

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

**Efeitos de Temperatura Finita nas Versões
Integrável e Não-Integrável
do Modelo de Lipkin-Meshkov-Glick**

MAISA DE OLIVEIRA TERRA

Tese de Doutorado
submetida ao Instituto de Física
da Universidade de São Paulo.



Banca Examinadora: Prof. Dr. Alfredo Miguel Ozório de Almeida (CBPF),
Prof.^a.Dr.^a. Kyoko Furuya (UNICAMP),
Prof. Dr. Marcos Saraceno (Tandar-CNEA-Argentina),
Prof.^a.Dr.^a. Maria Carolina Nemes (UFMG),
Prof. Dr. Walter Felipe Wreszinski (IFUSP).

Iberê Luiz Caldas

Prof. Iberê Luiz Caldas
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

M. C. Nemes
Orientadora: Prof.^a. Dr.^a. Maria Carolina Nemes

São Paulo
Julho de 1996

SBI-IFUSP



305M810T2453

T323e

D
ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

**Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo**

Terra, Maisa de Oliveira

**Efeitos de Temperatura Finita nas Versões Integrável
e Não-Integrável do Modelo de Lipkin-Meshkov-Glick.
São Paulo, 1996.**

**Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo.
Instituto de Física. Departamento de Física Matemática
Área de Concentração: Física Nuclear
Orientador: Profa. Dra. Maria Carolina Nemes**

**Unitermos: 1. Dinâmica Clássica Regular e Caótica;
2. Modelo de Lipkin SU(2) e SU (3); 3. Transições de Fase
Termodinâmicas; 4. Dinâmica Clássica Térmica.**

USP/IF/SBI - 28/96

*Carinhosamente aos meus pais
por seu amor, apoio, exemplo e incentivo,
sempre incondicionais.*

Obrigada por existirem.

Agradecimentos

Este é verdadeiramente um momento muito feliz que gostaria de compartilhar, expressando minha gratidão, com as muitas pessoas que colaboraram para que este instante efetivamente chegasse, passando de sonho a realidade, de meta distante a alvo próximo.

Antes de mais nada, gostaria de agradecer a Carolina que desde o começo deste trabalho tem tornado ainda mais prazeroso e fascinante o desafio de se enveredar pelos caminhos da ciência. Muito obrigada por sua orientação, pela sugestão do tema da tese, pelo incentivo, apoio e amizade, sempre constantes.

Aos meus colaboradores além mar, que têm se tornado cada vez mais próximos graças a sua presteza e pelas facilidades da tecnologia. Ao longo destes anos se fizeram presentes com suas contribuições, sugestões, críticas e apoios. Meu agradecimento especial a João da Providência e Constança Providência. A Brigitte Hiller e Alex Blin minha gratidão por tudo: pelas contribuições, incentivo e pela maravilhosa hospitalidade com que me receberam em fevereiro de 1995 em Coimbra. Agradeço também a todos da Universidade de Coimbra com os quais tive o prazer de conviver nesta ocasião.

A Caio Henrique Lewenkopf também sou especialmente grata. Nas poucas oportunidades em que pudemos interagir, suas sugestões e auxílios foram fundamentais e essenciais ao trabalho. Em particular, agradeço por sua assistência nos cálculos dos expoentes de Lyapunov e das seções de Poincaré.

A Marcelo Trindade dos Santos por sua amizade, pelo companheirismo e pelas discussões e ajudas. Aos amigos da UNICAMP, Giancarlo Q. Pellegrino, Fausto Camargo e Kyoko Furuya pelas discussões no início deste trabalho tão estimulantes.

Aos professores e físicos que de uma forma ou de outra fizeram parte importante

nesta história, quer seja por algum auxílio efetivo, quer seja por discussões e sugestões ou simplesmente por seus exemplos. Meu muito obrigado a Antonio F.R de Toledo Piza, Walter F. Wreszinski, Manoel R.Robilotta, Carlos Yokoi, Mauro Kyotoku e Rubens Lichtenthäler Filho.

Às amigas tão queridas Audrey Rodrigues Moreira, M^a Ivonete Nogueira da Silva e (mais recentemente) Fernanda Rodrigues Moreira por tudo que têm feito por mim. Meu muito obrigado por seu afeto, apoio, ajuda e pela fantástica hospitalidade que fez das viagens a Belo Horizonte ocasiões tão aprazíveis, frutíferas e até mesmo possíveis.

Aos colegas e professores da UFMG com os quais convivi no segundo semestre de 1992, este um dos períodos mais estimulantes que já passei. Ao Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais cujas instalações sempre foram disponíveis a mim e meus colegas.

Às pessoas amigas do Instituto de Física dentre as quais posso mencionar Sonia Mokarzel, Silvana Flego, Hugo Reis, Rênio Mendes, Emílio Vasconcelos, Monica Galindo, Mirian Bracco, Ligia Barz, Samya Macedo, Fabiane Avena, Ana Cristina Gomes, Moacir Lacerda, Saulo Carneiro, Graciela Foglia, Elisabeth Caparelli, Andréa Salgueiro, J.Rodrigo Parreira, Paulo Natti, Érica Takano dentre as muitas. Meu agradecimento especial a Rubens Freire por seu vigoroso incentivo antes mesmo deste trabalho iniciar.

À minha amiga e quase mãe Araci por sua ajuda constante e por seu inestimável afeto.

À Universidade de São Paulo por minha formação.

Ao CNPq, FAPESP e JNICT (Portugal) pelo imprescindível apoio financeiro.

Finalmente, a você leitor, sem o qual tudo isto não faria sentido.

Resumo

No presente trabalho usamos técnicas de física de muitos corpos não relativísticas para generalizar o limite clássico de sistemas quânticos de forma a incorporar misturas estatísticas. Efeitos de temperatura finita são estudados em detalhe no contexto das versões integrável e não integrável do modelo de Lipkin-Meshkov-Glick. Os dois aspectos mais notáveis de nossa análise são: o surgimento de um novo grau de liberdade essencialmente conectado a efeitos térmicos, ocorrendo a temperaturas suficientemente altas e uma caracterização quantitativa do efeito da temperatura no volume caótico do sistema. Mostra-se que os efeitos térmicos sistematicamente compensam a parte de interação da dinâmica. Este é o caso tanto no contexto da termodinâmica quanto da dinâmica a temperatura finita e acreditamos que seja verdadeiro em geral.

Abstract

In the present work we use techniques of nonrelativistic many body physics to generalize the classic limit of quantum systems in such a way as to incorporate statistical mixtures. Finite temperature effects are studied in detail in the context of the integrable and nonintegrable versions of the Lipkin-Meshkov-Glick Model. The most remarkable features of our analysis is twofold: the appearance of a new degree of freedom essentially connected to thermal effects i.e., for high enough temperatures and a quantitative characterization of the temperature on the chaotic volume of the system. Thermal effects can be shown to consistently counterbalance the interaction part of the dynamics. This is the case both in the context of thermodynamics and of the thermal dynamics of the system and we believe it to be true in general.

Índice

Introdução	2
1 Formalismo geral	9
1.1 Formalismo geral de campo médio com estados de mistura	10
1.2 Aspectos gerais a respeito do limite clássico dos modelos estudados . .	15
2 O modelo de Lipkin SU(2)	19
2.1 O modelo.	19
2.2 Sua solução exata e o espectro de energia	22
3 A termodinâmica do modelo	31
3.1 Os estados de equilíbrio	31
3.2 Propriedades termodinâmicas	37
3.3 Cálculo termodinâmico exato	43
4 Dinâmica clássica a temperatura finita do modelo	52
4.1 Variáveis canônicas e equações de movimento	52
4.2 Pontos fixos e bifurcações	58
5 O modelo de Lipkin SU(3)	70
5.1 O modelo.	70
5.2 Sua solução exata e o espectro de energia	73

6	A termodinâmica do modelo SU(3)	80
6.1	Estados de equilíbrio	80
6.2	Propriedades termodinâmicas	86
6.3	Cálculo termodinâmico exato: resultados de N finito.	92
7	Dinâmica clássica a temperatura finita do modelo de Lipkin SU(3)	96
7.1	Lagrangiana e Hamiltoniana clássicas térmicas	96
7.2	Movimento de pequenas amplitudes	99
7.3	Movimento de grandes amplitudes no regime de acoplamento forte . . .	103
7.3.1	Equações de movimento, pontos fixos e bifurcações no regime de acoplamento forte	106
7.3.2	Seções de Poincaré no regime de acoplamento forte	110
7.4	Movimento de grandes amplitudes para todos os regimes	112
7.4.1	Investigação numérica	118
8	Conclusões	135
A	Cálculo dos traços	137
B	Multiplicidades das representações irredutíveis do grupo SU(2)	141
C	O Grupo SU(3)	144
C.1	Representações Fundamentais	151
C.2	Produtos de Multipletos e suas Reduções	153
C.3	Construção dos estados e ação dos geradores do grupo	155
C.3.1	Primeiro Método	155
C.3.2	Segundo Método	157
C.3.3	Representações irredutíveis simétricas	160
D	Derivadas da energia livre de campo médio (6.9)	162

Introdução

A descoberta do “Caos”, uma classe de fenômenos com características universais, que se manifesta nas mais diversas áreas da ciência (biologia, medicina, meteorologia, física, matemática, astronomia, química), constitui talvez uma das mais profundas revoluções científicas deste século. Em especial, a Física e a Matemática têm em muito contribuído para esclarecer as origens e consequências deste fenômeno tão geral e interdisciplinar. Do ponto de vista teórico, analítico, uma conquista notável foi alcançada no que se refere a desvendar manifestações estruturais de fenômenos caóticos através do teorema KAM [1], proposto e provado originalmente por Kolmogorov (1954) e posteriormente revisto e provado com detalhes por Arnold (1963) e Moser (1962). Muito se deve também ao vertiginoso desenvolvimento tecnológico que permitiu o estudo numérico de problemas não lineares e a investigação detalhada de modelos específicos, contribuindo muito para comprovar, modificar e dirigir hipóteses aventadas sobre o fenômeno.

Dentro da própria física, o caos constitui hoje uma área de intensa atividade de pesquisa contendo já especializações, tais como, o caos em sistemas dissipativos [2, 3] e o caos hamiltoniano [4, 5, 6]. O presente trabalho se enquadra dentro do segundo contexto, e se propõe a investigar uma extensão do limite clássico tradicional, que permite a inclusão de efeitos estatísticos. Em particular, efeitos de temperatura finita em dinâmicas caóticas têm sido relativamente pouco explorados. Os resultados obtidos nesse contexto são restritos ao modelo do Maser de Dicke [7, 8], para o qual,

provavelmente devido a simplicidade de sua estrutura matemática, os efeitos térmicos na dinâmica caótica são triviais, restringindo-se a um escalonamento do espaço de fase. Neste caso a dinâmica térmica da versão não integrável do modelo pode ser completamente mapeada em sua dinâmica de temperatura nula. A referida extensão do limite clássico é baseada na seguinte idéia: tradicionalmente, o limite clássico de sistemas quânticos pode ser obtido como uma aproximação de campo médio, na qual os estados variacionais permitidos são estados coerentes de partículas ou de momento angular [9, 10, 11, 12]. Dentro deste contexto a dinâmica quântica é completamente descrita por estados coerentes cujos rótulos obedecem a equações de Hamilton. Deste ponto de vista, a extensão é natural e imediata: utiliza-se como estados variacionais permitidos um conjunto de estados estatísticos que podem, em particular, ser escolhidos como estados unitariamente equivalentes ao estado de equilíbrio termodinâmico do sistema. Assim, a dinâmica variacional resultante será de caráter hamiltoniano e, através da família de estados variacionais permitidos, poderá conter efeitos térmicos.

Neste trabalho implementamos esta técnica no caso do modelo de Lipkin-Meshkov-Glick ¹ em suas versões SU(2) [13](integrável) e SU(3) [14] (não-integrável). Duas razões fundamentais nos levaram à escolha do modelo: a estrutura matemática sobre a qual a versão SU(3) é construída é extremamente rica e nos permite, como mostraremos, descobrir efeitos altamente não triviais provenientes da dinâmica térmica, tais como o surgimento de um novo grau de liberdade e uma investigação detalhada da competição entre efeitos de acoplamento dinâmico e da temperatura, agora não necessariamente relacionados a dinâmica caótica de temperatura nula. A segunda razão é o fato de que o modelo de Lipkin pertence a uma vasta classe de modelos exatamente solúveis, modelos de Curie-Weiss [15], que se caracterizam pelo fato de que a aproximação de campo médio torna-se exata quando o parâmetro de expansão do

¹Apenas para facilitar a notação, daqui em diante, vamos nos referenciar a este simplesmente por modelo de Lipkin.

modelo (no presente caso este é o número de partículas do sistema) tende ao infinito. Em outras palavras, o modelo tem um limite clássico matematicamente bem definido. Foi concebido originalmente para servir como um “laboratório” para testar técnicas de muitos corpos dentro do contexto da Física Nuclear.

Os principais resultados de nosso trabalho são devidos a uma investigação detalhada da termodinâmica, do espectro quântico e da dinâmica térmica das versões $SU(2)$ e $SU(3)$ do modelo de Lipkin.

O estudo da termodinâmica da versão integrável do modelo nos revela uma transição de fase de segunda ordem para valores de acoplamento maiores que um valor crítico. Neste caso, o sistema apresenta duas fases: a fase deformada, na qual a interação tem um papel preponderante na definição dos estados de equilíbrio. Nesta fase a população média dos níveis é independente da temperatura e se mantém assim até que a temperatura se aproxime da temperatura de transição de fase. Esta mesma propriedade do sistema se reflete no valor médio dos operadores de Casimir: a fase deformada pode ser pensada como contendo contribuições apenas da representação simétrica do grupo em questão. A partir da transição de fase, outras representações passam a contribuir. Na fase normal, todas as propriedades termodinâmicas independem do parâmetro de interação, sendo portanto essencialmente governadas pela entropia do sistema. Na versão não integrável do modelo, dada a maior complexidade de sua estrutura matemática, obtemos duas transições de fase de segunda ordem, caracterizando assim três fases distintas às quais denominamos fase de acoplamento forte (SCR), fase de acoplamento intermediário (ICR) e fase de acoplamento fraco (WCR). Novamente na SCR, a interação tem um papel predominante. Com o aumento da temperatura, passamos à fase ICR onde os efeitos de acoplamento são parcialmente neutralizados por efeitos térmicos. Finalmente, para temperaturas suficientemente altas, atingimos a fase WCR, onde, como no caso integrável, a termodinâmica é essencialmente

governada por efeitos térmicos e o acoplamento passa a não ter papel algum. O comportamento dos operadores de Casimir é análogo ao caso integrável.

O estudo do espectro quântico no caso integrável é bastante instrutivo por ser suficientemente simples, mas não trivial, e permitir uma compreensão minuciosa e detalhada de sua relação com o limite clássico. De forma análoga ao que ocorre na termodinâmica para valores da constante de acoplamento inferiores a um certo valor crítico, o espectro é quase harmônico e limitado dentro do mesmo intervalo de energias. A partir do valor crítico o espectro apresenta dubletos quase-degenerados além de intervalos com comportamento essencialmente harmônicos nos extremos. O limite clássico desta dinâmica também pode ser caracterizado por dois regimes. Novamente, para valores suficientemente pequenos do parâmetro de interação, a dinâmica clássica apresenta trajetórias de um único tipo. A partir de um certo valor da constante de acoplamento dois regimes emergem, classicamente caracterizados pelos tipos de trajetórias. O surgimento de uma nova família de trajetórias pode ser associado de maneira inequívoca aos estados quânticos “deformados”. Já no caso da versão $SU(3)$ do modelo a situação está longe de ser simples. As características mais importantes do espectro quântico no que se refere à caracterização de um sistema não integrável estão relacionadas às propriedades de flutuação do espectro, extensivamente estudadas por D.C.Meredith [16]. A teoria de cicatrizes sugerida por E.J.Heller [17] também foi verificada no contexto deste modelo por P.Leboeuf e M.Saraceno [18, 19, 20, 21] que estudaram distribuições de Husimi e sua relação com órbitas clássicas periódicas.

