elaborados[89]. Nós reproduzimos aqui esse propagador usando um procedimento geral válido para uma ampla classe de potenciais com simetria radial. Como subproduto, encontramos harmônicos esféricos generalizados que naturalmente são adaptados à decomposição da álgebra $so(4)$ na soma $su(2) \oplus su(2)$. Tais funções podem ser úteis em outros problemas envolvendo acoplamentos spin-órbita em dimensão quatro.

4.1 Decomposição em ondas parciais

Consideremos uma teoria n -dimensional euclideana para um campo escalar $\varphi(x)$, cuja ação tenha a forma:

$$S[\varphi] = \int d^n x \left[\frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + V(\varphi) \right], \quad (4.1)$$

O funcional gerador é

$$Z[j] = \oint [\mathcal{D}\varphi] \exp \left\{ -S[\varphi] + \int j \varphi d^n x \right\}. \quad (4.2)$$

Na aproximação semiclássica, o funcional $Z[j]$ é dominado pelos pontos estacionários da ação. Admitiremos que uma tal solução clássica, $\bar{\varphi}$, dependa somente da coordenada radial, r :

$$\left(\frac{\delta S}{\delta \varphi} \right)_{\bar{\varphi}(r)} = -\nabla^2 \bar{\varphi} + V'(\bar{\varphi}) = 0. \quad (4.3)$$

Como vimos, as primeiras contribuições das flutuações quânticas em torno de $\bar{\varphi}$ envolvem o propagador semiclássico, que é definido pela equação:

$$[-\nabla^2 + V''(\bar{\varphi})] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^n(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.4)$$

Evidentemente, $V''(\bar{\varphi})$ é função apenas de r . Seguindo[90], escrevemos essa função

de Green como uma expansão em ondas parciais n -dimensional:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} g_l(r, r') C_l^{\frac{n-2}{2}}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{r}}'), \quad (4.5)$$

onde $C_l^{\frac{n-2}{2}}$ são polinômios de Gegenbauer [ver [90], páginas 462 e 463, equação 11]. Para $n = 3$, temos simplesmente $C_l^{1/2} = P_l(t)$, um polinômio de Legendre e, para $n = 4$, um polinômio de Chebyshev de segunda espécie.

O laplaciano em dimensão n é dado por:

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{1}{r^{n-1}} \frac{\partial}{\partial r} r^{n-1} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \nabla_0^2 \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{n-1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \nabla_0^2 \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde ∇_0^2 atua sobre as variáveis angulares. Os polinômios que são autofunções de ∇_0^2 formam o espaço de Hilbert dos polinômios harmônicos. Tal espaço é a soma direta infinita dos espaços dos polinômios harmônicos de grau l e n variáveis, \mathcal{H}^{nl} , com

$$\dim \mathcal{H}^{nl} = \frac{(2l+n-2)(n+l-3)!}{(n-2)!!}, \quad (4.7)$$

e, se $h \in \mathcal{H}^{nl}$,

$$\nabla_0^2 h = -l(l+n-2)h.$$

Portanto, a restrição do laplaciano n -dimensional a cada subespaço indexado por l é dada por:

$$\nabla_l^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{n-1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+n-2)}{r^2}. \quad (4.8)$$

Vemos que, exceto para $n = 1$, o laplaciano envolve uma derivada primeira na coordenada radial. Esse termo é que atrapalha a aplicação direta de resultados de mecânica quântica unidimensional que permitem determinar completamente o propagador semiclássico em termos da solução clássica. Contudo, o fato de reduzirmos o problema original a um problema unidimensional traz simplificações que podem dar origem a resultados exatos em alguns casos.

A função delta n -dimensional pode ser fatorada em suas partes radial e angular:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(r - r') \frac{\Gamma(\frac{n-1}{2})}{2\pi^{\frac{n-1}{2}}} \frac{\delta(\hat{r} \cdot \hat{r}' - 1)}{r^{n-1}}. \quad (4.9)$$

De fato, essa expressão se anula sempre que $r \neq r'$ and $\hat{r} \cdot \hat{r}' \neq 1$, e sua integral sobre todo o espaço vale 1. Note também que os polinômios de Gegenbauer formam um conjunto completo sobre a esfera, ou seja:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sigma_{nl} C_l^{\frac{n-2}{2}}(\hat{r} \cdot \hat{r}') = \delta(\hat{r} \cdot \hat{r}' - 1), \quad (4.10)$$

onde

$$\sigma_{nl} = \frac{(2l + n - 2)\Gamma^2(\frac{n-2}{2})}{2^{4-n}\pi\Gamma(n-2)}. \quad (4.11)$$

Portanto, se formos capazes de resolver a equação:

$$[\nabla_l^2 + V''(\bar{\varphi})] g_l(r, r') = \delta(r - r'), \quad (4.12)$$

(sob condições de contorno determinadas), então a função de Green seria dada por:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = b_n \sum_{l=0}^{\infty} (2l + n - 2) \frac{g_l(r, r')}{(r')^{n+1}} C_l^{\frac{n-2}{2}}(\hat{r} \cdot \hat{r}'), \quad (4.13)$$

onde

$$b_n = \frac{\Gamma(\frac{n-1}{2})\Gamma^2(\frac{n-2}{2})}{2^{5-n}\pi^{\frac{n+1}{2}}\Gamma(n-2)}. \quad (4.14)$$

Como vimos na seção 2.1.2, podemos obter a solução de (4.12) a partir de duas soluções da seguinte equação homogênea:

$$[\nabla_l^2 + V''(\bar{\varphi})] \eta_l(r) = 0. \quad (4.15)$$

A única diferença com relação ao cálculo da seção (2.1.2) é que agora o wronskiano não será constante como lá. De fato, se ϕ_1 e ϕ_2 são duas soluções de (4.15), então,

de $W = \phi_1\phi_2' - \phi_2\phi_1'$, obtemos:

$$\begin{aligned}
W'(r) &= \phi_1\phi_2'' - \phi_2\phi_1'' \\
&= \phi_1 \left(-\frac{n-1}{r}\phi_2' + \left[\frac{l(l+n-2)}{r^2} + V(r) \right] \phi_2 \right) - \phi_2 \left(-\frac{n-1}{r}\phi_1' + \right. \\
&\quad \left. + \left[\frac{l(l+n-2)}{r^2} + V(r) \right] \phi_1 \right) \\
&= -\frac{n-1}{r} [\phi_1\phi_2' - \phi_2\phi_1'] \\
&= -\frac{n-1}{r} W(r),
\end{aligned}$$

de forma que

$$W(r) = \frac{C}{r^{n-1}}. \quad (4.16)$$

O $1/r^{n-1}$ no wronskiano irá justamente cancelar o fator em r^{n-1} da delta radial. Para obter a constante C , é conveniente multiplicar $W(r)$ por r^{n-1} e tomar o limite $r \rightarrow \infty$ (ou aplicar a relação acima num ponto conveniente).

O ponto crucial aqui é resolver cada equação (4.15) para cada valor de l . Uma vez conhecidas as funções de Green radiais g_l , usamo-las para obter $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Esperamos que sempre que o propagador puder ser calculado usando métodos *ad hoc*, então seja possível reconstruí-lo usando essa técnica tradicional. Verificamos esse palpite no importante caso do propagador escalar na presença de um campo de fundo do instanton, que tem solução exata conhecida[89].

Terminamos esta seção ilustrando o caso particular trivial no qual $V''(\bar{\varphi}) = 0$. Duas soluções linearmente independentes da versão homogênea da equação (4.15) são $\psi_1(r) = r^{-(l+n+2)}$ e $\psi_2(r) = r^l$. No caso livre, o wronskiano pode ser calculado diretamente a partir da definição:

$$W(r) = \psi_1\partial_r\psi_2 - \psi_2\partial_r\psi_1 = \frac{(2l+n-2)}{r^{n-1}}. \quad (4.17)$$

Usando a receita da seção (2.1.2), obtemos:

$$g_{nl}(r, r') = \begin{cases} b_1\psi_1(r) + b_2\psi_2(r) - \Omega(r, r'), & r > r', \\ b_1\psi_1(r) + b_2\psi_2(r), & r' > r, \end{cases} \quad (4.18)$$

onde [ver (2.22)]:

$$\Omega(r, r') = \frac{\psi_1(r)\psi_2(r') - \psi_2(r)\psi_1(r')}{w(r')}. \quad (4.19)$$

Impondo que g_{nl} seja bem comportada em $r = 0$ e $r = \infty$, obtemos:

$$g_{nl}(r, r') = -(r')^{n-1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+n-2}}. \quad (4.20)$$

Finalmente, somando sobre l e usando o fato de que

$$\frac{1}{(1 - 2ty + y^2)^\lambda} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l^\lambda(t) y^l \quad (4.21)$$

obtemos:

$$\begin{aligned} G^{\text{livre}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -\frac{b_n}{r_{>}^{n-2}} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^l C_l^{(n-2)/2}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{r}}') \\ &= -\frac{b_n}{r_{>}^{n-2}} \frac{1}{[1 + 2 \cos(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{r}}') \frac{r_{<}}{r_{>}} + \frac{r_{<}^2}{r_{>}^2}]^{\frac{n-2}{2}}} \\ &= -b_n \frac{1}{[r_{>}^2 + 2 \cos(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{r}}') r_{<} r_{>} + r_{<}^2]^{\frac{n-2}{2}}} \\ &= -b_n \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{n-2}}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

com $b_3 = 1/4\pi$ e $b_4 = 1/4\pi^2$, em particular.

Nas próximas seções, mostramos como nosso método pode ser aplicado para se obter a expressão exata do propagador escalar na presença do instanton.

4.2 Propagador escalar na presença do instanton

Em um trabalho notável, Belavin, Polyakov, Shvarts e Tyupkin[91] mostraram que

$$A_\mu^a(\mathbf{r}) = \frac{2\eta_{a\mu\nu} \mathbf{r}^\nu}{\mathbf{r}^2 + \rho^2} \quad (4.23)$$

é um mínimo da ação euclideanda de Yang-Mills $SU(2)$ com carga topológica igual a 1. Nessa fórmula, $\eta_{a\mu\nu}$ são os chamados símbolos de 't Hooft (ver apêndice C). O parâmetro ρ é a chamada escala do instanton. Sendo arbitrária, não perderemos

generalidade ao escolher $\rho = 1$.

Flutuações em torno dessa solução estacionária da ação levam ao propagador escalar na presença do instanton:

$$-D^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.24)$$

onde $D_\mu = \partial_\mu - iT_a A_\mu^a$ é a derivada covariante e T^a são geradores de isospin $SU(2)$. Vamos nos deter nesse trabalho no caso de isospin igual a $1/2$, caso em que T^a pode ser escrito em termos de matrizes de Pauli τ^a como $T^a = \tau^a/2$. Valores maiores de spin e isospin podem ser considerados em um tratamento análogo, como comentaremos na seção 4.3.

Assim, o operador D^2 é essencialmente a soma de um laplaciano em dimensão 4 e termos envolvendo T^2 e o acoplamento spin-órbita com $\mathbf{L}_{\mu\nu} = x_\mu \partial_\nu - x_\nu \partial_\mu$. Seguindo a notação sugerida por 't Hooft[88], usaremos $L^2 = -(1/8)L_{\mu\nu}L_{\mu\nu}$ e introduziremos os seguintes operadores:

$$M_a = -\frac{i}{2} \eta_{a\mu\nu} x^\mu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \quad \text{and} \quad N_a = -\frac{i}{2} \bar{\eta}_{a\mu\nu} x^\mu \frac{\partial}{\partial x^\nu}, \quad (4.25)$$

onde os símbolos $\eta_{a\mu\nu}$ e $\bar{\eta}_{a\mu\nu}$ são definidos no apêndice C. A relação inversa é $L_{\mu\nu} = i\eta_{a\mu\nu}M^a + i\bar{\eta}_{a\mu\nu}N^a$.

Os dois conjuntos de operadores em (4.25) obedecem a álgebra $SU(2)$ e comutam entre si, realizando a decomposição de álgebra de Lie: $so(4) = su(2) \oplus su(2)$. Na referência [88], 't Hooft usa a definição sugestiva¹ $L^2 = -L_{\mu\nu}L_{\mu\nu}/8$, o que dá $L^2 = M^2 = N^2$.

Fazendo todas as substituições, obtemos:

$$D^2 = \partial_r^2 + \frac{3}{r} \partial_r - \frac{4L^2}{r^2} - \frac{8}{1+r^2} \mathbf{T} \cdot \mathbf{M} - \frac{4r^2}{(1+r^2)^2} T^2. \quad (4.26)$$

De acordo com comentários anteriores, podemos pensar no acoplamento $\mathbf{T} \cdot \mathbf{M}$ como um acoplamento ordinário $SU(2)$ e introduzir $\mathbf{J}_1 = \mathbf{M} + \mathbf{T}$. Após alguma

¹Para evitar confusão, adotaremos o símbolo ℓ para indicar o momentum angular na notação de 't Hooft, e o símbolo l para o autovalor usual. Eles estão relacionados por $\ell = l/2$.

manipulação, obtemos:

$$\left[\partial_r^2 + \frac{3}{r} \partial_r - \frac{4L^2}{r^2} - \frac{4}{1+r^2}(J_1^2 - L^2) + \frac{4T^2}{(1+r^2)^2} \right] \psi = 0, \quad (4.27)$$

ou, quando ψ é uma autofunção de J_1^2 , L^2 e T^2 (com isospin 1/2):

$$\left[\partial_r^2 + \frac{3}{r} \partial_r - \frac{4\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{4}{1+r^2}(j-\ell)(j+\ell+1) + \frac{3}{(1+r^2)^2} \right] \psi = 0. \quad (4.28)$$

É simples mostrar que a equação (4.28) é equivalente a uma equação de Morse-Rosen (ver apêndice A). Duas soluções independentes podem ser obtidas para cada ℓ em termos de funções hipergeométricas. Usando a técnica descrita no apêndice A é possível mostrar que duas soluções independentes dessa equação são:

$$\psi_+(r) = \frac{1}{r^{2(\ell+1)}(1+r^2)^{j-\ell}} F^{(+)}(r)$$

e

$$\psi_-(r) = r^{2\ell}(1+r^2)^{j-\ell} F^{(-)}(r),$$

onde

$$F^{(\pm)}(r) = {}_2F_1^{(\pm)}\left(\pm a + 1/2 + \sqrt{\gamma + 1/4}, \pm a + 1/2 - \sqrt{\gamma + 1/4}, 1 \pm a \pm b, \frac{1}{1+r^2}\right),$$

com $a = j - \ell$, $b = j + \ell + 1$ e $\gamma = T^2$. Em particular, $\sqrt{\gamma + 1/4} = 4t + 1/2 = 1$, no caso de isospin 1/2. Para $\ell = 0$ elas são dadas por [88, 47]:

$$\psi_0^{(a)}(r) = \frac{1}{r^2 \sqrt{1+r^2}} \quad \text{e} \quad \psi_0^{(b)}(r) = \frac{2+r^2}{\sqrt{1+r^2}}, \quad (4.29)$$

enquanto para $\ell \neq 0$, temos:

$$\psi_{j\ell}^{(a)}(r) = \frac{1}{r^{2(\ell+1)}(1+r^2)^{j-\ell}} F_{j\ell}^{(a)}\left(\frac{1}{1+r^2}\right) \quad (4.30)$$

e

$$\psi_{j\ell}^{(b)}(r) = r^{2\ell}(1+r^2)^{j-\ell} F_{j\ell}^{(b)}\left(\frac{1}{1+r^2}\right), \quad (4.31)$$

onde

$$F_{j\ell}^{(a)}(u) = 1 \quad \text{e} \quad F_{j\ell}^{(b)}(u) = 1 + \frac{u}{2\ell + 1} \quad \text{se } j = \ell + 1/2, \quad (4.32)$$

e

$$F_{j\ell}^{(a)}(u) = 1 - \frac{u}{2\ell + 1} \quad \text{e} \quad F_{j\ell}^{(b)}(u) = 1 \quad \text{se } j = \ell - 1/2. \quad (4.33)$$

O próximo passo é encontrar uma base de autofunções comuns de J_1^2, L^2, M_3 e N_3 .

4.2.1 Harmônicos esféricos adaptados a $o(4) = su(2) \oplus su(2)$.

A decomposição da álgebra de Lie $o(4)$ em $su(2) \oplus su(2)$ é geralmente obtida nos livros combinando-se os seis operadores de momentum angular em dois conjuntos independentes de três operadores. Essa separação é muito sugestiva devido à sua relação com a álgebra usual de momentum angular em dimensão três. Seguindo essa idéia, seria conveniente construir uma base do espaço de funções sobre S^3 composta por autofunções com propriedades análogas aos harmônicos esféricos Y_{lm} usuais. Não encontramos funções com essas propriedades na literatura. De fato, os harmônicos esféricos generalizados usados nos livros são dados em termo de funções esféricas zonais envolvendo polinômios de Gegenbauer. Entretanto, essas funções não são adaptadas à decomposição citada acima para a álgebra de Lie de $O(4)$.

Para se construir uma tal base é conveniente definir as seguintes variáveis complexas:

$$z_1 = x_1 + i x_2 \quad \text{e} \quad z_2 = x_3 + i x_4,$$

e trabalhar com z_1, z_1^*, z_2 e z_2^* em vez de x_1, x_2, x_3 e x_4 . No apêndice C mostramos que

$$L^2 = \partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2 + \partial_4^2 = 4(\partial_{z_1} \partial_{z_1^*} + \partial_{z_2} \partial_{z_2^*})$$

e

$$M_3 = \frac{1}{2} \left[(z_1 \partial_{z_1} - z_1^* \partial_{z_1^*}) + (z_2 \partial_{z_2} - z_2^* \partial_{z_2^*}) \right],$$

$$N_3 = \frac{1}{2} \left[(z_1 \partial_{z_1} - z_1^* \partial_{z_1^*}) - (z_2 \partial_{z_2} - z_2^* \partial_{z_2^*}) \right].$$

Note que M_3 e N_3 rodam independentemente os planos $(x_1, x_2, 0, 0)$ e $(0, 0, x_3, x_4)$. Portanto, as funções de $x_1^2 + x_2^2 = |z_1|^2$ e $x_3^2 + x_4^2 = |z_2|^2$ são invariantes. É possível mostrar que as funções H_{lmn} , definidas por:

$$H_{\ell,m,n} = \frac{1}{\sqrt{A_{\ell mn}}} z_2^{*m-n} z_1^{\ell+n} z_1^{*\ell-m} {}_2F_1(m-\ell, -n-\ell, m-n+1, -|z_2|^2/|z_1|^2) \quad (4.34a)$$

$(m = -\ell, \dots, \ell$ e $n = -\ell, \dots, m)$ e

$$H_{\ell,m,n} = \frac{1}{\sqrt{A_{\ell mn}}} z_2^{n-m} z_1^{\ell+m} z_1^{*\ell-n} {}_2F_1(n-\ell, -m-\ell, n-m+1, -|z_2|^2/|z_1|^2) \quad (4.34b)$$

$(n = -\ell, \dots, \ell$ e $m = -\ell, \dots, n)$, onde

$$A_{\ell mn} = \frac{(m-n)!^2 (\ell+n)! (\ell-m)!}{2\ell+1 (\ell-n)! (\ell+m)!} \quad (4.34c)$$

são autofunções de L^2 , M_3 e N_3 que constituem um conjunto ortonormal. Embora os H_{lmn} sejam escritos em termos de funções hipergeométricas, trata-se de polinômios homogêneos de grau 2ℓ . O número de tais funções é $(\ell+1)^2$, a dimensão do espaço dos polinômios harmônicos. Elas são claramente linearmente independentes; o conjunto delas é, pois, base.

As propriedades das funções $H_{\ell mn}$ são praticamente idênticas àsquelas dos harmônicos esféricos usuais e estão demonstradas no apêndice C. Em particular, elas satisfazem:

$$M_3 H_{\ell,m,n} = m H_{\ell,m,n} \quad \text{e} \quad N_3 H_{\ell,m,n} = n H_{\ell,m,n}. \quad (4.35)$$

Temos também:

$$M_{\pm} H_{\ell,m,n} = \sqrt{\ell(\ell+1) \mp m(m+1)} H_{\ell,m\pm 1,n} \quad (4.36)$$

e

$$N_{\pm} H_{\ell,m,n} = \sqrt{\ell(\ell+1) \mp n(n+1)} H_{\ell,m,n\pm 1}. \quad (4.37)$$

Além disso, o conjunto das funções H_{lmn} é completo, *i.e.*:

$$\sum_{m,n=-\ell}^{\ell} H_{\ell,m,n}(\hat{r}) H_{\ell,m,n}^*(\hat{r}') = (2\ell+1) C_{2\ell}^1(\hat{r} \cdot \hat{r}'). \quad (4.38)$$

Combinando (4.38) e (4.1), obtemos:

$$\frac{2}{\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m,n=-\ell}^{\ell} H_{\ell,m,n}(\hat{r}) H_{\ell,m,n}^*(\hat{r}') = \delta(\hat{r} \cdot \hat{r}' - 1). \quad (4.39)$$

4.2.2 Construção do propagador

As autofunções de J^2 são dubletos com autovalores $j = \ell + 1/2$ ou $j = \ell - 1/2$ (quando $\ell \neq 0$). É simples mostrar que as duas soluções independentes de (4.27) que precisamos podem ser:

$$H_{j,\ell,M,n}^{(a)}(\mathbf{r}) = \frac{\psi_{j\ell}^{(a)}(r)}{\sqrt{2\ell+1}} Y_{j\ell Mn}(\hat{r}) \quad \text{e} \quad H_{j,\ell,M,n}^{(b)}(\mathbf{r}) = \frac{\psi_{j\ell}^{(b)}(r)}{\sqrt{2\ell+1}} Y_{j\ell Mn}(\hat{r}), \quad (4.40)$$

onde

$$Y_{j\ell Mn}(\hat{r}) = \begin{pmatrix} \pm \sqrt{\ell \pm M + 1/2} H_{\ell,M-1/2,n}(\hat{r}) \\ \sqrt{\ell \mp M + 1/2} H_{\ell,M+1/2,n}(\hat{r}) \end{pmatrix} \quad \text{para } j = \ell \pm 1/2. \quad (4.41)$$

De agora em diante, o símbolo \pm corresponderá a $j = \ell \pm 1/2$. Usando o método descrito na seção 2.1.2 para a construção de funções de Green unidimensionais, obtemos:

$$g_{j\ell Mn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{H_{j,\ell,M,n}^{(a)}(\mathbf{r}_{>}) \otimes H_{j,\ell,M,n}^{(b)}(\mathbf{r}_{<})}{w(r')}. \quad (4.42)$$

Note que, quando r vai a infinito, a equação (4.27) se reduz à equação livre em dimensão quatro, com J^2 no lugar de L^2 . Assim, concluímos que o wronskiano é simplesmente $w(r) = 2(2j+1)/r^3$, levando a:

$$g_{j\ell Mn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\psi_{j\ell}^{(a)}(r_{>}) \psi_{j\ell}^{(b)}(r_{<})}{2(2j+1)} \frac{1}{2\ell+1} Y_{j\ell Mn}(\hat{r}) \otimes Y_{j\ell Mn}(\hat{r}'). \quad (4.43)$$

Antes de prosseguir no cálculo de $g_{j\ell Mn}$, note que

$$\left(\ell \pm M + \frac{1}{2} \right) H_{\ell,M-\frac{1}{2},n}(\hat{r}) = \left(\frac{2j+1}{2} \pm M_3 \right) H_{\ell,M-\frac{1}{2},n}(\hat{r}), \quad (4.44a)$$

$$\sqrt{\ell(\ell+1) - M^2 + \frac{1}{4}} H_{\ell,M\pm\frac{1}{2},n}(\hat{r}) = \pm M_{\pm} H_{\ell,M\mp\frac{1}{2},n}(\hat{r}) \quad (4.44b)$$

e

$$\left(\ell \mp M + \frac{1}{2}\right) H_{\ell, M+\frac{1}{2}, n}(\hat{r}) = \left(\frac{2j+1}{2} \mp M_3\right) H_{\ell, M+\frac{1}{2}, n}(\hat{r}). \quad (4.44c)$$

Usando a relação de completeza (4.38) chegamos a:

$$\sum_{M,n} Y_{j\ell Mn}(\hat{r}_>) \otimes Y_{j\ell Mn}(\hat{r}_<) = (2\ell + 1) \begin{pmatrix} \frac{2j+1}{2} \pm M_3 & \pm M_- \\ \pm M_+ & \frac{2j+1}{2} \mp M_3 \end{pmatrix} C_{2\ell}^1(\hat{r} \cdot \hat{r}'). \quad (4.45)$$

Pondo (4.45) em uma expressão análoga à (4.13), adaptada à estrutura de isospin, obtemos:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{1}{2\pi^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\pm} \sum_{M,n} g_{j\ell Mn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\pm} \frac{\psi_{j\ell}^{(a)}(r_>) \psi_{j\ell}^{(b)}(r_<)}{2j+1} \begin{pmatrix} \frac{2j+1}{2} \pm M_3 & \pm M_- \\ \pm M_+ & \frac{2j+1}{2} \mp M_3 \end{pmatrix} C_{2\ell}^1(\hat{r} \cdot \hat{r}') \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\pm} \left[\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2j+1} \begin{pmatrix} M_3 & M_- \\ M_+ & -M_3 \end{pmatrix} \right] \frac{\psi_{j\ell}^{(a)}(r_>) \psi_{j\ell}^{(b)}(r_<)}{2} C_{2\ell}^1(\hat{r} \cdot \hat{r}') \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\pm} \left[\frac{1}{2} \pm \frac{M_a \tau_a}{2j+1} \right] \frac{\psi_{j\ell}^{(a)}(r_>) \psi_{j\ell}^{(b)}(r_<)}{2} C_{2\ell}^1(\hat{r} \cdot \hat{r}'). \end{aligned}$$

No apêndice C mostramos que

$$(M_a \tau_a) C_{2\ell}^1(\hat{r} \cdot \hat{r}') = -i \eta_{\alpha\mu\nu} \frac{r_\mu r'_\nu}{r r'} \tau_\alpha C_{2\ell-1}^2(\hat{r} \cdot \hat{r}'). \quad (4.46)$$

Então:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\pm} \psi_{j\ell}^{(a)}(r_>) \psi_{j\ell}^{(b)}(r_<) \left[\frac{C_{2\ell}^1(\hat{r} \cdot \hat{r}')}{2} \mp \frac{i}{r r'} \eta_{\mu\nu\alpha} x_\mu y_\nu \tau_\alpha \frac{C_{2\ell-1}^2(\hat{r} \cdot \hat{r}')}{2j+1} \right]. \quad (4.47)$$

Note que até aqui não fizemos uso da expressão explícita para $\psi_{j\ell}^{(a)}$ e $\psi_{j\ell}^{(b)}$. Substituindo suas expressões em (4.47), obtemos finalmente, após um cálculo simples,

embora trabalhoso (ver detalhes no apêndice C):

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1 + \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' + i\eta_{\alpha\mu\nu} r_\mu r'_\nu \tau_\alpha}{4\pi^2 |r - r'|^2 \sqrt{(1 + r^2)(1 + r'^2)}}, \quad (4.48)$$

reproduzindo a expressão conhecida na literatura[89].

4.3 Outros propagadores de instanton

Tudo o que fizemos foi para o propagador escalar na presença de um instanton no caso sem massa e com isospin $1/2$. Entretanto, o presente método se aplica também a variações do mesmo problema. De fato, soluções da equação (4.27) para valores maiores de isospin, ainda dentro do caso sem massa, têm a mesma estrutura que ψ_{jl} , *i.e.*, são escritas como um produto de uma função simples de r por um polinômio em $(1 + r^2)^{-1}$, possibilitando um cálculo analítico exato para o propagador. Para cada valor de T^2 , teremos um tratamento diferente da parte angular para chegar a uma expressão análoga a (4.47). Contudo, o resto do cálculo procede exatamente como no caso de isospin $1/2$.

O caso massivo é mais complicado, mas também tratável, em princípio. Usando a expressão completa para o propagador sem massa pode-se implementar uma expansão do propagador massivo em potências de m^2 , como discutido em [92] e [93]. Uma outra possibilidade seria considerar uma solução aproximada para a equação radial unidimensional e substituí-la na expansão em ondas parciais em (4.47), que já tem a parte de isospin simplificada. No caso particular em que a massa tem uma dependência em r , como proposto por 't Hooft[88], soluções exatas são dadas por (4.30) e (4.31), onde $F_{jl}^{(a)}$ e $F_{jl}^{(b)}$ são determinadas funções hipergeométricas não-polinomiais. Trabalhar com a série hipergeométrica provavelmente impedirá a obtenção de fórmulas simples, mas sempre é possível escrever resultados aproximados.

Finalmente, é possível mostrar[89] que, para o caso sem massa, os propagadores de férmions, *ghosts* e vetores podem ser escritos em termos do propagador escalar da equação (4.48). Na realidade, o propagador escalar estará relacionado às partes daqueles propagadores que são ortogonais ao subespaços de modo-zero. A referência [94] discute os modos zeros do problema do instanton. Usando um certa parame-

trização do campo de fundo instantônico em termos de uma função radial ϕ dada por um kink,

$$\phi(t) = \tanh(t - t_s), \quad (4.49)$$

obtemos um operador do tipo Morse-Rosen. A existência de modos zeros no problema original é, então, equivalente à existência de estados ligados para o problema de Morse-Rosen associado, cujas autofunções são completamente conhecidas[94].

4.4 Conclusão

Deduzimos um procedimento sistemático para obter um propagador semiclássico no caso de campos clássicos de fundo com simetria esférica. Esse procedimento permite uma construção passo-a-passo do propagador escalar do instanton previamente obtido usando-se métodos *ad-hoc*. Uma construção relacionada a métodos mais elementares é algo não apenas desejável, mas também pode se mostrar útil em extensões futuras.

Como subproduto de nossa construção, obtivemos novos harmônicos esféricos que são adaptados à decomposição de $so(4)$ na soma direta $su(2) \oplus su(2)$. Suas propriedades são de grande utilidade em problemas que envolvem acoplamento de dois $su(2)$'s, como no caso dos acoplamentos do tipo isospin-órbita ou spin-órbita.

5

Termodinâmica semiclássica de campos escalares

Este capítulo tem por base a referência [43] (e sua versão parcial, ref. [95]).

A teoria de campos a temperatura finita[96] é o instrumento apropriado para o estudo das propriedades termodinâmicas de estados de equilíbrio e eventuais transições de fase. Suas aplicações vão desde a investigação da estrutura de fases das interações fortes e fracas, fornecendo informações a respeito do universo primordial, até a descrição de teorias efetivas a baixas energias, seja em física de partículas, seja em física da matéria condensada.

Entretanto, teorias de campos a temperatura finita apresentam, em geral, uma grande complicação: a expansão perturbativa usual [97, 98, 99, 100] é mal definida devido à presença de divergências infravermelhas no setor bosônico, produzindo resultados inconsistentes. No caso da QCD a temperatura finita – *hot QCD* –, por exemplo, pode-se dizer que o raio de convergência da série perturbativa é estritamente zero[101]. Esse desafio estimulou o desenvolvimento de técnicas que envolvem a soma de classes infinitas de diagramas – *resummation techniques* – por meio de uma reorganização da série perturbativa, obtendo uma melhora significativa nas propriedades de convergência da série (veja artigos recentes de revisão nas referências [102, 103]). Algumas dessas técnicas usam teorias efetivas para separar as escalas T , gT , and g^2T [104, 105, 106, 107, 108, 109]. Outras fazem uso de modelos de quasipartículas como ponto de partida para a expansão perturbativa[110], obtendo também boa convergência quando a massa dessas quasipartículas é escolhida de

modo apropriado. Podemos mencionar também as referências [122, 123], nas quais um modelo fenomenológico simples de quasipartículas massivas foi usado para reproduzir com sucesso a pressão do plasma de quarks e gluons obtida em simulações na rede. Em outras abordagens, reorganiza-se de maneira auto-consistente a expansão perturbativa do potencial termodinâmico em torno de diagramas especiais denominados, em inglês, *two-particle irreducible skeleton diagrams*, [111, 112, 113, 114, 115, 116]. Finalmente, algumas técnicas [117, 118, 119, 120, 121] se baseiam no uso sistemático da aproximação *HTL*¹ como boa aproximação para as quasipartículas do sistema, e de suas interações.