O estudo da dinâmica térmica revela que na versão integrável do modelo, os efeitos térmicos são triviais no mesmo sentido mencionado anteriormente para o Maser de Dicke. Existe um mapeamento exato entre a dinâmica de temperatura finita e a dinâmica de temperatura nula. Em contrapartida, a riqueza estrutural intrínseca da versão não integrável torna o problema muito mais complexo mesmo do ponto de vista

técnico. Para se ter uma idéia, o número de pontos fixos da dinâmica passa de quatro a quatorze. É possível estudar seu comportamento como função da temperatura. Neste caso, de maneira análoga ao que acontece com a termodinâmica do modelo, três regimes podem ser definidos, de acordo com valores da constante de acoplamento e temperatura. O regime de acoplamento forte mostra novamente um comportamento simples de escalonamento com relação a dinâmica clássica convencional. No entanto tal escalonamento desaparece para outros intervalos de constante de acoplamento e temperatura. Em particular, mostramos o surgimento de um terceiro grau de liberdade essencialmente vinculado aos efeitos térmicos. Neste caso, embora o teorema de Darboux [1] nos garanta a existência de pares de variáveis canonicamente conjugadas para caracterização dos três graus de liberdade, não fomos capazes de construí-los explicitamente, apesar das inúmeras tentativas. Felizmente a caracterização quantitativa do volume caótico do sistema pode ser feito independentemente. A integração direta das equações de Heisenberg para os valores médios dos geradores da álgebra nos permitiu calcular expoentes de Lyapunov e definir o volume caótico do sistema. O estabelecimento deste critério nos permitiu concluir que o volume caótico decresce em proporção inversa a temperatura.

Brevemente apresentamos agora a forma em que o trabalho está disposto. No primeiro capítulo discutimos dois aspectos formais fundamentais envolvidos em nosso trabalho. O primeiro refere-se ao esquema variacional utilizado para obter a termodinâmica e a dinâmica clássica conservativa a temperatura finita dos modelos e o segundo é uma discussão geral a respeito do limite clássico dos modelos estudados. O restante do trabalho é basicamente dividido em duas partes: a primeira que trata da versão integrável ($SU(2)$) do modelo e a segunda que trata da versão não integrável ($SU(3)$). A primeira parte constitui-se dos próximos três capítulos (2,3 e 4) enquanto que a segunda dos outros três em sequência (5,6 e 7). Ambas possuem basicamente a

mesma estrutura. Um capítulo é destinado a apresentação do modelo, sua estrutura quântica e seu espectro de energia. Em outro capítulo são estudados a termodinâmica clássica do sistema, seus estados de equilíbrio e propriedades termodinâmicas de interesse mais relevantes. Finalmente, o último destes é reservado para a investigação da dinâmica clássica a temperatura finita do sistema. Finalizamos apresentando as conclusões no capítulo 8.

Capítulo 1

Formalismo geral

Neste capítulo apresentamos dois tópicos relativos a aspectos formais envolvidos em nosso trabalho. O primeiro destes, exposto na próxima seção, refere-se ao esquema variacional utilizado para obter a termodinâmica e a dinâmica clássica conservativa a temperatura finita dos dois modelos estudados. Este esquema, originalmente proposto por J.da Providência e C.Fiolhais em [22] e posteriormente reformulado em [23], consiste em um formalismo de campo médio estático e dinâmico apropriado a estados gerais de mistura que fundamenta-se basicamente em técnicas de matriz densidade.

Já o segundo tópico, encontrado na seção 1.2, consiste em uma breve discussão a respeito de aspectos gerais envolvidos no limite clássico dos modelos que estudamos. Este limite, bem definido, ocorre quando o número de graus de liberdade do sistema cresce, mais precisamente, quando o número de partículas do sistema tende a infinito. Dado que este tema é extremamente rico, amplo e foi abordado em diversos trabalhos, optamos por fazer apenas uma apresentação sucinta dos conceitos elementares envolvidos e indicar referências apropriadas para discussões mais aprofundadas.

1.1 Formalismo geral de campo médio com estados de mistura

Seja H a Hamiltoniana de um sistema geral de N partículas. De acordo com os princípios da mecânica quântica, um estado de mistura arbitrário do sistema é descrito pela matriz densidade D cujo traço é unitário:

$$\text{Tr}(D) = 1. \quad (1.1)$$

Sabemos que a evolução temporal de D é dada pela equação de Liouville-von-Neumann

$$\dot{D} = i[D, H], \quad (1.2)$$

que é equivalente a

$$D(t) = e^{-iHt} D(0) e^{iHt}. \quad (1.3)$$

Vemos que o espectro de autovalores de D permanece inalterado com o tempo.

A matriz densidade D_0 descrevendo um estado de mistura estacionário satisfaz portanto a condição

$$[H, D_0] = 0. \quad (1.4)$$

Esta condição pode ser formulada variacionalmente. Para isso consideramos o conjunto de todas as matrizes densidades tendo um espectro fixo de autovalores. Se D_0 pertence a este conjunto, propomos a matriz densidade

$$D = U D_0 U^\dagger = e^{-iF} D_0 e^{iF}, \quad (1.5)$$

onde F é um operador hermiteano arbitrário. A condição de estacionariedade para a energia leva a equação (1.4).

Nosso objetivo é obter uma formulação variacional de (1.2) que possa ser usada em esquemas de aproximação confiáveis para as equações dinâmicas exatas. Começamos

escrevendo a matriz densidade dependente do tempo em termos da matriz densidade estacionária que satisfaz (1.4) dada por

$$D(t) = \mathcal{U}(t) D_0 \mathcal{U}^\dagger(t), \quad (1.6)$$

onde $\mathcal{U}(t)$ é um operador unitário variacional (a unitariedade de \mathcal{U} garante a invariância temporal do espectro de autovalores de D). Entretanto, é tecnicamente muito mais simples trabalhar com a forma diagonal de D_0 e para isso propomos

$$D_{dg} = V D_0 V^\dagger, \quad (1.7)$$

onde D_{dg} é uma matriz densidade diagonal independente do tempo e V uma transformação unitária que também não depende do tempo. Assim reescrevemos (1.6) como

$$D(t) = U(t) D_{dg} U^\dagger(t), \quad (1.8)$$

sendo o novo $U(t)$ dado por $V\mathcal{U}^\dagger(t)$.

Neste contexto, D_{dg} e $U(t)$ são restritos as formas

$$D_{dg} = \exp(A) / \text{Tr}(\exp(A)) \quad \text{e} \quad U(t) = \exp(iS(t)), \quad (1.9)$$

onde A e S são operadores hermiteanos de um corpo e a forma mais geral de U pode ser parametrizada por um conjunto de variáveis complexas $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}$.

Consideremos a integral de ação

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L dt \quad (1.10)$$

onde a Lagrangiana é dada por

$$L = i \text{Tr}(D_{dg} U \dot{U}^\dagger) - \text{Tr}(D_{dg} U H U^\dagger). \quad (1.11)$$

Seja

$$U = e^{-iF}, \quad \text{então} \quad \delta U = -iU \delta F, \quad (1.12)$$

onde δF é um operador infinitesimal. Temos portanto que

$$U^\dagger \delta U = -\delta U^\dagger U = -\imath \delta F. \quad (1.13)$$

A variação da integral de ação pode ser escrita por

$$\begin{aligned} \delta I &= \quad (1.14) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \{ \imath [Tr(D_{dg} \delta U \dot{U}^\dagger) + Tr(D_{dg} U \delta \dot{U}^\dagger)] - Tr(D_{dg} \delta U H U^\dagger) - Tr(D_{dg} U H \delta U^\dagger) \}. \end{aligned}$$

Trabalhando termo a termo obtemos

$$Tr(D_{dg} \delta U \dot{U}^\dagger) = Tr(U^\dagger \delta U \dot{U}^\dagger D_{dg} U); \quad (1.15)$$

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} dt Tr(D_{dg} U \delta \dot{U}^\dagger) &= Tr(D_{dg} U \delta U^\dagger) \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} dt Tr(D_{dg} \dot{U} \delta U^\dagger U U^\dagger) = \\ &= \imath Tr(D_{dg} \delta F) \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt Tr(U^\dagger \delta U U^\dagger D_{dg} \dot{U}); \quad (1.16) \end{aligned}$$

$$Tr(D_{dg} \delta U H U^\dagger) = Tr(U^\dagger \delta U H U^\dagger D_{dg} U); \quad (1.17)$$

$$\begin{aligned} Tr(D_{dg} U H \delta U^\dagger U U^\dagger) &= -Tr(D_{dg} U H U^\dagger \delta U U^\dagger) = \\ &= -Tr(U^\dagger \delta U U^\dagger D_{dg} U H); \quad (1.18) \end{aligned}$$

onde utilizamos (1.13) em (1.16) e (1.18). Substituindo estes termos em (1.14) obtemos

$$\delta I = -Tr(D_{dg} \delta F) \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt Tr \{ U^\dagger \delta U \{ \imath \frac{d}{dt} (U^\dagger D_{dg} U) + [U^\dagger D_{dg} U, H] \} \} \quad (1.19)$$

e finalmente

$$\delta I + Tr[D_{dg} \delta F(t_2)] - Tr[D_{dg} \delta F(t_1)] = 0. \quad (1.20)$$

Dado que a variação δF é arbitrária, para $t_1 \leq t \leq t_2$, a equação (1.20) satisfaz o princípio de mínima ação e é equivalente a equação de Liouville-von-Neumann e portanto (1.8) obedece a corretas equações de movimento. As quantidades $Tr[D_{dg} \delta F(t_2)]$

e $Tr[D_{dg}\delta F(t_1)]$ não têm um papel relevante fisicamente e portanto podemos sem perda de generalidade impor que

$$Tr[D_{dg}\delta F(t_2)] - Tr[D_{dg}\delta F(t_1)] = 0. \quad (1.21)$$

Assim o princípio de ação (1.20) reduz-se a forma simples

$$\delta I = 0. \quad (1.22)$$

A condição de equilíbrio estatístico é mais restritiva que (1.4) (a condição de equilíbrio estacionário). Os estados de equilíbrio térmico devem ser encontrados, no caso do ensemble canônico, pela minimização da energia livre F com respeito as variações de D satisfazendo a condição de normalização (1.1). Temos que F é dada por

$$\begin{aligned} F &= Tr(DH) + \frac{1}{\beta} Tr(D \ln D) = \\ &= Tr(D_{dg} U H U^\dagger) + \frac{1}{\beta} Tr(D_{dg} \ln D_{dg}), \end{aligned} \quad (1.23)$$

sendo que β é o inverso do produto da constante de Boltzmann k_B e a temperatura do sistema. A energia interna é dada por $Tr(DH)$ e a entropia $S = -k_B Tr(D \ln D)$.

A composição de estados mistos é assim prescrita sem ambigüidade.

O primeiro termo do lado direito da equação (1.11) pode ser utilizado na busca de variáveis canônicas (ainda que complexas) δ_j e δ_j^* (j variando de 1 ao número de graus de liberdade N_{gl}), enquanto que o segundo termo do lado direito desta equação é a Hamiltoniana do sistema. Desta forma teremos que

$$L = \frac{i}{2} \sum_{j=1}^{N_{gl}} (\delta_j \delta_j^* - \delta_j^* \delta_j) - H(\delta_j, \delta_j^*). \quad (1.24)$$

Fazendo

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{H(\delta_j, \delta_j^*)}{N} = \mathcal{H}_{cl}, \quad (1.25)$$

obtemos a Hamiltoniana clássica do sistema de um estado de mistura. As equações de movimento são dadas por

$$i\dot{\delta}_j^* = \frac{\partial \mathcal{H}_{cl}}{\partial \delta_j} \quad \text{e} \quad -i\dot{\delta}_j = \frac{\partial \mathcal{H}_{cl}}{\partial \delta_j^*}. \quad (1.26)$$

Há uma situação em nosso trabalho, como veremos no capítulo 7, onde não foi possível encontrarmos os pares de variáveis canônicas $\{\delta_j, \delta_j^*\}$ para o modelo de Lipkin SU(3) a temperatura finita. Apesar do teorema de Darboux [1] garantir suas existências não encontramos meios ou métodos eficazes para encontrá-las. Sendo assim, um procedimento alternativo, baseado em [24](pág.60), foi tomado: obtemos as equações de movimento a partir das equações de Heisenberg válidas para a evolução temporal dos valores médios dos geradores da álgebra de Lie em termos dos quais a Hamiltoniana do específico modelo é expressa.

Seja um operador \mathcal{A} tal que

$$\mathcal{A}(t) = \mathcal{U}(t)\mathcal{A}(0)\mathcal{U}^\dagger(t), \quad (1.27)$$

onde $\mathcal{A}(0) = \mathcal{A}$. Então a equação de movimento de Heisenberg é obedecida e pode ser calculada por

$$i\frac{d}{dt}\mathcal{A}(t) = [\mathcal{A}(t), H] = \mathcal{U}(t)[\mathcal{A}, H]\mathcal{U}^\dagger(t). \quad (1.28)$$

A evolução temporal do valor médio deste operador é dada por

$$i\frac{d}{dt}\langle \mathcal{A}(t) \rangle = i\frac{d}{dt}\langle \mathcal{U}(t)\mathcal{A}(0)\mathcal{U}^\dagger \rangle = \langle \mathcal{U}(t)[\mathcal{A}, H]\mathcal{U}^\dagger(t) \rangle. \quad (1.29)$$

Considerando o caso de interesse particular aqui, onde \mathcal{A} assume o papel dos geradores do grupo, a evolução temporal de seu valor médio é dada portanto por

$$i\frac{d}{dt}Tr(D_{dg}U\mathcal{A}U^\dagger) = Tr(D_{dg}U[\mathcal{A}, H]U^\dagger). \quad (1.30)$$

1.2 Aspectos gerais a respeito do limite clássico dos modelos estudados

O principal motivo que nos levou a trabalhar com os modelos de Lipkin SU(2) e SU(3) deve-se ao fato destes serem modelos $1/N$, ou ainda, por pertencerem a classe de modelos de Curie-Weiss ou modelos de campo médio como são comumente referidos [15]. Esta característica torna-os adequados à análise que se propõe fazer neste projeto, ou seja, a pesquisa dos efeitos de temperatura nas dinâmicas clássicas de sistemas integráveis ou caóticos. A Hamiltoniana de cada um destes modelos é de uma particular forma que permite uma expansão em série de potências em um parâmetro $1/N$ de modo que um limite assintótico seja atingido para $N \rightarrow \infty$. Mostra-se que este é seu limite clássico, onde flutuações e correlações quânticas desaparecem [25, 26]. Deste modo o parâmetro $1/N$ assume o papel tradicionalmente ocupado por \hbar no limite clássico de sistemas quânticos.

Em [25], L.G.Yaffe afirma que expansões $1/N$ e limites de grandes N como limite clássico ocupam lugares muito mais amplos no cenário da física, não sendo restritos apenas a nossa classe de modelos. Abrangendo teorias desde a mecânica quântica de uma partícula puntual movendo-se em um potencial central de dimensão N , passando por modelos de spins com N spins quânticos até teorias quânticas de campos contendo potenciais de gauge SU(N), o limite de $N \rightarrow \infty$ reconhecidamente simplifica drasticamente a dinâmica dos sistemas. Além do mais, expansões $1/N$ têm sido aplicadas em propósitos outros que os que temos aqui. Como exemplo, pode-se citar que no contexto da cromodinâmica quântica (QCD) é utilizada na busca de métodos confiáveis para análises dinâmicas.

Por estas razões, muitos métodos têm sido propostos para a solução do limite de grandes N e o que há de comum entre estes, segundo Yaffe, baseia-se no seguinte fato: Em toda teoria conhecida por ter um razoável limite de grandes N , o valor esperado

de qualquer produto de operadores (razoáveis) $\hat{A}\hat{B}$ satisfaz a relação de fatorização

$$\langle \hat{A}\hat{B} \rangle = \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle + O(1/N) + \dots \quad (1.31)$$

Assim a variância de qualquer operador se anula para $N \rightarrow \infty$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2) = 0. \quad (1.32)$$

Esta equação mostra que flutuações tornam-se irrelevantes ao menos para um conjunto de operadores à medida que N tende a infinito. Assim, em algum sentido teorias quânticas de grandes N comportam-se como teorias clássicas. Dado que são satisfeitas uma série de exigências que explicitamente isolam a estrutura mínima que uma teoria quântica deve possuir a fim de ter um limite clássico, efetivamente podemos então construir um espaço de fase, definir um colchete de Poisson consistente e encontrar uma Hamiltoniana clássica tal que a dinâmica clássica resultante concorde com a forma limite da dinâmica quântica original.

Entre outras, uma referência que indicamos fortemente é o trabalho de P.Kramer e M.Saraceno [24], onde a geometria do princípio variacional dependente do tempo na mecânica quântica é estudada. Este princípio é uma formulação da equação de Schrödinger dependente do tempo através da variação do funcional de ação. Para parametrizações das funções de onda com um conjunto finito de parâmetros reais ou complexos, esta formulação leva a equações de movimento de primeira ordem. Estas equações de movimento podem ser interpretadas como equações hamiltonianas, dado que uma certa matriz seja inversível. Esta matriz é essencialmente composta das derivadas das sobreposições de estados parametrizados, tomadas em relação a pares de parâmetros. Parênteses de Poisson ou a estrutura simplética desta formulação hamiltoniana são dados em termos do inverso desta matriz. As referências [19, 27, 28], apesar do restrito acesso, também são indicadas.

Os limites clássicos dos modelos com os quais trabalhamos já são conhecidos. Encontramos resultados para o modelo de Lipkin SU(2) obtidos através de estados coerentes em [29, 24, 30] e através da aproximação de Hartree-Fock dependente do tempo em [31, 32]. Para o Lipkin SU(3), análises clássicas do modelo realizadas a partir de estados coerentes são encontradas em [33, 16, 18, 19, 20, 21].

No caso do modelo SU(2), a dinâmica clássica é unidimensional, portanto integrável dado que o sistema é conservativo. No limite clássico de sistemas quânticos de spins, os valores esperados dos geradores da álgebra são substituídos por vetores clássicos que se movem sobre uma superfície esférica unitária (veremos isso no capítulo 4). Sendo os geradores da álgebra de Lie de nossos modelos definidos como variáveis extensivas do sistema, natural é dividi-los por N . Assim sendo, os comutadores dos geradores da álgebra escalados, como por exemplo,

$$\left[\frac{J_+}{N}, \frac{J_-}{N} \right] = \frac{2\hbar J_z}{N^2} \quad (1.33)$$

anulam-se para $N \rightarrow \infty$. Um tratamento formal do limite clássico desta classe de sistemas, realizado por E.H.Lieb em [34], prova que quando $J \rightarrow \infty$, mas depois do limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), a energia livre do sistema (ou a energia do estado fundamental) é igual ao valor clássico. Isto veio a implicar na verdade que estes dois limites comutam, pois já se sabia que a ordem inversa destes leva ao limite clássico. Referenciamos ao trabalho [28] para uma boa discussão sobre este tema.

Já o modelo SU(3) possui uma dinâmica clássica não integrável em um espaço de fases de quatro dimensões, apresentando movimento caótico para determinados intervalos de energia e parâmetros de interação .

Neste trabalho, vamos utilizar o procedimento apresentado na seção anterior para obter a dinâmica clássica a temperatura finita dos modelos. Mais precisamente, através da expressão (1.11) ou de (1.30). O primeiro termo do lado direito de (1.11) é utilizado na busca de variáveis canônicas, enquanto que seu segundo termo, quando

escalado por N e tomado seu limite de $N \rightarrow \infty$, fornece a Hamiltoniana clássica do sistema. As equações de movimento são dadas por (1.26). Na situação em que não encontramos os pares de variáveis canônicas, obtemos as equações de movimento para os valores médios dos geradores da álgebra de Lie em termos dos quais a Hamiltoniana do modelo é expressa a partir de (1.30).

Para que os estados de mistura correspondam a estados de equilíbrio térmico devemos minimizar a energia livre do sistema e já que isto é necessário, aproveitaremos para estudar as propriedades termodinâmicas dos modelos de forma mais detalhada.

Capítulo 2

O modelo de Lipkin SU(2)

2.1 O modelo.

Como proposto originalmente por Lipkin, Meshkov e Glick [13], o modelo consiste em N férmions interagentes distribuídos em dois níveis ou camadas de degenerescência $\mathcal{N} = N$ separados por uma energia ϵ . Cada estado de partícula única é definido por dois números quânticos: σ que pode assumir valores $+1$ (se a partícula está no nível superior) e -1 (se está no nível inferior) e p que especifica o particular estado degenerado dentro da camada, portanto tendo valores inteiros de 1 a N . A Hamiltoniana do sistema é dada por

$$H = \frac{1}{2}\epsilon \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_{p=1}^N \sigma a_{p\sigma}^\dagger a_{p\sigma} - \frac{1}{2}V \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_{p=1}^N \sum_{p'=1}^N a_{p\sigma}^\dagger a_{p'\sigma}^\dagger a_{p'-\sigma} a_{p-\sigma} +$$
$$-\frac{1}{2}W \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_{p=1}^N \sum_{p'=1}^N a_{p\sigma}^\dagger a_{p'-\sigma}^\dagger a_{p'\sigma} a_{p-\sigma} , \quad (2.1)$$

onde $a_{p\sigma}^\dagger$ e $a_{p\sigma}$ são respectivamente os operadores fermiônicos de criação e aniquilação de uma partícula no estado p do nível σ que obedecem as relações de anti-comutação usuais [35, 36, 37]

$$[a_{p\sigma}, a_{p'\sigma'}]_+ = [a_{p\sigma}^\dagger, a_{p'\sigma'}^\dagger]_+ = 0, \quad [a_{p\sigma}, a_{p'\sigma'}^\dagger]_+ = \delta_{pp'}\delta_{\sigma\sigma'}, \quad (2.2)$$

onde $[\dots]_+$ indica o anti-comutador de dois operadores, ou seja, $[\alpha, \beta]_+ \equiv \alpha\beta + \beta\alpha$. V e W são parâmetros especificando as intensidades das interações.

O primeiro termo de interação, proporcional a V , espalha pares de partículas pertencentes a um mesmo nível, enquanto que o segundo espalha pares de partículas pertencentes a níveis diferentes. Ambos não alteram o valor de p . Esta simetria é fundamental para a simplificação do problema como veremos a seguir.

Definindo os operadores de quase-spin

$$J_z = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^N [a_{p+1}^\dagger a_{p+1} - a_{p-1}^\dagger a_{p-1}], \quad (2.3)$$

e

$$J_+ = J_-^\dagger = \sum_{p=1}^N a_{p+1}^\dagger a_{p-1}, \quad (2.4)$$

que obedecem as regras de comutação do grupo $SU(2)$,

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm, \quad [J_+, J_-] = 2J_z, \quad (2.5)$$

a Hamiltoniana passa a ser expressa na forma

$$H = \epsilon J_z - \frac{1}{2} V (J_+^2 + J_-^2) - \frac{1}{2} W (J_+ J_- + J_- J_+). \quad (2.6)$$

Dado que o operador de Casimir do grupo $J^2 = \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2$ comuta com H , a matriz hamiltoniana de ordem 2^N é subdividida em blocos que não se conectam. Cada bloco corresponde a um particular subespaço vetorial de ordem $2j + 1$, ou seja, a uma particular representação irredutível caracterizada pelo valor de j , onde j é o número quântico que usualmente rotula os autoestados de J^2 e J_z e que não é alterado pelos operadores do grupo. Explicitamente (fazemos $\hbar = 1$)

$$J^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle, \quad (2.7)$$

$$J_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle. \quad (2.8)$$

Para um sistema sem interação ($V = W = 0$), o estado fundamental possui as N partículas no nível (camada) inferior, j assume seu máximo valor ($N/2$) e J_z tem seu mínimo autovalor ($-N/2$). Este é o estado de menor peso da maior representação irredutível, que possui estados simétricos em relação a troca de partículas e dimensão $N+1$. Muitos dos trabalhos na literatura restringem-se ao estudo do modelo a partir deste multipletto. Notadamente, o limite clássico obtido a partir de estados coerentes [9, 12, 38, 29, 24, 11].

Outra simetria da Hamiltoniana é a conservação da paridade do número de partículas em cada nível, ou seja, estados com número de partículas par (ou ímpar) no nível superior só interagem com estados com esta mesma característica. Isto divide os estados de cada um dos multipletos em dois conjuntos, reduzindo ainda mais as dimensões mínimas das matrizes a serem diagonalizadas. Em cada um destes conjuntos, os autoestados de energia são expressos como combinações lineares dos vetores da base $|j, m\rangle$, tais que diferenças entre os seus autovalores de J_z sejam múltiplas de dois. Isto implica, no caso de N par, na conservação da paridade destes autovalores. Essa simetria de H vem de sua comutatividade com o operador

$$\hat{\Pi} = \exp(i\pi\hat{J}_z), \quad (2.9)$$

conhecido como operador paridade [39]. Efeitos de quebra desta simetria em um espaço de fase discreto foram estudados recentemente em [40] para uma versão estendida do modelo.

Para $V = 0$, os autovetores de H são os mesmos de J_z . Observe que o termo de interação proporcional a W conserva a forma diagonal da Hamiltoniana nesta base.

A fim de que os termos de interação tenham as mesmas ordens de grandeza que o termo livre à medida que o número de partículas cresce, condição necessária para a existência do limite termodinâmico, é conveniente definirmos os parâmetros de interação escalados

$$\chi = \frac{V(N-1)}{\epsilon} \quad \text{e} \quad \kappa = \frac{W(N-1)}{\epsilon}. \quad (2.10)$$

Isto já sugere algo que será abordado na próxima seção : o carácter $1/N$ do espectro do sistema.

2.2 Sua solução exata e o espectro de energia

Várias características deste modelo tornam sua solução exata interessante e muito elucidativa. A primeira destas características é a de que o modelo possui um espaço de Hilbert finito. Assim sendo, inexistem problemas com truncamentos da matriz hamiltoniana. A solução de sistemas com espaço de Hilbert infinito, por vezes, torna-se uma questão tecnicamente delicada onde até mesmo a escolha da base vetorial na qual se expressa a Hamiltoniana pode influenciar drasticamente a convergência e qualidade dos resultados [41].

Outra característica deve-se ao fato deste se tratar de um modelo $1/N$. Isto significa que existe um parâmetro de expansão $1/N$ (no presente caso N é o número de partículas) no qual o espectro de energia pode ser expandido em uma série de potências. Assim sendo, o espectro tende a um limite assintótico à medida que N cresce, atingindo uma curva universal para $N \rightarrow \infty$ que dependerá apenas dos parâmetros de interação do modelo. Este é seu limite clássico, onde flutuações e correlações quânticas desaparecem [25, 26].

Com solução analítica simples em alguns casos e numericamente solúvel em todos,

a matriz hamiltoniana explicitamente escrita na base dos auto-estados de J_z é dada por

$$\begin{aligned} \langle j, m' | H | j, m \rangle = & \{ \epsilon m - W[j(j+1) - m^2] \} \langle j, m' | j, m \rangle + \\ & - \frac{V}{2} \{ \lambda_1 \lambda_2 \langle j, m' | j, m+2 \rangle + \lambda_3 \lambda_4 \langle j, m' | j, m-2 \rangle \}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde

$$\lambda_1 \lambda_2 = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \sqrt{j(j+1) - (m+1)(m+2)}, \quad (2.12)$$

$$\lambda_3 \lambda_4 = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \sqrt{j(j+1) - (m-1)(m-2)}, \quad (2.13)$$

$$-j \leq m \leq j \quad \text{e} \quad j = \frac{N}{2}, \left(\frac{N}{2} - 1 \right), \dots, 0 \text{ ou } \frac{1}{2}. \quad (2.14)$$

Vemos que os elementos de matriz, além dos parâmetros de interação do sistema, são funções explícitas apenas dos parâmetros de quase-spin. Entretanto, sabemos que estes em seus limites superiores e inferiores, e conseqüentemente todos os outros, estão vinculados a N .

Observando a eq.(2.11) notamos que os termos proporcionais a ϵ são de ordem N^1 , enquanto que os de interação são de ordem N^2 , tornando natural a definição (2.10) dos parâmetros escalados χ e κ . Além do mais, H é uma matriz esparsa, e em sua forma mais geral é tridiagonal.

Vamos analisar os autovalores de energia E_n escalados por $N\epsilon$ em função de n/n_{max} , onde n é o rótulo do nível e n_{max} é o máximo n , isto é, o número de auto-estados da representação irredutível. Verificaremos sua dependência com os parâmetros do sistema N, χ e κ .

Iniciamos o estudo do espectro observando o carácter $1/N$ do modelo a partir da representação irredutível simétrica apenas para que as figuras fiquem claras. Na figura

2.1, fixamos os parâmetros de interação e variamos o número de partículas. A figura 2.1(a) corresponde a $\chi = 0,6$, enquanto que 2.1(b) a $\chi = 6,0$; em ambos os casos κ é nulo. À medida que N cresce, a densidade de níveis aumenta e os autovalores de energia tendem a uma curva assintótica e contínua.

Para interações nulas, o espectro é harmônico, limitado ao intervalo $-1/2 \leq E \leq +1/2$. Para valores de $\chi + \kappa$ entre 0 e 1, observamos uma variação suave em torno do espectro de interação nula, mas sem haver alteração dos valores extremos $1/2$ e $-1/2$ como mostram as figuras 2.2 e 2.3.

Contudo, quando a soma dos parâmetros de interação excede a unidade, o espectro apresenta uma mudança de comportamento. Para κ nulo e $\chi > 1$, o espectro é simétrico em torno de zero e devido a esta interação de dois corpos, os limites inferiores e superiores expandem-se além do intervalo $[-1/2, +1/2]$. Para $|E| > 1/2$ surgem degraus de dubletos de autovalores, de modo que um dos auto-estados do dubleto tem seu autovetor expresso como uma combinação linear dos autovetores de J_z com autovalores pares e o outro auto-estado relaciona-se aos autovalores ímpares. Para $|E| < 1/2$ o comportamento do espectro continua sendo aproximadamente harmônico. Veja a figura 2.2.

Já para χ nulo e $\kappa > 1$, não existe simetria em torno do autovalor de energia nulo. Para $\kappa > 0$, os limites superiores não são alterados, enquanto que os inferiores dilatam-se além de $-1/2$, a partir do qual, as estruturas de dubletos surgem, porém menos nítidas devido ao fato de as distâncias dos degraus diminuírem à proporção que os autovalores de energia diminuem (figura 2.3). Aqui cada dubleto relaciona-se a uma única paridade dos autovalores de J_z . Na região de energia entre $-1/2$ e $1/2$, a inclinação do espectro é bem mais acentuada do que nos casos onde $\kappa = 0$.

A troca de sinal de χ (interação atrativa \rightarrow repulsiva) não altera o espectro de energias do sistema. Já a troca de sinal de κ gera a reflexão do espectro observada na

figura 2.3.

Quando as duas interações estão presentes, as características destas se fundem, hora de modo competitivo, hora de modo construtivo. Na figura 2.4, vemos que autovalores de energia maiores que $1/2$ só existem na situação onde χ é maior que κ . Uma inspeção mais detalhada mostra que estes surgem quando $\chi > \kappa + 1$. Já na situação inversa, $\chi < \kappa$, para valores de energia próximos, mas inferiores a $-1/2$ não encontramos a estrutura de dubletos bem definida, mas à medida que a energia diminui, tornam-se evidentes com o crescimento dos espaçamentos entre estes (comportamento inverso ao verificado na figura 2.3).

As figuras 2.5 ilustram o comportamento de todos os autovalores de energia, inclusive os das representações irredutíveis anti-simétricas para $\chi = 5$ e κ nulo para 10 e 30 partículas. O eixo das abscissas correspondem ao número quântico j que caracteriza o multiplete.

A transição de comportamento do espectro do sistema que ocorre a $\chi + \kappa = 1$ é uma característica fundamental do modelo e como veremos a seguir possui importantes implicações na termodinâmica do sistema e na dinâmica clássica a temperatura nula e finita.