Neste capítulo apresentamos uma abordagem alternativa. Tendo como inspiração o sucesso da implementação sistemática da série semiclássica em mecânica estatística quântica e seus resultados para a termodinâmica do oscilador anarmônico quártico, propomos uma descrição semiclássica da termodinâmica de um sistema de campos escalares em equilíbrio com um banho térmico. Dentro do espírito desta tese, essa abordagem estará centrada em uma construção simples de um propagador semiclássico que será o ingrediente fundamental nossa análise. Como sabemos, cálculos semiclássicos são qualitativamente diferentes dos métodos puramente perturbativos, podendo ser interpretados como a soma de um conjunto infinito de diagramas da série perturbativa, como está discutido em [1, 3].

Partiremos da expressão para a função de partição na forma de uma integral funcional, estabelecendo contato direto com a formulação mais simples no contexto de mecânica quântica do capítulo 2 onde, a partir do conhecimento das soluções da equação de movimento, foi possível construir toda a série. No contexto de teoria de campos, uma tal extensão fica inviabilizada pela natureza mais intrincada das equações diferenciais parciais que surgem. Entretanto, em alguns casos podemos construir o propagador semiclássico de modo simples e com ele calcular diversas quantidades relevantes, como vimos nos dois capítulos anteriores. Mostraremos a seguir que o mesmo vale para o cálculo da termodinâmica de campos escalares que interagem via um potencial do tipo poço simples. Neste trabalho original, expandimos a ação euclideana em torno de soluções clássicas cujos valores nas bordas do intervalo temporal são independentes da coordenada espacial. A hipótese básica é o conhecimento exato dessas soluções – analiticamente ou numericamente – enquanto função do potencial. Em seguida incorporamos flutuações em torno dessas

¹Sigla para a expressão em inglês: “*hard thermal loops*”.

configurações, bem como flutuações arbitrárias nos valores do contorno dos campos clássicos. Todas essas flutuações são implementadas na aproximação gaussiana. Damos uma interpretação diagramática aos diagramas considerados, conectando nosso formalismo à expansão perturbativa usual e identificando as classes infinitas de diagramas que são somados em nossa abordagem. Discutimos a renormalização das divergências ultravioletas e a ausência de divergências infravermelhas, cumprindo com nosso objetivo de prover uma alternativa para o cálculo de teorias de campos a temperatura finita.

5.1 Integral sobre flutuações em torno de uma configuração clássica

Valores esperados do campo, suas correlações, o diagrama de fases, todas as quantidades de importância termodinâmica podem ser obtidos como derivadas de um funcional gerador. Este nada mais é que a função de partição do sistema onde às suas interações acrescenta-se um acoplamento linear com uma fonte externa. Por simplicidade, vamos momentaneamente nos concentrar no cálculo da função de partição na ausência da fonte. Mais tarde, quando calcularmos a função de dois pontos, retomaremos o cálculo com esse termo incluído.

Assim, nosso ponto de partida é a expressão de $Z \equiv \text{Tr}e^{-\beta H}$ em termos de integrais funcionais:

$$Z = \int [D\varphi(\mathbf{x})] \int_{\phi(-\beta/2, \mathbf{x})=\phi(\beta/2, \mathbf{x})=\varphi(\mathbf{x})} [D\phi(\tau, \mathbf{x})] e^{-S_E[\phi]}, \quad (5.1)$$

onde S_E é a ação euclideana:

$$S_E[\phi] = \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} d\tau d^3\mathbf{x} \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + U(\phi) \right]. \quad (5.2)$$

Admitamos, inicialmente, que conheçamos uma solução $\phi_c(\tau, \mathbf{x})$ da equação de movimento clássica obedecendo uma dada condição de contorno² $\varphi(\mathbf{x})$ nas extremidades

²Usaremos essa terminologia, apesar de o mais correto ser chamar uma tal condição de condição inicial ou configuração inicial.

do intervalo de tempo :

$$\begin{aligned} (\square_E + m^2)\phi_c(\tau, \mathbf{x}) + U'(\phi_c(\tau, \mathbf{x})) &= 0, \\ \phi_c(-\beta/2, \mathbf{x}) = \phi_c(\beta/2, \mathbf{x}) &= \varphi(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (5.3)$$

onde usamos o símbolo $\square_E \equiv -(\partial_\tau^2 + \nabla^2)$, o operador d'alambertiano euclideo.

Uma solução clássica³ é um mínimo local de S_E . Então, na integral funcional sobre $\phi(\tau, \mathbf{x})$ da eq. (5.1), admitiremos que as contribuições dominantes vêm de configurações do campo na vizinhança dessa solução, ou seja, de flutuações em torno dessa solução clássica. Assim, escrevemos :

$$\phi(\tau, \mathbf{x}) \equiv \phi_c(\tau, \mathbf{x}) + \eta(\tau, \mathbf{x}), \quad (5.4)$$

e expandimos a ação euclidea até termos quadráticos na flutuação: $\eta(\tau, \mathbf{x})$:

$$\begin{aligned} S_E[\phi] &= S_E[\phi_c] \\ &+ \frac{1}{2} \int (d^4x_1)_E (d^4x_2)_E \left. \frac{\delta^2 S_E[\phi]}{\delta\phi(x_1)\delta\phi(x_2)} \right|_{\phi=\phi_c} \eta(x_1)\eta(x_2) + \mathcal{O}(\eta^4). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Usamos nessa equação uma notação simplificada para

$$x \equiv (\tau, \mathbf{x}) \quad \text{e} \quad \int (d^4x)_E \equiv \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau \int d^3\mathbf{x}. \quad (5.6)$$

Também para simplificar as expressões, vamos introduzir a seguinte notação :

$$\eta^T A[\phi_c] \eta \equiv \int (d^4x_1)_E (d^4x_2)_E \left. \frac{\delta^2 S_E[\phi]}{\delta\phi(x_1)\delta\phi(x_2)} \right|_{\phi=\phi_c} \eta(x_1)\eta(x_2), \quad (5.7)$$

onde $A[\phi_c]$ é uma matriz simétrica (com índices contínuos em $[-\beta/2, \beta/2] \times \mathbb{R}^3$) que depende da solução clássica, ϕ_c .

A integral gaussiana sobre a flutuação η deve ser feita com a restrição no domínio imposta pela condição de que $\eta(\tau, \mathbf{x})$ se anula nos extremos,

$$\forall \mathbf{x}, \quad \eta(-\beta/2, \mathbf{x}) = \eta(\beta/2, \mathbf{x}) = 0, \quad (5.8)$$

³Por vezes usamos o termo “solução clássica” para uma solução da equação clássica, eq. (5.3).

uma vez que o campo clássico de fundo já satisfaz – ou satura – as condições de contorno. Uma maneira de implementar essa condição de contorno é fazer uma decomposição de η em série de Fourier, somando sobre os chamados modos de Matsubara:

$$\eta(\tau, \mathbf{x}) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\omega_n \tau} \eta_n(\mathbf{x}) , \quad (5.9)$$

com $\omega_n \equiv 2\pi n/\beta$. A inversa dessa transformação é dada por

$$\eta_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{\beta} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau e^{-i\omega_n \tau} \eta(\tau, \mathbf{x}) . \quad (5.10)$$

A condição imposta pela condições de contorno se traduz em uma condição para os modos de Matsubara:

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} \eta_n(\mathbf{x}) = 0 . \quad (5.11)$$

Devemos usar essa relação para eliminar um dos modos em (5.9) (digamos $\eta_0(\mathbf{x})$). Em particular, temos:

$$\sum_{n,p \in \mathbb{Z}} \eta_n^T A_{np} \eta_p = \sum_{n,p \in \mathbb{Z}^*} \eta_n^T [A_{np} + A_{00} - A_{0p} - A_{n0}] \eta_p , \quad (5.12)$$

onde A_{np} são os coeficientes de Fourier da matriz A . Mais explicitamente, com todos os índices:

$$A_{np}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{\beta^2} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau d\tau' e^{-i\omega_n \tau} e^{-i\omega_p \tau'} A(\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{y}) . \quad (5.13)$$

Veremos mais adiante na seção 5.2.4 que existe um modo mais conveniente de implementar a condição (5.8). Por ora, podemos escrever:

$$Z \approx \int [D\varphi(\mathbf{x})] e^{-S_E[\phi_c]} [\det (A^*)]^{-1/2} , \quad (5.14)$$

onde indicamos por $A^*[\phi_c]$ a restrição do operador $A[\phi_c]$ ao subespaço das flutuações η que obedecem as condições (5.8).

Para concluir o cálculo semiclássico de Z , devemos agora integrar sobre todas as configurações de contorno do campo, $\varphi(x)$. Entretanto, antes de prosseguir, é útil entender a natureza dos diagramas que correspondem ao termo de raiz quadrada do

determinante funcional. Sabemos que a integração gaussiana sobre flutuações acerca de uma dada configuração de fundo corresponde a calcular as correções a 1-laço da ação efetiva. No entanto, para essa correspondência ser válida, é preciso integrar sobre *todos os campos periódicos* $\eta(x)$. Em nosso caso, a integração gaussiana envolve apenas aqueles η que se anulam nas bordas do intervalo temporal [ver eq. (5.8)], i.e., envolve apenas um subconjunto de todos os possíveis campos. Portanto, a quantidade $[\det(A^*[\phi_c])]^{-1/2}$ é uma parte da ação efetiva a 1-laço, mas não contém todos os termos que normalmente entram na ação efetiva a essa ordem⁴. Com essa observação em mente, um diagrama típico incluído nessa quantidade está mostrado na figura 5.1, para o caso de uma teoria com acoplamento quártico. É importante lembrar que o propagador representado pela linha tracejada difere do propagador completo com tempo ordenado, pois aquele corresponde a um subconjunto de todos os modos periódicos.

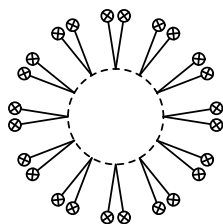


Figura 5.1: Diagrama típico incluído na integração sobre flutuações em torno da solução clássica na aproximação gaussiana. As linhas que terminam com uma cruz indicam a solução clássica com uma condição de contorno fixa, $\varphi(\mathbf{x})$. A linha tracejada pode ser vista como o propagador em torno do campo clássico para flutuações que se anulam na fronteira do intervalo de tempo.

A solução clássica e o determinante na eq. (5.14) dependem do campo $\varphi(\mathbf{x})$ da fronteira pela dependência da solução clássica ϕ_c nas condições de contorno da eq. (5.3). De fato, a solução clássica ϕ_c pode ser representada diagramaticamente como a soma de todos os diagramas em árvore com a extremidade na condição de contorno $\varphi(\mathbf{x})$. A maneira mais fácil de ver isso é escrever a fórmula de Green para a solução da eq. (5.3). Primeiramente, vamos introduzir a função de Green do operador $\square_E + m^2$:

$$[\partial_{\tau'}^2 + \nabla_{\mathbf{x}'}^2 - m^2] G^0(\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{x}') = \delta(\tau - \tau')\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') . \quad (5.15)$$

⁴Essa distinção também pode ser vista analisando-se as autofunções do operador $A[\phi_c]$ no espaço das funções periódicas e no espaço das funções que se anulam em $\tau = \pm\beta/2$, respectivamente.

Essa função de Green não é única, mas vamos deixar para escolhê-la depois. Multiplicando essa equação pelo campo clássico $\phi_c(\tau', \mathbf{x}')$, e integrando sobre τ' e \mathbf{x}' , obtém-se:

$$\phi_c(\tau, \mathbf{x}) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau' \int d^3 \mathbf{x}' \phi_c(\tau', \mathbf{x}') [\partial_{\tau'}^2 + \nabla_{\mathbf{x}'}^2 - m^2] G^0(\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{x}') . \quad (5.16)$$

Agora, multipliquemos a equação de movimento para $\phi_c(\tau', \mathbf{x}')$ pela função de Green $G^0(\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{x}')$, integremos sobre τ' , e subtraímos a equação resultante da anterior. Obtemos :

$$\begin{aligned} \phi_c(\tau, \mathbf{x}) &= \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau' \int d^3 \mathbf{x}' G^0(\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{x}') U'(\phi_c(\tau', \mathbf{x}')) \\ &+ \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau' \int d^3 \mathbf{x}' G^0(\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{x}') \left[\overrightarrow{\partial}_{\tau'}^2 + \overrightarrow{\nabla}_{\mathbf{x}'}^2 - \overleftarrow{\partial}_{\tau'}^2 - \overleftarrow{\nabla}_{\mathbf{x}'}^2 \right] \phi_c(\tau', \mathbf{x}') , \end{aligned} \quad (5.17)$$

onde as setas nos operadores diferenciais na segunda linha indicam em que lado eles atuam. A segunda linha pode ser reescrita como um termo de superfície, uma vez que :

$$A \left[\overrightarrow{\partial}_{\mu}^2 - \overleftarrow{\partial}_{\mu}^2 \right] B = \partial^{\mu} \left\{ A \left[\overrightarrow{\partial}_{\mu} - \overleftarrow{\partial}_{\mu} \right] B \right\} . \quad (5.18)$$

Na eq. (5.17), a fronteira nas direções espaciais não contribui para o campo clássico no ponto \mathbf{x} , uma vez que o propagador livre vai a zero à medida em que a separação espacial aumenta. Assim, nos resta apenas uma contribuição, associada à fronteira no tempo. Nesse ponto, uma vez que as condições de contorno para ϕ_c consistem em especificar o valor do campo em $\tau' = \pm\beta/2$, com uma derivada temporal qualquer, é

muito natural escolher uma função de Green G^0 que obedeça as seguintes condições⁵ :

$$G^0(\tau, \mathbf{x}; -\beta/2, \mathbf{x}') = G^0(\tau, \mathbf{x}; +\beta/2, \mathbf{x}') = 0 . \quad (5.19)$$

Com essa escolha para o propagador, nós obtemos a seguinte fórmula para $\phi_c(\tau, \mathbf{x})$:

$$\begin{aligned} \phi_c(\tau, \mathbf{x}) = & \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau' \int d^3\mathbf{x}' G^0(\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{x}') U'(\phi_c(\tau', \mathbf{x}')) \\ & - \int d^3\mathbf{x}' \varphi(\mathbf{x}') \left[\partial_{\tau'} G^0(\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{x}') \right]_{\tau'=-\beta/2}^{\tau'+\beta/2} , \end{aligned} \quad (5.20)$$

Essa fórmula nos mostra como a solução clássica ϕ_c depende da configuração de contorno $\varphi(\mathbf{x})$. Se o primeiro termo no lado direito da equação – envolvendo a derivada U' do potencial – não estivesse lá, então a relação entre ϕ_c e seu valor φ na borda seria linear. Isso ocorre apenas para a teoria livre. Na presença de interações, podemos resolver a equação (5.20) iterativamente em potências de U' . Essa expansão pode ser representada diagramaticamente pela soma de diagramas em árvore cujas folhas são o valor do campo na fronteira, $\varphi(\mathbf{x})$. Um exemplo dessa representação está indicado na figura 5.2, para o caso de uma interação do tipo ϕ^4 . Note que, quando a configuração na fronteira é pequena⁶, essa soma de árvores pode ser aproximada pela expansão em ordem zero em potências de U' , que é independente das interações. Por outro lado, para valores grandes de φ , é importante incluir todos os termos da expansão em árvores que aparecem em ϕ_c , pois todos eles serão comparáveis. Portanto, já podemos ver um importante aspecto desse esquema de aproximação: embora as flutuações quânticas se manifestem apenas a 1-laço, ela

⁵Em geral, sempre é possível impor duas condições sobre uma função de Green de $\square_E + m^2$, pois os modos nulos desse operador formam um espaço vetorial de dimensão 2. As condições da eq. (5.19) são satisfeitas por :

$$\begin{aligned} G^0(\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{x}') = & \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \left\{ \theta(\tau - \tau') \frac{\sinh(\omega_{\mathbf{k}}(\tau - \frac{\beta}{2})) \sinh(\omega_{\mathbf{k}}(\tau' + \frac{\beta}{2}))}{\omega_{\mathbf{k}} \sinh(\omega_{\mathbf{k}}\beta)} \right. \\ & \left. + \theta(\tau' - \tau) \frac{\sinh(\omega_{\mathbf{k}}(\tau' - \frac{\beta}{2})) \sinh(\omega_{\mathbf{k}}(\tau + \frac{\beta}{2}))}{\omega_{\mathbf{k}} \sinh(\omega_{\mathbf{k}}\beta)} \right\} , \end{aligned}$$

onde $\omega_{\mathbf{k}} \equiv \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2}$.

⁶Com isso queremos dizer que o termo de interação é muito menor que o termo cinético na ação. Essa condição depende do momentum em que se está interessado.

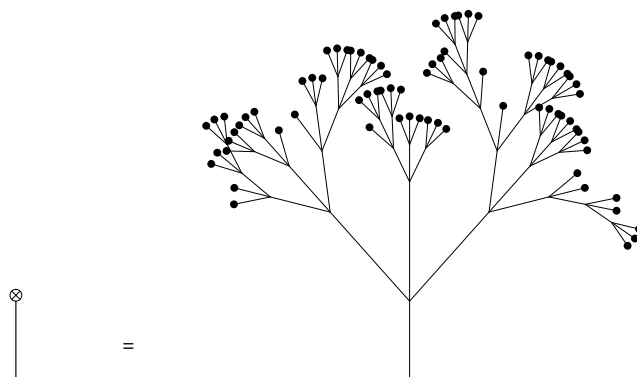


Figura 5.2: Expansão diagramática do campo clássico em termos do valor de fronteira do campo (bolinhas pretas).

contempla a contribuição do campo na fronteira em todas as ordens, permitindo um correto tratamento mesmo para valores grandes (não perturbativos) de $\varphi(\mathbf{x})$.

5.2 Expansão em flutuações da fronteira

5.2.1 Discussão preliminar

A integração sobre as configurações de fronteira que ainda precisa ser feita na eq. (5.14) torna a aproximação semiclássica para Z muito intrincada; primeiro, devemos resolver a equação diferencial parcial (5.3) para $\varphi(\mathbf{x})$ arbitrário, o que não é possível de se fazer em geral. Mesmo numericamente, trata-se de uma tarefa complicada. Além disso, a única integral funcional sobre φ que somos capazes de fazer analiticamente é uma integral gaussiana. Para contornar esses problemas, somos forçados a implementar algumas aproximações.

Pode-se ver diretamente nas eqs. (5.3) que a equação clássica de movimento se reduz a uma equação diferencial ordinária no caso em que o campo $\varphi(\mathbf{x})$ na borda é uma constante. Nesse caso, a solução clássica $\phi_x(\tau, \mathbf{x})$ se torna uma função $\phi_0(\tau)$ apenas do tempo :

$$\begin{aligned} (-\partial_\tau^2 + m^2)\phi_0(\tau) + U'(\phi_0(\tau)) &= 0, \\ \phi_0(-\beta/2) &= \phi_0(\beta/2) = \varphi_0. \end{aligned} \tag{5.21}$$

Essa simplificação das equações clássicas de movimento torna o problema muito mais tratável por métodos analíticos ou numéricos. Essa observação sugere que o campo na fronteira, $\varphi(\mathbf{x})$, seja decomposto em uma parte constante, φ_0 , e uma flutuação, $\xi(\mathbf{x})$:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \varphi_0 + \xi(\mathbf{x}) . \quad (5.22)$$

A solução da equação clássica de movimento pode, portanto, ser expandida de maneira similar:

$$\phi_c(\tau, \mathbf{x}) = \phi_0(\tau) + \phi_1(\tau, \mathbf{x}) + \phi_2(\tau, \mathbf{x}) + \dots , \quad (5.23)$$

onde ϕ_n é de ordem n em ξ (há termos de ordens arbitrariamente grandes em ξ se a equação de movimento for não-linear). Feito isso, podemos reescrever a integral funcional sobre $\varphi(\mathbf{x})$ na eq. (5.14) como :

$$Z \approx \int_{-\infty}^{+\infty} d\varphi_0 \int_{\langle \xi(\mathbf{x}) \rangle = 0} [D\xi(\mathbf{x})] e^{-S_E[\phi_c]} [\det (A^*[\phi_c])]^{-1/2} . \quad (5.24)$$

Note que a integração sobre $\xi(\mathbf{x})$ deve ser feita com a restrição

$$\langle \xi(\mathbf{x}) \rangle \equiv \int d^3\mathbf{x} \xi(\mathbf{x}) = 0 , \quad (5.25)$$

uma vez que a “componente uniforme” (i.e., o modo zero) da condição de contorno já foi levado em conta em φ_0 . Uma integração irrestrita sobre $\xi(\mathbf{x})$ contaria essa contribuição mais de uma vez.

Admitiremos na sequência que o primeiro termo, $\phi_0(\tau)$, pode ser determinado com acurácia arbitrária – ele pode ser determinado analiticamente em certos casos, enquanto que em geral ele será obtido resolvendo-se uma equação diferencial ordinária. Além disso, a dependência em ϕ_0 será sempre tratada exatamente; apenas os termos que dependem da flutuação ξ serão tratados de modo aproximado. Com isso, garantimos as vantagens de tratar corretamente o termo de interação quando o campo da fronteira é grande, uma vez que apenas as flutuações na fronteira é que serão tratadas perturbativamente.

Uma simplificação natural para obter a dependência em ξ é fazer uma aproximação gaussiana em torno de $\xi = 0$. Como veremos em breve, para encontrar a ação $S_E[\phi_c]$ até a segunda ordem na flutuação ξ da fronteira basta obter a solução clássica ϕ_c em primeira ordem em ξ .

Além disso, para ser consistente com a aproximação gaussiana para $S_E[\phi_c]$, precisamos apenas calcular o determinante na ordem mais baixa em ξ , i.e., em ordem zero. De fato, a integração gaussiana sobre as flutuações ξ corresponde a uma correção a 1-laço no campo de fundo ϕ_0 . Contudo, como vimos na seção anterior, o determinante funcional da eq. (5.24) já é uma correção a 1-laço. Portanto, mantendo a dependência em ξ desse determinante incluiríamos termos com mais de 1-laço na integral sobre ξ , mas somente um subconjunto de todas as correções a 2-laços. Fazer isso não seria proibido por nenhum princípio fundamental, mas isso tornaria os cálculos consideravelmente mais complicados, além de alterar a renormalização do resultado final. De fato, como veremos depois, expandindo o determinante funcional em ξ na eq. (5.24) obtemos uma expressão cujas divergências ultravioletas são precisamente aquelas da ação efetiva a 1-laço. Por essas razões, vamos calcular

$$Z \approx \int_{-\infty}^{+\infty} d\varphi_0 [\det(A^*[\phi_0])]^{-1/2} \int_{\langle \xi(\mathbf{x}) \rangle = 0} [D\xi(\mathbf{x})] e^{-S_E[\phi_c]} . \quad (5.26)$$

5.2.2 Correção para ϕ_c devido a flutuações na condição de contorno

O próximo passo é encontrar a correção $\phi_1(\tau, \mathbf{x})$ à solução clássica ϕ_c . Para encontrar a equação obedecida por ϕ_1 , simplesmente trocamos ϕ_c por $\phi_0 + \phi_1$ na eq. (5.3). Ignorando todos os termos de ordem superior à unidade em ϕ_1 (uma vez que eles são ao menos de ordem 2 em ξ), e usando a equação obedecida por ϕ_0 , obtemos a seguinte equação (linearizada) para ϕ_1 :

$$\left[(\square_E + m^2) + U''(\phi_0(\tau)) \right] \phi_1 = 0 , \quad (5.27)$$

com a condição de contorno:

$$\phi_1(-\beta/2, \mathbf{x}) = \phi_1(\beta/2, \mathbf{x}) = \xi(\mathbf{x}) . \quad (5.28)$$

Para prosseguir, precisaremos da fórmula de Green para a variação ϕ_1 do campo clássico. A dedução é muito similar à da eq. (5.20), de forma que não a reproduziremos aqui. A principal diferença com relação à eq. (5.20) é que precisamos da função de Green para o operador $\square_E + m^2 + U''(\phi_0(\tau))$:

$$[\partial_{\tau'}^2 + \nabla_{\mathbf{x}'}^2 - m^2 - U''(\phi_0(\tau'))] G(\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{x}') = \delta(\tau - \tau')\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') , \quad (5.29)$$

em vez de para o propagador livre G^0 que introduzimos anteriormente. Novamente, esse propagador deve obedecer a condição de contorno:

$$G(\tau, \mathbf{x}; -\beta/2, \mathbf{x}') = G(\tau, \mathbf{x}; \beta/2, \mathbf{x}') = 0 . \quad (5.30)$$

Em termos das flutuações e do propagador, a primeira correção à solução clássica fica:

$$\phi_1(\tau, \mathbf{x}) = \int d^3\mathbf{x}' \xi(\mathbf{x}') [\partial_{\tau'} G(\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{x}')]_{\tau'=-\beta/2}^{\tau'+\beta/2} . \quad (5.31)$$

Note que, uma vez que o campo de fundo ϕ_0 não depende das coordenadas espaciais, o propagador G depende apenas da diferença $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$. Assim, podemos eliminar a convolução espacial indo para o espaço de Fourier:

$$\phi_1(\tau, \mathbf{k}^2) = \xi(\mathbf{k}) [\partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}^2)]_{\tau'=-\beta/2}^{\tau'+\beta/2} , \quad (5.32)$$

onde o propagador no espaço de Fourier é definido por

$$[\partial_{\tau'}^2 - (\mathbf{k}^2 + m^2) - U''(\phi_0(\tau'))] G(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) = \delta(\tau - \tau') , \quad (5.33)$$

e

$$G(\tau, -\beta/2, \mathbf{k}^2) = G(\tau, \beta/2, \mathbf{k}^2) = 0 . \quad (5.34)$$

5.2.3 Propagador no campo de fundo ϕ_0

É bastante simples determinar o propagador que obedece as eqs. (5.33) e (5.34) em termos de duas soluções linearmente independentes da equação diferencial linear homogênea:

$$[\partial_{\tau}^2 - (m^2 + \mathbf{k}^2) - U''(\phi_0(\tau))] \eta(\tau, \mathbf{k}^2) = 0 . \quad (5.35)$$

Sejam $\eta_a(\tau, \mathbf{k}^2)$ e $\eta_b(\tau, \mathbf{k}^2)$ duas soluções quaisquer⁷ de (5.35). Para construir a partir de $\eta_{a,b}$ uma solução das equações (5.33) e (5.34), primeiro vamos introduzir o seguinte objeto:

$$\Omega(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) \equiv \eta_a(\tau, \mathbf{k}^2)\eta_b(\tau', \mathbf{k}^2) - \eta_b(\tau, \mathbf{k}^2)\eta_a(\tau', \mathbf{k}^2). \quad (5.37)$$

É trivial checar que $\Omega(\tau, \tau', \mathbf{k}^2)$ satisfaz a eq. (5.35), com respeito a ambas as variáveis τ e τ' . Consideremos a seguinte identidade:

$$\begin{aligned} H(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) &\equiv \frac{\Omega(\beta/2, \tau, \mathbf{k}^2)\Omega(\tau', -\beta/2, \mathbf{k}^2)}{\Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2)} && \text{if } \tau > \tau', \\ H(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) &\equiv \frac{\Omega(\beta/2, \tau', \mathbf{k}^2)\Omega(\tau, -\beta/2, \mathbf{k}^2)}{\Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2)} && \text{if } \tau < \tau'. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Essa quantidade obedece a eq. (5.33) se $\tau \neq \tau'$. Além disso, embora $H(\tau, \tau', \mathbf{k}^2)$ seja contínua em $\tau = \tau'$, sua primeira derivada não é. Em vez disso, temos

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\partial_{\tau'} H(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) \Big|_{\tau'=\tau+\epsilon} - \partial_{\tau'} H(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) \Big|_{\tau'=\tau-\epsilon} \right) \\ = \eta_a(\tau, \mathbf{k}^2)\dot{\eta}_b(\tau, \mathbf{k}^2) - \dot{\eta}_a(\tau, \mathbf{k}^2)\eta_b(\tau, \mathbf{k}^2) \equiv -W. \end{aligned} \quad (5.39)$$

como pode ser verificado fazendo-se os cálculos. O lado direito da equação anterior nada mais é que o wronskiano W do par de soluções $\eta_{a,b}$ e é independente de τ no caso da equação (5.35). Indiquemos por W o valor do wronskiano para o par de soluções $\eta_{a,b}$. A discontinuidade de $\partial_{\tau'} H(\tau, \tau', \mathbf{k}^2)$ em $\tau' = \tau$ é, portanto, igual a W , o que significa que a segunda derivada temporal contém um termo em $W \delta(\tau - \tau')$. Finalmente, da propriedade óbvia:

$$\Omega(\tau, \tau, \mathbf{k}^2) = 0, \quad (5.40)$$

⁷Quando $\mathbf{k} = 0$, é fácil verificar que

$$\begin{aligned} \eta_a(\tau; \mathbf{0}) &= \dot{\phi}_0(\tau), \\ \eta_b(\tau; \mathbf{0}) &= \dot{\phi}_0(\tau) \int_0^\tau \frac{d\tau'}{\dot{\phi}_0^2(\tau')}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

obedecem (5.35). Entretanto, essa construção falha quando $\mathbf{k} \neq 0$.

vê-se que $H(\tau, \tau', \mathbf{k}^2)$ satisfaz as condições de contorno da eq. (5.34). Portanto, $W^{-1} H(\tau, \tau', \mathbf{k}^2)$ é o propagador que estamos procurando:

$$G(\tau, \tau', \mathbf{k}) = -\frac{\Omega(\beta/2, \max(\tau, \tau'), \mathbf{k}^2)\Omega(\min(\tau, \tau'), -\beta/2, \mathbf{k}^2)}{W \Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2)}. \quad (5.41)$$

Em geral, as soluções $\eta_{a,b}$ não serão conhecidas numericamente para um valor não nulo de \mathbf{k} , e teremos que usar métodos numéricos.