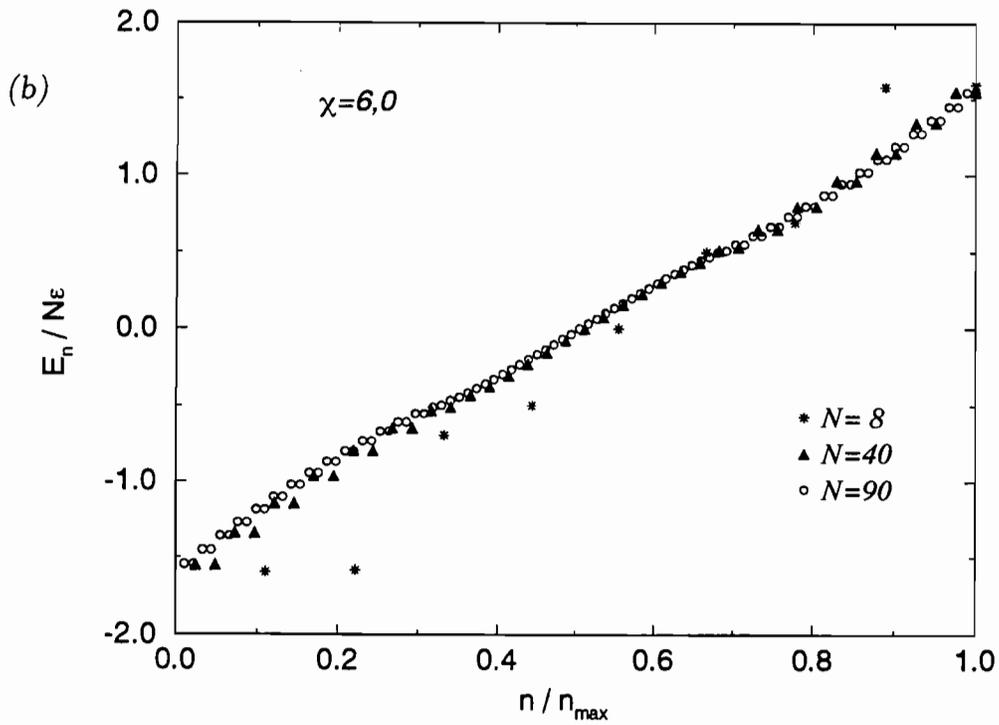
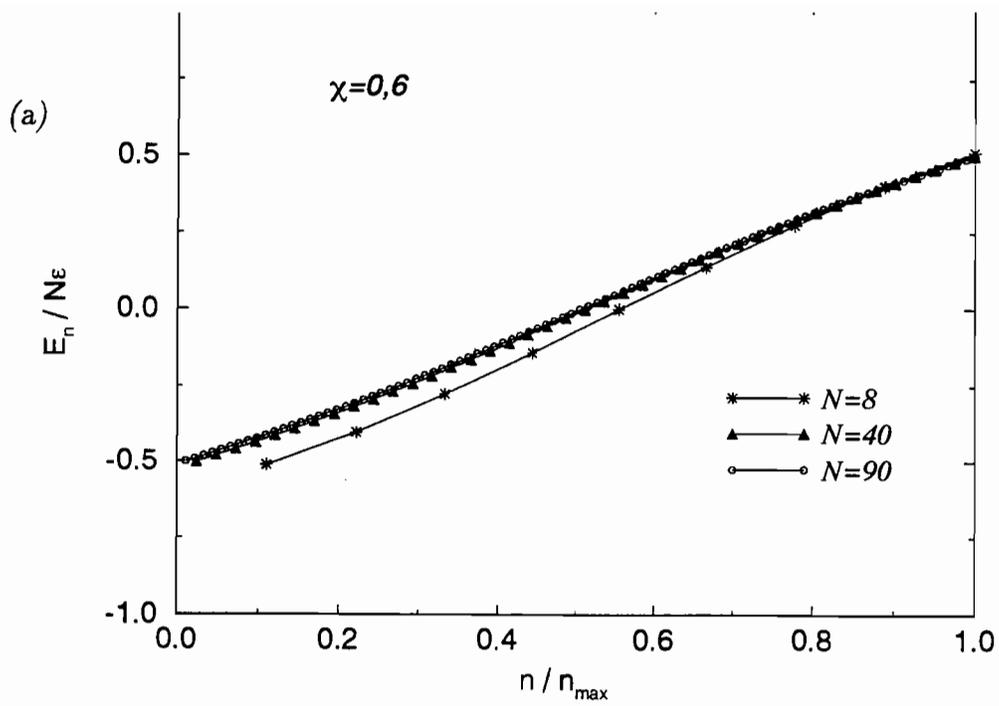


Figura 2.1: Autovalores de energia $E_n/N\epsilon$ versus n/n_{max} calculados para vários valores de número de partículas N e parâmetros de acoplamento fixos para a representação irredutível simétrica. Em ambos casos κ é nulo. Em (a), tomamos $\chi = 0,6$ e em (b) $\chi = 6,0$ que correspondem respectivamente a valores inferior e superior a $\chi_{crit} = 1,0$. n_{max} corresponde ao número de auto-estados do multiplete, sendo $N + 1$ para a representação simétrica. Em (a) os pontos foram unidos somente para efeito de visualização, sendo as curvas contínuas apenas no limite $N \rightarrow \infty$.

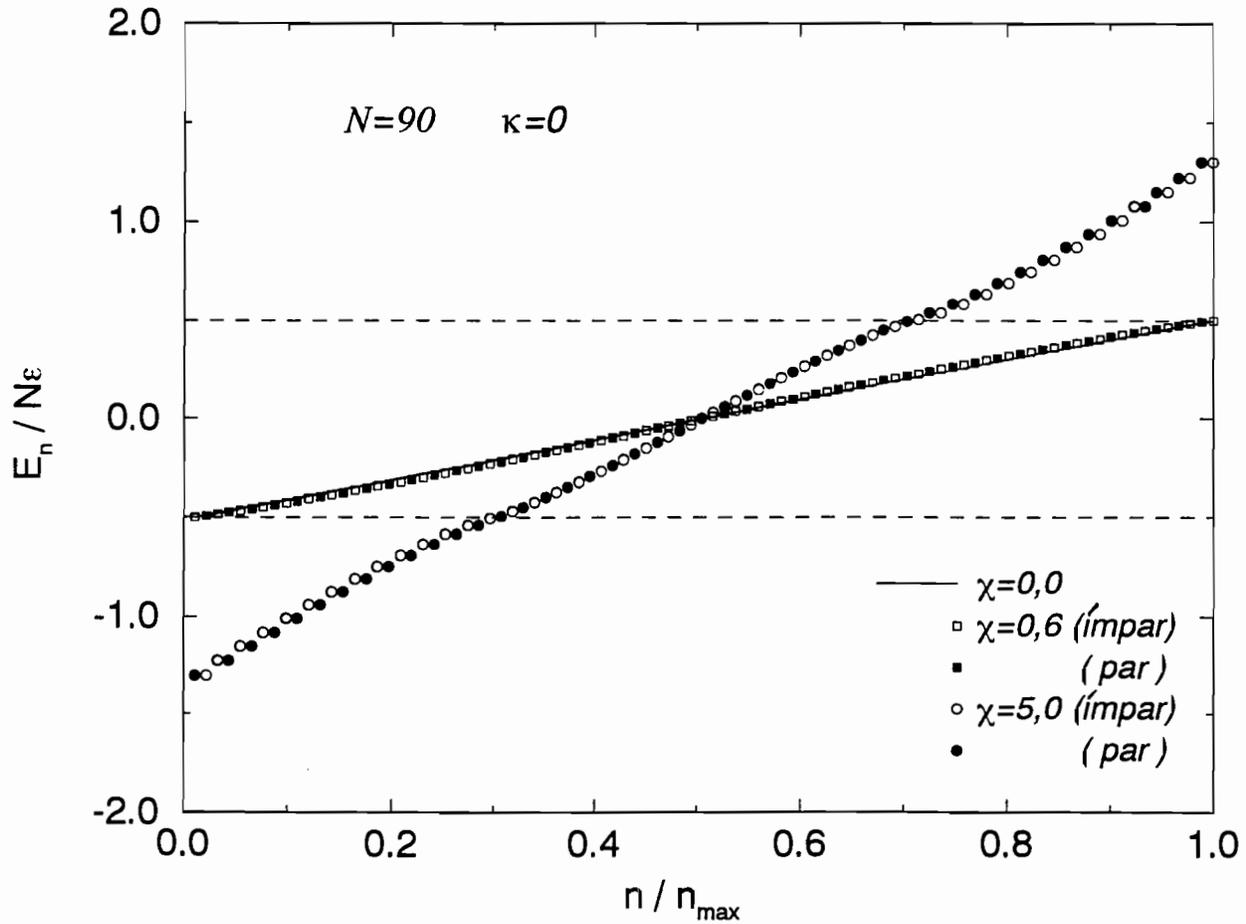


Figura 2.2: Autovalores de energia $E_n/N\epsilon$ versus n/n_{max} calculados para $N = 90$ e κ nulo para os valores indicados de χ (apenas representação irredutível simétrica, $n_{max} = N+1$). As linhas tracejadas mostram os valores máximos para o espectro para $\chi < 1,0$. Os caracteres vazios correspondem a autovalores de energia pertencentes ao conjunto dos autovalores de J_z ímpares, enquanto que os preenchidos aos autovalores pares. Note que para $\chi > 1,0$, cada auto-estado dos dubletos pertence alternadamente aos dois conjuntos e que o espectro é simétrico em torno do autovalor de energia nulo. A inversão do sinal de χ não altera o espectro.

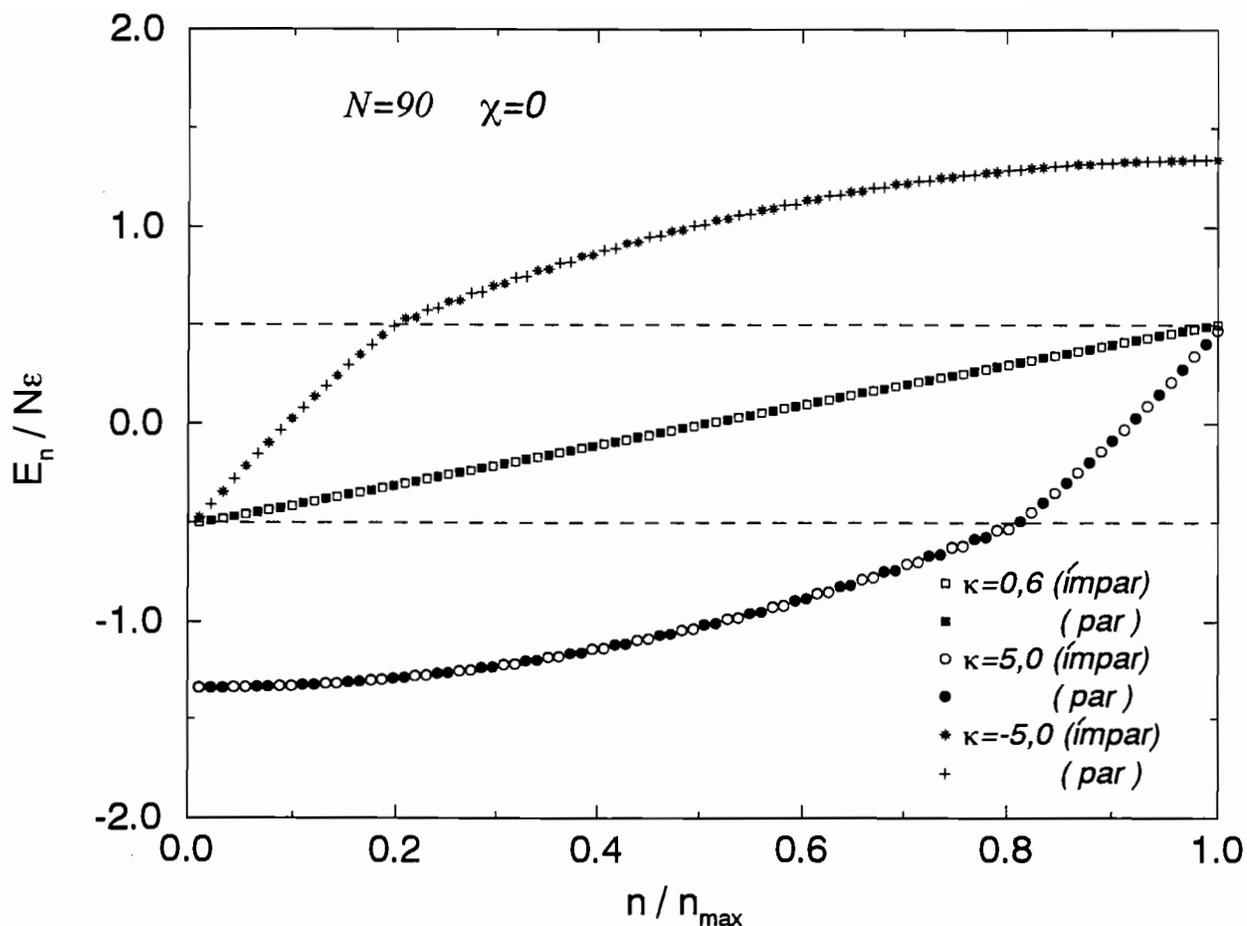


Figura 2.3: Autovalores de energia $E_n/N\epsilon$ versus n/n_{max} calculados para $N = 90$ e χ nulo para os valores indicados de κ (apenas representação irredutível simétrica $n_{max} = N+1$). As linhas tracejadas mostram os valores máximos para o espectro para $\kappa < 1,0$. Como na figura anterior, os caracteres vazios correspondem a autovalores pertencentes ao conjunto dos autovalores de J_z ímpares, enquanto que os preenchidos aos autovalores pares. Aqui cada um dos dubletos de energia, existentes para $|\kappa| > 1,0$, relaciona-se a uma única paridade dos autovalores de J_z . Distintamente da figura anterior, para $\kappa \neq 0$, o espectro não é simétrico em torno do autovalor de energia nulo e a troca do sinal de κ produz uma rotação de 180° no espectro de autovalores.

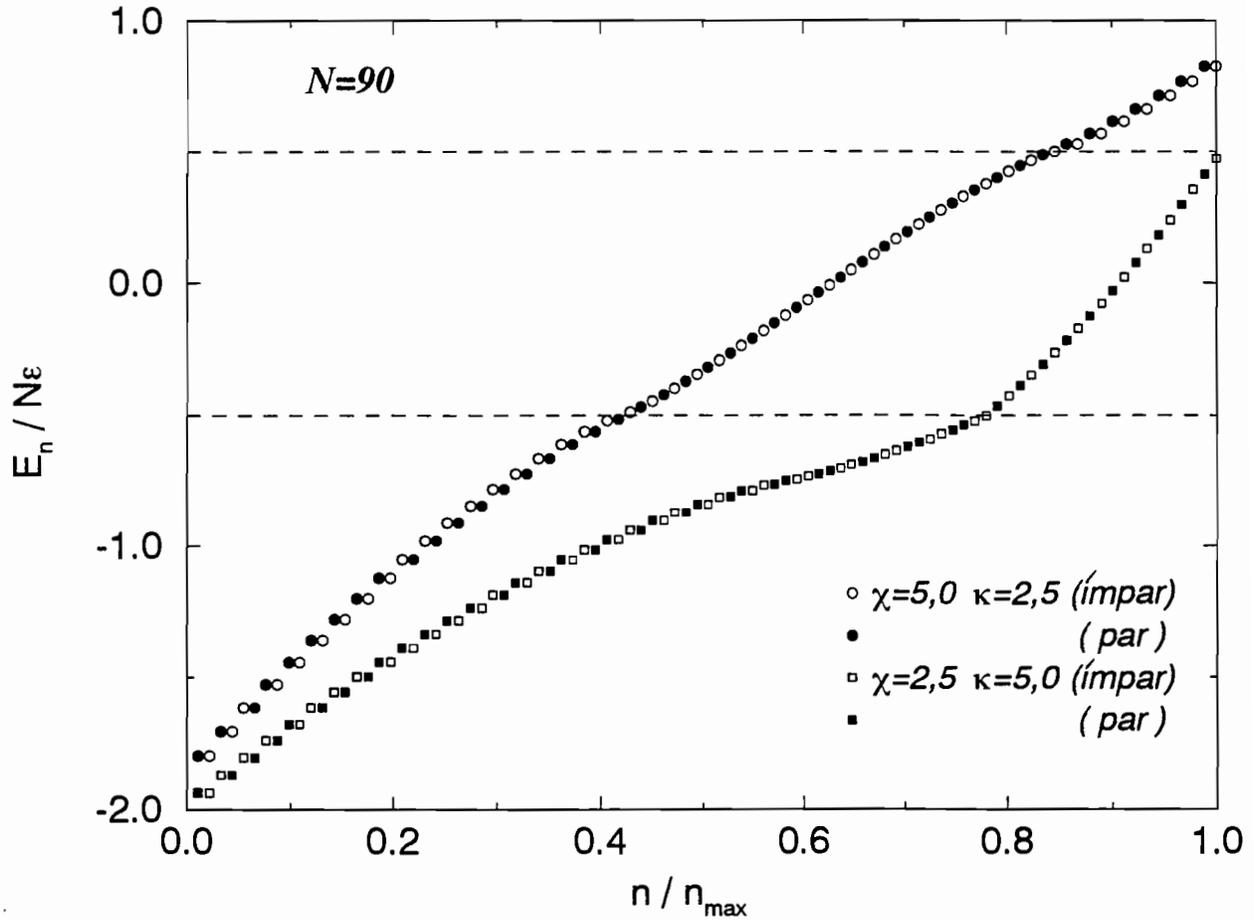


Figura 2.4: Autovalores de energia $E_n/N\epsilon$ versus n/n_{\max} calculados para $N = 90$ e parâmetros de interação indicados (representação irredutível simétrica). Como nas duas figuras anteriores, as linhas tracejadas indicam os valores máximos do espectro para $\chi + \kappa < 1,0$ (região “harmônica”). Também aqui, os caracteres vazios relacionam-se a paridade ímpar dos autovalores de J_z , enquanto que os preenchidos aos autovalores pares. Autovalores de energia maiores que $1/2$ só existem quando $\chi > \kappa + 1$.