5.2.4 Cálculo do determinante funcional

Como explicamos anteriormente, precisamos calcular o determinante que aparece na equação eq. (5.24), $\det(A^*[\phi_c])$, em ordem zero na flutuação ξ da borda, i.e., calcular $\det(A^*[\phi_0])$. Ao integrar por partes o termo cinético, a ação euclideana pode ser reescrita da seguinte forma:

$$S_E[\phi_0 + \eta] \approx S_E[\phi_0] + \int (d^4x)_E \left[\frac{1}{2}\eta \square_E \eta + \frac{1}{2}m^2 \eta^2 + U''(\phi_0)\eta^2 \right]. \quad (5.42)$$

Note que a integração por partes não introduz nenhum termo de borda aqui graças às condições de contorno satisfeitas por η [ver eq. (5.8)]. Portanto, obtemos para o operador A^* a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} A^*[\phi_0]_{\tau, \mathbf{x}; \tau', \mathbf{y}} &\equiv \left. \frac{\delta^2 S_E}{\delta\phi(\tau, \mathbf{x})\delta\phi(\tau', \mathbf{y})} \right|_{\phi=\phi_0} \\ &= \delta(\tau - \tau')\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \left[\square_E + m^2 + U''(\phi_0(\tau)) \right]. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Escrevemos ϕ_0 explicitamente como um campo que depende apenas do tempo, uma vez que estamos calculando o determinante apenas em ordem zero nas flutuações da borda. Assim, podemos fazer a transformada de Fourier com respeito às coordenadas espaciais e usar \mathbf{k} em vez de \mathbf{x} . Os autovalores g_i e as autofunções η_i do operador $A^*[\phi_0]$ são funções $\eta(\tau, \mathbf{x})$ que obedecem o seguinte sistema de equações⁸:

$$\begin{aligned} \left[\partial_\tau^2 - (m^2 + \mathbf{k}^2) - U''(\phi_0(\tau)) \right] \eta_i(\tau, \mathbf{k}^2) &= g_i \eta_i(\tau, \mathbf{k}^2), \\ \forall \mathbf{x}, \quad \eta_i(-\beta/2, \mathbf{k}^2) = \eta_i(\beta/2, \mathbf{k}^2) &= 0. \end{aligned} \quad (5.44)$$

⁸Para mais informações a respeito das propriedades e soluções dessa classe de equação, denominada equação de Hill, o leitor pode consultar a referência [125].

Essa equação é do mesmo tipo que a eq. (5.35), sendo que a única diferença é que \mathbf{k}^2 é substituído por $\mathbf{k}^2 + g_i$. Portanto, ela tem como duas soluções independentes $\eta_a(\tau, \mathbf{k}^2 + g_i)$ e $\eta_b(\tau, \mathbf{k}^2 + g_i)$, e uma sua solução geral pode ser escrita como

$$\eta_i(\tau, \mathbf{k}^2) = C_a \eta_a(\tau, \mathbf{k}^2 + g_i) + C_b \eta_b(\tau, \mathbf{k}^2 + g_i) , \quad (5.45)$$

onde $C_{a,b}$ são duas constantes de integração. Para ter um η_i não-trivial que obedeça as condições de contorno exigidas, precisamos que esse sistema tenha a seguinte propriedade:

$$\eta_a(-\beta/2, \mathbf{k}^2 + g_i) \eta_b(\beta/2, \mathbf{k}^2 + g_i) = \eta_a(\beta/2, \mathbf{k}^2 + g_i) \eta_b(-\beta/2, \mathbf{k}^2 + g_i) . \quad (5.46)$$

Essa equação determina os autovalores g_i permitidos. Essa equação também pode ser escrita como

$$\Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2 + g_i) = 0 , \quad (5.47)$$

onde Ω foi definido na eq. (5.37). O determinante do operador A^* é obtido, obviamente, como o produto de seus autovalores:

$$\det A^*[\phi_0, \mathbf{k}^2] = \prod_{g|\Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2 + g)=0} g . \quad (5.48)$$

(Indicamos por $A^*[\phi_0, \mathbf{k}^2]$ a restrição do operador $A^*[\phi_0]$ a campos de flutuação com modo de Fourier \mathbf{k} .) Se z_n são as raízes (possivelmente não-reais) da função $\Omega(\beta/2, -\beta/2; z)$, então as soluções de $\Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2 + g) = 0$ são os números $g = z_n - \mathbf{k}^2$. Portanto, podemos escrever

$$\det A^*[\phi_0, \mathbf{k}^2] = \prod_n (z_n - \mathbf{k}^2) , \quad (5.49)$$

onde raízes múltiplas são repetidas tantas vezes quanto necessário no produto. O lado direito dessa equação é uma função inteira de \mathbf{k}^2 , que obviamente se anula em todas as z_n . Como $\Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2)$ tem a mesma propriedade, existe uma função inteira $p(\mathbf{k}^2)$ tal que [126] :

$$\det A^*[\phi_0, \mathbf{k}^2] = \Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2) e^{p(\mathbf{k}^2)} . \quad (5.50)$$

Da eq. (5.37) vemos que, se escolhermos as funções η_a e η_b de modo que seus valores em $\tau = -\beta/2$ sejam independentes de \mathbf{k}^2 , então, o limite

$$\lim_{\mathbf{k}^2 \rightarrow \infty} |\Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2)| e^{-M\sqrt{\mathbf{k}^2}} \quad (5.51)$$

é cotado para qualquer $M > \beta$. Pelo teorema de Hadamard[126], a função $p(\mathbf{k}^2)$ é uma constante⁹. O fator constante e^p deve ser de fato proporcional ao inverso do wronskiano do par de soluções η_a e η_b que estamos usando: $e^p = \text{const}/\beta W$, porque o determinante deve ser independente dessa escolha (o fator β no denominador foi incluído para que se obtivesse um determinante adimensional). A constante de renormalização pode ser absorvida como uma constante global multiplicativa em Z .

Finalmente, o determinante de $A^*[\phi_0]$ é obtido multiplicando-se o resultado anterior para todos os \mathbf{k} 's, o que dá :

$$\det A^*[\phi_0] = \exp V \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ln \left(\frac{\Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2)}{\beta W} \right). \quad (5.52)$$

Para ver como o volume V aparece nessa fórmula, é útil considerar primeiro que o sistema está numa caixa finita e reescrever a soma sobre os modos discretos de Fourier correspondentes como uma integral.

5.3 Integração sobre flutuações da condição de contorno

5.3.1 Expansão da ação clássica

O passo final da parte analítica desse cálculo é fazer a integral funcional sobre as flutuações ξ da fronteira temporal, como na eq. (5.24). Antes de fazer essa integração é preciso expandir a ação clássica $S_E[\phi_c]$ até a ordem quadrática em ξ usando a

⁹Estritamente falando, o que foi demonstrado é a independência da função p com relação a \mathbf{k}^2 , mas isso não exclui a dependência dos outros parâmetros do problema: a massa m e as constantes de acoplamento contidas no potencial $U(\phi)$. Contudo, fica claro a partir da forma do operador cujo determinante estamos calculando que uma possível dependência apenas poderia provir da combinação $m^2 + U''(\phi_0(\tau))$, ou seja, que ela poderia entrar no resultado final apenas via η_a e η_b , i.e., via função Ω . Assim, o prefator $\exp(p(\mathbf{k}^2))$ não pode conter nenhuma dependência implícita nesses parâmetros.

expansão da eq. (5.23) para ϕ_c . Temos:

$$S_E[\phi_c] = S_E[\phi_0] + \delta^{(1)}S_E + \delta^{(2)}S_E + \mathcal{O}(\xi^3). \quad (5.53)$$

Note que poderíamos ter problemas porque *a priori* deveríamos manter o termo ϕ_2 — o termo em ordem ξ^2 na solução clássica ϕ_c — no segundo termo do lado direito da equação acima. Esse termo seria muito mais difícil de ser obtido. Entretanto, nós não vamos precisar dele porque ϕ_0 é uma solução exata da equação de movimento clássica. De fato, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \delta^{(1)}S_E &= \int (d^4x)_E \frac{1}{2} \left[-\ddot{\phi}_0(\tau) + m^2\phi_0(\tau) + U'(\phi_0(\tau)) \right] (\phi_1(x) + \phi_2(x)) \\ &\quad + \int d^3\mathbf{x} \left[\dot{\phi}_0(\tau)(\phi_1(x) + \phi_2(x)) \right]_{\tau=-\beta/2}^{\tau=+\beta/2}. \end{aligned} \quad (5.54)$$

e por ϕ_0 ser solução clássica decorre que o primeiro termo se anula identicamente. O segundo termo — um termo de borda¹⁰ — pode ser reescrito como :

$$\int d^3\mathbf{x} \left[\dot{\phi}_0(\tau)(\phi_1(x) + \phi_2(x)) \right]_{\tau=-\beta/2}^{\tau=+\beta/2} = \left[\dot{\phi}_0(+\beta/2) - \dot{\phi}_0(-\beta/2) \right] \int d^3\mathbf{x} \xi(\mathbf{x}), \quad (5.55)$$

e se anula, pois estamos impondo que a flutuação ξ do campo na borda tenha média nula.

A segunda variação da ação — o terceiro termo do lado direito da eq. (5.53) — é formalmente dada por

$$\delta^2 S_E = \frac{1}{2} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \left[L_{\phi,\phi}(\phi_c - \phi_0)^2 + 2L_{\phi,\partial_\mu\phi}(\phi_c - \phi_0)(\partial_\mu\phi_c - \partial_\mu\phi_0) + \right. \quad (5.56)$$

$$\left. + L_{\partial_\mu\phi,\partial_\mu\phi}(\partial_\mu\phi_c - \partial_\mu\phi_0)^2 \right] \quad (5.57)$$

onde usamos uma notação simplificada para as derivadas da densidade lagrangeana

¹⁰Note que a primeira variação da ação avaliada na solução clássica não se anula, em princípio, mesmo sendo a solução clássica um mínimo da ação. A confusão se dá pelo fato de estarmos habituados com variações do campo clássico ao longo de flutuações que satisfazem (5.8), com as condições de contorno já saturadas pelo campo clássico. Em uma expansão nas condições de contorno, tomamos variações do campo clássico satisfazendo condições de contorno não-triviais, como as da equação (5.28).

L . De maneira mais precisa, e usando a expressão que temos para L , obtemos

$$\begin{aligned}\delta^{(2)}S_E &= \frac{1}{2} \int (d^4x)_E \left[(\partial_\mu \phi_1(x)) (\partial^\mu \phi_1(x)) + m^2 \phi_1^2(x) + U''(\phi_0(\tau)) \phi_1^2(x) \right] \\ &= \frac{1}{2} \int (d^4x)_E \partial_\mu \left[\phi_1(x) \partial^\mu \phi_1(x) \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \int (d^4x)_E \phi_1(x) \left[\square_E + m^2 + U''(\phi_0(\tau)) \right] \phi_1(x) .\end{aligned}\quad (5.58)$$

O integrando do segundo termo se anula devido à equação de movimento obedecida pelo campo $\phi_1(x)$. Portanto, a variação da ação clássica até a segunda ordem vem inteiramente do termo de borda:

$$\begin{aligned}\delta^{(2)}S_E &= \frac{1}{2} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d^3x d\tau \partial_\tau [\phi_1(\tau, \mathbf{x}) \partial_\tau \phi_1(\tau, \mathbf{x})] \\ &= \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} [\phi_1(\tau, \mathbf{x}) \partial_\tau \phi_1(\tau, \mathbf{x})]_{\tau=-\beta/2}^{\tau=+\beta/2} \\ &= \frac{1}{2} \int d^3x \xi(\mathbf{x}) [\partial_\tau \phi_1(\tau, \mathbf{x})]_{-\beta/2}^{\beta/2} .\end{aligned}$$

onde usamos a condição de contorno obedecida por $\phi_1(\tau, \mathbf{x})$. Reescrevendo a integral acima no espaço de momentum e usando a eq. (5.32), obtemos¹¹.

$$\begin{aligned}\delta^{(2)}S_E &= \frac{1}{2} \int d^3x \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \xi(\mathbf{k}') [\partial_\tau \phi_1(\tau, \mathbf{k})]_0^\beta e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{x}} \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \xi(-\mathbf{k}) [\partial_\tau \phi_1(\tau, \mathbf{k})]_{-\beta/2}^{\beta/2} \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \xi(-\mathbf{k}) \left[\partial_\tau \left(\xi(\mathbf{k}) \partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}) \right) \Big|_{-\beta/2}^{\beta/2} \right]_{-\beta/2}^{\beta/2} \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \xi(\mathbf{k}) \xi(-\mathbf{k}) \left[\partial_\tau \left(\partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}) \right) \Big|_{-\beta/2}^{\beta/2} \right]_{-\beta/2}^{\beta/2} \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} C(\mathbf{k}) \xi(\mathbf{k}) \xi(-\mathbf{k}) ,\end{aligned}$$

¹¹Para obter essa fórmula usamos a relação

$$[\partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}^2)]_{\tau'=-\beta/2}^{\tau'=+\beta/2} = \frac{\Omega(\tau, -\frac{\beta}{2}, \mathbf{k}^2) + \Omega(\frac{\beta}{2}, \tau, \mathbf{k}^2)}{\Omega(\frac{\beta}{2}, -\frac{\beta}{2}, \mathbf{k}^2)} .\quad (5.59)$$

Portanto, essa quantidade é igual a 1 em $\tau = \pm\beta/2$.

onde

$$C(\mathbf{k}) \equiv \left[\left[\partial_\tau \partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) \right]_{\tau' = -\beta/2}^{\tau' = +\beta/2} \right]_{\tau = -\beta/2}^{\tau = +\beta/2}. \quad (5.60)$$

Portanto, a integral funcional gaussiana sobre ξ leva ao seguinte resultado:

$$\frac{e^{-S_E[\phi_0]}}{\sqrt{\prod_{\mathbf{k} \neq 0} \beta C(\mathbf{k})}} = e^{-S_E[\phi_0]} \exp \left[-\frac{V}{2} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ln(\beta C(\mathbf{k})) \right]. \quad (5.61)$$

O vínculo $k \neq 0$ serve para remover a contribuição dos modos nulos, i.e., das funções ξ que são constantes, uma vez que já foram levadas em conta na quantidade φ_0 . Como antes, fatores em β foram introduzidos para tornar os argumentos do log e da raiz quadrada adimensionais.

5.3.2 Cálculo de $C(\mathbf{k})$

A quantidade $C(\mathbf{k})$ definida na eq. (5.60) envolve o cálculo de duas derivadas da função de Green avaliadas nas bordas. Em princípio teríamos um problema, uma vez que a derivada de G não é contínua em pontos coincidentes. Entretanto, note que a eq. (5.60) impõe um ordem bem definida para tomar os limites $\tau, \tau' \rightarrow \pm\beta/2$. Essa ordem leva, sem ambiguidades, à seguinte expressão para $C(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned} C(\mathbf{k}) = & \lim_{\substack{\tau, \tau' \rightarrow +\beta/2 \\ \tau < \tau'}} \partial_\tau \partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) + \lim_{\substack{\tau, \tau' \rightarrow -\beta/2 \\ \tau > \tau'}} \partial_\tau \partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) \\ & - \lim_{\substack{\tau' \rightarrow +\beta/2 \\ \tau \rightarrow -\beta/2}} \partial_\tau \partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) - \lim_{\substack{\tau' \rightarrow -\beta/2 \\ \tau \rightarrow +\beta/2}} \partial_\tau \partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}^2). \end{aligned} \quad (5.62)$$

Da eq. (5.41), vemos que, dependendo da ordem de τ e τ' , a derivada segunda do propagador será dada por :

$$\begin{aligned} \partial_\tau \partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}) &= -\frac{\partial_\tau \Omega(\beta/2, \tau, \mathbf{k}^2) \partial_{\tau'} \Omega(\tau', -\beta/2, \mathbf{k}^2)}{W \Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2)} & \text{if } \tau' < \tau, \\ \partial_\tau \partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}) &= -\frac{\partial_{\tau'} \Omega(\beta/2, \tau', \mathbf{k}^2) \partial_\tau \Omega(\tau, -\beta/2, \mathbf{k}^2)}{W \Omega(\beta/2, -\beta/2, \mathbf{k}^2)} & \text{if } \tau' > \tau. \end{aligned} \quad (5.63)$$

Usando a expressão para $\Omega(\tau, \tau', \mathbf{k}^2)$ dada na eq. (5.37), obtemos após um cálculo simples :

$$C(\mathbf{k}) = \frac{\det \begin{pmatrix} \Delta\eta_a(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_a(\mathbf{k}^2) \\ \Delta\eta_b(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_b(\mathbf{k}^2) \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} \eta_a(\frac{\beta}{2}, \mathbf{k}^2) & \eta_a(-\frac{\beta}{2}, \mathbf{k}^2) \\ \eta_b(\frac{\beta}{2}, \mathbf{k}^2) & \eta_b(-\frac{\beta}{2}, \mathbf{k}^2) \end{pmatrix}}, \quad (5.64)$$

onde

$$\Delta\eta_{a,b}(\mathbf{k}^2) \equiv \left[\eta_{a,b}(\tau, \mathbf{k}^2) \right]_{\tau=-\beta/2}^{\tau=+\beta/2}, \quad \Delta\dot{\eta}_{a,b}(\mathbf{k}^2) \equiv \left[\dot{\eta}_{a,b}(\tau, \mathbf{k}^2) \right]_{\tau=-\beta/2}^{\tau=+\beta/2}. \quad (5.65)$$

Note que a forma de $C(\mathbf{k})$ dada na eq. (5.64) evidencia o fato de que $C(\mathbf{k})$ não depende da escolha particular das duas soluções η_a e η_b que são usadas na construção, desde que elas sejam independentes. De fato, os coeficientes $C(\mathbf{k})$ são uma propriedade da própria ação clássica e devem ser independentes da escolha particular da base para o espaço das flutuações em torno do campo clássico.

Se escolhemos duas soluções $\bar{\eta}_a$ e $\bar{\eta}_b$ tais que

$$\begin{aligned} \bar{\eta}_a(-\beta/2, \mathbf{k}^2) &= 1, & \dot{\bar{\eta}}_a(-\beta/2, \mathbf{k}^2) &= 0, \\ \bar{\eta}_b(-\beta/2, \mathbf{k}^2) &= 0, & \dot{\bar{\eta}}_b(-\beta/2, \mathbf{k}^2) &= 1/\beta, \end{aligned} \quad (5.66)$$

então

$$C(\mathbf{k}) = \frac{2(\bar{\eta}_a(\beta/2, \mathbf{k}^2) - 1)}{\beta\dot{\bar{\eta}}_b(\beta/2, \mathbf{k}^2)}, \quad (5.67)$$

onde usamos a relação

$$\beta\dot{\bar{\eta}}_b(\beta/2, \mathbf{k}^2) = \bar{\eta}_a(\beta/2, \mathbf{k}^2) \quad (5.68)$$

demonstrada no apêndice ???. Admitiremos que $(m^2 + U'')$ é positivo¹². Nesse caso, pode-se ver facilmente a partir de (5.35) que $\bar{\eta}_a$ é monotonicamente crescente em $[-\beta/2, \beta/2]$. Isso implica que $C(\mathbf{k}) > 0$ e $\delta^{(2)}S_E > 0$, o que significa que as flutuações da condição de contorno sempre aumentam o valor da ação com relação a uma configuração com condição de contorno homogênea. Essa constatação pode ser vista como uma justificativa *a posteriori* para a expansão em torno de configurações com fronteira homogênea; de fato, essas configurações tem um valor menor para a ação do

¹²Dito de outra forma, admitiremos que o espectro do propagador semiclássico não contemple estados ligados[125].

que aquelas com flutuações da condição de contorno, e portanto dão as contribuições dominantes para a função de partição.

5.3.3 Interpretação diagramática

A integração gaussiana de $\exp(-S_E[\phi_c])$ sobre as flutuações do campo na fronteira da variável temporal também corresponde a alguma correção a 1-loop. Para começar, lembremos que, no caso da interação quártica, a ação clássica $S_E[\phi_c]$ só contém termos que são quadráticos ou quárticos no campo clássico ϕ_c . Além disso, já vimos no final da seção 5.1 que o campo clássico ϕ_c é a soma de todos os diagramas em árvore com uma pata externa que tem na extremidade um campo na fronteira, φ (veja a figura 5.2). Assim, $S_E[\phi_c]$ é uma soma de diagramas em árvore sem patas externas, com campos de fronteira nas terminações da árvore. Um diagrama típico está representado na figura 5.3.

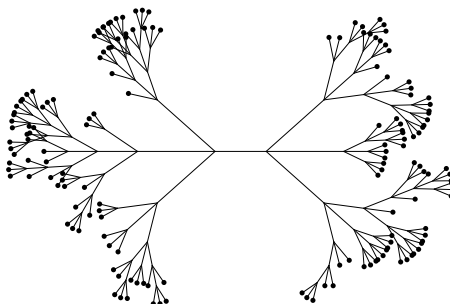


Figura 5.3: Expansão diagramática da ação clássica $S_E[\phi_c]$ em termos do valor de borda do campo (pontos pretos).

Até este ponto, esses diagramas representam a ação clássica para uma configuração arbitrária φ como condição de contorno. Quando escrevemos $\varphi = \varphi_0 + \xi$ e fazemos a aproximação gaussiana, obtemos que, para cada diagrama como os mostrados na figura 5.3, todos os pontos pretos, com exceção de dois deles, passam a representar o valor uniforme na fronteira φ_0 . Os dois pontos restantes representam a flutuação $\xi(\mathbf{x})$ da borda. Então, integrar sobre ξ significa unir essas duas extremidades do diagrama com valor ξ , formando um laço. A esse laço pode ser conectado um número arbitrário de diagramas em árvore com terminações em φ_0 : cada uma dessas árvores é uma contribuição a $\phi_0(\tau)$, a solução clássica com valor de fronteira igual a φ_0 .

Assim, concluímos que os termos resultantes da média gaussiana sobre as flu-

tuações do campo de contorno também são contribuições a 1-laço no campo de fundo composto pelo campo $\phi_0(\tau)$. Esses termos estão portanto em pé de igualdade com os termos incluídos no determinante $\det(A^*[\phi_0])$. Além disso, essa análise dos diagramas contidos em nossa aproximação confirma a auto-consistência dessas aproximações: seria inconsistente manter flutuações gaussianas da borda em $\det(A^*[\phi_c])$, porque fazendo isso incluiríamos diagramas em 2-laços no campo de fundo ϕ_0 .

Como veremos na seção 5.4, outro teste de consistência de nossa fórmula final está baseado na estrutura de suas divergências ultravioletas: ela contém exatamente as divergências que se esperariam de uma ação efetiva a 1-laço no campo clássico de fundo, $\phi_0(\tau)$, sendo, portanto, simples de ser renormalizada. É importante perceber que é preciso as duas correções a 1-laço, uma oriunda de $\det(A^*[\phi_0])$, e outra da integração gaussiana sobre as flutuações da condição de contorno para reproduzir o padrão conhecido de divergências ultravioletas a 1-laço. Se deixássemos de incluir uma delas, teríamos divergência espúrias que não poderiam ser removidas pelo procedimento usual de renormalização.

5.3.4 Fórmula final para a função de partição

Juntando todos os ingredientes, podemos escrever a seguinte fórmula (ainda não renormalizada) para a função de partição:

$$Z \approx \int_{-\infty}^{+\infty} d\varphi_0 e^{-S_E[\phi_0]} \exp -\frac{V}{2} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ln \left[\frac{1}{W} \begin{vmatrix} \Delta\eta_a(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_a(\mathbf{k}^2) \\ \Delta\eta_b(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_b(\mathbf{k}^2) \end{vmatrix} \right], \quad (5.69)$$

que é válida para escolhas arbitrárias de condições iniciais, desde que independentes de \mathbf{k}^2 . De fato, a razão do determinante e do wronskiano dentro do logaritmo não depende da escolha particular de duas soluções η_a e η_b . Na prática, isso representa uma vantagem que pode simplificar os cálculos numéricos. Em particular, para as condições iniciais definidas na (5.66), temos

$$\frac{1}{W} \begin{vmatrix} \Delta\eta_a(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_a(\mathbf{k}^2) \\ \Delta\eta_b(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_b(\mathbf{k}^2) \end{vmatrix} = 2 (\bar{\eta}_a(\beta/2, \mathbf{k}^2) - 1). \quad (5.70)$$

Assim, obtemos uma fórmula compacta que leva em conta (na aproximação gaussiana) as flutuações em torno da solução clássica e as flutuações da condição de contorno. Neste estágio, o cálculo envolve apenas soluções de equações diferenciais ordinárias, que em princípio são simples de serem obtidas numericamente. Para cada φ_0 , é preciso determinar as seguintes quantidades:

1. a solução clássica $\phi_0(\tau)$,
2. a ação clássica $S_E[\phi_0]$,
3. para cada \mathbf{k}^2 , duas soluções independentes $\eta_a(\tau, \mathbf{k}^2)$ e $\eta_b(\tau; \mathbf{k}^2)$ da equação de flutuações em torno da solução clássica, $\phi_0(\tau)$.

No apêndice D, obtemos expressões para as soluções η_a e η_b em termos de uma solução de uma outra equação que, no caso do potencial quártico ou do potencial de sine-Gordon, admite soluções polinomiais.

Note que todas as quantidades que dependem de \mathbf{k} , de fato dependem de $|\mathbf{k}|$. Isso significa que a integração sobre \mathbf{k} é, na verdade, uma integral unidimensional.

5.4 Renormalização

Nossa expressão final, eq. (5.69), apresenta divergências ultravioletas. Essas divergências surgem da integração sobre o momentum \mathbf{k} na segunda linha. É fácil convencer-se de que essas divergências podem ser tratadas usando a técnica usual de renormalização a 1-laço. Para ver isso, escrevemos as soluções η_a e η_b como séries no termo de interação $U''(\phi_0)$ com o campo de contorno. De fato, se indicamos por $\eta_{a,b}^{(n)}$ o termo em $\eta_{a,b}$ que tem n potências de $U''(\phi_0)$, obtemos as seguintes relações :

$$\begin{aligned} (\partial_\tau^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2)\eta_{a,b}^{(0)} &= 0, \\ (\partial_\tau^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2)\eta_{a,b}^{(n+1)} &= U''(\phi_0)\eta_{a,b}^{(n)}. \end{aligned} \quad (5.71)$$

Dessas equações, podemos ver que $\eta_{a,b}^{(n+1)}$ têm uma potência extra de $1/\mathbf{k}^2$ para valores de \mathbf{k} grandes comparados a $\eta_{a,b}^{(n)}$. Assim, esperamos que apenas um número finito de termos nessa expressão carregará divergências ultravioletas. Para verificar isso, vamos calcular explicitamente os primeiros três termos da expansão do lado

direito da eq. (5.70). As soluções $\bar{\eta}_{a,b}^{(0)}$ que obedecem as condições de contorno da eq. (5.66) são dadas por :

$$\begin{aligned}\bar{\eta}_a^{(0)}(\tau, \mathbf{k}^2) &= \cosh\left(\omega_{\mathbf{k}}\left(\tau + \frac{\beta}{2}\right)\right), \\ \bar{\eta}_b^{(0)}(\tau, \mathbf{k}^2) &= \frac{\sinh\left(\omega_{\mathbf{k}}\left(\tau + \frac{\beta}{2}\right)\right)}{\beta\omega_{\mathbf{k}}}.\end{aligned}\quad (5.72)$$

Note que essas soluções em ordem zero já saturam as condições de contorno em $\tau = -\beta/2$ na eq. (5.66). Assim, os termos de ordem superior na expressão de $\bar{\eta}_{a,b}$ devem se anular e ter uma primeira derivada nula em $\tau = -\beta/2$. Para encontrar esses termos, é útil construir uma função de Green $\bar{G}^0(\tau, \tau', \mathbf{k}^2)$ do operador $\partial_\tau^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2$ que obedece as seguintes condições :

$$\begin{aligned}(\partial_\tau^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2)\bar{G}^0(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) &= \delta(\tau - \tau'), \\ \bar{G}^0(\tau = -\frac{\beta}{2}, \tau', \mathbf{k}^2) &= 0, \quad \partial_\tau \bar{G}^0(\tau = -\frac{\beta}{2}, \tau', \mathbf{k}^2) = 0.\end{aligned}\quad (5.73)$$

É simples verificar que o propagador que obedece essas condições é dado por

$$\bar{G}^0(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) = \theta(\tau - \tau') \frac{\sinh(\omega_{\mathbf{k}}(\tau - \tau'))}{\omega_{\mathbf{k}}}, \quad (5.74)$$

que nada mais é que a função de Green retardada de $\partial_\tau^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2$. Com essa função de Green, podemos escrever:

$$\bar{\eta}_{a,b}^{(n+1)}(\tau, \mathbf{k}^2) = \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} d\tau' \bar{G}^0(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) U''(\phi_0(\tau')) \bar{\eta}_{a,b}^{(n)}(\tau', \mathbf{k}^2). \quad (5.75)$$

Note que, uma vez que a solução clássica $\phi_0(\tau)$ não depende da coordenada espacial, a relação entre $\bar{\eta}_{a,b}^{(n+1)}$ e $\bar{\eta}_{a,b}^{(n)}$ é local em \mathbf{k} .

Com um pouco de trabalho algébrico obtemos a expressão de $\bar{\eta}_{a,b}$ até a segunda

ordem em U'' :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\overline{W}} \left| \begin{array}{cc} \Delta\eta_a(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_a(\mathbf{k}^2) \\ \Delta\eta_b(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_b(\mathbf{k}^2) \end{array} \right| &= e^{\beta\omega_{\mathbf{k}}} \left\{ 1 + \right. \\
&+ \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} d\tau' \frac{U''(\phi_0(\tau'))}{2\omega_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{2} \left[\int_{-\beta/2}^{+\beta/2} d\tau' \frac{U''(\phi_0(\tau'))}{2\omega_{\mathbf{k}}} \right]^2 \\
&- \frac{1}{2} \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} d\tau' d\tau'' \frac{e^{-2\omega_{\mathbf{k}}|\tau'-\tau''|}}{(2\omega_{\mathbf{k}})^2} U''(\phi_0(\tau')) U''(\phi_0(\tau'')) \\
&\left. + \mathcal{O}(e^{-\beta\omega_{\mathbf{k}}}) + \mathcal{O}((U'')^3) \right\}. \tag{5.76}
\end{aligned}$$

Ignoramos os termos dentro das chaves que vão a zero exponencialmente quando $|\mathbf{k}| \rightarrow +\infty$. De fato, esses termos não contribuem para as divergências ultravioletas que estamos estudando nesta seção. Nessa expressão, reconhecemos o propagador em tempo ordenado, dado por

$$\overline{G}_F^0(\tau, \tau', \mathbf{k}^2) = \frac{e^{-\omega_{\mathbf{k}}|\tau-\tau'|}}{2\omega_{\mathbf{k}}}. \tag{5.77}$$

É um fato importante que a eq. (5.70), embora tendo uma expressão natural em termos do propagador retardado, possa ser rearranjada de modo a ser escrita em termos do propagador ordenado temporalmente (pelo menos para os termos que contribuem para as divergências ultravioletas).

Os termos que aparecem entre chaves na eq. (5.76) tem interpretação simples em termos de diagramas de Feynman. Para uma teoria eslar com acoplamento ϕ^4 , o primeiro termo não-trivial pode ser representado por

$$\int_{-\beta/2}^{+\beta/2} d\tau' \frac{U''(\phi_0(\tau'))}{2\omega_{\mathbf{k}}} = \text{Diagrama de um círculo com uma linha horizontal na base}. \tag{5.78}$$

Note que, nessa expressão, $1/2\omega_{\mathbf{k}}$ é igual ao valor do propagador em tempo ordenado para tempos coincidentes. Similarmente, o termos na terceira linha pode ser representado por

$$-\frac{1}{2} \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} d\tau' d\tau'' \frac{e^{-2\omega_{\mathbf{k}}|\tau'-\tau''|}}{(2\omega_{\mathbf{k}})^2} U''(\phi_0(\tau')) U''(\phi_0(\tau'')) = \text{Diagrama de dois círculos conectados por uma linha horizontal na base}. \tag{5.79}$$

O segundo termo na segunda linha da eq. (5.76) poderia ser representado por um diagrama composto de duas partes do tipo indicado na eq. (5.78) (o fator $1/2$ é o fator de simetria que resulta da possibilidade de permutar essas duas componentes). De fato, quando tomamos o logaritmo (conforme a eq. 5.69), essas contribuições desconexas simplesmente desaparecem :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \ln \left[\frac{1}{W} \begin{vmatrix} \Delta\eta_a(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_a(\mathbf{k}^2) \\ \Delta\eta_b(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_b(\mathbf{k}^2) \end{vmatrix} \right] &= \frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2} + \frac{1}{2} \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} d\tau' \frac{U''(\phi_0(\tau'))}{2\omega_{\mathbf{k}}} \\ &- \frac{1}{4} \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} d\tau' d\tau'' \frac{e^{-2\omega_{\mathbf{k}}|\tau'-\tau''|}}{(2\omega_{\mathbf{k}})^2} U''(\phi_0(\tau')) U''(\phi_0(\tau'')) + \dots \quad (5.80) \end{aligned}$$

Pode-se verificar que esse cancelamento de termos desconexos após aplicar-se o logaritmo é um fato geral e funciona em todas as ordens. Finalmente, quando integrado sobre \mathbf{k} , o primeiro termo dá a energia de ponto zero e os próximos termos dão as duas primeiras contribuições não triviais à ação efetiva a 1-laço a temperatura zero (para chegar a isso foi importante escrever as expressões em termos do propagador em tempo ordenado). Nós lembramos o fato conhecido de que se uma teoria é renormalizável a $T = 0$, então é também renormalizável a $T \neq 0$ com os contratermos calculados a $T = 0$. Todos esses termos têm divergências ultravioletas. Se calculados com até um valor de corte Λ de momentum, eles se comportam respectivamente como Λ^4 , Λ^2 , e $\ln(\Lambda)$, se estivermos em dimensão espacial igual a 3. Todos os termos seguintes na expansão em potências de U'' são finitos no limite ultravioleta porque têm ao menos uma potência a menos que $1/\mathbf{k}^2$ quando $|\mathbf{k}| \rightarrow +\infty$.

Essa identificação nos diz que, para renormalizar nossa expressão final, devemos seguir o seguinte procedimento :

1. subtrair a energia de ponto zero em $\ln(Z)$, i.e., subtrair $\beta\omega_{\mathbf{k}}/2$ do integrando na integração sobre \mathbf{k} ,
2. adicionar os contratermos a 1-laço à ação clássica $S_E[\phi_0]$, e simultaneamente regularizar a integração sobre \mathbf{k} .

Note que o esquema de regularização empregado para calcular os contratermos deve ser idêntico àquele usado para calcular a integral em \mathbf{k} . Assim, a regularização que introduz um momentum de corte parece ser a mais natural nesse contexto. Uma vez que esses dois procedimentos tenham sido realizados, teremos uma expressão dependente de Λ que produzirá um resultado finito quando $\Lambda \rightarrow +\infty$.

Tal expressão de Z é livre de divergências ultravioletas. Mas, naturalmente, está expressa em termos de acoplamentos e massas que dependerão das condições de renormalização (uma vez que será preciso escolher um determinado esquema de renormalização¹³) para que sejam definidos de maneira única os contratermos que foram adicionados à ação clássica. O procedimento padrão é expressar um número suficiente de quantidades físicas em termos desses parâmetros que variam com o esquema escolhido, e eliminar esses últimos para se obterem relações que envolvam apenas quantidades físicas.

5.5 O caso livre

Antes de passar ao cálculo da função de 2 pontos, é instrutivo verificar a consistência da fórmula (5.69) no caso da teoria livre. A ação correspondente é:

$$S[\phi] = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d^3x d\tau \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 \right], \quad (5.81)$$

levando à seguinte equação de movimento:

$$[\partial_\tau^2 - m^2] \phi_0 = 0. \quad (5.82)$$

A solução clássica satisfazendo $\phi_0(-\beta/2) = \phi_0(\beta/2) = \varphi_0$ é

$$\phi_0 = \varphi_0 \left[\cosh m(\tau + \beta/2) + \frac{(1 - \cosh(\beta m))}{\sinh(\beta m)} \sinh(m(\tau + \beta/2)) \right]. \quad (5.83)$$

É simples mostrar que $S_E[\phi_0] = \alpha \varphi_0^2$, com $\alpha = mV(\cosh(\beta m) - 1)/\sinh(\beta m)$, onde V é o volume. Seguindo nosso resultado principal, precisamos de duas soluções de

$$\left[\partial_\tau^2 - (m^2 + k^2) \right] \eta = 0, \quad (5.84)$$

que obedeçam a eq. (5.66). Já vimos essas soluções na eq. (5.72). Temos, então:

$$\begin{aligned} 2(\bar{\eta}_a(\beta/2, \mathbf{k}^2) - 1) &= 2(\cosh(\beta\omega_k) - 1) \\ &= (1 - \exp(-\beta\omega_k))^2 \exp(\beta\omega_k). \end{aligned} \quad (5.85)$$

¹³O esquema de renormalização não deve ser confundido com o esquema de regularização.

Finalmente, obtemos

$$Z \approx \int_{-\infty}^{+\infty} d\varphi_0 e^{-\alpha\varphi_0^2} \exp \left[-V \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(\ln(1 - e^{-\beta\omega_k}) + \frac{\beta\omega_k}{2} \right) \right] \quad (5.86)$$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp \left[-V \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(\ln(1 - e^{-\beta\omega_k}) + \frac{\beta\omega_k}{2} \right) \right] \quad (5.87)$$

que é o resultado conhecido, embora ainda não renormalizado, para o oscilador harmônico. Vemos que nosso método leva ao resultado exato para a teoria livre. Isso é consequência do fato de que, na ausência de interações, a aproximação gaussiana representa exatamente as flutuações do sistema.

5.6 A função de dois pontos

Mostraremos nesta seção como calcular a função de correlação de dois campos na mesma aproximação em que obtivemos a função de partição. A partir da função de correlação podemos extrair informações importantes sobre a teoria, como relações de dispersão e coeficientes de transporte. Seguindo o procedimento usual, vamos introduzir uma corrente externa j que permite que se obtenha a função de n pontos tomando-se derivadas funcionais de

$$Z[j(\tau, \mathbf{k})] = \int [D\varphi(\mathbf{x})] \int_{\phi(-\beta/2, \mathbf{x})=\phi(\beta/2, \mathbf{x})=\varphi(\mathbf{x})} [D\phi(\tau, \mathbf{x})] e^{-S_E[\phi] + \int j(\tau, \mathbf{x})(\phi(\tau, \mathbf{x}) - \phi_0(\tau))}, \quad (5.88)$$

onde $S_E[\phi]$ é a ação euclideana do campo ϕ , dada por (5.2). Note que não acoplamos o campo ϕ_0 à corrente j pois estamos interessados apenas em correlações de campos com dependência espacial. Como consequência, procedendo como no cálculo da função de partição, a equação clássica para o campo com condições de contorno homogêneas é novamente dada por (5.21), sem termos de fonte. Obviamente, ϕ_0 será também o mesmo de antes e o efeito da fonte fica restrito à equação (5.35) para as flutuações η_a e η_b .

Escrevendo $\phi = \phi_c + \eta$, expandindo S_E até termos quadráticos no campo η , e

fazendo a integração funcional sobre esse campo, obtemos:

$$Z[j(\tau, \mathbf{k})] = \int [D\varphi(\mathbf{x})] e^{-S_E[\phi_c] + \int j(\phi_c - \phi_0)} [\det (A^*[\phi_c, j])]^{-1/2} \\ \times \exp \frac{1}{2} \int j(\mathbf{k}) G_j(\tau, \tau'; \mathbf{k}) j(-\mathbf{k}) ,$$

onde G_j agora é a solução de

$$\left[\partial_{\tau'}^2 + \mathbf{k}^2 - m^2 - U''(\phi_0(\tau')) + j(\tau, \mathbf{k}) \right] G_j(\tau, \tau'; \mathbf{k}) = \delta(\tau - \tau') , \\ G_j(-\beta/2, \tau') = G_j(\beta/2, \tau') = 0 . \quad (5.89)$$

Evidentemente, G_j (e analogamente o determinante de flutuações, $\det A^*[\phi_c, j]$) terá uma dependência implícita na corrente, j . Entretanto, no cálculo da função de 2 pontos estamos interessados em derivadas parciais com relação a j e como ao final dos cálculos tomaremos $j = 0$, podemos trabalhar com esse limite da expressão de G_j (e de $\det A^*[\phi_c, j]$). Em outras palavras, podemos substituir G_j por (5.41) e $\det A^*[\phi_c, j]$ por (5.52).

O próximo passo em nossa aproximação é fazer a integração sobre a flutuação ξ das condições de contorno. Agrupando toda a dependência em ξ , obtemos a seguinte integral no espaço de Fourier [análoga a (5.59)]:

$$- \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{C(\mathbf{k})}{2} \xi(\mathbf{k}) \xi(-\mathbf{k}) + \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} j(\tau, -\mathbf{k}) \phi_1(\tau, k) . \quad (5.90)$$

Note que, em princípio, deveríamos levar em conta a contribuição de ϕ_2 , a componente de ϕ_c que é quadrática em ξ . Contudo, essa contribuição está relacionada ao valor esperado $\langle \phi_0 \phi_2 \rangle$ que se anula uma vez que ϕ_0 é par sob a inversão $\varphi_0 \leftrightarrow -\varphi_0$, enquanto que ϕ_2 muda de sinal sob a mesma inversão. Substituindo a expressão (5.32) para ϕ_1 ,

$$\phi_1(\tau, \mathbf{k}) = \xi(\mathbf{k}) [\partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k})]_{\tau' = -\beta/2}^{\tau' = +\beta/2} , \quad (5.91)$$

obtemos para a integral da equação (5.90):

$$- \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{C(\mathbf{k})}{2} \xi(\mathbf{k}) \xi(-\mathbf{k}) - j(\tau, -\mathbf{k}) \xi(\mathbf{k}) (\partial G(\tau, \mathbf{k})) \right\} , \quad (5.92)$$

onde

$$(\partial G(\tau, \mathbf{k})) \text{ é uma notação simplificada para } \left. \partial_{\tau'} G(\tau, \tau', \mathbf{k}) \right|_{\tau' = -\beta/2}^{\tau' = +\beta/2},$$

que já foi calculado em (5.59). Fazendo a integral gaussianiana, obtemos

$$Z[j(\tau, \mathbf{k})] \approx \int [D\varphi(\mathbf{x})] e^{-S_E[\phi_c]} [\det(A^*[\phi_c])]^{-1/2} e^{\frac{1}{2} \int j(\tau, \mathbf{k}) \tilde{G}(\tau, \tau'; \mathbf{k}) j(\tau', -\mathbf{k})}, \quad (5.93)$$

onde

$$\tilde{G}(\tau, \tau'; \mathbf{k}) \equiv G(\tau, \tau'; \mathbf{k}) - (\partial G(\tau, \mathbf{k})) \frac{1}{C(\mathbf{k})} (\partial G(\tau', -\mathbf{k})). \quad (5.94)$$

Essa nova função de Green é periódica em τ . Finalmente, obtemos para a função de dois pontos:

$$\begin{aligned} \langle (\phi(\tau, \mathbf{k}) - \phi_0(\tau)) (\phi(\tau', \mathbf{k}) - \phi_0(\tau')) \rangle &= \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varphi_0 e^{-S_E[\phi_0]} \tilde{G}(\tau, \tau'; \mathbf{k}) \\ &\times \exp -\frac{V}{2} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ln \left[\frac{1}{W} \begin{vmatrix} \Delta\eta_a(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_a(\mathbf{k}^2) \\ \Delta\eta_b(\mathbf{k}^2) & \Delta\dot{\eta}_b(\mathbf{k}^2) \end{vmatrix} \right]. \end{aligned}$$

5.7 Conclusão

Obtivemos uma aproximação semiclássica para a função de partição de um sistema de campos escalares na presença de um potencial de interação geral com apenas um mínimo. No formalismo de integrais funcionais a função de partição é uma integral sobre configurações periódicas em tempo imaginário e é dominada por trajetórias clássicas. A informação não-perturbativa contida nessas soluções clássicas servem como ponto de partida para essa aproximação semiclássica.

Soluções clássicas euclidianas em geral não são conhecidas para condições de contorno arbitrárias, ainda que periódicas. Contudo, considerando-se inicialmente soluções clássicas que correspondam a condições de contorno independentes da coordenada espacial (encontrar essas quantidades equivale a resolver equações diferenciais ordinárias) pudemos construir de modo sistemático soluções clássicas aproximadas obedecendo condições de contorno arbitrárias. Calculamos correções quânticas das flutuações em torno dessas soluções clássicas em um esquema autoconsistente.

Nossa fórmula final para Z admite uma expressão simples em termos de duas soluções linearmente independentes da equação de pequenas flutuações em torno da solução clássica, sendo tratável por métodos numéricos. Apesar de sua simplicidade, nossa expressão trata exatamente o valor médio do campo na fronteira, ainda que grande. Além disso, mostramos que essa expressão é renormalizável subtraindo-se da ação clássica contratermos usuais e a energia de ponto zero.

A fórmula que obtivemos para a função de partição é não-perturbativa. Com isso queremos dizer que ela leva em consideração a interação em todas as ordens para configurações com grande valor médio do campo na borda. Um modo de visualizar isso é investigar que classes de diagramas da teoria de perturbação usual estão incluídos em nossa abordagem. Esperamos que as propriedades termodinâmicas derivadas dessa expressão semiclássica para Z sejam válidas numa região maior do espaço de parâmetros $(T, \{\lambda\})$ (onde $\{\lambda\}$ representa as constantes de acoplamento) quando comparadas àquelas obtidas na expansão perturbativa usual.

Sistemas de matéria condensada com parâmetro de ordem escalar, como densidade e magnetização, são candidatos naturais à aplicação direta dos resultados aqui encontrados. Possíveis extensões a potenciais com mais de um mínimo e outras teorias de campos serão analisadas no futuro.

6

Conclusão

Mostramos nesta tese como implementar uma aproximação semiclássica em diferentes cenários. O ponto de partida dessa aproximação é o conhecimento do setor clássico. O método que, no contexto de mecânica quântica e mecânica estatística quântica unidimensionais dá origem a toda uma série semiclássica pôde ser estendido a teorias de campos, como vimos e ilustramos com aplicações. Quando a questão era saber em que medida o conhecimento do setor clássico nos possibilitava conhecer a teoria quântica completa, obtivemos, em parte, uma resposta: no contexto de mecânica quântica e mecânica estatística quântica todos os termos da série semiclássica são determinados por quantidades clássicas. Não está claro, entretanto, se a informação contida nessa série semiclássica em uma formulação de integrais de caminho coincide com o que se pode extrair a partir de outras abordagens. Com relação à extensão para teorias quânticas de campos, vimos que a natureza mais intrincada das equações impede o estabelecimento de resultados tão fortes quanto aqueles válidos em mecânica quântica, embora nossa técnica se mostre útil, como vimos, em diversos casos particulares de interesse. Mais que isso, nas aplicações que apresentamos, encaixamos todos os desenvolvimentos analíticos encontrados na literatura em uma mesma formulação, o que permite atacar novos problemas de maneira unificada e particularmente mais simples.

Certamente ainda falta muito o que discutir com relação ao que aqui foi apresentado. Um dos pontos mais importantes é o controle que temos sobre a série semiclássica proposta. Exceto em um parágrafo no final do capítulo 2 e no cálculo explícito de diagramas de Feynman para interfaces, não foi discutido o compor-

tamento geral das primeiras correções à aproximação quadrática e menos ainda a convergência da série. Nosso argumento em favor da aproximação semiclássica são seus bons resultados numéricos. Como temos em todos os casos uma expressão fechada e relativamente simples para o propagador, podemos partir para um cálculo numérico das diversas correções que foram apenas indicadas no corpo do texto e estudar o comportamento da série.

Outra vantagem do método semiclássico é que ele resulta em expressões consistentes para o cálculo da termodinâmica de campos escalares, ao contrário do método perturbativo usual. Temos ainda que explorar a fundo nossos resultados, completando a etapa numérica do cálculo da pressão e compará-la com os resultados obtidos por meio de outros métodos alternativos. Esse cálculo está sendo finalizado e será publicado nos próximos meses. Além disso, a partir da expressão da função de dois pontos podemos obter quantidades relevantes como a massa térmica, relação de dispersão de quasi-partículas, massa de Debye e coeficientes de transporte. Do ponto de vista mais técnico, temos que investigar o caso do potencial de sine-Gordon que, como vimos, admite expressões simples; outra tarefa é encontrar que outras teorias — além da teoria livre, dos potenciais quárticos e de sine-Gordon — correspondem às soluções polinomiais da equação (D.5).

As fórmulas obtidas para campos escalares poderiam ser úteis a modelos fenomenológicos de matéria condensada. Outras aplicações poderiam estar relacionadas a extensões daquelas fórmulas a teorias de campos escalares complexos ou, no melhor dos cenários, a teorias de calibre.

Em uma linha puramente matemática, ainda existem muitas questões em aberto com respeito ao próprio método semiclássico. Por exemplo, nos cálculos de funções de partição do oscilador anarmônico quártico, será que podemos inferir o que ocorre com o potencial de poço duplo a partir dos resultados para o poço simples? Visto de outra maneira: poderíamos fazer uma continuação analítica para valores negativos de m^2 , passando da situação de poço simples para poço duplo? Se possível, como interpretar na fase de poço simples as cáusticas e a transição de fase presentes no caso de poço duplo?

Deixamos essas e outras questões para trabalhos futuros. Esperamos que essa tese sirva como auxiliar e inspiração a futuras investigações.

6.1 Nota complementar sobre a trivialidade da fórmula (5.69) no limite termodinâmico

Infelizmente, entre o dia da defesa desta tese e a publicação de sua versão final concluímos que a fórmula (5.69) para a função de partição de campos escalares se reduz, no limite termodinâmico, a uma expressão trivial, a saber, a mesma de uma teoria livre. De fato, apesar de todos os desenvolvimentos apresentados no capítulo 4 desta tese serem corretos, não tivemos o cuidado de analisar seu limite de volume infinito. Nesse limite, a ação clássica $S[\phi_0]$ torna-se arbitrariamente grande quando comparada a $S[0] = 0$. Disso decorre que a contribuição das configurações $\phi = \phi_0 + \phi_1$ para $\phi_0 \neq 0$ são completamente suprimidas no limite termodinâmico. Mesmo classicamente, apenas a solução $\phi_0 = 0$ contribui naquele limite. Deve-se notar que, como função de V , a fórmula (5.69) tem um conteúdo físico não-trivial que pode ser útil na análise termodinâmica em questão (ver, por exemplo, as referências [128, 129, 130]). É preciso comparar correções à teoria livre devido à interação com as correções semiclássicas associadas a um volume finito para estimar sua importância.

Apêndice A

O potencial de Morse-Rosen

Chama-se potencial de Morse-Rosen um potencial que pode ser escrito do seguinte modo:

$$V(z) = \alpha + \beta \tanh z - \gamma \operatorname{sech}^2 z. \quad (\text{A.1})$$

No caso particular em que $\beta = 0$ esse potencial recebe o nome de potencial de Pöschl-Teller modificado. Tais potenciais são amplamente utilizados em ótica, física atômica e molecular, etc para simular uma interação atrativa com barreira suave.

Estamos interessados numa equação do tipo Schrödinger para esse potencial. É o que veremos na seção seguinte.

A.1 Autofunções do operador de Schrödinger

A chamada equação de Morse-Rosen é dada por

$$-\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + [\alpha + \beta \tanh z - \gamma \operatorname{sech}^2 z] \psi = 0 \quad (\text{A.2})$$

Definamos uma função auxiliar F através da relação: $\psi = e^{-az} \operatorname{sech}^b(z) F(z)$. Usando que $(\operatorname{sech} x)' = -\operatorname{sech}(x) \tanh(x)$ e $(\tanh x)' = \operatorname{sech}^2 x$, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial z} &= -a\psi - b \tanh(x)\psi + e^{-az} \operatorname{sech}^b(z) F'(z) \\ &= e^{-az} \operatorname{sech}^b(z) [-(a + b \tanh z)F(z) + F'] \end{aligned}$$

A segunda derivada de ψ é

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} &= -(a + b \tanh z) e^{-az} \operatorname{sech}^b(z) \left[-(a + b \tanh z) F(z) + F'(z) \right] + \\ &+ e^{-az} \operatorname{sech}^b z \left[-(a + b \tanh z) F'(z) - b \operatorname{sech}^2(z) F(z) + F''(z) \right] \\ &= e^{-az} \operatorname{sech}^b(z) \left\{ [(a + b \tanh z)^2 - b \operatorname{sech}^2 z] F(z) - 2(a + b \tanh z) F'(z) + F'' \right\}\end{aligned}$$

Aplicando essas relações em (A.2), obtemos

$$\begin{aligned}\left\{ [(a + b \tanh z)^2 - b \operatorname{sech}^2 z] F(z) - 2(a + b \tanh z) F'(z) + F'' \right\} + \\ + (-\alpha - \beta \tanh z + \gamma \operatorname{sech}^2 z) F(z) = 0\end{aligned}$$

O termo que multiplica $F(z)$ é

$$a^2 + b^2 \tanh^2 z + 2ab \tanh z - b \operatorname{sech}^2 z - \alpha - \beta \tanh z + \gamma \operatorname{sech}^2 z$$

Se definirmos a e b tais que $\beta = 2ab$ e $a^2 + b^2 = \alpha$, a equação acima se reduz a

$$F''(z) - 2(a + b \tanh z) F'(z) + [\gamma - b(b + 1)] \operatorname{sech}^2(z) F(z) = 0.$$

Essa é equação é equivalente a uma equação hipergeométrica para a variável $u = (e^{-z} \operatorname{sech} z)/2$:

$$u(1 - u)F''(u) + [a + b + 1 - 2(b + 1)u]F'(u) + [\gamma - b(b + 1)]F(u) = 0.$$

Da teoria das equações hipergeométricas aprendemos que a equação acima tem como duas soluções independentes:

$$\begin{aligned}\phi_1 &= e^{-az} \operatorname{sech}^b z {}_2F_1\left(b + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4}, b + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma + 1/4}, 1 + a + b; \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right) \\ &= e^{-az} \operatorname{sech}^b z \left(\frac{e^z}{e^z + e^{-z}}\right)^{a-b} \times \\ &\times {}_2F_1\left(a + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4}, a + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma + 1/4}, 1 + a + b; \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right) \\ &= 2^{b-a} e^{-bz} \operatorname{sech}^a z {}_2F_1\left(a + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4}, a + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma + 1/4}, 1 + a + b; \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right)\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\phi_2 &= e^{-az} \operatorname{sech}^b z \left(\frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}} \right)^{-a-b} \times \\ &\times {}_2F_1\left(-a + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4}, -a + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma + 1/4}, 1 - a - b; \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right) \\ &= 2^{b+a} e^{bz} \operatorname{sech}^{-a} z {}_2F_1\left(-a + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4}, -a + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma + 1/4}, 1 - a - b; \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right)\end{aligned}$$

Note que $\phi_2(a, b) = 4^b \phi_1(-a, -b)$ (podemos nos livrar do fator 4^b com uma redefinição de ϕ_1 , por exemplo). Como função de $c = b + a$ e $d = b - a$ as soluções são dadas por

$$\phi_1 = u^{-c/2} (1-u)^{d/2} \times {}_2F_1\left(\frac{d-c+1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4}, \frac{d-c+1}{2} + \sqrt{\gamma + 1/4}, 1+c; u\right)$$

e

$$\phi_1 = u^{c/2} (1-u)^{d/2} \times {}_2F_1\left(\frac{c-d+1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4}, \frac{c-d+1}{2} + \sqrt{\gamma + 1/4}, 1-c; u\right)$$

Escrever as soluções dessa maneira manifesta a simetria de (A.2) sob a inversão $z \leftrightarrow -z$.

Para que as funções hipergeométricas acima sejam dadas por um polinômio, seus argumentos devem satisfazer

$$a + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4} = -n \quad \Longleftrightarrow \quad \sqrt{\gamma + 1/4} - a = n + \frac{1}{2}$$

ou

$$-a + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4} = -m \quad \Longleftrightarrow \quad \sqrt{\gamma + 1/4} + a = m + \frac{1}{2}$$

onde $n, m = 0, 1, 2, \dots$

As seguinte condições equivalentes para b são também suficientes para que a série hipergeométrica termine:

$$b + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4} = -n' \quad \Longleftrightarrow \quad \sqrt{\gamma + 1/4} - b = n' + \frac{1}{2}$$

e

$$-b + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4} = -m' \iff \sqrt{\gamma + 1/4} + b = m' + \frac{1}{2}$$

onde $n', m' = 0, 1, 2, \dots$

A.2 Comportamento assintótico das autofunções

A função hipergeométrica ${}_2F_1(p, q, r; u)$ converge para 1 quando u vai a zero. Para estudar seu comportamento quando $u \rightarrow 1$ precisamos da seguinte propriedade:

$$\begin{aligned} F(p, q, r; u) &= \frac{\Gamma(r)\Gamma(r-p-q)}{\Gamma(r-p)\Gamma(r-q)} F(p, q, p+q-r+1; 1-u) + \\ &+ \frac{\Gamma(r)\Gamma(p+q-r)}{\Gamma(p)\Gamma(q)} (1-u)^{r-p-q} F(r-p, r-q, r-p-q+1; 1-u) \end{aligned}$$

Aplicando essa relação para $u \approx 1$, obtemos:

$$F(p, q, r; u) = \frac{\Gamma(r)\Gamma(r-p-q)}{\Gamma(r-p)\Gamma(r-q)} + \frac{\Gamma(r)\Gamma(p+q-r)}{\Gamma(p)\Gamma(q)} (1-u)^{r-p-q}$$

No caso em questão,

$$\phi_1 \xrightarrow{z \rightarrow \infty} e^{-(a+b)z}$$

$$\phi_1 \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} e^{(a-b)z} \left(\frac{\Gamma(1+a+b)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b+\frac{1}{2}+\sqrt{\gamma})\Gamma(b+\frac{1}{2}-\sqrt{\gamma})} + \frac{\Gamma(1+a+b)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a+\frac{1}{2}+\sqrt{\gamma})\Gamma(a+\frac{1}{2}-\sqrt{\gamma})} e^{2(b-a)z} \right)$$

e

$$\phi_2 \xrightarrow{z \rightarrow \infty} e^{(a+b)z}$$

$$\phi_2 \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} e^{(b-a)z} \left(\frac{\Gamma(1-a-b)\Gamma(a-b)}{\Gamma(-b+\frac{1}{2}+\sqrt{\gamma})\Gamma(-b+\frac{1}{2}-\sqrt{\gamma})} + \frac{\Gamma(1-a-b)\Gamma(b-a)}{\Gamma(-a+\frac{1}{2}+\sqrt{\gamma})\Gamma(-a+\frac{1}{2}-\sqrt{\gamma})} e^{2(a-b)z} \right)$$

A.3 O wronskiano

Sejam ρ_1 e ρ_2 duas soluções independentes da equação hipergeométrica, de modo que $\phi_i = \omega \rho_i$, onde $\omega = e^{-az} \operatorname{sech}^b z$. Em particular, $\omega' = -(a+b \tanh z)\omega$. Portanto:

$$W = (\omega \rho_1)(\omega \rho_2)' - (\omega \rho_1)'(\omega \rho_2) = \omega^2 (\rho_1 \rho_2' - \rho_1' \rho_2)$$

A derivada de W é dada por:

$$\begin{aligned} W' &= 2\omega\omega' (\rho_1 \rho_2' - \rho_1' \rho_2) + \omega^2 (\rho_1 \rho_2'' - \rho_1'' \rho_2) \\ &= \omega^2 \rho_1 [-2(a+b \tanh z)\rho_2' + \rho_2''] - \omega^2 \rho_2 [-2(a+b \tanh z)\rho_1' + \rho_1''] \end{aligned}$$

Usando a equação diferencial verificada por ρ_1 e ρ_2 , obtemos

$$W' = \omega^2 \rho_1 [(\gamma - b(b+1)\operatorname{sech}^2 z)\rho_1] - \omega^2 \rho_2 [(\gamma - b(b+1)\operatorname{sech}^2 z)\rho_2] = 0.$$

Portanto, $W = cte = W(\infty)$. Trabalharemos com soluções da forma:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= e^{-bz} \operatorname{sech}^a z {}_2F_1\left(a + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4}, a + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma + 1/4}, 1 + a + b; \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right) \\ &\equiv e^{-bz} \operatorname{sech}^a z F_+ \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \phi_2 &= e^{bz} \operatorname{sech}^{-a} z {}_2F_1\left(-a + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4}, -a + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma + 1/4}, 1 - a - b; \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right) \\ &\equiv e^{bz} \operatorname{sech}^{-a} z F_- \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} W &= F_+ F_- (b + a \tanh z) + F_+ F'_- - \left(F_+ F_- (-b - a \tanh z) + F_- F'_+ \right) \\ &= 2(a + b \tanh z) + F_+ F'_- - F_- F'_+ \end{aligned}$$

Observe que $F_{\pm} \rightarrow 1$ quando $z \rightarrow \infty$. Usando a relação $F'(p, q, r, u) = (pq/r)F(p + 1, q + 1, r + 1, u)$, obtemos

$$\begin{aligned} F'_+(\infty) &= \frac{(a + \frac{1}{2} - \sqrt{\lambda + 1/4})(a + \frac{1}{2} + \sqrt{\lambda + 1/4})}{1 + a + b} F_+(\infty) \times \frac{d}{dz} \left(\frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}} \right) \Big|_{z=\infty} \\ &= \frac{a^2 + a - \gamma}{1 + a + b} \frac{-2e^z}{(1 + e^{2z})^2} \Big|_{z=\infty} = 0 \end{aligned}$$

(analogamente, $F'_-(\infty) = 0$). Portanto,

$$W = W(\infty) = \lim_{z \rightarrow \infty} 2(a + b \tanh z) = 2(a + b).$$

A.4 A função de Green

Agora podemos construir a função de Green para um problema de Schrödinger com um potencial de Morse-Rosen e com condições de contorno tais que a função de Green se anula em $\pm\infty$. Seguindo a receita descrita na seção (2.1.2), escrevemos

$$G(z, z') = \begin{cases} b_1 \phi_1(z) + b_2 \phi_2(z) - \frac{\phi_1(z) \phi_2(z') - \phi_2(z) \phi_1(z')}{-w(z')}, & z > z' \\ b_1 \phi_1(z) + b_2 \phi_2(z), & z' > z \end{cases}$$

com $w(z') = 2(b + a)$ (o sinal menos vem do laplaciano de (A.2).) Construiremos a função de Green com a condição de contorno: $G(-\infty, z') = G(\infty, z') = 0$. Quando $z \rightarrow \infty$, temos

$$G(z, z') \longrightarrow \left(b_2 - \frac{\phi_1(z')}{2(b + a)} \right) \phi_2(z) \longrightarrow 0$$

se e somente se $b_2 = \phi_2(z')/[2(b + a)]$.

In the previous paper we had $\phi_2(-\infty) = 0$, so that we had to have $b_1 = 0$. We should just impose that condition to check the consequences. Observe that is

unnecessary to require that $\phi_1(-\infty) = 0$. First, the Green's function would have the same aspect. For $z > z'$

$$G = \frac{e^{-b(z-z')} \operatorname{sech}^a z}{2(a+b) \operatorname{sech}^a z'} {}_2F_1(a, b, u) {}_2F_1(-a, -b, u')$$

(for $z' > z$ just turn 1 into 2 and vice-versa).