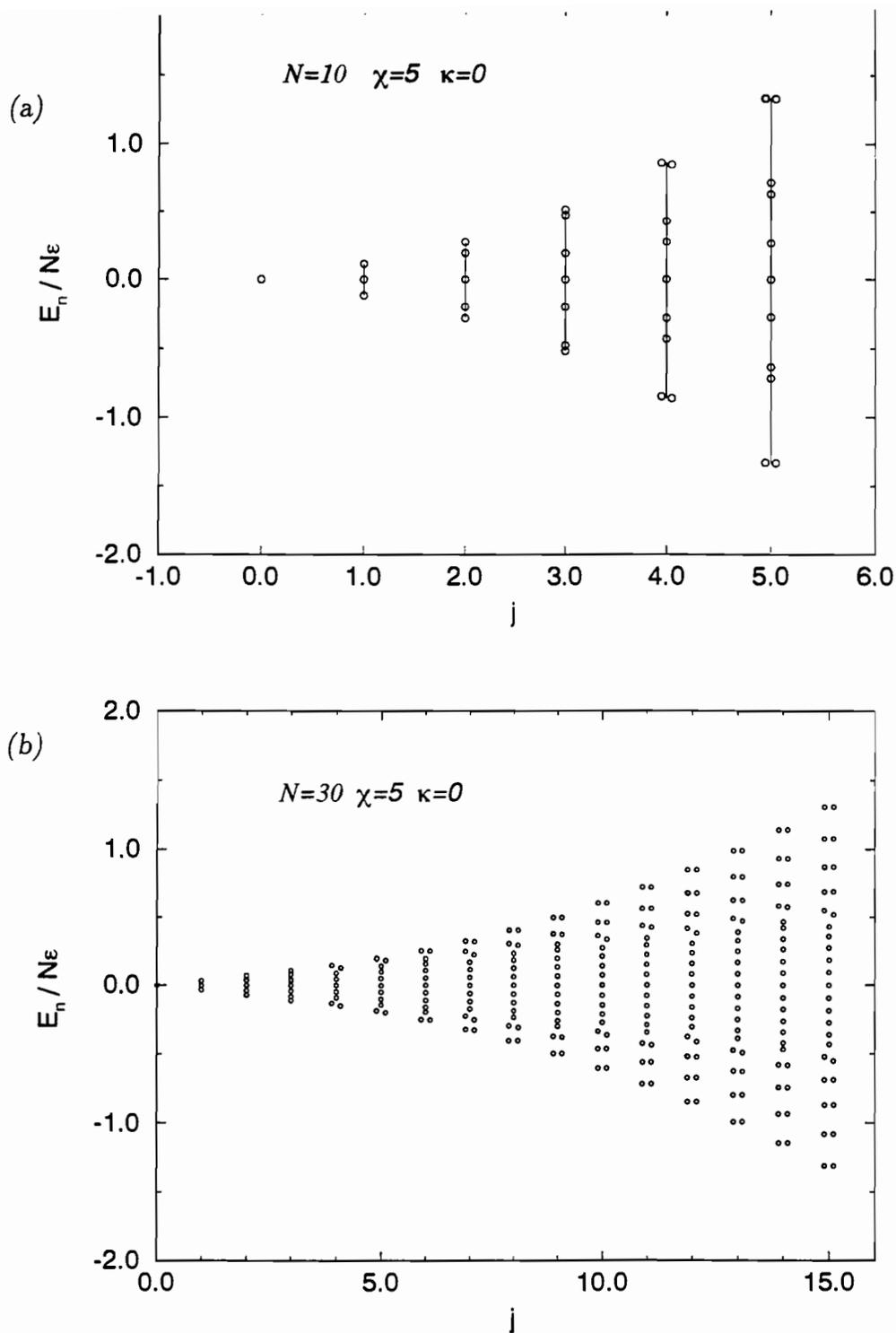


Figura 2.5: Autovalores de energia $E_n/N\epsilon$ versus j para todas as representações irredutíveis para (a) $N = 10$ e (b) $N = 30$ e parâmetros de acoplamento fixos. Note que os valores de j são todos inteiros e que autovalores de energia muito próximos foram separados horizontalmente apenas para serem visualmente distintos. Em (a) os pontos foram artificialmente unidos apenas para efeito de visualização também.

Capítulo 3

A termodinâmica do modelo

Quando tratamos sistemas com número finito de partículas, a termodinâmica do modelo é solúvel ao menos numericamente. Já para limites de grandes N , que aqui equivale ao limite clássico¹ a abordagem de campo médio torna-se exata possibilitando uma solução quase toda analítica, onde o comportamento e as características termodinâmicas são evidenciadas. Iniciamos construindo os estados de equilíbrio a partir de uma técnica variacional e logo a seguir calculamos as propriedades termodinâmicas relevantes do sistema, enfatizando o comportamento de sua transição de fase. Finalmente, comparamos estes resultados com os obtidos pelo cálculo exato para N finito, mas suficientemente grande.²

3.1 Os estados de equilíbrio

O ensemble canônico torna-se a escolha mais natural para a análise do modelo dado que o número de partículas do sistema é constante. Entretanto esta escolha não terá qualquer influência em nossos resultados, pois o limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) será tomado [15].

¹Dado que desde o princípio consideramos $\hbar = 1$, o limite clássico é obtido aqui escalando-se os valores esperados dos geradores do grupo por N e então tomando-se o limite de $N \rightarrow \infty$. Este procedimento é análogo a tomarmos $J \rightarrow \infty$, $\hbar \rightarrow 0$, $\hbar J$ finito.

²Os resultados principais deste e do próximo capítulos encontram-se publicados em [42].

A aproximação de campo médio é introduzida em nossa análise apenas na matriz densidade. Para isso definimos

$$D_0 = K \exp(-\beta h_{CM}), \quad (3.1)$$

onde K é o termo de normalização e a Hamiltoniana de campo médio tem a forma mais geral possível em termos de operadores do grupo, isto é,

$$h_{CM} = \alpha_1 J_z + \alpha_2 J_+ + \alpha_2^* J_-. \quad (3.2)$$

Dado que o grupo $SU(2)$ possui três geradores independentes, teremos três parâmetros variacionais $\{\alpha_i\}$ que serão obtidos minimizando-se a energia livre do sistema

$$\beta F = \beta Tr(D_0 H) + Tr(D_0 \ln D_0), \quad (3.3)$$

onde β relaciona-se com a temperatura como $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e k_B é a constante de Boltzmann. Note que H no primeiro termo do lado direito da equação acima é a Hamiltoniana exata (2.1).

Contudo, trabalhar com a forma diagonal da matriz densidade D_0 é tecnicamente muito mais simples e para isso definimos

$$D = U D_0 U^\dagger = K' e^{\alpha J_z} \quad \text{onde } \alpha \in \mathfrak{R}, \quad (3.4)$$

e

$$U = \exp[i(z J_+ + z^* J_-)] \quad \text{e } z \in \mathcal{C}. \quad (3.5)$$

Assim, a energia livre pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \beta F &= \beta Tr(U^\dagger D U H) + Tr(D \ln D) = \\ &= \beta Tr(D U H U^\dagger) + Tr(D \ln D). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Os parâmetros variacionais serão agora α , z e z^* e são dados em função da temperatura e dos parâmetros de interação. Calculamos então, utilizando a relação

$$e^{xA} B e^{-xA} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \underbrace{[A, [A, \dots, [A, B] \dots]]}_{n \text{ colchetes}}, \quad (3.7)$$

as quantidades:

$$\xi_1 = Tr(DU J_z U^\dagger) = Tr(DJ_z) \cos(2\sqrt{zz^*}), \quad (3.8)$$

$$\xi_2 = Tr(DU(J_+^2 + J_-^2)U^\dagger) = -[Tr(DJ_z)]^2 \frac{(N-1)}{N} \frac{z^{*2} + z^2}{zz^*} \sin^2(2\sqrt{zz^*}), \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} \xi_3 &= Tr(DU(J_+ J_- + J_- J_+)U^\dagger) = 2Tr(DJ_z) \cos(2\sqrt{zz^*}) + \\ &+ 2 \cos^4 \sqrt{zz^*} [2Tr(DJ_x^2) - Tr(DJ_z)] + \\ &+ 8 \sin^2 \sqrt{zz^*} \cos^2 \sqrt{zz^*} Tr(DJ_z^2) + 2 \sin^4 \sqrt{zz^*} [2Tr(DJ_x^2) + Tr(DJ_z)], \end{aligned} \quad (3.10)$$

e

$$\begin{aligned} \xi_4 = Tr(D \ln D) &= \alpha Tr(DJ_z) - \ln Tr(D) = \\ &= \alpha Tr(DJ_z) - N \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\alpha}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde (para detalhes de cálculo, veja Apêndice A)

$$Tr(DJ_z) = \frac{N}{2} \tanh \left(\frac{\alpha}{2} \right), \quad (3.12)$$

$$Tr(DJ_z^2) = \frac{N}{4} \left\{ (N-1) \tanh^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) + 1 \right\}, \quad (3.13)$$

$$Tr(DJ_x^2) = Tr(DJ_y^2) = \frac{N}{4}, \quad (3.14)$$

$$Tr(DJ_x) = Tr(DJ_y) = 0, \quad (3.15)$$

$$Tr(DJ_z J_i) = 0 \quad \text{para } i = x, y, +, -. \quad (3.16)$$

A energia livre portanto é dada por

$$F = \xi_1 - \frac{V}{2}\xi_2 - \frac{W}{2}\xi_3 + \frac{1}{\beta}\xi_4. \quad (3.17)$$

Analisando a dependência de F em relação ao parâmetro z , notamos que basta considerarmos a parte imaginária deste a fim de minimizarmos a energia livre para interações atrativas. O termo ξ_2 é positivo definido para z imaginário puro e negativo definido para z real. Desta forma, o termo proporcional a V sempre contribui para minimizar a energia livre, quer seja para interações atrativas (V ou $\chi > 0$), quer seja para repulsivas (V ou $\chi < 0$). Já o termo ξ_3 é positivo definido para qualquer z e portanto o termo de interação proporcional a este só contribui para minimizar F se a interação é atrativa (W ou $\kappa > 0$). Assim sendo, definimos

$$z = \theta/2i, \quad \text{onde } \theta \text{ é um número real,} \quad (3.18)$$

a partir do qual a transformação unitária U passa a ser simplesmente uma rotação de um ângulo θ em torno de J_y , isto é, $U = e^{i\theta J_y}$. Explicitamente teremos

$$U^\dagger J_x U = J_x \cos \theta - J_z \sin \theta, \quad (3.19)$$

$$U^\dagger J_y U = J_y, \quad (3.20)$$

$$U^\dagger J_z U = J_z \cos \theta + J_x \sin \theta. \quad (3.21)$$

Obtemos então a forma final da energia livre

$$F = \epsilon \cos \theta \frac{N}{2} \tanh \left(\frac{\alpha}{2} \right) - (V + W) \sin^2 \theta \frac{N}{4} (N - 1) \tanh^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) + \frac{\alpha N}{2\beta} \tanh \left(\frac{\alpha}{2} \right) - \frac{N}{\beta} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\alpha}{2} \right) \right] - \frac{WN}{2}. \quad (3.22)$$

Consideramos pois que esta expressão escala com N após substituirmos V e W por χ e κ respectivamente. Chegamos assim a energia livre por partícula no limite de $N \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \bar{F} = \frac{F}{N} = & \epsilon \frac{\cos \theta}{2} \tanh \left(\frac{\alpha}{2} \right) - \frac{\epsilon(\chi + \kappa)}{4} \sin^2 \theta \tanh^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) + \\ & + \frac{\alpha}{2\beta} \tanh \left(\frac{\alpha}{2} \right) - \frac{1}{\beta} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\alpha}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Minimizamos-a em relação a α e θ

$$\frac{\partial F}{\partial \theta} = -\epsilon \sin \theta \frac{N}{2} \tanh \left(\frac{\alpha}{2} \right) - \epsilon(\chi + \kappa) \sin \theta \cos \theta \frac{N}{2} \tanh^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) = 0, \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha} = \frac{N}{4} \left\{ \epsilon \cos \theta - \epsilon(\chi + \kappa) \sin^2 \theta \tanh^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) + \frac{\alpha}{\beta} \right\} \cosh^{-2} \left(\frac{\alpha}{2} \right) = 0, \quad (3.25)$$

encontramos duas soluções que correspondem a duas fases respectivamente:

Fase Normal:

$$\theta = 0, \quad (3.26)$$

$$\alpha = -\beta\epsilon, \quad (3.27)$$

Fase deformada:

$$\cos \theta = -\frac{\beta\epsilon}{\alpha}, \quad (3.28)$$

$$\alpha = (\chi + \kappa)\beta\epsilon \tanh \left(\frac{\alpha}{2} \right). \quad (3.29)$$

A solução normal não depende absolutamente de χ e κ , portanto sendo um extremo da energia livre para qualquer intensidade de interação e temperatura. Para $\beta < \beta_{cr}$ é um máximo de F , passando a ser um mínimo, como veremos, quando a solução deformada inexistente ($\beta > \beta_{cr}$). Corresponde a situação onde a interação não tem qualquer papel e o sistema se comporta como o de partículas independentes. Substituindo (3.26) e (3.27) em (3.4) verificamos que a matriz densidade $D_0 = K e^{-\beta(\epsilon J_x)} = K e^{-\beta H_0}$, ou seja, a Hamiltoniana de campo médio resume-se precisamente ao termo livre da Hamiltoniana exata.

As soluções das equações transcendentais (3.28) e (3.29) são encontradas numericamente e apresentadas em função de β para dois valores de $(\chi + \kappa)$ na figura 3.1.

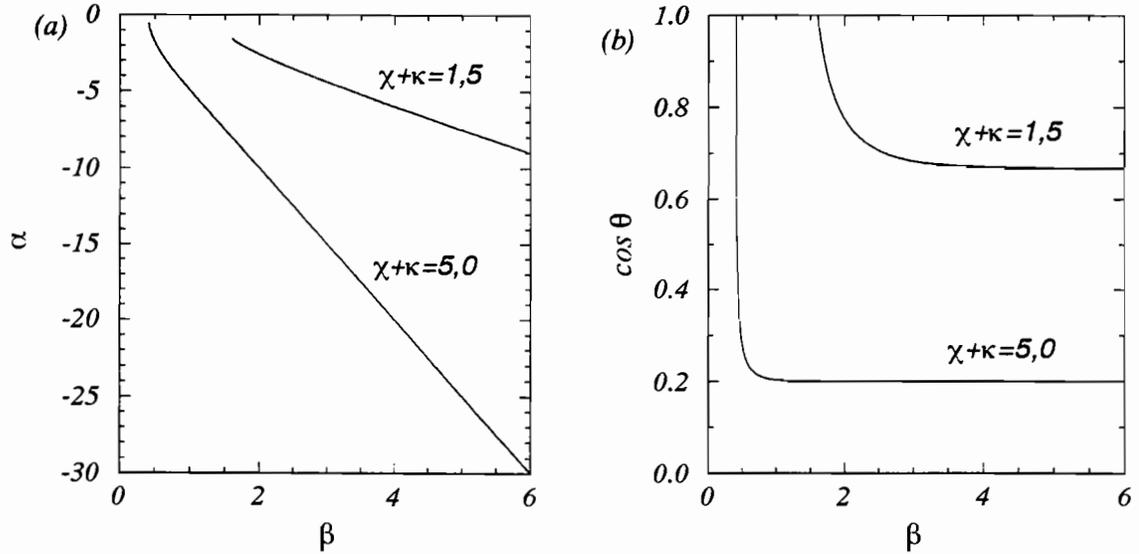


Figura 3.1: Relação entre os parâmetros variacionais α (a) e θ (b) e o inverso da temperatura do sistema β na fase deformada para dois valores da soma dos parâmetros de interação $(\chi + \kappa)$. Note que esta fase só existe para $(\chi + \kappa) \leq 1$.