We can rewrite the last expression in a convenient fashion

$$G = \frac{e^{-(a+b)(z-z')}}{2(a+b)} \left(\frac{e^z \operatorname{sech} z}{e^{z'} \operatorname{sech} z'} \right)^a {}_2F_1(a, a+b, u) {}_2F_1(-a, -(a+b), u')$$

and, finally,

$$G = \frac{e^{-(a+b)(z-z')}}{2(a+b)} \mathcal{F}(a, a+b, z) \mathcal{F}(-a, -(a+b), z),$$

where

$$\mathcal{F}(p, q, z) = (e^z \operatorname{sech} z)^p \times {}_2F_1\left(p + \frac{1}{2} - \sqrt{\gamma + 1/4}, p + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma + 1/4}, 1 + q; \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right)$$

Apêndice B

Apêndice do capítulo 3

Nesse apêndice apresentamos em detalhe o cálculo dos diagramas, da renormalização e de passagens utilizadas no capítulo 3.

Começamos com a expressão (3.39) da função de partição invariante por translação em termos do campo clássico (*kink*) e uma flutuação η :

$$Z[j] = \int \frac{dz}{L} \exp \left\{ -S[\widehat{\varphi}]/\lambda + \int d^d x j(x) \widehat{\varphi}(x) / \sqrt{\lambda} \right\} \times \quad (\text{B.1})$$

$$\int [\mathcal{D}\eta] \exp \left\{ -\delta S_2 - \delta S + \int d^d x j(x) \eta(x) \right\} \delta \left(\frac{1}{L} \int d^d x \eta(x) \eta_0(z) \right) J[\widehat{\varphi}, \eta], \quad (\text{B.2})$$

onde

$$J[\widehat{\varphi}, \eta] = \left(\frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} \right)^{1/2} - \int d^d x \frac{d\eta_0}{dz} \eta(x) \quad (\text{B.3})$$

$$\equiv \left(\frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} \right)^{1/2} - (S[\widehat{\varphi}])^{-1/2} \int d^d x V'[\widehat{\varphi}] \eta, \quad (\text{B.4})$$

$$\delta S_2[\widehat{\varphi}, \eta] = \int d^d x \left[\frac{1}{2} (\partial_i \eta)^2 + \frac{1}{12} (3\widehat{\varphi}^2 - \varphi_v^2) \eta^2 \right] \quad (\text{B.5})$$

and

$$\delta S[\widehat{\varphi}, \eta] = \int d^d x \left[\frac{\sqrt{\lambda}}{3!} \widehat{\varphi} \eta^3 + \frac{\lambda}{4!} \eta^4 \right]. \quad (\text{B.6})$$

Agrupando as contribuições que são até a ordem quadrática nos campos, obtemos:

$$Z[j] = \int \frac{dz}{L} \left(\frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} \right)^{1/2} \exp \left\{ -S[\widehat{\varphi}]/\lambda + \int d^d x j(x) \widehat{\varphi}(x)/\sqrt{\lambda} \right\} \times \\ \int [\mathcal{D}\eta] \delta \left(\frac{1}{L} \int d^d x \eta(x) \eta_0(z) \right) \exp \left\{ \delta S_2 + \int d^d x j(x) \eta(x) \right\} \mathcal{P}[\widehat{\varphi}, \eta],$$

onde

$$\mathcal{P}[\widehat{\varphi}, \eta] = \left(1 - \frac{\sqrt{\lambda}}{S[\widehat{\varphi}]} \int V'[\widehat{\varphi}] \eta \right) e^{-\delta S} \quad (\text{B.7})$$

tem que ser tratado perturbativamente, usando-se:

$$e^{-\delta S} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left(\int \frac{\sqrt{\lambda}}{3!} \widehat{\varphi} \eta^3 + \frac{\lambda}{4!} \eta^4 \right)^n. \quad (\text{B.8})$$

É conveniente dar um nome à parte quadrática das flutuações:

$$Z'_2[j] = \int [\mathcal{D}\eta] \delta \left(\frac{1}{L} \int d^d x \eta(x) \eta_0(z) \right) \exp \left\{ \delta S_2 + \int d^d x j(x) \eta(x) \right\}. \quad (\text{B.9})$$

O propagador semiclássico está associado ao operador de flutuações quadráticas sem o termo de fonte, ou seja,

$$\left[-\partial_i^2 + M^2 - \frac{3}{2} M^2 \text{sech}^2(\theta(z)) \right] G(x, x') = \delta^d(x - x'). \quad (\text{B.10})$$

Definimos também G' como sendo a restrição do propagador semiclássico ao subespaço ortogonal ao modo zero. Em termos de

$$(G')^{-1} = -\partial_i^2 + M^2 - \frac{3}{2} M^2 \text{sech}^2(\theta(z)), \quad (\text{B.11})$$

podemos escrever

$$Z'_2[j] = \int [\mathcal{D}\eta] \exp -\frac{1}{2} \{ \eta (G')^{-1} \eta - 2\eta j \} . \quad (\text{B.12})$$

Completando o quadrado e mudando a variável de integração, tal como foi feito no capítulo 3, obtemos, na notação definida em (3.17):

$$Z'_2[j] = Z'_2[0] \exp \frac{1}{2} \langle j | G' | j \rangle , \quad (\text{B.13})$$

onde

$$Z'_2[0] = \det^{-1/2} (G')^{-1} \equiv (\Delta')^{-1/2} . \quad (\text{B.14})$$

Assim, temos:

$$Z[j] = \int \frac{dz}{L} \left(\frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} \right)^{1/2} (\Delta')^{1/2} e^{-S[\widehat{\varphi}]/\lambda + \langle j | \widehat{\varphi} \rangle / \sqrt{\lambda}} \left\{ \mathcal{P} \left[\widehat{\varphi}, \frac{\delta}{\delta j} \right] e^{\frac{1}{2} \langle j | G' | j \rangle} \right\} . \quad (\text{B.15})$$

Expandindo a expressão entre chaves em (B.15), obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \left[\widehat{\varphi}, \frac{\delta}{\delta j} \right] = & \left(1 - \frac{\sqrt{\lambda}}{S[\widehat{\varphi}]} \int V'[\widehat{\varphi}] \frac{\delta}{\delta j} \right) \left\{ 1 - \int d^d x_1 \left[\frac{\sqrt{\lambda}}{3!} \widehat{\varphi}(x_1) \frac{\delta^3}{[\delta j(x_1)]^3} + \right. \right. \\ & + \frac{\lambda}{4!} \widehat{\varphi}(x_1) \frac{\delta^4}{[\delta j(x_1)]^4} \left. \right] + \frac{1}{2!} \int d^d x_1 d^d x_2 \left[\frac{\lambda}{(3!)^2} \widehat{\varphi}(x_1) \widehat{\varphi}(x_2) \frac{\delta^3}{[\delta j(x_1)]^3} \frac{\delta^3}{[\delta j(x_2)]^3} + \right. \\ & + \frac{\lambda^{3/2}}{3!4!} \widehat{\varphi}(x_1) \frac{\delta^3}{[\delta j(x_1)]^3} \frac{\delta^4}{[\delta j(x_2)]^4} + \frac{\lambda^{3/2}}{3!4!} \widehat{\varphi}(x_2) \frac{\delta^3}{[\delta j(x_2)]^3} \frac{\delta^4}{[\delta j(x_1)]^4} + \\ & \left. \left. + \frac{\lambda^2}{(4!)^2} \frac{\delta^4}{[\delta j(x_1)]^4} \frac{\delta^4}{[\delta j(x_2)]^4} \right] + \mathcal{O}(\lambda^{5/2}) \right\} . \end{aligned}$$

Definindo:

$$f = \exp \frac{1}{2} \langle j | G' | j \rangle , \quad (\text{B.16})$$

obtemos, até a ordem $\lambda^{3/2}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \left[\widehat{\varphi}, \frac{\delta}{\delta j} \right] f &= f - \frac{\sqrt{\lambda}}{3!} \langle \widehat{\varphi} | \frac{\delta^3 f}{\delta j^3} \rangle - \frac{\sqrt{\lambda}}{S[\widehat{\varphi}]} \langle V'[\widehat{\varphi}] | \frac{\delta f}{\delta j} \rangle - \frac{\lambda}{4!} \langle \frac{\delta^4 f}{\delta j^4} \rangle + \frac{\lambda}{2(3!)^2} \langle \widehat{\varphi} | \frac{\delta^6 f}{\delta j_1^3 \delta j_2^3} | \widehat{\varphi} \rangle + \\ &+ \frac{\lambda}{3!S[\widehat{\varphi}]} \langle \widehat{\varphi} | V'[\widehat{\varphi}] \frac{\delta^4 f}{\delta j \delta j_1^3} | \widehat{\varphi} \rangle + \mathcal{O}(\lambda^{3/2}) . \end{aligned}$$

Usando uma notação compacta, escrevemos:

$$\mathcal{P} \left[\widehat{\varphi}, \frac{\delta}{\delta j} \right] f = f \{ 1 - A_{1/2} \lambda^{1/2} - A_1 \lambda + \mathcal{O}(\lambda^{3/2}) \} ,$$

onde

$$A_{1/2} = \frac{1}{S[\widehat{\varphi}]f} \langle V'[\widehat{\varphi}] | \frac{\delta f}{\delta j} \rangle + \frac{1}{3!f} \langle \widehat{\varphi} | \frac{\delta^3 f}{\delta j^3} \rangle \quad (\text{B.17})$$

e

$$A_1 = \frac{1}{4!f} \langle \frac{\delta^4 f}{\delta j^4} \rangle - \frac{1}{3!S[\widehat{\varphi}]f} \langle \widehat{\varphi} | V'[\widehat{\varphi}] \frac{\delta^4 f}{\delta j \delta j_1^3} | \widehat{\varphi} \rangle - \frac{1}{2!(3!)^2 f} \langle \widehat{\varphi} | \frac{\delta^6 f}{\delta j_1^3 \delta j_2^3} | \widehat{\varphi} \rangle . \quad (\text{B.18})$$

Assim, obtemos, a menos de termos de ordem $\lambda^{3/2}$:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} Z[j] = \left(\frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} \right)^{1/2} (\Delta')^{1/2} e^{-S[\widehat{\varphi}]/\lambda + \langle j | \widehat{\varphi} \rangle / \sqrt{\lambda}} f \{ 1 - A_{1/2} \lambda^{1/2} - A_1 \lambda \} . \quad (\text{B.19})$$

Usando (B.19), obtemos para a energia livre $F[j]$ (novamente incluindo termos até a ordem λ):

$$\begin{aligned} F[j] &= -\log \left(\lim_{L \rightarrow \infty} Z[j] \right) \\ &= \frac{S[\widehat{\varphi}]}{\lambda} - \frac{\langle j | \widehat{\varphi} \rangle}{\sqrt{\lambda}} - \frac{1}{2} \log \frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} + \frac{1}{2} \log \Delta' - \log f \\ &\quad + A_{1/2} \lambda^{1/2} + \left(A_1 + \frac{1}{2} A_{1/2}^2 \right) \lambda . \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

B.1 Bolhas de vácuo e tensão superficial

As chamadas bolhas de vácuo são os termos da expansão do funcional gerador $Z[j]$ quando $j = 0$. Note que, ao derivarmos a função f um número ímpar de vezes

com relação a j , nos depararemos com expressões proporcionais a j , que se anulam, portanto, quando fazemos $j = 0$. Desse modo, teremos $A_{1/2} = 0$. Para o cálculo de $A_1[0]$ precisaremos calcular derivadas pares de f . É o que faremos agora. Usamos

$$\frac{\delta f}{\delta j(x)} = \left[\frac{1}{2} \langle x | G' j \rangle + \frac{1}{2} \langle j G' | x \rangle \right] f(x) \equiv f(x) \overline{G' j}(x),$$

para obter

$$\frac{\delta^2 f}{[\delta j(x)]^2} = f(x) \left\{ G'(x, x) + \overline{G' j}^2(x) \right\}.$$

A derivada terceira é

$$\frac{\delta^3 f}{[\delta j(x)]^3} = f(x) \left\{ 3G'(x, x) \overline{G' j}(x) + \overline{G' j}^3(x) \right\} \equiv f(x) T(x).$$

Precisamos ainda da quarta derivada:

$$\frac{\delta^4 f}{[\delta j(x)]^4} = f(x) \left\{ 3G'^2(x, x) + 6G'(x, x) \overline{G' j}^2(x) + \overline{G' j}^4(x) \right\}. \quad (\text{B.21})$$

Um dos termos que contribuem para $A_1[0]$ está relacionado ao valor dessa quarta derivada em $j = 0$:

$$\left. \frac{\delta^4 f}{[\delta j(x)]^4} \right|_{j=0} = 3f(x) G'^2(x, x).$$

Para simplificar a notação, definamos

$$\frac{\delta \overline{G' j}(x)}{\delta j(y)} = \frac{1}{2} G'(x, y) + \frac{1}{2} G'(y, x) = \overline{G'}(x, y).$$

Usando a regra de Leibnitz para o produto $f(x)T(x)$ que aparece na derivada terceira, podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{\delta^6 f}{[\delta j(x_2)]^3 [\delta j(x_1)]^3} &= \frac{\delta^3 T}{[\delta j(x_2)]^3}(x_1) f(x) + 3 \frac{\delta^2 T}{[\delta j(x_2)]^2}(x_1) \frac{\delta f}{\delta j(x_2)}(x) + \\ &+ 3 \frac{\delta T}{\delta j(x_2)}(x_1) \frac{\delta^2 f}{[\delta j(x_2)]^2}(x) + T(x_1) \frac{\delta^3 f}{[\delta j(x_2)]^3}(x). \end{aligned}$$

Substituindo as expressões já obtidas para as derivadas, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\delta^6 f}{[\delta j(x_2)]^3 [\delta j(x_1)]^3} &= f(x) \left[6\overline{G}^3(x_1, x_2) + 3 \left\{ 6\overline{G}'j(x_1)\overline{G}'^2(x_1, x_2) \right\} \overline{G}'j(x_2) + \right. \\ &+ 3 \left\{ 3G'(x_1, x_1)\overline{G}'(x_1, x_2) + 3\overline{G}'j^2(x_1)\overline{G}'(x_1, x_2) \right\} \left\{ G'(x_2, x_2) + \overline{G}'j^2(x_2) \right\} + \\ &+ \left. \left\{ 3G'(x_1, x_1)\overline{G}'j(x_1) + \overline{G}'j^3(x_1) \right\} \left\{ 3G'(x_2, x_2)\overline{G}'j(x_2) + \overline{G}'j^3(x_2) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Impondo $j = 0$ e agrupando os termos, chegamos à expressão:

$$\left. \frac{\delta^6 f}{[\delta j(x_2)]^3 [\delta j(x_1)]^3} \right|_{j=0} = 6f(x)\overline{G}^3(x_1, x_2) + 9f(x)G'(x_1, x_1)\overline{G}'(x_1, x_2)G'(x_2, x_2).$$

Analogamente, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\delta^4 f}{\delta j(x)[\delta j(x_1)]^3} &= \frac{\delta T}{\delta j(x)}(x_1)f(x) + T(x_1)\frac{\delta f}{\delta j(x)}(x) \\ &= f(x) \left\{ 3\overline{G}'j(x)G'(x_1, x_1)\overline{G}'j(x_1) + \overline{G}'j(x)\overline{G}'^3j(x_1) \right. \\ &+ \left. 3G'(x_1, x_1)\overline{G}'(x, x_1) + 3\overline{G}'^2j(x_1)G'(x_1, x_1) \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Fazendo $j = 0$, apenas um termo sobrevive:

$$\left. \frac{\delta^4 f}{\delta j(x)[\delta j(x_1)]^3} \right|_{j=0} = 3G'(x_1, x_1)\overline{G}'(x, x_1).$$

Já temos os ingredientes para calcular $A_1[0]$:

$$\begin{aligned} A_1[0] &= \frac{\lambda}{8} \int d^d x G'^2(x, x) - \frac{\lambda}{2S[\widehat{\varphi}]} \int d^d x d^d x_1 V'[\widehat{\varphi}(x)]G'(x_1, x_1)\overline{G}'(x, x_1)\widehat{\varphi}(x_1) + \\ &- \frac{\lambda}{12} \int d^d x_1 d^d x_2 \widehat{\varphi}(x_1)\overline{G}^3(x_1, x_2)\widehat{\varphi}(x_2) + \\ &- \frac{\lambda}{8} \int d^d x_1 d^d x_2 \widehat{\varphi}(x_1)G'(x_1, x_1)\overline{G}'(x_1, x_2)G'(x_2, x_2)\widehat{\varphi}(x_2). \end{aligned}$$

Usando essa expressão em (B.19), obtemos

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} Z[0] = & \left(\frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} \right)^{1/2} (\Delta')^{1/2} e^{-S[\widehat{\varphi}]/\lambda} \left\{ 1 - \frac{\lambda}{8} \int d^d x G'^2(x, x) + \right. \\ & + \frac{\lambda}{2S[\widehat{\varphi}]} \int d^d x d^d x_1 V'[\widehat{\varphi}(x)] G'(x_1, x_1) \overline{G}'(x, x_1) \widehat{\varphi}(x_1) + \\ & + \frac{\lambda}{12} \int d^d x_1 d^d x_2 \widehat{\varphi}(x_1) \overline{G}'^3(x_1, x_2) \widehat{\varphi}(x_2) + \\ & \left. + \frac{\lambda}{8} \int d^d x_1 d^d x_2 \widehat{\varphi}(x_1) G'(x_1, x_1) \overline{G}'(x_1, x_2) G'(x_2, x_2) \widehat{\varphi}(x_2) \right\}. \end{aligned}$$

De posse de $Z[0]$, calculamos trivialmente a energia livre $F[0]$ por meio de (B.20):

$$\begin{aligned} F[0] &= \frac{S[\widehat{\varphi}]}{\lambda} - \frac{1}{2} \log \frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} + \frac{1}{2} \log \Delta' + \log(1 - A_1[0]\lambda) \\ &= \frac{S[\widehat{\varphi}]}{\lambda} - \frac{1}{2} \log \frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} + \frac{1}{2} \log \Delta' - A_1[0]\lambda + \mathcal{O}(\lambda^{3/2}). \end{aligned}$$

A tensão superficial é dada por

$$\sigma = \lim_{V_{d-1} \rightarrow \infty} \left(\frac{\Delta F}{V_{d-1}} \right),$$

onde ΔF é a diferença entre o valor de $F[0]$ na presença da interface e no vácuo φ_v :

$$\begin{aligned} \Delta F &= F[0] - F_{\varphi_v}[0] \\ &= -\log \left[e^{-S[\widehat{\varphi}]/\lambda} \left(\frac{S[\widehat{\varphi}]}{2\pi\lambda} \right)^{1/2} \left(\frac{\Delta'}{\Delta_v} \right)^{1/2} \frac{1 - A_1[0]}{1 - A_{1v}[0]} \right] \\ &= \frac{S[\widehat{\varphi}]}{\lambda} + \frac{1}{2} \log \left(\frac{2\pi\lambda}{S[\widehat{\varphi}]} \frac{\Delta'}{\Delta_v} \right) + (A_1[0] - A_{1v}[0])\lambda + \mathcal{O}(\lambda^{3/2}). \end{aligned}$$

No limte $V_{d-1} \rightarrow \infty$ diversos termos vão a zero e obtemos para a tensão superficial:

$$\sigma = \sigma_0 + \sigma_1 = \frac{\widehat{S}}{\lambda} + \lim_{A \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2A} \log \frac{\Delta'}{\Delta_v} \right). \quad (\text{B.24})$$

Formalmente, o logaritmo do determinante na expressão anterior pode ser escrito

como uma integral sobre momenta:

$$\log \frac{\Delta}{\Delta_v} = V_d \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \log \frac{G}{G_v}. \quad (\text{B.25})$$

É interessante separar a contribuição do modo com $k = 0$. Faremos isso, reescrevendo a razão de determinantes na expressão anterior de uma maneira conveniente:

$$\log \frac{G}{G_v} = \log \left(\frac{2k}{M} \right)^2 + \log \frac{G'(k)}{G'(0)} + \log \frac{G_v(k)}{G_v(0)} + \log \frac{G'(0)}{G_v(0)}. \quad (\text{B.26})$$

Para calcular o segundo e o terceiro termos do lado direito da equação anterior, escrevamos a decomposição espectral de G como¹

$$G(\mathbf{k}, x, y) = \int \frac{dq}{2\pi} \frac{\eta_q(x)\eta_q^*(y)}{\lambda_q + \mathbf{k}^2}, \quad (\text{B.27})$$

de forma que

$$G^{-1}(\mathbf{k}, x, y) = \int \frac{dq}{2\pi} (\lambda_q + \mathbf{k}^2) \eta_q(x)\eta_q^*(y). \quad (\text{B.28})$$

Agora, note que

$$\frac{d}{d\mathbf{k}^2} \log G^{-1} = \frac{1}{G^{-1}} \frac{d}{d\mathbf{k}^2} G^{-1} = \frac{1}{G^{-1}} = G. \quad (\text{B.29})$$

Assim,

$$\log G^{-1} = \int_0^{\mathbf{k}^2} G(\sqrt{q}, x, y) dq. \quad (\text{B.30})$$

Usando a identidade $\log \det A = \text{Tr} \log A$, escrevemos

$$\log \frac{\Delta}{\Delta_v} = \text{Tr} \log \frac{G_v}{G}, \quad (\text{B.31})$$

onde o índice v em uma quantidade indica que ela é avaliada no setor de vácuo

¹Admitiremos que G seja a função de Green de um operador do tipo $(\mathbf{k}^2 + \mathcal{L})$, onde \mathcal{L} é um operador diferencial sem dependência em \mathbf{k} , de modo que o espectro de G dependa trivialmente de \mathbf{k} .

trivial, $\pm\varphi_v$. Portanto,

$$\text{Tr} \log \frac{G(\mathbf{k})}{G(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\mathbf{k}^2} G(\sqrt{q}, x, x) dq dx . \quad (\text{B.32})$$

Relações análogas valem para G' e G_v . As integrais envolvidas podem ser facilmente calculadas, produzindo

$$\log \frac{\Delta'(k)}{\Delta'(0)} - \log \frac{\Delta'_v(k)}{\Delta'_v(0)} = \log \left[\frac{b(k) - 1}{b(k) + 1} \right] - 2 \log[b(k) + 2] + \log 48 . \quad (\text{B.33})$$

O último termo do lado direito de (B.26) pode ser obtido em textos de mecânica quântica. O resultado é:

$$\log \frac{G'(0)}{G_v(0)} = -\log 48 . \quad (\text{B.34})$$

Juntando todas as contribuições, obtemos a expressão (3.51) do texto.

B.2 A função a 1-ponto e o perfil da interface

O perfil da interface é o valor esperado do campo escalar ϕ . Podemos expressar essa quantidade em termos de Z por meio da relação²:

$$G_c^{(1)}(y) = -\left. \frac{\delta F}{\delta j(y)} \right|_{j=0} = \frac{1}{Z} \left. \frac{\delta Z}{\delta j(y)} \right|_{j=0} . \quad (\text{B.35})$$

A partir da expressão que temos para F , identificamos as seguintes contribuições não-nulas para o perfil até a ordem $\lambda^{1/2}$:

$$G_c^{(1)}(y) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left. \frac{\delta}{\delta j(y)} \langle j | \hat{\varphi} \rangle \right|_{j=0} + \lambda^{1/2} \left. \frac{\delta A_{1/2}}{\delta j(y)} \right|_{j=0} .$$

O primeiro termo produz

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left. \frac{\delta}{\delta j(y)} \langle j | \hat{\varphi} \rangle \right|_{j=0} = \frac{\hat{\varphi}(y)}{\sqrt{\lambda}} .$$

² $G_c^{(1)}$ é a chamada função de 1-ponto conexa.

O segundo termo não é tão imediato:

$$\lambda^{1/2} \frac{\delta A_{1/2}}{\delta j(y)} \Big|_{j=0} = \lambda^{1/2} \left(\frac{1}{S[\widehat{\varphi}]} \frac{\delta}{\delta j(y)} \left[\frac{1}{f} \langle V'[\widehat{\varphi}] | \frac{\delta f}{\delta j(x)} \rangle \right] \Big|_{j=0} + \frac{1}{3!} \frac{\delta}{\delta j(y)} \left[\frac{1}{f(x)} \langle \widehat{\varphi} | \frac{\delta^3 f}{\delta j(x)^3} \rangle \right] \Big|_{j=0} \right).$$

Analisando cada colchete separadamente, temos

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta j(y)} \left[\frac{1}{f} \langle V'[\widehat{\varphi}] | \frac{\delta f}{\delta j(x)} \rangle \right] \Big|_{j=0} &= -\frac{1}{f^2(x)} \frac{\delta f}{\delta j(x)} \langle V'[\widehat{\varphi}] | \frac{\delta f}{\delta j(x)} \rangle + \frac{1}{f(x)} \langle V'[\widehat{\varphi}] | \frac{\delta^2 f}{\delta j(y) \delta j(x)} \rangle \\ &= \int d^d x V'[\widehat{\varphi}(x)] \overline{G}'(x, y), \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta j(y)} \left[\frac{1}{f(x)} \langle \widehat{\varphi} | \frac{\delta^3 f}{\delta j(x)^3} \rangle \right] \Big|_{j=0} &= -\frac{1}{f^2(x)} \frac{\delta f}{\delta j(x)} \langle \widehat{\varphi} | \frac{\delta^3 f}{[\delta j(x)]^3} \rangle + \frac{1}{f(x)} \langle \widehat{\varphi} | \frac{\delta^4 f}{\delta j(y) [\delta j(x)]^3} \rangle \\ &= 3 \int d^d x \widehat{\varphi}(x) G'(x, x) \overline{G}'(x, y). \end{aligned}$$

Ficamos com:

$$\begin{aligned} G_c^{(1)}(y) &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left\{ \widehat{\varphi}(y) - \frac{\lambda}{S[\widehat{\varphi}]} \int d^d x V'[\widehat{\varphi}(x)] \overline{G}'(x, y) + \right. \\ &\quad \left. - \frac{\lambda}{2} \int d^d x \widehat{\varphi}(x) G'(x, x) \overline{G}'(x, y) + \mathcal{O}(\lambda^2) \right\}. \end{aligned}$$

B.3 A função de 2-pontos e correlações na interface

A função de dois pontos tem uma expressão simples em termos da energia livre F quando nos restringimos a cálculos a 1-laço:

$$G_c^{(2)}(y_1, y_2) = - \left[\frac{\delta^2 F}{\delta j(y_1) \delta j(y_2)} \right] \Big|_{j=0}. \quad (\text{B.36})$$

Os quatro primeiros termos em (B.20) não contribuem. A primeira contribuição não-nula é

$$\left[\frac{\delta^2 \log f}{\delta j(y_1) \delta j(y_2)} \right] \Big|_{j=0} = \overline{G}'(y_1, y_2).$$

Em seguida temos as contribuições envolvendo derivadas $A_{1/2}$ e A_1 . Inicialmente, note que

$$-\lambda^{1/2} \frac{\delta^2 A_{1/2}}{\delta j(y_1) \delta j(y_2)} \Big|_{j=0} = 0,$$

resultado que pode ser verificado facilmente. As contribuições em um cálculo até a ordem λ são:

$$G_c^{(2)}(y_1, y_2) = -\lambda \frac{\delta^2 A_1}{\delta j(y_1) \delta j(y_2)} \Big|_{j=0} - \lambda \left[\frac{\delta A_{1/2}}{\delta j(y_1)} \Big|_{j=0} \right] \left[\frac{\delta A_{1/2}}{\delta j(y_2)} \Big|_{j=0} \right]. \quad (\text{B.37})$$

Começemos desenvolvendo o último termo. Já obtivemos, na análise da função a 1-ponto, a expressão de cada um dos colchetes. Podemos inferir que

$$\begin{aligned} \left[\frac{\delta A_{1/2}}{\delta j(y_1)} \Big|_{j=0} \right] \left[\frac{\delta A_{1/2}}{\delta j(y_2)} \Big|_{j=0} \right] &= \left(\frac{1}{S[\widehat{\varphi}]} \int d^d x V'[\widehat{\varphi}(x)] \overline{G}'(x, y_1) + \right. \\ &\quad \left. - \frac{\lambda}{2} \int d^d x \widehat{\varphi}(x) G'(x, x) \overline{G}'(x, y_1) \right) \left(\frac{1}{S[\widehat{\varphi}]} \int d^d x V'[\widehat{\varphi}(x)] \overline{G}'(x, y_2) + \right. \\ &\quad \left. - \frac{\lambda}{2} \int d^d x \widehat{\varphi}(x) G'(x, x) \overline{G}'(x, y_2) \right). \end{aligned}$$

A expressão (B.18) tem três termos, que já foram calculados. Usando (B.21), obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2}{\delta j_1 \delta j_2} \left[\frac{1}{f(x)} \frac{\delta^4 f}{[\delta j(x)]^4} \right] &= 6G'(x, x) \frac{\delta^2}{\delta j_1 \delta j_2} \overline{G}'^2(x) \Big|_{j=0} \\ &= 12G'(x, x) \overline{G}'(x, y_1) \overline{G}'(x, y_2). \end{aligned}$$

O segundo termo envolve a derivada

$$\frac{\delta^2}{\delta j_1 \delta j_2} \left[\frac{1}{f(x)} \frac{\delta^4 f}{\delta j(x) [\delta j(x_1)]^3} \right] = 3\overline{G}'(y_1, x) G'(x_1, x_1) \overline{G}'(x_1, y_2) + (y_1 \leftrightarrow y_2).$$

onde usamos (B.23). Com (B.22), obtemos a derivada que aparece no terceiro termo de (B.18):

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2}{\delta j_1 \delta j_2} \left[\frac{1}{f(x)} \frac{\delta^6 f}{[\delta j_1]^3 [\delta j_2]^3} \right] &= 18 \overline{G}'(x_1, y_1) \overline{G}'(x_1, x_2) \overline{G}'(x_2, y_2) + (y_1 \leftrightarrow y_2) + \\ &+ \overline{G}'(x_1, y_1) \overline{G}'(x_1, y_2) \overline{G}'(x_1, x_2) G'(x_2, x_2) + (x_1 \leftrightarrow x_2) \\ &+ 9 \overline{G}'(x_1, y_1) G'(x_1, x_1) G'(x_2, x_2) \overline{G}'(x_2, y_2) + (y_1 \leftrightarrow y_2) . \end{aligned}$$

Juntando todas as contribuições com os respectivos pré-fatores, diversos termos se cancelam e obtemos para a função de 2-pontos:

$$\begin{aligned} G_c^{(2)}(y_1, y_2) &= \overline{G}'(y_1, y_2) - \frac{\lambda}{2} \int d^d x_1 \overline{G}'(y_1, x_1) G'(x_1, x_1) \overline{G}'(x_1, y_2) + \\ &+ \frac{\lambda}{2} \int d^d x_1 d^d x_2 \overline{G}'(y_1, x_1) \widehat{\varphi}(x_1) G'^2(x_1, x_2) \widehat{\varphi}(x_2) \overline{G}'(x_2, y_2) + \\ &+ \frac{\lambda}{2} \int d^d x_1 d^d x_2 \overline{G}'(y_1, x_1) \widehat{\varphi}(x_1) \overline{G}'(x_1, y_2) \overline{G}'(x_1, x_2) \widehat{\varphi}(x_2) \overline{G}'(x_2, x_2) + \\ &- \frac{\lambda}{S^2[\widehat{\varphi}]} \int d^d x_1 V'[\widehat{\varphi}(x_1)] \overline{G}'(x_1, y_1) \int d^d x_2 V'[\widehat{\varphi}(x_2)] \overline{G}'(x_2, y_2) + \mathcal{O}(\lambda^{3/2}) \end{aligned}$$

B.4 O procedimento de renormalização

Neste apêndice apresentamos o procedimento de renormalização adotado no texto. Começamos com o funcional de ação efetiva a 1-laço

$$\mathcal{A}[\phi(x)] \equiv \lambda \Gamma[\phi(x)] = S[\phi(x)] + \frac{\lambda}{2} \log \left(\frac{\Delta[\phi(x)]}{\Delta_v} \right) , \quad (\text{B.38})$$

escrito em termos de parâmetros renormalizados, e a eles adicionamos contratermos para obtermos uma expressão renormalizada

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_R[\phi(x)] &= \mathcal{A}[\phi(x)] - \frac{C_1}{2} \int d^d x (\phi^2 - \varphi_v^2) - \frac{C_2}{4} \int d^d x (\phi^2 - \varphi_v^2)^2 \\ &- \frac{C_{3L}}{2} \int d^d x (\partial_L \phi)^2 - \frac{C_{3T}}{2} \int d^d x (\nabla_T \phi)^2 . \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

Na fórmula acima, $\phi(x) \equiv \langle \varphi(x) \rangle$ é o valor esperado do campo. As contantes de renormalização C_1, C_2, C_{3L} e C_{3T} estão associadas a massa, acoplamento e renormalização das funções de onda longitudinais e transversais, respectivamente. Elas

serão fixadas por condições de renormalização no setor de vácuo.

Da própria equação (3.18) que define G , obtém-se

$$G^{-1} = G_v^{-1} - \mathcal{B}, \quad (\text{B.40})$$

com $\mathcal{B}(\theta) = (\phi^2 - \varphi_v^2)/2 = (3M/2)\text{sech}^2\theta$, de modo que $G_v G^{-1} = 1 - G_v \mathcal{B}$ e, portanto,

$$\log \frac{\Delta}{\Delta_v} = \text{Tr} \log (1 - G_v \mathcal{B}) \quad (\text{B.41})$$

$$= - \sum_{n=1}^{\infty} \text{Tr} (G_v \mathcal{B})^n. \quad (\text{B.42})$$

O propagador G_v é conhecido, por ter a forma de um propagador livre:

$$G_v(\mathbf{k}, \theta, \theta') = \frac{e^{-\sqrt{4+\mathbf{k}^2}|\theta-\theta'|}}{2\sqrt{4+\mathbf{k}^2}}. \quad (\text{B.43})$$

Da definição da função de vértice, temos:

$$\Gamma_R[\varphi] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \Gamma_R^{(n)}(x_1, \dots, x_n) [\phi(x_1) - \varphi_v] \dots [\phi(x_n) - \varphi_v] d^d x_1 \dots d^d x_n, \quad (\text{B.44})$$

de modo que

$$\Gamma_R^{(n)} = \left[\frac{\delta^{(n)} \Gamma_R}{\delta \Delta \phi_1 \dots \delta \Delta \phi_n} \right]_{\phi=\phi_v}. \quad (\text{B.45})$$

Derivadas funcionais de (B.39) com relação a $\phi(x)$ levam às funções de vértice de n pontos. Derivadas avaliadas em $\phi(x) = \hat{\varphi}(x)$ produzem funções de vértice no setor de kink.

Como

$$\mathcal{B} = \varphi_v(\varphi - \varphi_v) + \frac{1}{2}(\varphi - \varphi_v)^2, \quad (\text{B.46})$$

vemos diretamente de (B.39) e (B.42) que

$$\begin{aligned}
\Gamma_R^{(1)}(y) &= \frac{\delta S_{cl}}{\delta\phi(y)} + \frac{\lambda}{2} \frac{\delta}{\delta\phi(y)} \text{Tr} \log (G_v^{-1} + \mathcal{B}) - C_1 \frac{\delta}{\delta\phi(y)} \text{Tr} \mathcal{B} - C_2 \frac{\delta}{\delta\phi(y)} \text{Tr} \mathcal{B}^2 + \\
&\quad - \frac{C_{3L}}{2} \frac{\delta}{\delta\phi(y)} \text{Tr} (\partial_z \phi)^2 - \frac{C_{3T}}{2} \frac{\delta}{\delta\phi(y)} \text{Tr} (\partial_T \phi)^2 \\
&= \frac{\delta S_{cl}}{\delta\phi(y)} + \frac{\lambda}{2} \text{Tr} \left[G \frac{\delta \mathcal{B}}{\delta\phi(y)} \right] - C_1 \text{Tr} \frac{\delta \mathcal{B}}{\delta\phi(y)} - 2C_2 \text{Tr} \left[\frac{\delta \mathcal{B}^2}{\delta\phi(y)} \right] + \\
&\quad - C_{3L} \text{Tr} \left[(\partial_z \phi)_x \partial_z^x \frac{\delta\phi(x)}{\delta\phi(y)} \right] - C_{3T} \text{Tr} \left[(\partial_T \phi)_x \partial_T^x \frac{\delta\phi(x)}{\delta\phi(y)} \right] \\
&= \frac{\delta S_{cl}}{\delta\phi(y)} + \frac{\lambda}{2} \phi(y) G(y, y) - C_1 \phi(y) - 2C_2 \phi(y) \mathcal{B}(y) + C_{3L} \partial_z^2 \phi(y) + C_{3T} \partial_T^2 \phi(y),
\end{aligned}$$

onde usamos na última passagem a definição da derivada da delta. Quando avaliamos $\Gamma_R^{(1)}$ em φ_v , que é um mínimo constante da ação, obtemos

$$\Gamma^{(1)}(y) = \varphi_v G_v(y, y) - C_1 \varphi_v, \quad (\text{B.47})$$

Note que, de (B.43),

$$G_v(y, y) = \int \frac{d^d k}{2\pi} \frac{1}{2\sqrt{4 + \mathbf{k}^2}}, \quad (\text{B.48})$$

que é uma constante infinita. Nesse ponto é conveniente definir certas quantidades auxiliares por meio de

$$I_n(d, \Lambda) = \int_{\Lambda} \frac{d^{d-1} k_T}{(2\pi)^{d-1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_L}{2\pi} \tilde{G}_v^n(k). \quad (\text{B.49})$$

Vê-se facilmente que $\Gamma^{(1)}(y) = \varphi_v I_1(d, \Lambda) - C_1 \varphi_v$.

Para $\Gamma_R^{(2)}$, temos:

$$\begin{aligned}
\Gamma_R^{(2)}(y_1, y_2) &= \frac{\delta^2 S_{cl}}{\delta_1 \phi(y_1) \delta \phi(y_2)} + \frac{\lambda}{2} \delta(y_1 - y_2) G(y_1, y_1) - \text{Tr} \left[\frac{\lambda}{2} \phi(y_1) \delta(x - y_1) G^2(x, y_2) \right] + \\
&\quad - C_1 \delta(y_1 - y_2) - 2C_2 \phi(y_1) \phi(y_2) \delta(y_1 - y_2) - 2C_2 \mathcal{B}(y_1) \delta(y_1 - y_2) + \\
&\quad + C_{3L} \partial_{1z}^2 [\delta(y_1 - y_2)] + C_{3T} \partial_{1T}^2 [\delta(y_1 - y_2)],
\end{aligned}$$

que aplicado em φ_v produz

$$\Gamma_R^{(2)}(y_1, y_2) = \frac{\delta^2 S_{cl}}{\delta\phi(y_1)\delta\phi(y-2)} \Big|_{\varphi_v} + \frac{\lambda}{2}\delta(y_1 - y_2)G_v(y_1, y_1) - \frac{\lambda}{2}\phi_v^2\delta(x - y_1)G(y_1, y_2)G(y_2, y_1) + \\ - (C_1 + 2C_2\varphi_v^2)\delta(y_1 - y_2) - (C_{3L}\partial_{1z}^2 + C_{3T}\partial_{1T}^2)\delta(y_1 - y_2).$$

Em termos da transformada de Fourier,

$$\Gamma_R^{(2)}(p_1, p_2) = \int dy_1 dy_2 e^{ip_1 y_1} e^{ip_2 y_2} \Gamma_R^{(2)}(y_1, y_2),$$

a expressão de $\Gamma_R^{(2)}$ fica

$$\Gamma_R^{(2)}(p_1, p_2) = (2\pi)^d \delta(p_1 + p_2) \left[(p_2^2 + M^2) + \left(\frac{\lambda}{2} G_v(k) - C_1 \right) - 2C_2\varphi_v^2 - C_{3L}p_{2L}^2 + \right. \\ \left. - C_{3T}p_{2T}^2 - \frac{\lambda}{2}\varphi_v^2 \int d^d q G_v(q)G_v(q + p_2) \right].$$

Em particular,

$$\Gamma_R^{(2)}(0, 0) = (2\pi)^d \delta(0) \left[M^2 + \frac{\lambda}{2} I_1(d) - \frac{\lambda\varphi_v^2}{2} I_2(d) - C_1 - 2C_2\varphi_v^2 \right].$$

A partir da expressão de $\Gamma_R^{(2)}$, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial p_L^2} \Gamma_R^{(2)}(p_1, p_2) \Big|_{p_i=0} = (2\pi)^d \delta(0) \left[1 - C_{3L} - \frac{\lambda}{2}\varphi_v^2 \frac{\partial}{\partial p_L^2} \int d^d q G_v(q)G_v(q + p_2) \Big|_{p_i=0} \right]$$

e

$$\frac{\partial}{\partial p_T^2} \Gamma_R^{(2)}(p_1, p_2) \Big|_{p_i=0} = (2\pi)^d \delta(0) \left[1 - C_{3T} - \frac{\lambda}{2}\varphi_v^2 \frac{\partial}{\partial p_T^2} \int d^d q G_v(q)G_v(q + p_2) \Big|_{p_i=0} \right].$$

Essas quantidades são utilizadas no texto para fixar as constantes de renormalização. Para calcular as duas derivadas acima usamos que

$$\frac{1}{(k+p)^2 + M^2} = \frac{1}{k^2 + M^2} - \frac{p^2 - 2k \cdot p}{(k^2 + M^2)^2} + \frac{4(k \cdot p)^2}{(k^2 + M^2)^3} + \mathcal{O}(p^3),$$

de modo que

$$G_v(q)G_v(q+p_2) = \frac{1}{(q^2 + M^2)^2} - \frac{p_2^2 - 2q \cdot p_2}{(q^2 + M^2)^3} + \frac{4(q \cdot p_2)^2}{(q^2 + M^2)^4} + \mathcal{O}(p_2^3).$$

Integrando em q , obtemos

$$\begin{aligned} \int d^d q G_v(q)G_v(q+p_2) &= I_2(d) + p_{2L}^2 \left[3I_3(d) - 4M^2 I_4(d) - 4(2\pi)^2 \frac{\Omega_d}{\Omega_{d+2}} I_4(d+2) \right] + \\ &+ p_T^2 \left[-I_3(d) + \frac{4}{d}(2\pi)^2 \frac{\Omega_d}{\Omega_{d+2}} I_4(d+2) \right] + \mathcal{O}(p_2^4). \end{aligned}$$

onde Ω_d é o ângulo sólido d -dimensional. Portanto,

$$\left. \frac{\partial}{\partial p_L^2} \Gamma_R^{(2)}(p_1, p_2) \right|_{p_i=0} = (2\pi)^d \delta(0) \left[1 - C_{3L} - \frac{\lambda}{2} \varphi_v^2 \left(3I_3(d) - 4M^2 I_4(d) - 16\pi^2 \Omega_d \frac{I_4(d+2)}{\Omega_{d+2}} \right) \right]$$

e

$$\left. \frac{\partial}{\partial p_T^2} \Gamma_R^{(2)}(p_1, p_2) \right|_{p_i=0} = (2\pi)^d \delta(0) \left[1 - C_{3T} - \frac{\lambda}{2} \varphi_v^2 \left(-I_3(d) + \frac{16\pi^2}{d} \Omega_d \frac{I_4(d+2)^2}{I\Omega_{d+2}} \right) \right].$$

Usando o mesmo tipo de manipulações obtém-se:

$$\begin{aligned} \Gamma^{(4)}(p_i) &= (2\pi)^d \delta(p_1 + p_2 + p_3 + p_4) \left[\lambda - \frac{\lambda}{2} \left(\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} G_v(p_3 + p_4 + k) G_v(k) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (13) + (14) \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\lambda \varphi_v^2}{2} \left(\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} G_v(p_3 + p_4 + k) G_v(p_3 + k) G_v(k) + (11 \text{ termos}) \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{3\lambda \varphi_v^4}{2} \left(\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} G_v(p_1 + p_2 + p_3 + k) G_v(p_1 + p_2 + k) G_v(p_1 + k) G_v(k) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (5 \text{ termos}) \right) - 6C_2 \right]. \end{aligned}$$

Em particular,

$$\Gamma^{(4)}(p_i = 0) = (2\pi)^d \delta(0) \left[\lambda - \frac{3\lambda}{2} I_2(d) + 6\lambda \varphi_v^2 I_3(d) - 3\lambda \varphi_v^4(d) - 6C_2 \right]. \quad (\text{B.50})$$

As condições de renormalização (3.53) para o setor de vácuo que foram adotadas

no texto levam à determinação das constantes: $C_1 = \lambda I_1(d, \Lambda)/2$, $C_2 = -\lambda I_2(d, \Lambda)/4$, $C_{3L} = C_{3T} = 0$. Usando esses valores nas expressões no espaço de Fourier a momenta zero, as divergências ultravioletas são canceladas quando $\Lambda \rightarrow \infty$.

Como um teste de consistência de nosso procedimento, usamos as condições de renormalização

$$\bar{\Gamma}_R^{(1)} = 0; \quad \bar{\Gamma}_R^{(2)} = M^2; \quad \left(\frac{\partial \bar{\Gamma}_R^{(2)}}{\partial [p_L^2]} \right)_0 = 1, \quad (\text{B.51})$$

que foram adotadas na referência [68], para calcular correções à massa do kink. Os resultados que nós encontramos coincidem com os dessa referência, ilustrando que o cálculo do determinante via propagador semiclássico não é afetado por ambiguidades de contagem de modos. Isso permite que usemos condições de regularização simples, mais diretamente relacionadas a fenomenologia de matéria condensada.

B.5 Teorema sobre decomposição espectral

Terminamos esse apêndice com a demonstração de uma fórmula útil para se obter, por meio de uma integral, a decomposição espectral do propagador semiclássico de campos na presença de um campo de fundo com simetria transversal. Essa fórmula é a generalização da construção particular que vimos no capítulo 3.

Seja S o operador do tipo Schrödinger definido por

$$S = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x). \quad (\text{B.52})$$

Por definição, se $\lambda_q \in \text{Spec}(S)$ então existe η tal que $S\eta = \lambda_q\eta$. O operador $S + k^2$ tem as mesmas autofunções que S e seu espectro é da forma $\{\lambda_q + k^2\}$, onde $\{\lambda_q\} = \text{Spec}(S)$.

Seja G_k a função de Green associada a $(S + k^2)$:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + k^2 + V(x) \right] G_k(x, x') = \delta(x - x'). \quad (\text{B.53})$$

Pelo que foi dito no parágrafo anterior, a decomposição espectral de G_k é da forma

$$G_k(x, x') = \int \frac{dq}{2\pi} \frac{\eta_q(x)\eta_q^*(x')}{\lambda_q + k^2}. \quad (\text{B.54})$$

Definamos a quantidade auxiliar

$$\mathcal{I}(x, x') = -2i \int \frac{dp}{2\pi} \frac{p}{p^2 + k^2} G_{-ip}(x, x') \quad (\text{B.55})$$

$$= -2i \int \frac{dp}{2\pi} \frac{dq}{2\pi} \frac{p}{p^2 + k^2} \frac{\eta_q(x) \eta_q^*(x')}{\lambda_q - p^2}. \quad (\text{B.56})$$

Podemos calcular a integral em p por resíduos. As hipóteses do teorema estão garantidas pelas propriedades de convergência das autofunções. Como η_q não depende de p , vemos que, dentro do contorno indicado na Figura B.1, estão os pólos $p = ik$ e $p = i\sqrt{|\lambda_q|}$, para $\lambda_q \leq 0$. A escolha do contorno é feita para selecionar os estados ligados do problema.

Portanto, temos

$$\mathcal{I}(x, x') = G_k(x, x') - \sum_{\lambda_q < 0} \frac{\eta_q(x) \eta_q^*(x')}{\lambda_q + k^2}, \quad (\text{B.57})$$

ou, de modo mais conveniente,

$$G_k(x, x') = \sum_{\lambda_q < 0} \frac{\eta_q(x) \eta_q^*(x')}{\lambda_q + k^2} + \mathcal{I}(x, x'). \quad (\text{B.58})$$

Portanto, a quantidade \mathcal{I} corresponde à soma espectral sobre os estados espalhados. Fica demonstrado, assim, que podemos obter a decomposição espectral de um operador a partir da função de Green associada.

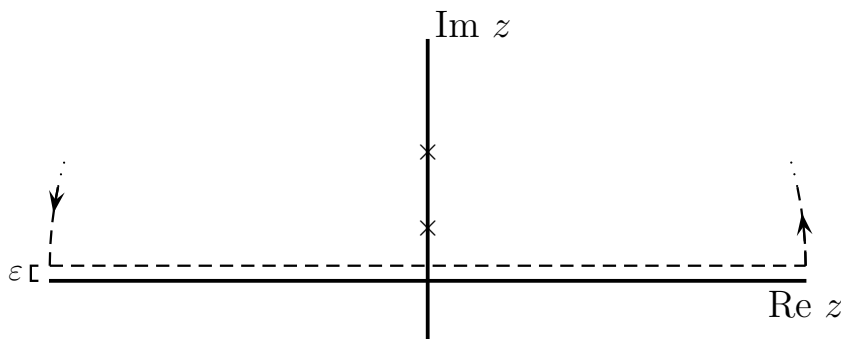


Figura B.1: Contorno no plano complexo usado para definir a integral em (B.56).

Apêndice C

Apêndice do capítulo 4

C.1 Coordenadas na esfera S^3

Denotemos as coordenadas cartesianas de \vec{r} por (x_1, x_2, x_3, x_4) e as de \vec{r} por (y_1, y_2, y_3, y_4) . As coordenadas esféricas de \vec{r} são definidas por

$$x_1 = r \cos \theta_1 \operatorname{sen} \theta_2 \operatorname{sen} \theta_3$$

$$x_2 = r \operatorname{sen} \theta_1 \operatorname{sen} \theta_2 \operatorname{sen} \theta_3$$

$$x_3 = r \cos \theta_2 \operatorname{sen} \theta_3$$

$$x_4 = r \cos \theta_3 .$$

Temos

$$\theta_3 = \operatorname{arc} \operatorname{sen} \frac{\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2}},$$

e, portanto,

$$\frac{d\theta_3}{dx_4} = -\frac{x_4}{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2} = -\frac{\operatorname{sen} \theta_3}{r} .$$

Agora,

$$\theta_2 = \operatorname{arc} \cos \frac{x_3}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}}$$

$$\Rightarrow \frac{d\theta_2}{dx_1} = \frac{x_1 x_3}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} \frac{1}{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} = \frac{\cos \theta_1 \cos \theta_2}{r \sin \theta_3},$$

e

$$\frac{d\theta_3}{dx_2} = \frac{\sin \theta_1 \cos \theta_2}{r \sin \theta_3} \quad \text{e} \quad \frac{d\theta_2}{dx_3} = -\frac{\sin \theta_2}{r \sin \theta_3}.$$

Finalmente,

$$\theta_1 = \arccos \frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}$$

$$\Rightarrow \frac{d\theta_1}{dx_1} = \frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} = \frac{\sin \theta_1}{r \sin \theta_2 \sin \theta_3} \quad \text{e} \quad \frac{d\theta_1}{dx_2} = -\frac{\cos \theta_1}{r \sin \theta_2 \sin \theta_1}.$$

De

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} = \frac{\partial \theta_1}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial \theta_1} + \frac{\partial \theta_2}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial \theta_2} + \frac{\partial \theta_3}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial \theta_3},$$

segue que

$$L_{12} = x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1 = -\partial_{\theta_1}$$

e

$$L_{13} = x_1 \partial_3 - x_2 \partial_1 = -\sin \theta_1 \cot \theta_2 \partial_{\theta_1} - \cos \theta_1 \partial_{\theta_2}.$$

Analogamente, temos:

$$L_{23} = x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2 = \cos \theta_1 \cot \theta_2 \partial_{\theta_1} - \sin \theta_1 \partial_{\theta_2}.$$

Finalmente,

$$L_{14} = x_1 \partial_4 - x_4 \partial_1 = -\frac{\sin \theta_1 \cos \theta_3}{\sin \theta_2 \sin \theta_3} \partial_{\theta_1} - \frac{\cos \theta_1 \cos \theta_2 \cos \theta_3}{\sin \theta_3} \partial_{\theta_2} - \cos \theta_1 \sin \theta_2 \partial_{\theta_3}$$

e

$$L_{43} = x_4 \partial_3 - x_3 \partial_4 = \cos \theta_2 \partial_{\theta_3} - \operatorname{sen} \theta_2 \cot \theta_3 \partial_{\theta_2} .$$

Evidentemente, $L_{12}^2 = \partial_{\theta_1}^2$. Temos, também

$$\begin{aligned} L_{31}^2 &= \left(\operatorname{sen} \theta_1 \cot \theta_2 \partial_{\theta_1} + \cos \theta_1 \partial_{\theta_2} \right) \left(\operatorname{sen} \theta_1 \cot \theta_2 \partial_{\theta_1} + \cos \theta_1 \partial_{\theta_2} \right) \\ &= \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cot^2 \theta_2 \partial_{\theta_1}^2 + \operatorname{sen} \theta_1 \cos \theta_1 \cot^2 \theta_2 \partial_{\theta_1} - \operatorname{sen} \theta_1 \cos \theta_1 \operatorname{csc}^2 \theta_2 \partial_{\theta_2} + \\ &\quad + 2 \operatorname{sen} \theta_1 \cos \theta_1 \cot \theta_2 \partial_{\theta_1} \partial_{\theta_2} - \operatorname{sen}^2 \theta_1 \cot \theta_2 \partial_{\theta_2} + \cos^2 \theta_1 \partial_{\theta_2}^2 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} L_{23}^2 &= \left(\cos \theta_1 \cot \theta_2 \partial_{\theta_1} - \operatorname{sen} \theta_1 \partial_{\theta_2} \right) \left(\cos \theta_1 \cot \theta_2 \partial_{\theta_1} - \operatorname{sen} \theta_1 \partial_{\theta_2} \right) \\ &= \cos^2 \theta_1 \cot^2 \theta_2 \partial_{\theta_1}^2 - \operatorname{sen} \theta_1 \cos \theta_1 \cot^2 \theta_2 \partial_{\theta_1} + \operatorname{sen} \theta_1 \cos \theta_1 \operatorname{csc}^2 \theta_2 \partial_{\theta_2} + \\ &\quad - 2 \operatorname{sen} \theta_1 \cos \theta_1 \cot \theta_2 \partial_{\theta_1} \partial_{\theta_2} - \cos^2 \theta_1 \cot \theta_2 \partial_{\theta_2} + \operatorname{sen}^2 \theta_1 \partial_{\theta_2}^2 . \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} L_{12}^2 + L_{23}^2 + L_{31}^2 &= \operatorname{csc}^2 \theta_2 \partial_{\theta_1}^2 - \cot \theta_2 \partial_{\theta_2} + \partial_{\theta_2}^2 \\ &= \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \theta_2} \partial_{\theta_1}^2 + \frac{1}{\operatorname{sen} \theta_2} \partial_{\theta_2} (\operatorname{sen} \theta_2 \partial_{\theta_2}) \end{aligned}$$

que é o operador laplaciano nas variáveis θ_1 e θ_2 . Suas autofunções¹ são, portanto, os harmônicos esféricos $Y_{nm}(\theta_2, \theta_1)$.

Temos $z_1 = x_1 + ix_2$ e $z_2 = x_3 + ix_4$ e as relações inversas:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{z_1 + z_1^*}{2}, & x_2 &= \frac{z_1 - z_1^*}{2i} \\ x_3 &= \frac{z_2 + z_2^*}{2}, & x_4 &= \frac{z_2 - z_2^*}{2i} . \end{aligned}$$

¹E as de L_{12} .

Teremos, para as derivadas:

$$\begin{aligned}\partial_1 &= \frac{\partial z_1}{\partial x_1} \partial_{z_1} + \frac{\partial z_1^*}{\partial x_1} \partial_{z_1^*} = \partial_{z_1} + \partial_{z_1^*} \\ \partial_2 &= \frac{\partial z_1}{\partial x_2} \partial_{z_1} + \frac{\partial z_1^*}{\partial x_2} \partial_{z_1^*} = i(\partial_{z_1} - \partial_{z_1^*}) \\ \partial_3 &= \frac{\partial z_2}{\partial x_3} \partial_{z_2} + \frac{\partial z_2^*}{\partial x_3} \partial_{z_2^*} = \partial_{z_2} + \partial_{z_2^*} \\ \partial_4 &= \frac{\partial z_2}{\partial x_4} \partial_{z_2} + \frac{\partial z_2^*}{\partial x_4} \partial_{z_2^*} = i(\partial_{z_2} - \partial_{z_2^*}).\end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}\partial_1^2 &= \partial_{z_1}^2 + \partial_{z_1^*}^2 + 2\partial_{z_1}\partial_{z_1^*} \\ \partial_2^2 &= -\partial_{z_1}^2 - \partial_{z_1^*}^2 + 2\partial_{z_1}\partial_{z_1^*} \\ \partial_3^2 &= \partial_{z_2}^2 + \partial_{z_2^*}^2 + 2\partial_{z_2}\partial_{z_2^*} \\ \partial_4^2 &= -\partial_{z_2}^2 - \partial_{z_2^*}^2 + 2\partial_{z_2}\partial_{z_2^*},\end{aligned}$$

de modo que

$$\partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2 + \partial_4^2 = 4(\partial_{z_1}\partial_{z_1^*} + \partial_{z_2}\partial_{z_2^*}).$$

Note que

$$L_{12} = x_1\partial_2 - x_2\partial_1 = i\left(z_1\partial_{z_1} - z_1^*\partial_{z_1^*}\right)$$

e, analogamente, $L_{34} = i\left(z_2\partial_{z_2} - z_2^*\partial_{z_2^*}\right)$. Teremos, também

$$L_{31} = \left(\frac{z_2 + z_2^*}{2}\right)\left(\partial_{z_1} + \partial_{z_1^*}\right) - \left(\frac{z_1 + z_1^*}{2}\right)\left(\partial_{z_2} + \partial_{z_2^*}\right).$$

$$L_{42} = i\left(\frac{z_2 - z_2^*}{2i}\right)\left(\partial_{z_1} - \partial_{z_1^*}\right) - i\left(\frac{z_1 - z_1^*}{2i}\right)\left(\partial_{z_2} - \partial_{z_2^*}\right).$$

$$L_{23} = \left(\frac{z_1 - z_1^*}{2i} \right) \left(\partial_{z_2} + \partial_{z_2^*} \right) - i \left(\frac{z_2 + z_2^*}{2} \right) \left(\partial_{z_1} - \partial_{z_1^*} \right).$$

$$L_{41} = \left(\frac{z_2 - z_2^*}{2i} \right) \left(\partial_{z_1} + \partial_{z_1^*} \right) - i \left(\frac{z_1 + z_1^*}{2} \right) \left(\partial_{z_2} - \partial_{z_2^*} \right).$$

Usando essas expressões, obtemos:

$$M_3 = -\frac{i}{2}(L_{12} - L_{34}) = \frac{1}{2} \left[(z_1 \partial_{z_1} - z_1^* \partial_{z_1^*}) - (z_2 \partial_{z_2} - z_2^* \partial_{z_2^*}) \right]$$

e

$$N_3 = -\frac{i}{2}(L_{12} + L_{34}) = \frac{1}{2} \left[(z_1 \partial_{z_1} - z_1^* \partial_{z_1^*}) + (z_2 \partial_{z_2} - z_2^* \partial_{z_2^*}) \right]$$

e

$$\begin{aligned} M_+ = M_1 + i M_2 &= \left(\frac{L_{23} + L_{41}}{2i} \right) + i \left(\frac{L_{31} + L_{42}}{2i} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left[L_{31} + L_{42} - i(L_{23} + L_{42}) \right] \\ &= z_2^* \partial_{z_1^*} - z_1 \partial_{z_2}. \end{aligned}$$

Analogamente:

$$\begin{aligned} M_- = M_1 - i M_2 &= \left(\frac{L_{23} + L_{41}}{2i} \right) - i \left(\frac{L_{31} + L_{42}}{2i} \right) = \\ &= -\frac{1}{2} \left[L_{31} + L_{42} + i(L_{23} + L_{42}) \right] \\ &= z_1^* \partial_{z_2^*} - z_2 \partial_{z_1}. \end{aligned}$$

C.2 Propriedades dos harmônicos esféricos H_{lmn} .

Em (4.34) definimos as funções:

$$H_{l,m,n} = z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m} {}_2F_1 \left(m - \frac{l}{2}, -n - \frac{l}{2}, m - n + 1, -|z_2|^2/|z_1|^2 \right)$$

(quando $m = -\frac{l}{2}, \dots, \frac{l}{2}$ e $n = -\frac{l}{2}, \dots, m$), e

$$H_{l,m,n} = z_2^{n-m} z_1^{\frac{l}{2}+m} z_1^{*\frac{l}{2}-n} {}_2F_1\left(n - \frac{l}{2}, -m - \frac{l}{2}, n - m + 1, -|z_2|^2/|z_1|^2\right),$$

(quando $n = -\frac{l}{2}, \dots, \frac{l}{2}$ e $m = -\frac{l}{2}, \dots, n$).

Note que, para $m \geq n$:

$$\begin{aligned} \partial_{z_1} H_{l,m,n} &= \left(\frac{l}{2} + n\right) z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m} {}_2F_1 + z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m} {}_2F_1' \left(\frac{z_2 z_2^*}{z_1^2 z_1^{*2}}\right) \\ &= \left(\frac{l}{2} + n\right) z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m} {}_2F_1 + z_2 z_2^{*m+n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n-2} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1', \end{aligned}$$

de forma que

$$z_1 \partial_{z_1} H_{l,m,n} = \left(\frac{l}{2} + n\right) H_{l,m,n} + z_2 z_2^{*m+n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1'.$$

Temos, também:

$$\begin{aligned} \partial_{z_1^*} H_{l,m,n} &= \left(\frac{l}{2} - m\right) z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1 + z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m} {}_2F_1' \left(\frac{z_2 z_2^*}{z_1 z_1^{*2}}\right) \\ &= \left(\frac{l}{2} - m\right) z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1 + z_2 z_2^{*m+n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m-2} {}_2F_1', \end{aligned}$$

de forma que

$$z_1^* \partial_{z_1^*} H_{l,m,n} = \left(\frac{l}{2} - m\right) H_{l,m,n} + z_2 z_2^{*m+n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1',$$

e, portanto,

$$(z_1 \partial_{z_1} - z_1^* \partial_{z_1^*}) H_{l,m,n} = (m + n) H_{l,m,n}.$$

Do mesmo modo,

$$\begin{aligned} \partial_{z_2} H_{l,m,n} &= z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m} {}_2F_1' \left(-\frac{z_2^*}{z_1 z_1^*}\right) \\ &= -z_2^{*m-n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1', \end{aligned}$$

e

$$z_2 \partial_{z_2} H_{l,m,n} = -z_2 z_2^{*m-n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1' .$$

Finalmente,

$$\begin{aligned} \partial_{z_2^*} H_{l,m,n} &= (m-n) z_2^{*m-n-1} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m} {}_2F_1 + z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m} {}_2F_1' \left(-\frac{z_2}{z_1 z_1^*} \right) \\ &= (m-n) z_2^{*m-n-1} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m} {}_2F_1 - z_2 z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1' , \end{aligned}$$

e

$$z_2^* \partial_{z_2^*} H_{l,m,n} = (m-n) H_{l,m,n} - z_2 z_2^{*m-n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1' ,$$

o que nos permite escrever:

$$(z_2 \partial_{z_2} - z_2^* \partial_{z_2^*}) H_{l,m,n} = (m-n) H_{l,m,n}$$

Assim, concluímos:

$$M_3 H_{l,m,n} = m H_{l,m,n} \quad \text{e} \quad N_3 H_{l,m,n} = n H_{l,m,n} .$$

É simples verificar que o mesmo vale quando $n > m$.