Também a partir destas equações, vemos que para que a solução deformada exista, algumas condições devem ser satisfeitas:

$$\chi + \kappa \geq 1 \quad \text{e} \quad 0 \leq T \leq T_{cr}, \quad (3.30)$$

onde T_{cr} é a temperatura de transição de fase. Esta ocorre na situação crítica onde $\theta = 0$ e é dada pela equação

$$\beta_{cr} = \frac{2}{\epsilon} \arg \tanh \left(\frac{1}{\chi + \kappa} \right). \quad (3.31)$$

A relação entre β_{cr} e $\chi + \kappa$ é mostrada na figura 3.2 para $\epsilon = 1$. Vale lembrar que estamos considerando apenas interações atrativas.

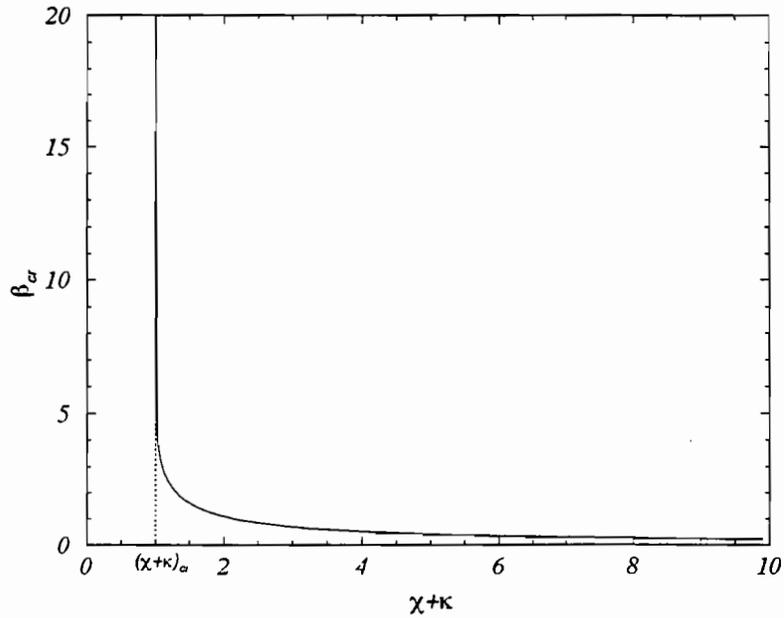


Figura 3.2: A temperatura crítica inversa, onde ocorre a transição de fase, como função da soma dos parâmetros de interação $(\chi + \kappa)$. O valor crítico $(\chi + \kappa) = 1$ é indicado. A região acima da curva corresponde à fase deformada, enquanto que a inferior e a esquerda à fase normal.

Esta transição de fase também foi encontrada nas análises de R.Gilmore e D.H.Feng [29, 30] onde o problema é abordado dentro do contexto da teoria de catástrofes.

3.2 Propriedades termodinâmicas

Além da energia livre (eq.(3.23)), podemos calcular as seguintes quantidades termodinâmicas de interesse do sistema em função da temperatura para o estado de equilíbrio:

A energia interna

$$\bar{E} = \frac{Tr(DH')}{N\epsilon} = \frac{\cos \theta}{2} \tanh \left(\frac{\alpha}{2} \right) - \frac{(\chi + \kappa)}{4} \sin^2 \theta \tanh^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right), \quad (3.32)$$

A entropia

$$\bar{S} = \frac{S}{k_B N} = -\frac{\text{Tr}(D \ln D)}{N} = -\frac{\alpha}{2} \tanh\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \ln \left[2 \cosh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right], \quad (3.33)$$

A média do operador J_z

$$\langle J_z \rangle = \frac{\text{Tr}(DUJ_zU^\dagger)}{N} = \frac{\cos \theta}{2} \tanh\left(\frac{\alpha}{2}\right), \quad (3.34)$$

O calor específico do sistema

$$C = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{k_B \epsilon \beta^2}{4 \cosh^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)} \left\{ 1 - (\chi + \kappa) \frac{\sin^2 \theta}{\cos \theta} \tanh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right\}. \quad (3.35)$$

As quatro primeiras quantidades são mostradas nas figuras 3.3 (a-d) para $\chi + \kappa = 1, 5$ e 3.4 (a-d) para $\chi + \kappa = 5, 0$. Para $\beta \geq \beta_{cr}$, as linhas cheias correspondem à solução deformada, enquanto que as tracejadas à solução normal. Para $\beta \leq \beta_{cr}$, a solução deformada deixa de existir e a solução normal passa a ser a solução física sendo agora representada por linhas cheias. Exceto a energia livre, na temperatura crítica há uma variação abrupta, porém contínua destas médias. As figuras 3.3 (d) e 3.4(d) apresentam o valor médio de J_z , que nada mais é que a metade da média da diferença das populações do nível superior e inferior. Para a fase deformada, o estado fundamental a temperatura nula tem ambos os níveis populados em contraste com a solução normal. À medida que a temperatura cresce, as médias das populações são mantidas constantes até que a temperatura crítica é atingida, a partir da qual a interação deixa de ter qualquer papel. Isto ilustra que o sistema tem um comportamento coletivo na primeira situação, passando a assumir o carácter de um sistema de partículas independentes para temperaturas suficientemente altas. As figuras 3.4 evidenciam a troca de papéis entre temperatura e interação com a transição de fase. Ao longo de grande parte da fase deformada, os valores médios permanecem constantes devido a interação prevalecer sobre os efeitos térmicos. Nas proximidades de β_{cr} , há

uma variação mais acentuada que em relação às figuras 3.3 (a) e (b) em direção às curvas da solução normal, quando a temperatura passa a dominar em relação a interação. Cabe salientar ainda que observando a eq.(3.31), notamos que a temperatura nula, o sistema apresenta uma transição de fase para $\chi + \kappa = 1$, que será abordada na análise da dinâmica clássica a temperatura finita e que também se manifesta no espectro quântico como foi mostrado no capítulo anterior.

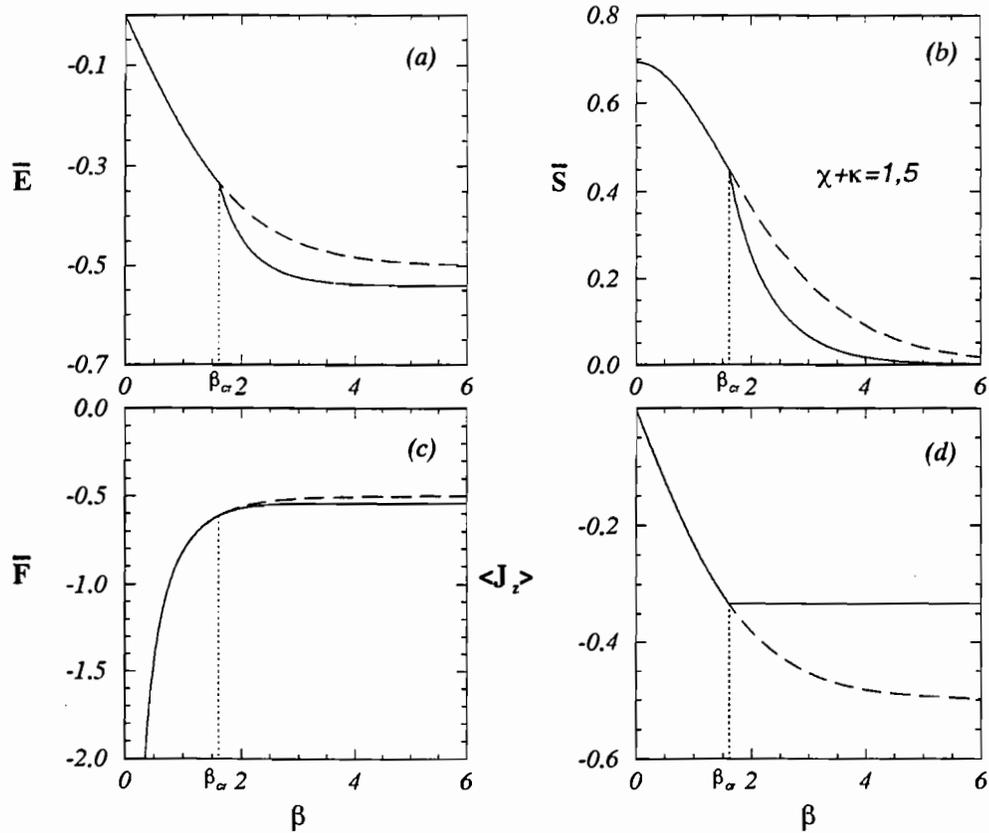


Figura 3.3: Energia interna \bar{E} (a), entropia \bar{S} (b), energia livre \bar{F} (c) e o valor médio de J_z (d) como função do inverso da temperatura para $\chi + \kappa = 1,5$. A temperatura de transição de fase β_{cr} é indicada pelas linhas pontilhadas e separa a fase deformada (à direita) da fase normal (à esquerda). As linhas tracejadas correspondem à solução normal cujas formas não dependem dos parâmetros de interação, sendo um máximo da energia livre para $\chi + \kappa \geq 1,0$ e $\beta \geq \beta_{cr}$. Para a situação onde não há transição de fase ($\chi + \kappa \leq 1,0$) é a única solução de equilíbrio.

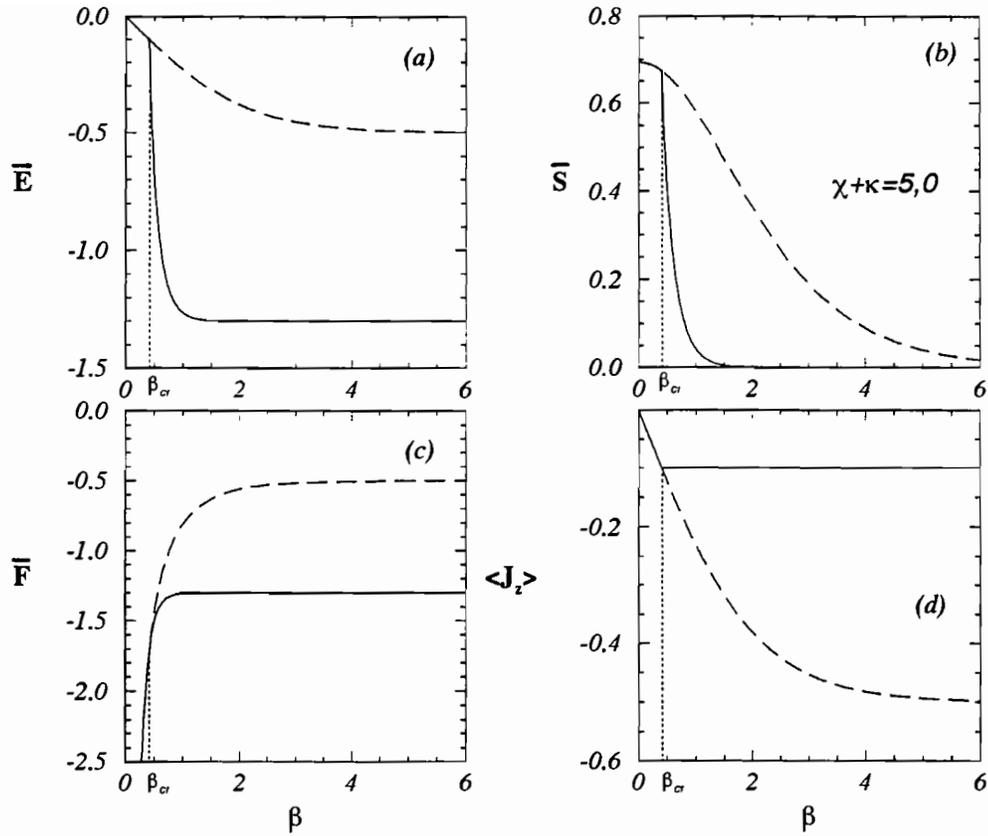


Figura 3.4: Mesmas grandezas apresentadas na figura anterior: energia interna \bar{E} (a), entropia \bar{S} (b), energia livre \bar{F} (c) e o valor médio de J_z (d) versus β para $\chi + \kappa = 5,0$. Note que nas proximidades de β_{cr} as variações em (a) e (b) ocorrem mais abruptamente que em 3.3 (a) e 3.3 (b).

A transição de fase de segunda ordem é evidenciada pelas figuras 3.5 onde o calor específico é apresentado para três valores de $\chi + \kappa$ em função do inverso da temperatura. À proporção que o parâmetro de interação cresce, a temperatura crítica também cresce.

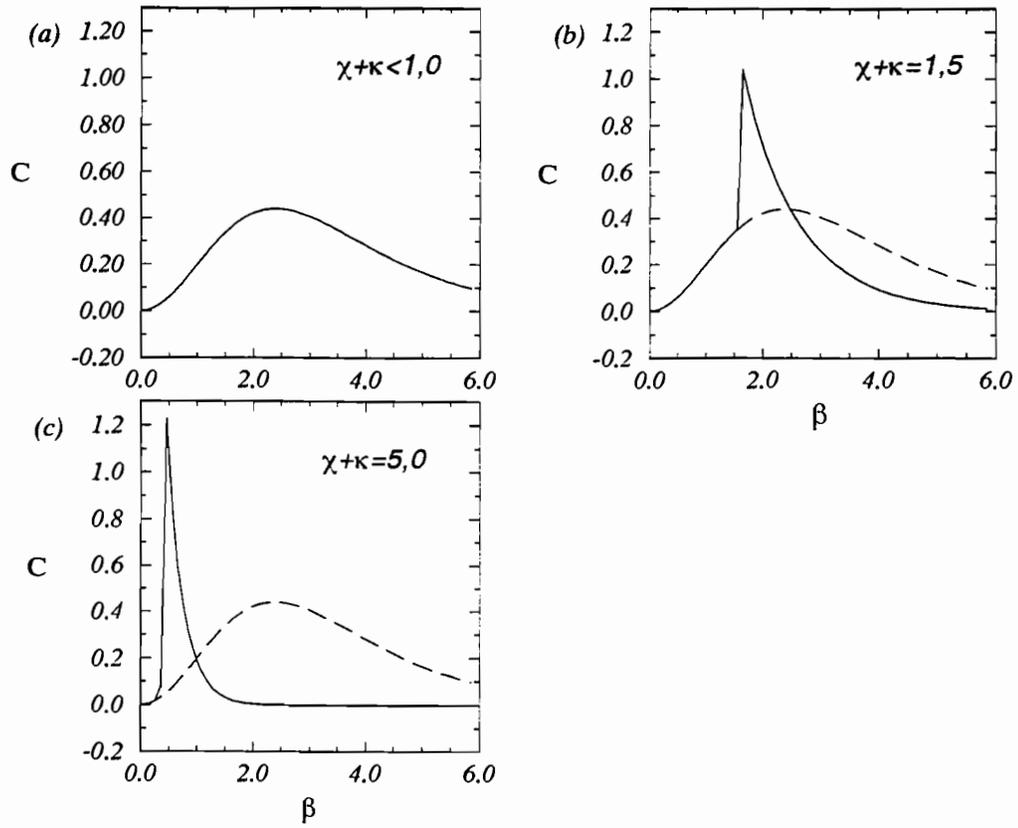


Figura 3.5: Calor específico do sistema como função do inverso da temperatura para (a) $(\chi + \kappa) < 1,0$, (b) $(\chi + \kappa) = 1,5$ e (c) $(\chi + \kappa) = 5,0$. As linhas tracejadas correspondem a solução normal.

Escolhemos como parâmetro de ordem do sistema o valor médio de $J_x = (J_+ + J_-)/2$. Dado que os valores médios de J_+ e J_- têm os mesmos valores para a solução de equilíbrio, esta quantidade reduz-se a

$$\frac{\langle J_x \rangle}{N} = \frac{\text{Tr}(DUJ_+U^\dagger)}{N} = \frac{\text{Tr}(DUJ_-U^\dagger)}{N} = \frac{\sin \theta}{2} \tanh\left(\frac{\alpha}{2}\right), \quad (3.36)$$

e é apresentado na figura 3.6(a). A física refletida por este novamente refere-se a quebra do papel do termo de interação da dinâmica pela temperatura, ou seja, após a transição de fase a interação passa a não ter qualquer participação na definição das populações dos níveis do estado de equilíbrio (que são definidas pelos efeitos térmicos, isto é entropia). Note que na fase normal, os valores médios dos operadores de transição anulam-se.