De

$$\partial_{z_1^*} H_{l,m,n} = \left(\frac{l}{2} - m \right) z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1 + z_2 z_2^{*m+n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m-2} {}_2F_1'$$

e

$$\partial_{z_2} H_{l,m,n} = -z_2^{*m-n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1' ,$$

segue que

$$\begin{aligned} M_+ H_{l,m,n} &= (l/2 - m) z_2^{*m-n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1 + z_2 z_2^{*m+n+2} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m-2} {}_2F_1' + \\ &+ z_2^{*m-n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1' \\ &= z_2^{*m-n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} \left[(l/2 - m) {}_2F_1 + \left(1 + \frac{z_2 z_2^*}{z_1 z_1^*} \right) {}_2F_1' \right]. \end{aligned}$$

Observe que $\partial_{u^2} F_1(a, b, c, u) = {}_2F_1(a+1, b+1, c+1, u)$. Portanto, nessa notação,

$$\begin{aligned} M_+ H_{l,m,n} &= z_2^{*m-n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} \left[-a {}_2F_1(a, b, c, u) + \right. \\ &\quad \left. + (1-u) \frac{ab}{c} {}_2F_1(a+1, b+1, c+1, u) \right] \\ &= -\frac{a}{c} z_2^{*m-n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} \left[c {}_2F_1(a, b, c, u) + \right. \\ &\quad \left. - b(1-u) {}_2F_1(a+1, b+1, c+1, u) \right] \\ &= \frac{a(b-c)}{c} z_2^{*m-n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1(a+1, b, c+1, u) \\ &= \frac{a(b-c)}{c} H_{l,m+1,n} \\ &= \frac{\frac{l}{2}(\frac{l}{2}+1) - m(m+1)}{m+1-n} H_{l,m+1,n}, \end{aligned}$$

onde foi usada uma relação de Gauss entre hipergeométricas contíguas (eq 9.137-8, página 1044 de[47]). Analogamente, de

$$z_1^* \partial_{z_2^*} H_{l,m,n} = (m-n) z_2^{*m-n-1} z_1^{\frac{l}{2}+n} z_1^{*\frac{l}{2}-m+1} {}_2F_1 - z_2 z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m} {}_2F_1'$$

e

$$z_2 \partial_{z_1} H_{l,m,n} = \left(\frac{l}{2} + n \right) z_2 z_2^{*m-n} z_1^{\frac{l}{2}+n-1} z_1^{*\frac{l}{2}-m} {}_2F_1 + z_2^2 z_2^{*m+n+1} z_1^{\frac{l}{2}+n-2} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} {}_2F_1',$$

segue que

$$M_- H_{l,m,n} = z_2^{*m-n-1} z_1^{\frac{l}{2}+n-2} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} \left[\left(m - n - \left(\frac{l}{2} + n \right) \frac{z_2 z_2^*}{z_1 z_1^*} \right) {}_2F_1 + \right. \\ \left. - \frac{z_2 z_2^*}{z_1 z_1^*} \left(1 + \frac{z_2 z_2^*}{z_1 z_1^*} \right) {}_2F_1' \right].$$

Na notação conveniente, temos:

$$M_- H_{l,m,n} = z_2^{*m-n-1} z_1^{\frac{l}{2}+n-2} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} \left[(c - 1 - bu) {}_2F_1(a, b, c, u) + \right. \\ \left. - u(1 - u) {}_2F_1'(a, b, c, u) \right] \\ = z_2^{*m-n-1} z_1^{\frac{l}{2}+n-2} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} \left[(c - 1 - bu) {}_2F_1(a, b, c, u) + \right. \\ \left. + \frac{ab}{c} u(1 - u) {}_2F_1'(a + 1, b + 1, c + 1, u) \right] \\ = z_2^{*m-n-1} z_1^{\frac{l}{2}+n-2} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} \left[(c - 1 - bu) {}_2F_1(a, b, c, u) + \right. \\ \left. + (c - a) F_1(a - 1, b, c, u) + (a + bu - c) F_1(a, b, c, u) \right] \\ = z_2^{*m-n-1} z_1^{\frac{l}{2}+n-2} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} \left[(a - 1) {}_2F_1(a, b, c, u) + (c - a) F_1(a - 1, b, c, u) \right] \\ = (c - 1) z_2^{*m-n-1} z_1^{\frac{l}{2}+n-2} z_1^{*\frac{l}{2}-m-1} F_1(a - 1, b, c, u).$$

(foram usadas as propriedades 9.137-9 de [47] e 15.2.17, página 558 de [49]). Finalmente,

$$M_- H_{l,m,n} = (m - n) H_{l,m-1,n}$$

Normalização das funções H_{lmn} na esfera

Inicialmente, observe que para $m = n = -l/2$ temos $H_{l,m,n} = z_1^l$, e, conseqüentemente, $H_{l,m,n} H_{l,m,n}^* = \text{sen}^{2l} \theta_2 \text{sen}^{2l} \theta_3$. Nesse caso,

$$\frac{1}{2\pi^2} \int_{S_3} H_{l,m,n} d\Omega = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \int_0^\pi \text{sen}^{2l+1} \theta_2 \text{sen}^{2l+2} \theta_3 d\theta_2 d\theta_3 = \frac{1}{l+1}.$$

Note que

$$\langle M_+ H_{lmn} | M_+ H_{lmn} \rangle = \langle M_- M_+ H_{lmn} | H_{lmn} \rangle = \left[\frac{l}{2} \left(\frac{l}{2} + 1 \right) - m(m+1) \right] \|H_{l,m,n}\|^2 ,$$

ou seja,

$$\|M_+ H_{lmn}\| = \sqrt{\frac{l}{2} \left(\frac{l}{2} + 1 \right) - m(m+1)} \|H_{l,m,n}\| ,$$

como já era esperado. De outro modo, temos

$$\|H_{l,m+1,n}\| = \frac{m+n-1}{\sqrt{\frac{l}{2} \left(\frac{l}{2} + 1 \right) - m(m+1)}} \|H_{l,m,n}\| .$$

Por indução, obtemos que

$$\|H_{l,m+k,n}\| = \frac{m+n-1}{\sqrt{\frac{l}{2} \left(\frac{l}{2} + 1 \right) - m(m+1)}} \|H_{l,m,n}\| .$$

Finalmente, ainda não temos uma demonstração geral da ortogonalidade das funções $H_{l,m,n}$.

C.3 Detalhes do cálculo do propagador do instanton

Para chegarmos à equação (4.46), primeiro de tudo, note que $L_{ij}(\hat{r} \cdot \hat{r}') = L_{ij}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')/(rr')$. Da definição (4.25), vemos que

$$\begin{aligned} M_a \tau_a(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}') &= -\frac{i}{2} \eta_{a\mu\nu} x_\mu \partial_\nu (x_\sigma x'_\sigma) \tau_a \\ &= -\frac{i}{2} \eta_{a\mu\nu} x_\mu x'_\nu \tau_a , \end{aligned}$$

onde $\eta_{a\mu\nu}$ e $\bar{\eta}_{a\mu\nu}$ são quantidades totalmente antissimétricas satisfazendo

$$\begin{aligned}\eta_{a\mu\nu} &= \epsilon_{a\mu\nu}, \text{ e } \mu, \nu = 1, 2, 3, \\ \eta_{a4\nu} &= -\delta_{a\nu}, \\ \eta_{a\mu 4} &= \delta_{a\mu} \text{ e} \\ \bar{\eta}_{a\mu\nu} &= (-1)^{\delta_{\mu 4} + \delta_{\nu 4}} \eta_{a\mu\nu}.\end{aligned}$$

Para completar a demonstração precisamos usar a seguinte propriedade dos polinômios de Gegenbauer[90]:

$$\frac{dC_l^1(t)}{dt} = 2C_{l-1}^2(t).$$

Passos finais

Para obter a expressão (4.48), note que, após somar sobre j , o termo proporcional à identidade em (4.47) se torna

$$\begin{aligned}& \frac{1}{8\pi^2} \left[\left(\sqrt{\frac{1+r_{>}^2}{1+r_{<}^2}} + \sqrt{\frac{1+r_{>}^2}{1+r_{<}^2}} \right) \frac{1}{r_{>}^2} \sum_{l=1}^{\infty} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^l C_l^1(\hat{r} \cdot \hat{r}') + \frac{2+r_{<}^2}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}r_{>}^2} \right] \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \left[\frac{2+r_{<}^2+r_{>}^2}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}} \left(\frac{1}{|r-r'|^2} - \frac{1}{r_{>}^2} \right) + \frac{2+r_{<}^2}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}r_{>}^2} \right] \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \left[\frac{2+r_{<}^2+r_{>}^2}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}} \frac{1}{|r-r'|^2} - \frac{1}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}} \right] \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1+\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}} \frac{1}{|r-r'|^2}.\end{aligned}$$

Similarmente, o termo em τ_α é dado por

$$\begin{aligned}
& \frac{i\eta_{\mu\nu\alpha}r_\mu r'_\nu \tau_\alpha}{4\pi^2(r r')} \frac{1}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}} \sum_{l=1}^{\infty} \left[\left(1 - \frac{1}{(l+1)(1+r_{>}^2)}\right) \frac{(1+r_{>}^2)}{l} + \right. \\
& \quad \left. - \left(1 + \frac{1}{(l+1)(1+r_{<}^2)}\right) \frac{(1+r_{<}^2)}{l+2} \right] \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^l C_{l-1}^2(\hat{r} \cdot \hat{r}') = \\
& = \frac{i\eta_{\mu\nu\alpha}r_\mu r'_\nu \tau_\alpha}{4\pi^2(r r')} \frac{1}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}} \sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{r_{>}^2}{l} - \frac{r_{<}^2}{l+2} \right] \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^l C_{l-1}^2(\hat{r} \cdot \hat{r}') \\
& = \frac{i\eta_{\mu\nu\alpha}r_\mu r'_\nu \tau_\alpha}{4\pi^2(r r')} \frac{1}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}} \sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{1}{l} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^l - \frac{1}{l+2} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^{l+2} \right] C_{l-1}^2(\hat{r} \cdot \hat{r}') \\
& = \frac{i\eta_{\mu\nu\alpha}r_\mu r'_\nu \tau_\alpha}{4\pi^2(r r')} \frac{1}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}} \left[\sum_{l=3}^{\infty} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^l \frac{1}{l} \left(C_{l-1}^2(\hat{r} \cdot \hat{r}') - C_{l-3}^2(\hat{r} \cdot \hat{r}') \right) + \right. \\
& \quad \left. + \frac{r_{<}}{r_{>}} + 2 \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^2 \hat{r} \cdot \hat{r}' \right] \\
& = \frac{i\eta_{\mu\nu\alpha}r_\mu r'_\nu \tau_\alpha}{4\pi^2(r r')} \frac{1}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}} \left[\sum_{l=3}^{\infty} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^l \left(C_{l-1}^2(\hat{r} \cdot \hat{r}') + C_{l-3}^2(\hat{r} \cdot \hat{r}') \right) + \right. \\
& \quad \left. - 2(\hat{r} \cdot \hat{r}') C_{l-2}^2(\hat{r} \cdot \hat{r}') + \frac{r_{<}}{r_{>}} + 2 \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^2 \hat{r} \cdot \hat{r}' \right] \\
& = \frac{i\eta_{\mu\nu\alpha}r_\mu r'_\nu \tau_\alpha}{4\pi^2} \frac{1}{\sqrt{1+r_{<}^2}\sqrt{1+r_{>}^2}} \frac{1}{|r-r'|^2}.
\end{aligned}$$

O resultado anterior fez uso da relação[47]:

$$(l+2)C_{l+2}^p(t) = 2(p+l+1)t C_{l+1}^p - (2p+l)C_l^p(t),$$

bem como a sequência de identidades listadas abaixo:

$$\begin{aligned}
\sum_{l=2}^{\infty} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^l C_l^2(\hat{r} \cdot \hat{r}') &= r_{<} r_{>}^3 \frac{1}{|r-r'|^4} - \frac{r_{<}}{r_{>}} \left(1 + 4 \frac{r_{<}}{r_{>}} (\hat{r} \cdot \hat{r}')\right), \\
\sum_{l=1}^{\infty} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^l C_l^2(\hat{r} \cdot \hat{r}') &= r_{<}^2 r_{>}^2 \frac{1}{|r-r'|^4} - \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^2, \\
\sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^l C_l^2(\hat{r} \cdot \hat{r}') &= r_{<}^3 r_{>} \frac{1}{|r-r'|^4}.
\end{aligned}$$

Finalmente obtemos a expressão desejada para o propagador:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1 + \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' + i\eta_{\mu\nu\alpha} r_{\mu} r'_{\nu} \tau_{\alpha}}{4\pi^2 |r - r'|^2 \sqrt{(1 + r^2)(1 + r'^2)}} .$$

Apêndice D

Apêndice do capítulo 5

D.1 Soluções analíticas da equação de flutuações

Vamos reproduzir aqui a equação (5.35) para as flutuações na presença de um campo clássico de fundo:

$$[\partial_\tau^2 - \omega_k^2 - U''(\phi_0(\tau))] \eta(\tau, \mathbf{k}^2) = 0, \quad (\text{D.1})$$

onde $\omega_k^2 = k^2 + m^2$. É conveniente reescrever essa equação em termos da variável

$$z(\tau) = U''(\phi_0(\tau))/\alpha, \quad (\text{D.2})$$

onde $\alpha = U''(\phi_0(0))$, de modo que $z(0) = 1$. Definindo a função¹ $q(z)$ através de

$$\frac{dz}{d\tau} = \text{sgn}(\tau) \sqrt{\alpha q(z(\tau))}, \quad (\text{D.3})$$

é simples mostrar que (D.1) é equivalente a

$$q(z) \frac{d^2\eta}{dz^2} + \frac{q'(z)}{2} \frac{d\eta}{dz} - (\nu_k^2 + z) \eta = 0, \quad (\text{D.4})$$

onde $\nu_k^2 = \omega_k^2/\alpha$. Observe que $\dot{z}(0) = \alpha U'''(\phi_0(0))\dot{\phi}_0(0) = 0$, sendo $t = 0$ o ponto de retorno da trajetória clássica. Portanto, $q(1) = 0$.

Se η_1 e η_2 são soluções de (D.4), é simples mostrar² que o wronskiano W do par

¹Para os potenciais que vamos discutir, a terceira derivada do potencial tem o mesmo sinal de τ e, portanto, q como está definido em (D.3) é uma função não-negativa.

²Basta derivar a expressão do wronskiano, como fizemos para obter (4.16).

é dado por $W(z) = -A/\sqrt{q(z)}$, onde A é uma constante a ser fixada *a posteriori*. Vendo sob outro ângulo, se conhecemos η_1 quando o wronskiano não se anula, podemos obter uma solução η_2 independente de η_1 utilizando o wronskiano. Além disso, se η_1 e η_2 são soluções de (D.4), então, a seguinte expressão:

$$q(z) \frac{d^3 F}{dz^3} + \frac{3q'(z)}{2} \frac{d^2 F}{dz^2} + \frac{q''(z)}{2} \frac{dF}{dz} - 4(\nu_k^2 + z) \frac{dF}{dz} - 2F(Z) = 0 \quad (\text{D.5})$$

tem $\eta_1 \eta_2$, η_1^2 e η_2^2 como três soluções independentes, como demonstramos no apêndice. É simples verificar que, no caso livre, $F(z) = 1/\omega_k$. Veremos mais pra frente que para o potencial de sine-Gordon, F será uma função linear e para interações quárticas, parabólica. De posse de uma solução F de (D.5) podemos construir, com a ajuda do wronskiano, um par de soluções independentes de (D.4). De fato, suponhamos que F seja uma solução conhecida de (D.5). Usando que

$$\frac{d \log \eta_2 / \eta_1}{dz} = \frac{W(z)}{F(z)}, \quad (\text{D.6})$$

podemos obter por integração direta a seguinte expressão:

$$\eta_{1,2}(z) = \sqrt{F(\bar{z})} \exp \left\{ \pm \frac{A}{2} \int_{\bar{z}}^z \frac{1}{\sqrt{q(z')F(z')}} dz' \right\}. \quad (\text{D.7})$$

onde \bar{z} é uma constante arbitrária. No apêndice verificamos explicitamente que é solução de (D.5) quando $A^2 = q(z_+)(F'(z_+))^2$. Nessa demonstração fica clara a conveniência de escolhermos \bar{z} maior que a maior raiz de $F(z) = 0$. Para simplificar, escolheremos $\bar{z} = \infty$. A presença de F no denominador do integrando em (D.1) poderia ser um problema nos pontos em que F se anula. Mostramos, entretanto, que a solução é bem comportada quando F tem zeros com multiplicidade 1. O que ocorre é que, nos pontos em que F se anula, a raiz quadrada que aparece em (D.1) multiplicando a exponencial também se anula, havendo um cancelamento exato da divergência no expoente. Para ver isso, denotemos por z_+ a maior raiz de F no domínio de integração. No apêndice resolvemos a integral em (D.1) por resíduos em torno de z_+ . Temos:

$$\text{Res} \left[\pm \frac{A}{2} \int_{\infty}^z \frac{1}{\sqrt{q(z)F(z)}} \right] = \pm \frac{1}{2}. \quad (\text{D.8})$$

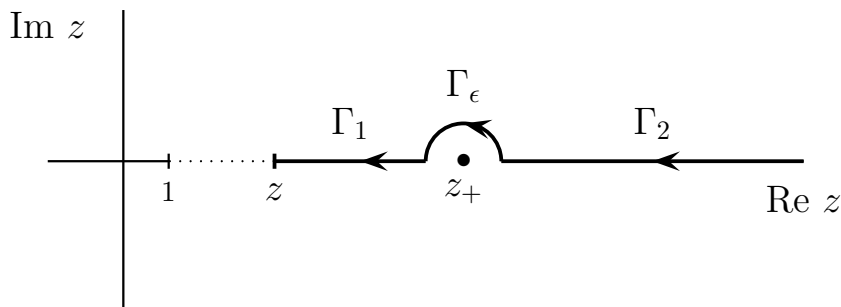


Figura D.1: Contorno no plano complexo usado para calcular a integral que aparece em (D.1). Γ_ϵ é um semicírculo de raio ϵ .

Um contorno que evita o ponto z_+ é indicado na Figure D.1. Ele tem três partes: $\Gamma_1, \Gamma_\epsilon, \Gamma_2$. A contribuição do semicírculo Γ_ϵ é $i\pi$ vezes o resíduo do integrando. Vemos que Γ_ϵ contribui com $\pm i\pi/2$ para a integral em (D.1), o que dá $\pm i$ quando aplicamos a exponencial. Esse fator $\pm i$ aparece quando $F(z)$ muda de sinal. Quando esse fator é multiplicado por $\sqrt{F(z)}$ em (D.1) ele produz³ $\pm\sqrt{|F(z)|}$. As partes restantes do contorno correspondem ao valor principal de Cauchy da integral. Portanto, podemos escrever as soluções η_1 e η_2 do seguinte modo:

$$\eta_1(z) = \sqrt{|F(z)|} \exp \left\{ \frac{A}{2} \mathcal{P} \int_\infty^z \frac{1}{\sqrt{q(z')}F(z')} dz' \right\} \quad (\text{D.9})$$

e

$$\eta_2(z) = \text{sgn}(F(z))\sqrt{|F(z)|} \exp \left\{ -\frac{A}{2} \mathcal{P} \int_\infty^z \frac{1}{\sqrt{q(z')}F(z')} dz' \right\}. \quad (\text{D.10})$$

Essas expressões são válidas até atingirmos a segunda raiz de F . Então, em princípio, uma solução sobre todo o domínio de integração pode ser construída por partes. No caso do potencial simples, F tem no máximo uma raiz simples no interior do domínio de integração.

Quando $A = 0$, as duas funções em (D.1) coincidem. Nesse caso, pode-se mostrar

³Admitindo-se, sem perda de generalidade, que $F(z) > 0$ quando $z > z_+$.

que

$$\eta_1(z) = \sqrt{|F(z)|} \quad \text{and} \quad \eta_2(z) = \sqrt{|F(z)|} \int_{\infty}^z \frac{dz'}{\sqrt{q(z')}|F(z')|} \quad (\text{D.11})$$

são duas soluções linearmente independentes. Em particular, o limite $z \rightarrow 1$ de $\eta_{\pm}(z)$ existe. Na seção ?? mostramos que A^2 é sempre real, de modo que $A = |A|$ ou $A = i|A|$, onde $|A| = \sqrt{q(r)}|F'(r)|$. No último caso, $\eta_{1,2}$ não são funções reais e nem tem raízes reais no domínio.

Em termos de τ , temos (para $\tau < 0$):

$$\eta_1(z(\tau)) = \sqrt{|F(z(\tau))|} \exp \left\{ \mathcal{P} \int_{\tau_{\infty}}^{\tau} \frac{\sqrt{\alpha}A}{2F(z(\tau'))} d\tau' \right\}, \quad (\text{D.12})$$

e

$$\eta_2(z(\tau)) = \text{sgn}(F(z(\tau)))\sqrt{|F(z(\tau))|} \exp \left\{ -\mathcal{P} \int_{\tau_{\infty}}^{\tau} \frac{\sqrt{\alpha}A}{2F(z(\tau'))} d\tau' \right\}, \quad (\text{D.13})$$

Observe que $\eta_{1,2}(z(\tau))$ não são soluções em $[-\beta/2, \beta/2]$, pois as derivadas $\dot{\eta}_{1,2}(z(\tau))$ não são contínuas em $\tau = 0$. Contudo, podemos construir soluções no intervalo inteiro por partes:

$$\sigma_{1,2}(\tau) = \frac{1}{W_{1,2}} [\eta_{2,1}(z(\tau))\eta_{1,2}(1)\Theta(-\tau) + \eta_{1,2}(z(\tau))\eta_{2,1}(1)\Theta(\tau)]. \quad (\text{D.14})$$

onde $W_{1,2}$ é o wronskiano de $\eta_1(z(\tau))$ e $\eta_2(z(\tau))$ para $\tau < 0$. Um cálculo simples dá $W_{1,2} = -A$. As funções $\sigma_{1,2}$ são claramente contínuas e $\dot{\sigma}_{1,2}(0+) - \dot{\sigma}_{1,2}(0-) = -\dot{F}(z(\tau))(0)/W_{1,2} = 0$, pois $\dot{z}(0) = 0$. Finalmente, as combinações lineares que precisamos para o cálculo da função de partição e da função de dois pontos são:

$$\bar{\eta}_a(\tau) = \frac{\dot{\eta}_2(z_s)}{\eta_2(1)}\sigma_2(\tau) - \frac{\dot{\eta}_1(z_s)}{\eta_1(1)}\sigma_1(\tau) \quad (\text{D.15})$$

e

$$\beta\bar{\eta}_b(\tau) = \frac{\eta_1(z_s)}{\eta_1(1)}\sigma_1(\tau) - \frac{\eta_2(z_s)}{\eta_2(1)}\sigma_2(\tau). \quad (\text{D.16})$$

onde $z_s = z(\beta/2)$.

D.1.1 Expressão explícita para o propagador semiclássico

Se $\eta(\tau)$ é uma solução da equação (5.35) para as flutuações, então $\eta(-\tau)$ também o é devido à invariância da ação clássica sob a transformação que leva τ em $-\tau$. Podemos, por simplicidade, usar o par $\bar{\eta}_b(\tau)$ e $\bar{\eta}_b(-\tau)$ para construir G . Um cálculo simples nos mostra que $W = -\bar{\eta}_b(\beta/2)/\beta$, $\Omega(\beta/2, -\beta/2) = \bar{\eta}_b^2(\beta/2)$, $\Omega(\beta/2, \tau_{max}) = \bar{\eta}_b(\beta/2)\bar{\eta}_b(-\tau_{max})$ e $\Omega(\tau_{min}, -\beta/2) = \bar{\eta}_b(\tau_{min})\bar{\eta}_b(\beta/2)$. Aplicando essas relações na receita para G segue o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} G(\tau, \tau'; \mathbf{k}) &= -\frac{\bar{\eta}_b^2(\beta/2)\bar{\eta}_b(-\tau_{max})\bar{\eta}_b(\tau_{min})}{-\bar{\eta}_b^3(\beta/2)/\beta} \\ &= \beta \frac{\bar{\eta}_b(\tau_{min})\bar{\eta}_b(-\tau_{max})}{\bar{\eta}_b(\beta/2)}. \end{aligned}$$

Substituindo a expressão formal de $\bar{\eta}_b(\tau)$, obtemos:

$$G(\tau, \tau'; \mathbf{k}) = \frac{\sqrt{F(z(\tau))F(z(\tau'))} \sinh(\beta\omega[\tau_{min}]) \sinh(\beta\omega[-\tau_{max}])}{\text{sgn}(F(z_s))\sqrt{\alpha}A \sinh(\beta\omega[\beta/2])}.$$

onde ω é dado por

$$\omega[\tau] = \int_{-\beta/2}^{\tau} \frac{\sqrt{\alpha}A}{2F(z(m\tau))} d\tau,$$

Usando que

$$2 \sinh(\beta\omega[\tau_{min}]) \sinh(\beta\omega[-\tau_{max}]) = \cosh(\widetilde{\omega}\beta - \widetilde{\omega}\tau_r) - \cosh(\widetilde{\omega}\tau_R),$$

onde

$$\widetilde{\omega}\beta = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \frac{\sqrt{\alpha}A}{2F(z(m\tau))} d\tau, \quad \widetilde{\omega}\tau_r = \int_{\tau_{min}}^{\tau_{max}} \frac{\sqrt{\alpha}A}{2F(z(m\tau))} d\tau,$$

e

$$\widetilde{\omega}\tau_R = \int_{-\tau_{max}}^{\tau_{min}} \frac{\sqrt{\alpha}A}{2F(z(m\tau))} d\tau,$$

obtemos, após algum trabalho algébrico:

$$G(\tau, \tau'; \mathbf{k}) = \frac{\sqrt{F(z(m\tau))F(z(m\tau'))}}{2\text{sgn}(F(z_s))A} \left[\left(1 + n(\widetilde{\omega}\beta)\right) e^{-\widetilde{\omega}\tau_r} + n(\widetilde{\omega}\beta)e^{\widetilde{\omega}\tau_r} + \right. \\ \left. - \text{csch}(\widetilde{\omega}\beta) (\cosh \widetilde{\omega}\tau_r + \cosh \widetilde{\omega}\tau_R) \right], \quad (\text{D.17})$$

onde $n(x) = (\exp(x) - 1)^{-1}$ é a distribuição de Bose-Einstein. Por meio de relações trigonométricas, podemos simplificar a relação acima, chegando em:

$$\widetilde{G}(\tau, \tau'; \mathbf{k}) = \frac{\sqrt{F(z(m\tau))F(z(m\tau'))}}{2\text{sgn}(F(z_s))A} \left[\left(1 + n(\widetilde{\omega}\beta)\right) e^{-\widetilde{\omega}\tau_r} + n(\widetilde{\omega}\beta)e^{\widetilde{\omega}\tau_r} \right].$$

Essa fórmula generaliza a relação conhecida para o propagador livre a temperatura finita.

D.2 Exemplo 1: a interação quártica massiva

D.2.1 Solução clássica

A equação clássica de movimento é

$$\begin{aligned} (-\partial_\tau^2 + m^2)\phi_0(\tau) + \frac{\lambda}{3!}\phi_0^3(\tau) &= 0, \\ \phi_0(-\beta/2) &= \phi_0(\beta/2) = \varphi_0, \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

a mesma equação discutida no capítulo 1 no contexto de mecânica quântica. Como antes, redefinindo a variável temporal e o campo, por meio de

$$\begin{aligned} \theta &\equiv m\tau, \\ \Phi_0(\theta) &\equiv \frac{1}{m} \sqrt{\frac{\lambda}{3!}} \phi_0(\tau), \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

obtemos uma equação normalizada, equivalente a (D.18):

$$\partial_\theta^2 \Phi_0 = \Phi_0 + \Phi_0^3, \quad (\text{D.20})$$

com a condição de contorno adaptada:

$$\Phi_0(-m\beta/2) = \Phi_0(m\beta/2) = \frac{\varphi_0}{m} \sqrt{\frac{\lambda}{3!}} \equiv \Phi_0. \quad (\text{D.21})$$

Já vimos também que a solução dessa equação é

$$\Phi_0(\theta) = \Phi_t \operatorname{nc}(u(\theta), \mu), \quad (\text{D.22})$$

onde cn é uma das doze funções elípticas de Jacob, e

$$\begin{aligned} \Phi_t &\equiv \frac{\Phi_0}{\operatorname{nc}(u(m\beta/2), \mu)}, \\ u(\theta) &\equiv \sqrt{1 + \Phi_t^2} \theta, \\ \mu &\equiv \sqrt{\frac{2 + \Phi_t^2}{2(1 + \Phi_t^2)}}. \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

Note que Φ_t é determinado apenas implicitamente pelas três últimas equações. Retornando à definição original do campo e da variável temporal, temos:

$$\phi_0(\tau) = \varphi_0 \frac{\operatorname{nc}(u(m\tau), \mu)}{\operatorname{nc}(u(m\beta/2), \mu)}. \quad (\text{D.24})$$

D.2.2 Equação para as flutuações

A equação para as flutuações é

$$\left[\partial_\tau^2 - (m^2 + \mathbf{k}^2) - \frac{\lambda}{2} \phi_0^2(\tau) \right] \eta(\tau, \mathbf{k}^2) = 0, \quad (\text{D.25})$$

ou, na forma normalizada,

$$\left[\partial_\theta^2 - \frac{m^2 + \mathbf{k}^2}{m^2} - 3\Phi_0^2(\theta) \right] \eta(\theta, \mathbf{k}^2) = 0, \quad (\text{D.26})$$

Note que (D.26) é independente de λ . Portanto, a função de partição e as funções de correlação dependerão da constante de acoplamento apenas via ação clássica, $S_E[\phi_0]$.

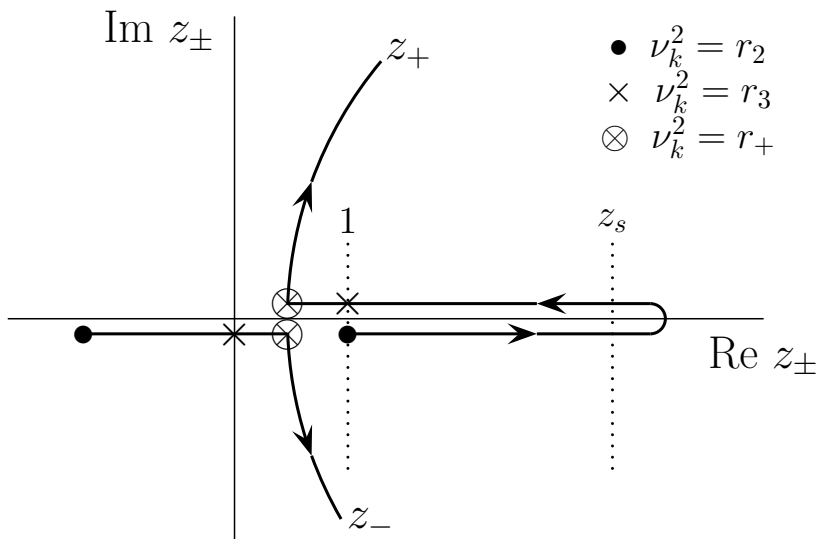


Figura D.2: Posição das raízes z_{\pm} de $F(z)$ no plano complexo como função de ν_k^2 (z_s é o valor de z em $\beta/2$).