Outra quantidade de interesse é o valor médio do operador de Casimir do grupo, J^2 , dado por

$$\text{Tr}(DUJ^2U^\dagger) = \frac{N}{4} \left\{ (N-1) \tanh^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + 3 \right\}. \quad (3.37)$$

Escalando-o por N^2 e então tomando-se o limite de grandes N , obtemos

$$\frac{\langle J^2 \rangle}{N^2} = \frac{1}{4} \tanh^2\left(\frac{\alpha}{2}\right). \quad (3.38)$$

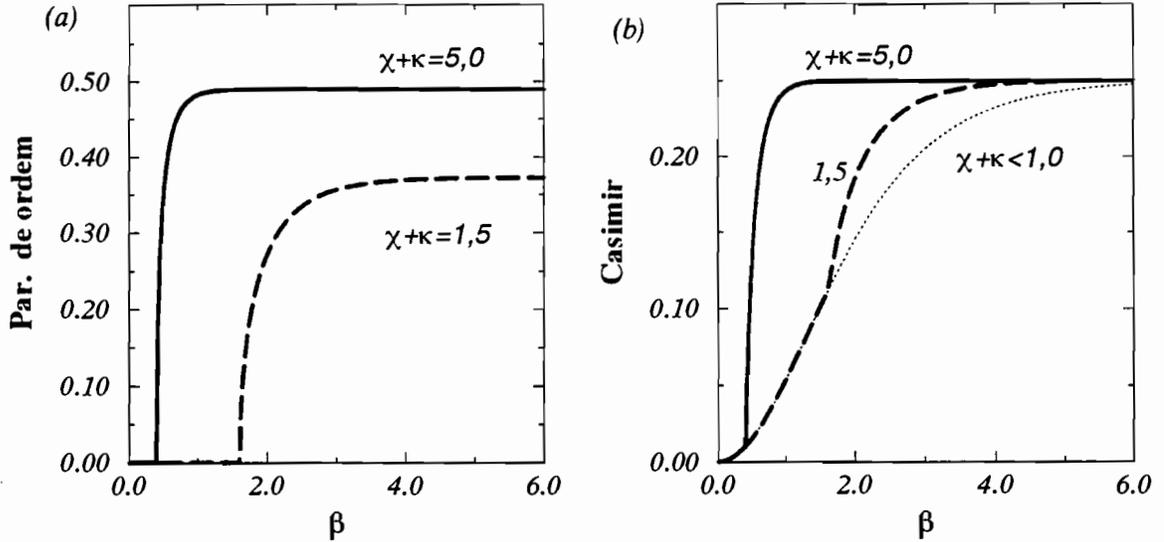


Figura 3.6: *Parâmetro de ordem do sistema (a) e valor médio do operador de Casimir escalado por N^2 (b) em função de β para $(\chi + \kappa) = 1,5$ (linhas tracejadas), $(\chi + \kappa) = 5,0$ (linhas sólidas) e $(\chi + \kappa) < 1$ (linhas pontilhadas).*

Observamos que o valor médio do operador de Casimir não é constante, mas sim depende da temperatura como ilustra a figura 3.6(b). Do ponto de vista quântico, isto é um reflexo do efeito térmico que mistura estados de representações irredutíveis diferentes, o que não é possível à dinâmica, nem tão pouco à estrutura algébrica na qual ela é descrita. Tomando o limite de temperatura nula da expressão não escalada (3.37), obtemos que o $\langle J^2 \rangle$ de equilíbrio corresponde ao da representação irredutível simétrica, ou seja $N/2(N/2 + 1)$. Outro fato a ser ressaltado é que a raiz quadrada da expressão acima é igual ao $\text{Tr}(DJ_z)/N$ e como veremos no próximo capítulo é o termo que dará toda a informação a respeito da temperatura na dinâmica clássica térmica.

A seguir, a termodinâmica exata é obtida e comparada com os resultados de campo médio.

3.3 Cálculo termodinâmico exato

Como vimos no capítulo anterior, o espaço de Hilbert de dimensão 2^N decompõe-se em subespaços invariantes de dimensão $2j + 1$ cujos estados não são misturados pela dinâmica quântica. Os operadores da álgebra $SU(2)$ com os quais a Hamiltoniana é contruída agem somente em cada um destes subespaços invariantes. O maior destes subespaços corresponde a $j = \frac{N}{2}$ e possui $N + 1$ estados simétricos. O subsequente corresponde a $j = \frac{N}{2} - 1$ de dimensão $N - 1$. Este e todos os outros são constituídos de estados anti-simétricos e podem ser múltiplos, ou seja, existem outros subespaços formados por outros estados anti-simétricos, mas que possuem os mesmos autovalores de energia e mesma dimensão (a multiplicidade é dada pela eq.(3.40)). Decrementando j de uma unidade consecutivamente, varremos todas as representações irredutíveis existentes até alcançarmos o valor 0 ou $\frac{1}{2}$ para j .

Sendo assim podemos calcular a função partição a partir de

$$Z = \text{Tr}(\exp(-\beta\hat{H})) = \sum_{j=0 \text{ ou } \frac{1}{2}}^{\frac{N}{2}} Y(N, j) \text{Tr}_j(\exp(-\beta\hat{H})), \quad (3.39)$$

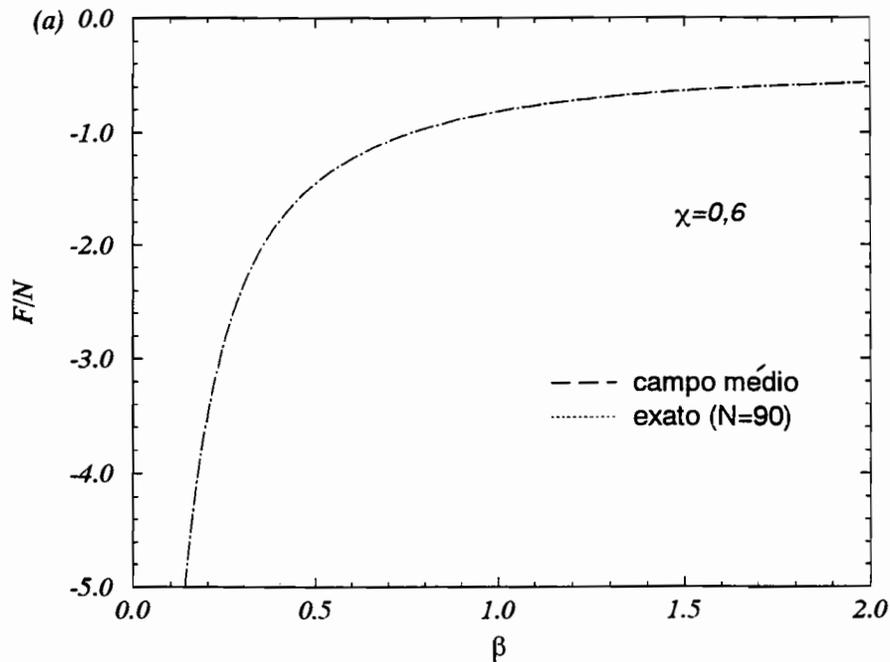
onde Tr_j refere-se a soma restrita a cada subespaço invariante j de dimensão $(2j + 1)$ e $Y(N, j)$ é o fator de multiplicidade de ocorrência do subespaço invariante j no espaço de Hilbert de dimensão 2^N dado por

$$Y(N, j) = \binom{N}{\frac{N}{2} - j} - \binom{N}{\frac{N}{2} - j - 1} = \frac{(2j + 1) N!}{\left(\frac{N}{2} + j + 1\right)! \left(\frac{N}{2} - j\right)!} . \quad (3.40)$$

Apresentamos uma possível dedução desta expressão, que também é utilizada nas ref. [9, 29], no Apêndice B.

Verificamos a dependência dos resultados em função do número de partículas N e do parâmetro de acoplamento χ , mantendo κ nulo para facilitar a análise. Para $\chi = 0,6$ os resultados exato ($N = 90$ partículas) e de campo médio estão em ótima concordância quase não sendo distinguíveis visualmente nas curvas da energia livre F/N ($\epsilon = 1$), energia interna $E/N\epsilon$ e entropia S/N apresentadas nas Figs. 3.7 (a),(b) e (c).

Para $\chi = 6,0$, os resultados estão nas figuras 3.8 (a),(b) e (c) (energia livre, energia interna e entropia respectivamente) sendo possível notar o limite assintótico de grandes N , isto é, à medida que N cresce as curvas exatas vão em direção às de campo médio, como esperado. Entretanto, as curvas para $N = 90$ já não apresentam a ótima concordância com os resultados de campo médio como as obtidas para $\chi = 0,6$, pois são visualmente distintas. Devemos lembrar que as não analiticidades encontradas nas curvas de campo médio são resultados de efeitos de muitos corpos, ocorrendo nas curvas exatas somente no limite de $N \rightarrow \infty$.



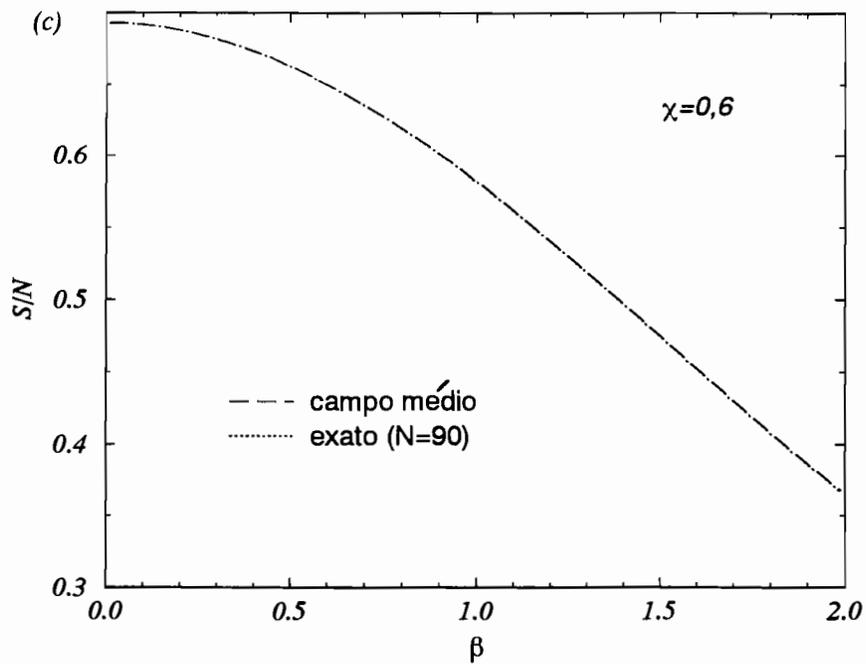
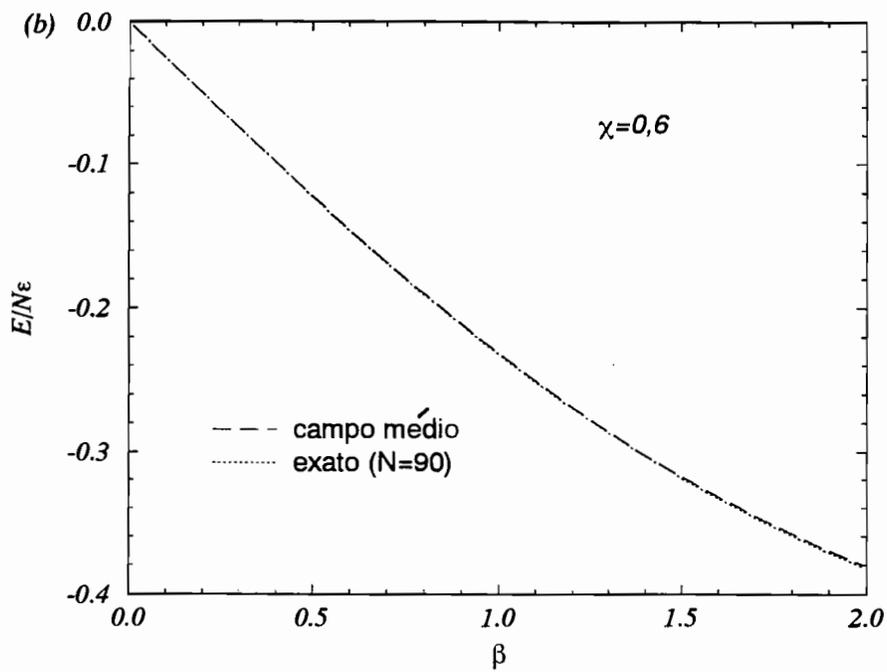
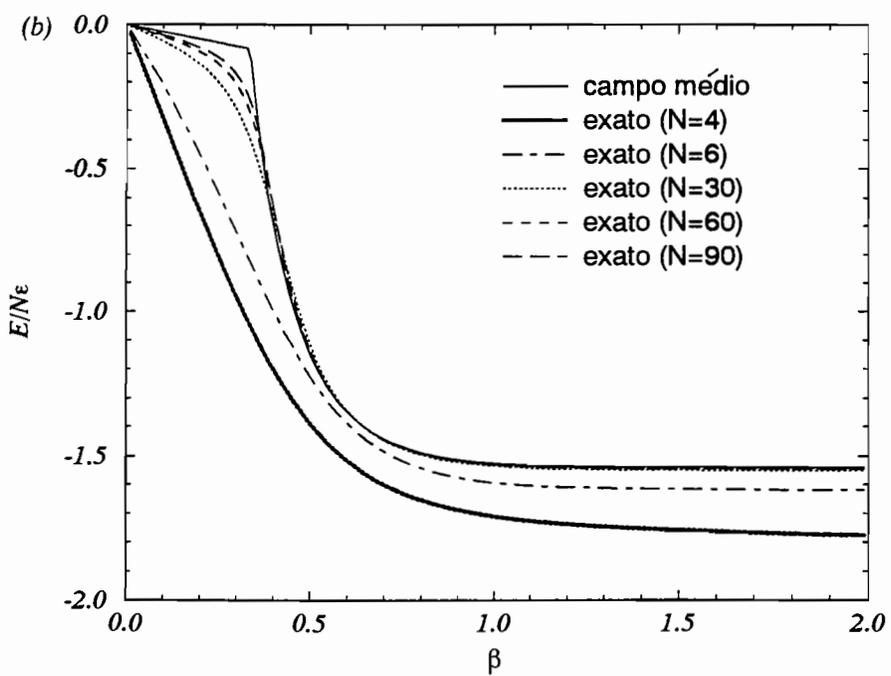
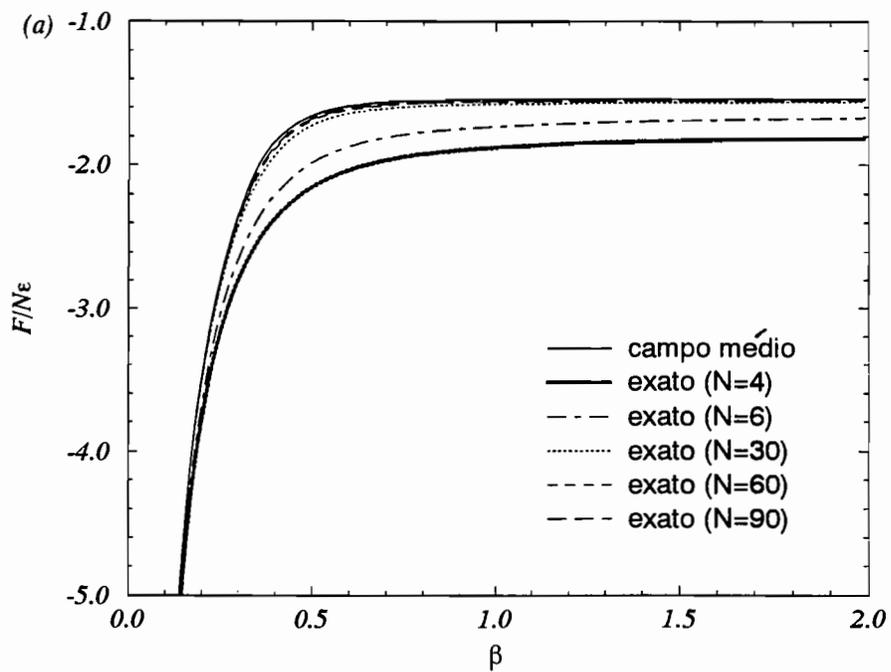


Figura 3.7: Comparação entre os resultados de campo médio e exato para 90 partículas para $\chi = 0,6$. Temos em (a) a energia livre F/N , em (b) a energia interna $E/N\epsilon$ e em (c) a entropia S/N como função do inverso da temperatura. Note a ótima concordância entre os resultados.