Seguindo o método da seção D.1, definimos

$$z(\tau) = U''(\phi_0(\tau))/\alpha = \text{nc}^2(u(m\tau), \mu), \quad (\text{D.27})$$

onde $\alpha = 3m^2\Phi_t^2$. A função $q(z)$ é dada por $q(z) = (2/3)z(z-1)(z+\zeta)$, onde $\zeta = 1 + 2/\Phi_t^2$. Para o potencial quártico, $F(z) = a + bz + z^2$ com

$$b = \frac{4}{3}(\zeta - 1) - 2\nu_k^2 \quad \text{and} \quad a = (b+1)(b-\zeta), \quad (\text{D.28})$$

onde $\nu_k^2 = \omega_k^2/(3m^2\Phi_t^2)$. Encontramos:

$$A = \sqrt{(2ab\zeta + 12a^2\nu_k^2)/3} \quad (\text{D.29})$$

$$= 8\sqrt{(\nu_k^2 - r_1)(\nu_k^2 - r_2)(\nu_k^2 - r_3)(\nu_k^2 - r_+)(\nu_k^2 - r_-)} \quad (\text{D.30})$$

onde as raízes são $r_1 = (\zeta - 1)/6 - 1/2$, $r_2 = (\zeta - 1)/6$, $r_3 = 2(\zeta - 1)/3 + 1/2$, $r_{\pm} = (\zeta - 1)/3 \pm \sqrt{\zeta^2 + \zeta + 1}/3$. Note que, no domínio relevante ($z > 1$), $r_- < r_1 < r_2 < r_3 < r_+$. Além disso, $r_2 \leq \nu_k^2$, valendo a igualdade quando $k^2 = 0$.

As raízes de $F(z)$ são $z_{\pm} = -b/2 \pm \sqrt{3(r_+ - \nu_k^2)(\nu_k^2 - r_-)}$. As posições de z_+ e z_- como função de ν_k^2 para um valor fixo de Φ_t estão mostradas na Figura D.2. Perceba que r_- , sendo menor do que 1, nunca é problema.

D.3 Exemplo 2: A interação quártica sem massa

As expressões obtidas para o caso massivo não se aplicam diretamente à teoria sem massa pois seu desenvolvimento dependeu essencialmente de uma mudança de variáveis que aqui é singular. Contudo, podemos adaptar o método lá utilizado.

D.3.1 Solução clássica

A equação de movimento agora é

$$\begin{aligned} -\partial_\tau^2 \phi_0(\tau) + \frac{\lambda}{3!} \phi_0^3(\tau) &= 0, \\ \phi_0(-\beta/2) &= \phi_0(\beta/2) = \varphi_0. \end{aligned} \quad (\text{D.31})$$

A solução dessa equação é:

$$\phi_0(\tau) = \sqrt{\frac{6}{\lambda}} \varphi_t \text{nc}(\varphi_t \tau, 1/\sqrt{2}), \quad (\text{D.32})$$

onde agora φ_t é dado implicitamente pela equação

$$\varphi_0 = \sqrt{\frac{6}{\lambda}} \varphi_t \text{nc}(\varphi_t \beta/2, 1/\sqrt{2}). \quad (\text{D.33})$$

Observe que não há como definir variáveis adimensionais no caso da interação quártica massiva. A solução normalizada⁴ é simplesmente:

$$\Phi_0(\tau) = \sqrt{\frac{\lambda}{6}} \phi_0(\tau) = \varphi_t \text{nc}(\varphi_t \tau, 1/\sqrt{2}), \quad (\text{D.34})$$

e obedece $\Phi_0(-\beta/2) = \Phi_0(\beta/2) = \Phi_0 = \sqrt{\lambda/6} \varphi_0$. Quando $\Phi_0 \beta \ll 1$, o ponto de retorno de Φ_0 é dado explicitamente por

$$\varphi_t = \Phi_0 \left(1 + \frac{\beta^2 \Phi_0^2}{8} \right). \quad (\text{D.35})$$

⁴Essa normalização não leva a uma quantidade adimensional como na seção anterior.

D.3.2 Equação para as flutuações

A equação para as flutuações é

$$\left[\partial_\tau^2 - \mathbf{k}^2 - 3\varphi_t^2 \text{nc}^2(\varphi_t\tau, 1/\sqrt{2}) \right] \eta(\tau, \mathbf{k}^2) = 0. \quad (\text{D.36})$$

Essa equação é a mesma⁵ que (D.26), se identificarmos θ com τ e $(k^2 + m^2)/m^2$ com \mathbf{k}^2 . Definindo $z = \text{nc}^2(\varphi_t\tau, 1/\sqrt{2})$ podemos fazer uso das expressões de $\bar{\eta}_a$ e $\bar{\eta}_b$ no caso massivo, usando : $\nu_k^2 = \mathbf{k}^2/(3\varphi_t^2)$, $\zeta = 1$, $q(z) = (2/3)z(z^2 - 1)$, $b = -2\nu_k^2$, $a = b^2 - 1$, $r_1 = -1/2$, $r_2 = 0$, $r_3 = 1/2$, $r_\pm = \pm 1/\sqrt{3}$,

$$A = 8\nu_k \sqrt{(\nu_k^4 - 1/3)(\nu_k^4 - 1/4)},$$

$$z_\pm = \nu_k^2 \pm \sqrt{1 - 3\nu_k^4}, \quad z_s = \lambda \varphi_0^2 / (6\varphi_t^2) = \Phi_0^2 / \varphi_t^2.$$

D.4 Exemplo 3: o limite de temperatura zero de Z

Em princípio, a única solução de

$$\begin{aligned} (-\partial_\tau^2 + m^2)\phi_0(\tau) + U'(\phi_0(\tau)) &= 0, \\ \phi_0(-\beta/2) &= \phi_0(\beta/2) = \varphi_0 \end{aligned} \quad (\text{D.37})$$

a $T = 0$ com ação finita é a solução trivial, $\phi_0(\tau) \equiv 0$. Contudo, é preciso olhar com cuidado esse limite. Se ϕ_0 é uma solução clássica a temperatura $T \neq 0$, então a ação $S_E[\phi_0]$ converge para um valor finito quando β vai para infinito. Podemos ver isso explicitamente para o potencial quártico. De fato, consideremos uma aproximação

⁵Aqui, como no caso massivo, a equação para as flutuações não tem dependência em λ .

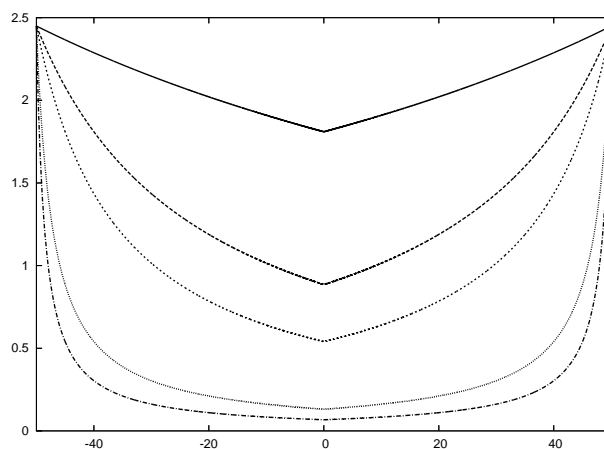


Figura D.3: Gráfico da função $\rho_0(t)$ no caso sem massa exibindo o comportamento singular a $\tau = 0$. As diferentes curvas correspondem a diferentes valores de β : 1, 5, 10, 50 e 100 (curva de baixo). Os parâmetros utilizados foram: $k = 1, \Phi_0 = 1, \lambda = 1$. A escala horizontal foi ajustada, enquadrando todos os gráficos em $[-50, 50]$ para comparar as curvas.

para a solução clássica, dada por⁶:

$$\rho_0(\tau) = \frac{\varphi_0}{e^{-m(\beta/2 - |\tau|)} + \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\lambda \varphi_0^2}{12m^2}}\right) \sinh [m(\beta/2 - |\tau|)]}$$

ou, quando $m = 0$,

$$\rho_0(\tau) = \frac{\varphi_0}{1 + \sqrt{\frac{\lambda}{12}} \varphi_0 \left(\frac{\beta}{2} - |\tau|\right)}.$$

Essas funções são singulares apenas em $\tau = 0$. A ação $S_E[\rho_0]$ pode ser calculada, obtendo-se:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} S_E[\rho_0] = \frac{8m^3 V}{\lambda} \left[\left(1 + \frac{\Phi_0^2}{2}\right)^{3/2} - 1 \right],$$

⁶Quando dizemos que a função ρ é uma solução aproximada queremos dizer que, sendo ϕ_0 a solução exata, então

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} |\phi_0(\tau) - \rho_0(\tau)| = 0, \forall \tau \in R^*.$$

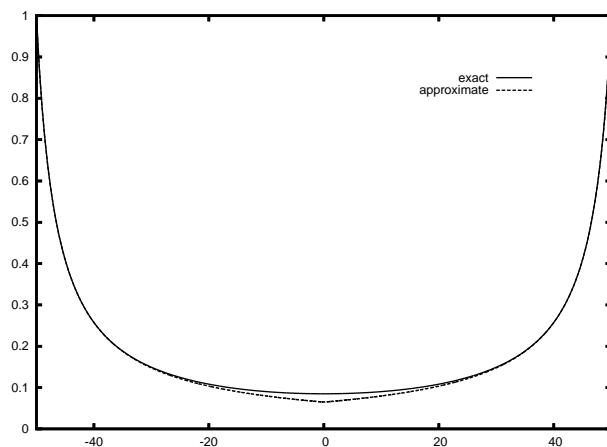


Figura D.4: Gráfico da solução exata, ϕ_0 , e da solução aproximada, $\rho_0(t)$, para $\beta = 100$. Para grandes valores de β as curvas diferem substancialmente apenas perto de $\tau = 0$.

e

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} S_E[\rho_0] = \frac{4\sqrt{2}|\Phi_0|^3 V}{\lambda}.$$

para $m = 0$. Note que os casos $m \neq 0$ e $m = 0$ são essencialmente diferentes. De fato, para $m = 0$ a única combinação adimensional é $\Phi_0^3 V$.

Aplicando o método da seção D.1, podemos resolver exatamente a equação

$$\left[\partial_\tau^2 - k^2 - \frac{\lambda}{2} \rho_0^2(\tau) \right] \eta(\tau, \mathbf{k}^2) = 0. \quad (\text{D.38})$$

Nesse caso,

$$z(\tau) = \left(\frac{\sqrt{2} + \beta\Phi_0/2}{\sqrt{2} + (\beta/2 - |\tau|)\Phi_0} \right)^2, \quad (\text{D.39})$$

$$F(z) = b^2 + bz + z^2, \quad (\text{D.40})$$

$$b = -\frac{2k^2}{3\Phi_0^2} \left(1 + \frac{\beta}{2\sqrt{2}}\Phi_0 \right)^2 \quad \text{e} \quad \sqrt{\alpha}A = 2kb^2. \quad (\text{D.41})$$

As soluções são

$$\bar{\eta}_a(\tau) = \sqrt{\frac{F(z(\tau))}{F(z(\beta/2))}} \left(\cosh [k(\tau + \beta/2) + \Delta(\tau)] + \right. \quad (\text{D.42}) \\ \left. + \frac{3\sqrt{2}}{4} \frac{\Phi_0^3 (3\Phi_0^2 - k^2)}{k^5} \sinh [k(\tau + \beta/2) + \Delta(\tau)] \right)$$

e

$$\bar{\eta}_b(\tau) = \frac{\sqrt{F(z(\tau))F(z(\beta/2))}}{\beta k b^2} \sinh [k(\tau + \beta/2) + \Delta(\tau)] , \quad (\text{D.43})$$

onde

$$\Delta(\tau) = (2D(\beta/2) - D(\beta/2 - \tau))\Theta(\tau) + D(\beta/2 + \tau)\Theta(-\tau) , \quad (\text{D.44})$$

com

$$D(\tau) = \tanh^{-1} \left[\frac{3k\Phi_0^2 (k^2(2 + \sqrt{2}\Phi_0\tau) - 3\Phi_0^2) \tau}{9\Phi_0^4 - 3k^2\Phi_0^2(2 + \sqrt{2}\Phi_0\tau - \tau^2\Phi_0^2) + 2k^4(2 + 2\sqrt{2}\Phi_0\tau + \tau^2\Phi_0^2)} \right] .$$

Pode-se verificar explicitamente que (D.42) e (D.43) são soluções de (D.38) usando que $\dot{D} = kb^2/F(z(t)) - k$. O propagador semiclássico, \tilde{G} , é dado por

$$\tilde{G}(\tau, \tau') = \frac{\sqrt{F(z(\tau))F(z(\tau'))}}{2kb^2} \left[(1 + n(k\beta)) e^{-\widetilde{\omega}\tau_r} + n(k\beta) e^{\widetilde{\omega}\tau_r} \right] e^{-\Delta(\beta/2)} , \quad (\text{D.45})$$

onde

$$\widetilde{\omega}\tau_r = k|\tau - \tau'| - \Delta(-\tau_>) - \Delta(\tau_<) . \quad (\text{D.46})$$

Usando que

$$\Delta(-\tau_>) + \Delta(\tau_<) \approx 2 \tanh^{-1} \left(\frac{3\sqrt{2}k\Phi_0}{2k^2 + 3\Phi_0^2} \right) - \frac{12}{\beta k} + \frac{24\sqrt{2}}{\beta^2 k} - \frac{12}{\beta^2 k} |\tau - \tau'|$$

e expandindo os demais termos em (D.45), concluímos que, para pequenos valores da temperatura, $\tilde{G}(\tau, \tau') = \tilde{G}(|\tau - \tau'|)$.

D.5 Exemplo 4: potencial de sine-Gordon

O potencial de sine-Gordon tem a forma:

$$V(\phi) = \cosh \phi - 1 . \quad (\text{D.47})$$

Até o momento não conhecemos na literatura uma solução da equação de movimento:

$$\begin{aligned} -\partial_\tau^2 \phi_0(\tau) + \sinh \phi_0 &= 0 , \\ \phi_0(-\beta/2) &= \phi_0(\beta/2) = \varphi_0 . \end{aligned} \quad (\text{D.48})$$

Entretanto, podemos mostrar que é possível resolver a equação correspondente para as flutuações em torno de ϕ_0 usando os métodos descritos no início dessa seção. De fato, teremos

$$q(z) = 2(z-1) \left(z^2 - \frac{1}{\alpha^2} \right) , \quad (\text{D.49})$$

onde z e α são dados em termos de ϕ_0 . A equação (D.5) tem como solução a seguinte função linear:

$$F(z) = z - (1 + 2\nu_k^2) , \quad (\text{D.50})$$

onde ν_k^2 é dado por ω_k^2/α , como antes. Finalmente,

$$A = 2\nu_k \sqrt{(1 + 2\nu_k^2)^2 - \frac{1}{\alpha^2}} . \quad (\text{D.51})$$

Curiosamente, as três primeiras soluções polinomiais de (D.5) correspondem a três potenciais escalares relevantes. Não conhecemos a que teorias correspondem as soluções polinomiais com grau maior ou igual a 3.

Evidentemente, em todos os exemplos mostrados neste apêndice ainda resta uma última etapa de cálculos numéricos para obtermos explicitamente grandezas termodinâmicas como a pressão e o calor específico.

Bibliografia

- [1] R. Rajaraman, Phys. Rep. **21C**, 227 (1975); *Solitons and Instantons: an Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory* (North-Holland, Amsterdam, 1987-89), and references therein.
- [2] D.J. Amit, *Field Theory, The Renormalization Group and Critical Phenomena* (World Scientific, Singapore, 1984).
- [3] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Oxford University Press, Oxford, 1993).
- [4] C. A. A. de Carvalho, H.M. Nussenzveig, Phys. Rep. **364**, 83 (2002).
- [5] L. Brillouin, Comptes Rendus **183**, 24 (1926).
- [6] H. A. Kramers, Z. Phys. **39**, 828 (1926).
- [7] G. Wentzel, Z. Phys. **38**, 518 (1926).
- [8] J. L. Dunham, Phys. Rev. **41**, 713 (1932).
- [9] C. M. Bender, K. Olaussen and P. S. Wang, Phys. Rev. D **16**, 1740 (1977).
- [10] R. Balian, G. Parisi and A. Voros, Phys. Rev. Lett. **41**, 1141 (1978).
- [11] R. Balian, G. Parisi and A. Voros, *Quartic Oscillator*. In: G. Parisi, *Field Theory, Disorder and Simulations* (World Scientific Publ. Co., 1992).
- [12] C. M. Bender and T. T. Wu, Phys. Rev. Lett. **21**, 406 (1968); **27**, 461 (1971).
- [13] C. M. Bender and T. T. Wu, Phys. Rev. **184**, 1231 (1969).
- [14] C. M. Bender and T. T. Wu, Phys. Rev. D **7**, 1620 (1973).

- [15] L. N. Lipatov, JETP **45**, 216 (1977).
- [16] E. Brézin, J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, Phys. Rev. D **15**, 1544, 1558 (1977).
- [17] C. Itzykson and J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory* (McGraw-Hill, Singapore, 1985).
- [18] R. Balian and C. Bloch, Ann. Phys. (N.Y.) **63**, 592 (1971); **85**, 514 (1974).
- [19] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965); R. P. Feynman, *Statistical Mechanics* (Addison-Wesley, New York, 1972).
- [20] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (John Wiley, New York, 1981).
- [21] R. J. Rivers, *Path Integral Methods in Quantum Field Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 1987).
- [22] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, Singapore, 1993).
- [23] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics* (World Scientific, Singapore, 1995).
- [24] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **8**, 1979 (1967); **12**, 343 (1971).
- [25] R. F. Dashen, B. Hasslacher and A. Neveu, Phys. Rev. D **10**, 4114, 4130, 4138 (1974).
- [26] R. F. Dashen, B. Hasslacher and A. Neveu, Phys. Rev. D **11**, 3424 (1975).
- [27] R. F. Dashen, B. Hasslacher and A. Neveu, Phys. Rev. D **12**, 2443 (1975).
- [28] C. DeWitt-Morette, Commun. Math. Phys. **28**, 47 (1972); **37**, 63 (1974); Ann. Phys. (N.Y.) **97**, 367 (1976).
- [29] Maurice M. Mizrahi, J. Math. Phys. **17**, 566 (1976); **19**, 298 (1978); **20**, 844 (1979).
- [30] M. Roncadelli, Phys. Rev. Lett. **72**, 1145 (1994).

- [31] C. W. Bernard, Phys. Rev. D **9**, 3312 (1974).
- [32] L. Dolan and R. Jackiw, Phys. Rev. D **9**, 3320 (1974).
- [33] S. Weinberg, Phys. Rev. D **9**, 3357 (1974).
- [34] R. F. Dashen, Shang-keng Ma and R. Rajaraman, Phys. Rev. D **11**, 1499 (1975).
- [35] B. J. Harrington, Phys. Rev. D **18**, 2982 (1978).
- [36] L. Dolan and J. Kiskis, Phys. Rev. D **20**, 505 (1979).
- [37] C. A. A. de Carvalho, R.M. Cavalcanti, E.S. Fraga and S.E. Jorás, Annals Phys. **273**, 146 (1999).
- [38] C. A. A. de Carvalho, R. M. Cavalcanti, E. S. Fraga and S. E. Joras, Phys. Rev. E **65**, 056112 (2002).
- [39] C. A. A. de Carvalho and R. M. Cavalcanti, Braz. J. Phys. **27**, 373 (1997) [quant-ph/9803049].
- [40] C. A. A. de Carvalho, R. M. Cavalcanti, E. S. Fraga and S. E. Joras, Phys. Rev. E **61**, 6392 (2000).
- [41] A. Bessa, C. A. A. de Carvalho, E. S. Fraga, Phys. Rev. D **69** (2004).
- [42] A. Bessa and C. A. A. de Carvalho, J. Phys. A **39** (2006) 9891.
- [43] A.Bessa, C.A.A. de Carvalho, E.S. Fraga, F. Gelis, JHEP08(2007)007.
- [44] D. Boyanovsky, R. Willey and R. Holman, Nucl. Phys. **B376**, 599 (1992).
- [45] F. W. Byron, JR and R. W. Fuller, *Mathematics of Classical and Quantum Physics* (Addison Wesley, Reading, Massachusetts, 1970).
- [46] P. M. Morse, H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1953).
- [47] I. S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products* (Academic Press, New York, 1965).
- [48] P. F. Byrd and M. D. Friedman, *Handbook of Elliptic Integrals for Engineers and Physicists* (Springer-Verlag, Berlin, 1954).

- [49] M. Abramowitz and I. A. Stegun (eds.), *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1965).
- [50] F. Vinette and J. Čížek, *J. Math. Phys.* **32**, 3392 (1991); W. Janke and H. Kleinert, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2787 (1995).
- [51] W. H. Miller, *Science* **233**, 171 (1986).
- [52] M. V. Berry, *Adv. Phys.* **25**, 1 (1976).
- [53] H. Trinkaus and F. Drepper, *J. Phys. A: Math. Gen.* **10**, L11 (1977).
- [54] M. V. Berry, J. F. Nye, and F. J. Wright, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **291**, 453 (1979).
- [55] M. Berry, in *Physics of Defects*, Les Houches Session XXXV (1980), edited by R. Balian, M. Kléman, and J.-P. Poirier (North-Holland, Amsterdam, 1981).
- [56] M. V. Berry and C. Upstill, in *Progress in Optics XVIII*, edited by E. Wolf (North-Holland, Amsterdam, 1980).
- [57] R. Thom, *Structural Stability and Morphogenesis* (Benjamin, Reading, MA, 1975).
- [58] T. Poston and I. N. Stewart, *Catastrophe Theory and its Applications* (Pitman, London, 1978).
- [59] G. Dangelmayr and W. Veit, *Ann. Phys. (N.Y.)* **118**, 108 (1979).
- [60] I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 388 (1981).
- [61] E. M. Chudnovsky, *Phys. Rev. A* **46**, 8011 (1992).
- [62] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, Singapore, 1993).
- [63] J. Ankerhold and H. Grabert, *Physica A* **188**, 568 (1992).
- [64] F. J. Weiper, J. Ankerhold, and H. Grabert, *Physica A* **223**, 193 (1996) [quant-ph/9512015].
- [65] For a review, see A. Cuccoli, R. Giachetti, V. Tognetti, R. Vaia, and P. Verucchi, *J. Phys.: Condensed Matter* **7**, 7891 (1995). See also Ref. [?].

- [66] M. Bachmann, H. Kleinert, and A. Pelster, Phys. Rev. A **60**, 3429 (1999) [quant-ph/9812063].
- [67] T. W. B. Kibble, in *Topological Defects and the Nonequilibrium Dynamics of Symmetry Breaking Phase Transitions*, Les Houches, France (1999).
- [68] A. Rebhan and P. van Nieuwenhuizen, Nucl. Phys. B **508**, 449 (1997); H. Nastase, M. A. Stephanov, P. van Nieuwenhuizen and A. Rebhan, Nucl. Phys. B **542**, 471 (1999); A. Rebhan, P. van Nieuwenhuizen and R. Wimmer, New J. Phys. **4**, 31 (2002).
- [69] T. Bhattacharya, A. Gocksch, C. Korthals Altes and R. D. Pisarski, Phys. Rev. Lett. **66**, 998 (1991); Nucl. Phys. B **383**, 497 (1992).
- [70] D. T. Son and M. A. Stephanov, Phys. Rev. A **65**, 063621 (2002).
- [71] A. Parnachev and L. G. Yaffe, Phys. Rev. D **62**, 105034 (2000).
- [72] E. Farhi, N. Graham, P. Haagenen and R. L. Jaffe, Phys. Lett. B **427**, 334 (1998); N. Graham and R. L. Jaffe, Nucl. Phys. B **544**, 432 (1999); *ibid.* **549**, 516 (1999); E. Farhi, N. Graham, R. L. Jaffe and H. Weigel, *ibid.* **585**, 443 (2000); *ibid.* **595**, 536 (2001); N. Graham, R. L. Jaffe, M. Quandt and H. Weigel, Phys. Rev. Lett. **87**, 131601 (2001); N. Graham, Phys. Lett. B **529**, 178 (2002).
- [73] J. Rudnick and D. Jasnow, Phys. Rev. B **17**, 1351 (1978).
- [74] D. Jasnow, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 10, edited by C. Domb and M. S. Green (Academic Press, New York, 1986), p. 270.
- [75] J. Rudnick and D. Jasnow, Phys. Rev. Lett. **41**, 698 (1978).
- [76] G. Münster, Nucl. Phys. B **324**, 630 (1989).
- [77] E. Brézin and S. Feng, Phys. Rev. B **29**, 472 (1974).
- [78] G. Münster, Nucl. Phys. B **340**, 559 (1990); S. Klessinger and G. Münster, Nucl. Phys. B **386**, 701 (1992).
- [79] P. Hoppe and G. Münster, Phys. Lett. A **238**, 265 (1998).
- [80] E. S. Wu and W. W. Webb, Phys. Rev. A **8**, 2065 (1973).

- [81] C. A. A. de Carvalho, Phys. Rev. D, **65**, 065021 (2002).
- [82] D. J. Wallace, in *Recent Advances in Field Theory and Statistical Mechanics*, Les Houches, 1982, edited by J.B. Zuber and R. Stora (North Holland, 1984).
- [83] M. Hasenbusch and K. Pinn, Physica A **245**, 366 (1997).
- [84] K. Binder, Phys. Rev. Lett. **77**, 1318 (1996); J. Stat. Phys. **95**, 1045 (1999).
- [85] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [86] D. Diakonov, Prog. Part. Nucl. Phys. **51** (2003) 173 [arXiv:hep-ph/0212026].
- [87] E. V. Shuryak and I. Zahed, Phys. Rev. D **69**, 014011 (2004).
- [88] G. 't Hooft, Phys. Rev. D, **14**, 3432 (1976) [Erratum-ibid. D **18**, 2199 (1978)].
- [89] L. S. Brown, R. D. Carlitz, D. B. Creamer and C. Lee, Phys. Lett., **71B**, 103 (1977).
- [90] N.J. Vilenkin, *Special Functions and the Theory of Group Representations* (American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 1968).
- [91] A. A. Belavin, A. M. Polyakov, A. S. Shvarts and Y. S. Tyupkin, Phys. Lett. B **59**, 85 (1975).
- [92] N. Andrei, D.J.Gross, Phys. Rev. D**18**, 468 (1978).
- [93] C.A.A. de Carvalho, Nucl. Phys. **B183**, 182 (1981).
- [94] C. A. A. de Carvalho, M.P. Isidro Filho, Phys. Rev. D**43**, 3455 (1991).
- [95] A. Bessa, C. A. A. de Carvalho, E. S. Fraga and F. Gelis, Braz. J. Phys. **37** (2007) 30.
- [96] M. Le Bellac, *Thermal Field Theory*, Cambridge University Press, (2000).
- [97] P. Arnold and C. X. Zhai, Phys. Rev. D **50**, 7603 (1994).
- [98] P. Arnold and C. X. Zhai, Phys. Rev. D **51**, 1906 (1995).
- [99] R. Parwani and H. Singh, Phys. Rev. D **51**, 4518 (1995).

- [100] K. Kajantie, M. Laine and Y. Schroder, Phys. Rev. D **65**, 045008 (2002).
- [101] E. Braaten, Nucl. Phys. A **702**, 13 (2002).
- [102] U. Kraemmer and A. Rebhan, Rept. Prog. Phys. **67**, 351 (2004).
- [103] J. O. Andersen and M. Strickland, Annals Phys. **317**, 281 (2005).
- [104] E. Braaten and A. Nieto, Phys. Rev. D **51**, 6990 (1995).
- [105] E. Braaten and A. Nieto, Phys. Rev. Lett. **76**, 1417 (1996).
- [106] E. Braaten and A. Nieto, Phys. Rev. D **53**, 3421 (1996).
- [107] K. Kajantie, M. Laine, K. Rummukainen and Y. Schroder, Phys. Rev. Lett. **86**, 10 (2001).
- [108] K. Kajantie, M. Laine, K. Rummukainen and Y. Schroder, Phys. Rev. D **67**, 105008 (2003).
- [109] K. Kajantie, M. Laine, K. Rummukainen and Y. Schroder, JHEP **0304**, 036 (2003).
- [110] F. Karsch, A. Patkos and P. Petreczky, Phys. Lett. B **401**, 69 (1997).
- [111] J. M. Luttinger and J. C. Ward, Phys. Rev. **118**, 1417 (1960).
- [112] J. P. Blaizot, E. Iancu and A. Rebhan, Phys. Rev. Lett. **83**, 2906 (1999).
- [113] J. P. Blaizot, E. Iancu and A. Rebhan, Phys. Lett. B **470**, 181 (1999).
- [114] J. P. Blaizot, E. Iancu and A. Rebhan, Phys. Rev. D **63**, 065003 (2001).
- [115] J. P. Blaizot, E. Iancu and A. Rebhan, arXiv:hep-ph/0303185.
- [116] A. Peshier, B. Kampfer, O. P. Pavlenko and G. Soff, Europhys. Lett. **43**, 381 (1998).
- [117] J. O. Andersen, E. Braaten and M. Strickland, Phys. Rev. Lett. **83**, 2139 (1999).
- [118] J. O. Andersen, E. Braaten and M. Strickland, Phys. Rev. D **61**, 014017 (2000).

- [119] J. O. Andersen, E. Braaten and M. Strickland, Phys. Rev. D **61**, 074016 (2000).
- [120] J. O. Andersen, E. Braaten and M. Strickland, Phys. Rev. D **63**, 105008 (2001).
- [121] J. O. Andersen, E. Braaten, E. Petitgirard and M. Strickland, Phys. Rev. D **66**, 085016 (2002).
- [122] A. Peshier, B. Kampfer, O. P. Pavlenko and G. Soff, Phys. Lett. B **337**, 235 (1994).
- [123] A. Peshier, B. Kampfer, O. P. Pavlenko and G. Soff, Phys. Rev. D **54**, 2399 (1996).
- [124] C. A. A. de Carvalho, R. M. Cavalcanti, E. S. Fraga and S. E. Joras, Annals Phys. **273**, 146 (1999).
- [125] W. Magnus and S. Winkler, *Hill's Equation*, Dover, (2004).
- [126] S. Lang, *Complex analysis*, Ed. Springer-Verlag, Berlin (1993).
- [127] A. Bessa, C. A. A. de Carvalho, E. S. Fraga and F. Gelis, trabalho em preparação.
- [128] A. D. Jackson, M. K. Sener and J. J. M. Verbaarschot, Phys. Lett. B **387** (1996) 355.
- [129] R. J. Szabo, Nucl. Phys. B **723** (2005) 163.
- [130] G. Mussardo, V. Riva and G. Sotkov, Nucl. Phys. B **670** (2003) 464.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)