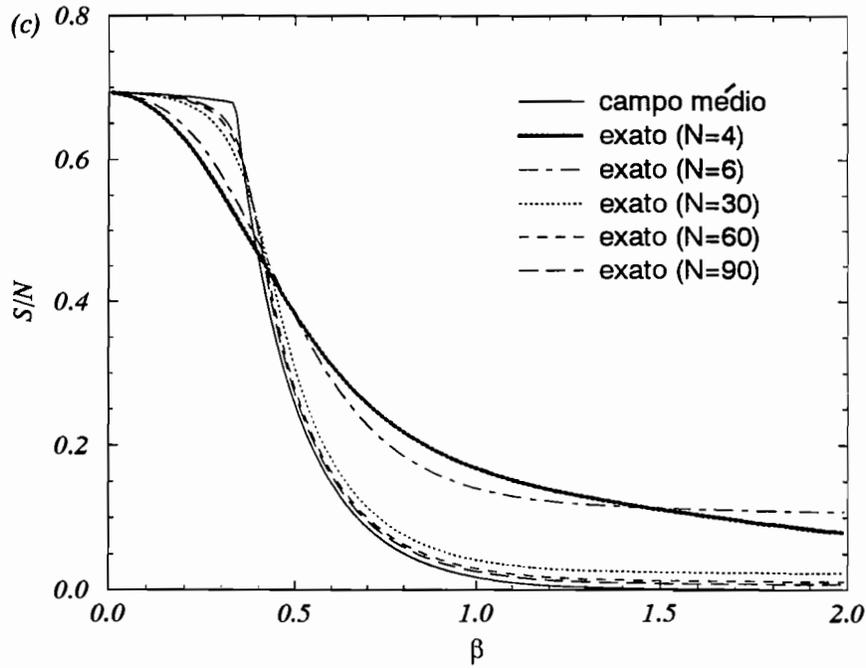


Figura 3.8: Comparação entre os resultados de campo médio e exato para 4, 6, 30, 60 e 90 partículas para $\chi = 6,0$. Note que as curvas exatas tendem às de campo médio à medida que N cresce.

Outro ponto interessante é verificar a participação das representações irredutíveis (RI) nas médias estatísticas. Para isso graficamos os valores de

$$\frac{1}{Z} \text{Tr}_j(\exp(-\beta \hat{H})) \quad X \quad \beta, \quad (3.41)$$

(note que a soma é realizada para os autovalores de determinada RI e a função partição Z calculada para todos os 2^N estados).

Para 4 e 6 partículas temos respectivamente 3 e 4 representações irredutíveis. Suas probabilidades para $\chi = 6,0$ como função do inverso da temperatura são das formas apresentadas nas Figs. 3.9 (a) e (b).

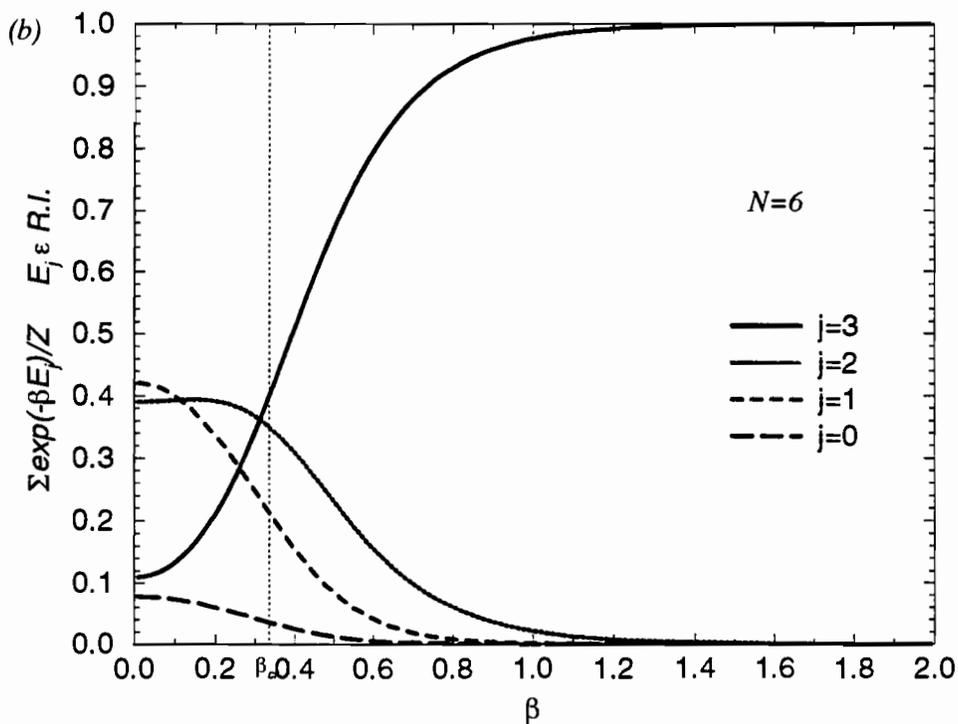
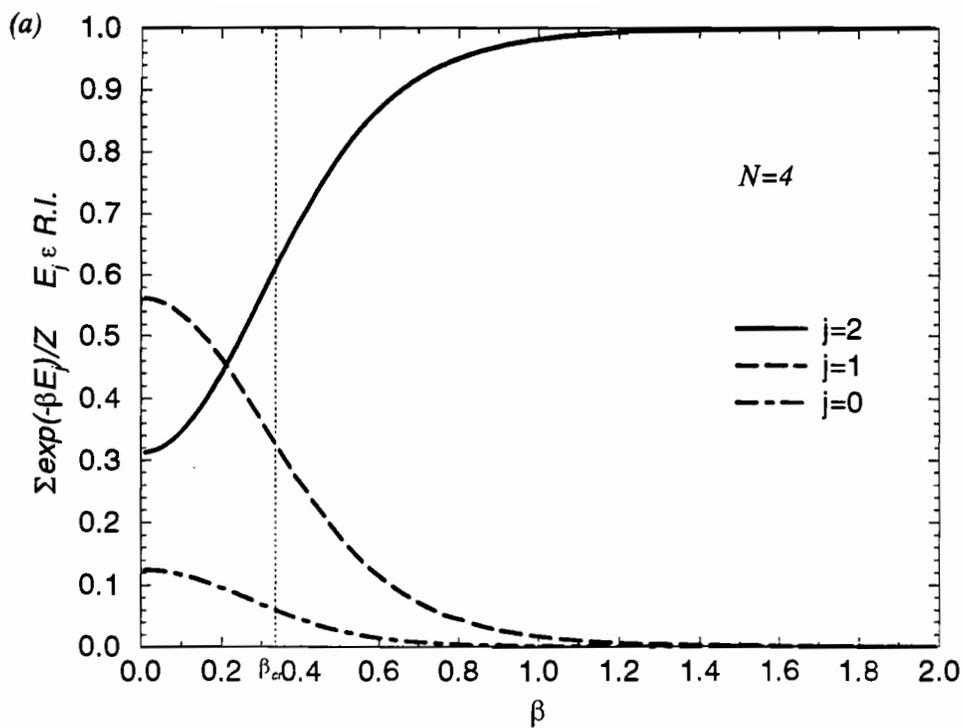


Figura 3.9: Participação das representações irredutíveis nas médias estatísticas para (a) 4 e (b) 6 partículas e $\chi = 6,0$. As linhas pontilhadas indicam a temperatura de transição de fase, enquanto que as outras, conforme as legendas, correspondem aos diferentes multipletos.

Para 30, 60 e 90 partículas temos muitas RI e só graficamos as probabilidades das dez primeiras nas figuras 3.10.

Notamos que à proporção que N cresce, as representações irredutíveis anti-simétricas passam a contribuir para as médias estatísticas a temperaturas menores (β maiores). Em 3.9 (a) e (b), a representação irredutível $j = (N/2-1)$ tem um papel relevante para β da ordem ou menor que β_{cr} . Já em 3.10, vemos que em sistemas de muitas partículas esta representação tem uma participação expressiva para $\beta > \beta_{cr}$. Esta verificação torna-se trivial quando observamos a figura 2.5, onde a distância entre o estado de menor energia das representações anti-simétricas e o estado fundamental, pertencente a representação simétrica, diminui com o crescimento de N . Contudo, devemos ainda observar que o valor médio do operador de Casimir de campo médio apresentado em função de β na figura 3.6 (b) indica que mesmo no limite de N infinito, a temperaturas suficientemente baixas, a contribuição das representações anti-simétricas é desprezível. Estas representações começam a ter uma participação significativa somente em um intervalo de temperatura um pouco inferior a temperatura crítica. Consistentemente, neste intervalo de temperatura há um crescimento abrupto da entropia do sistema, como vimos na figura 3.4 (b).

Para $\chi = 0,6$ é possível notar que as RI anti-simétricas passam a ter maiores contribuições às médias estatísticas a temperaturas menores (β maiores) que para $\chi = 6,0$. Veja fig. 3.11.

Isto ilustra, dentro do contexto quântico (N finito), a competição entre o termo de acoplamento da dinâmica e os efeitos térmicos. A temperatura mistura estados de RI diferentes, quebrando a estrutura do grupo $SU(2)$ o que fisicamente significa minorar o papel da dinâmica.

Como veremos a seguir, esta competição também tem um papel primordial na dinâmica clássica a temperatura finita que é o objeto de estudo do próximo capítulo.

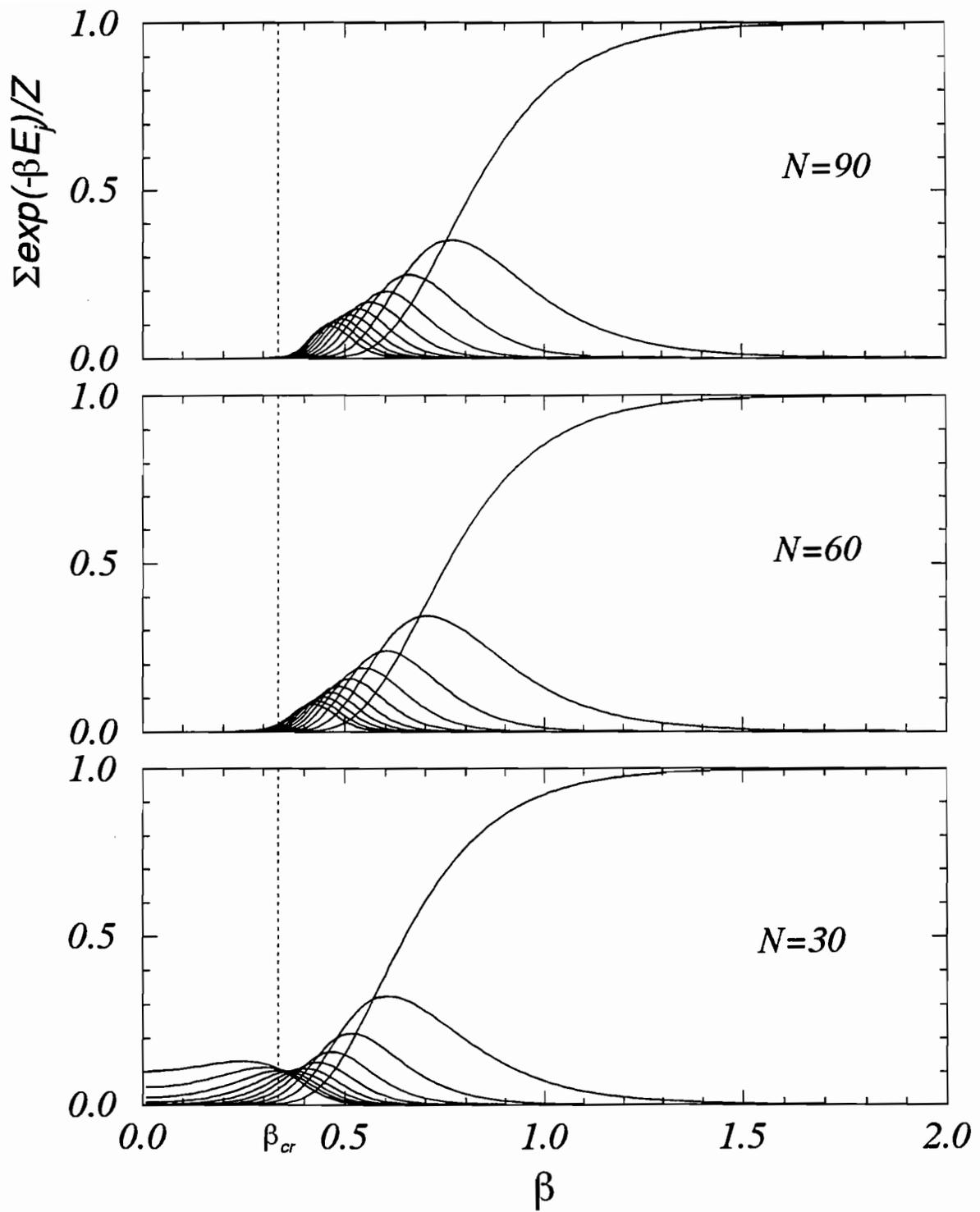


Figura 3.10: Participação das dez primeiras representações irredutíveis (de $j = N/2$ à $j = (N/2 - 9)$ da direita para a esquerda) nas médias estatísticas para 90, 60 e 30 partículas e $\chi = 6,0$. As linhas pontilhadas indicam a temperatura de transição de fase.

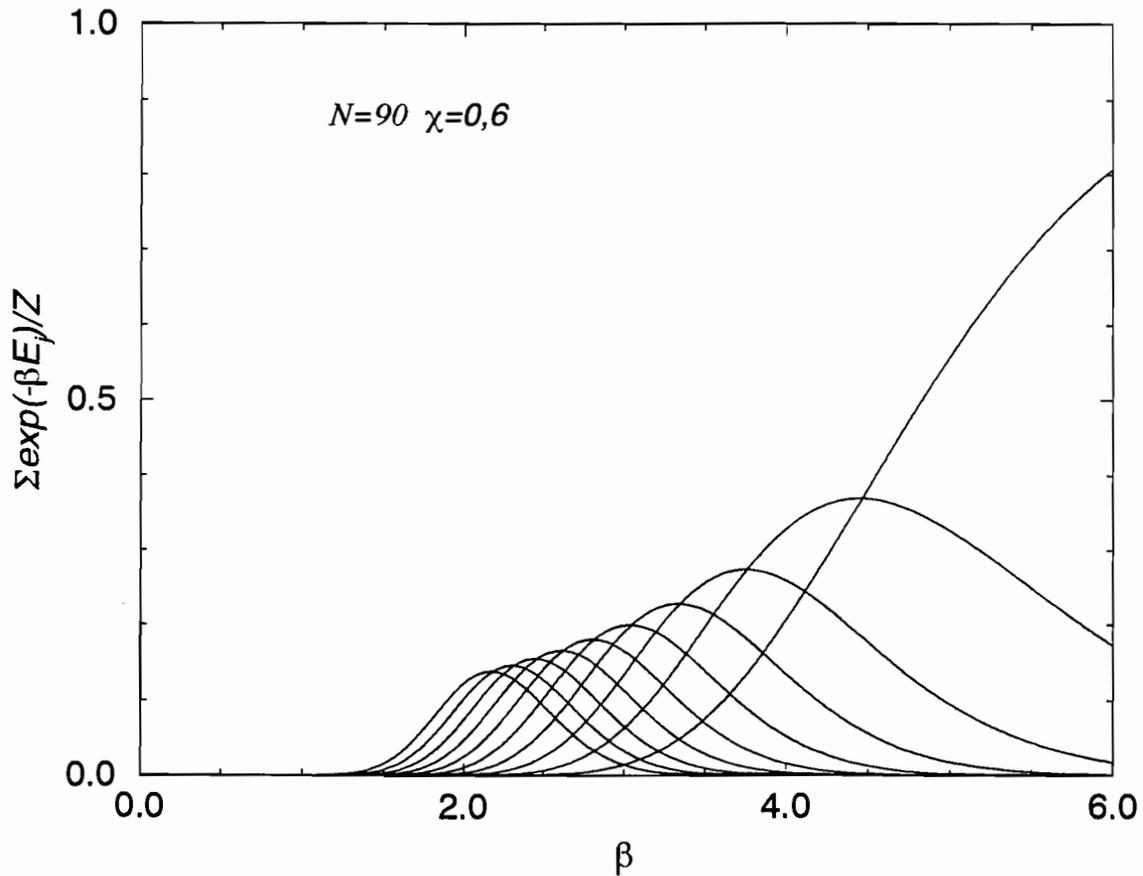


Figura 3.11: Participação das dez primeiras representações irreduzíveis (de $j = N/2$ à $j = (N/2 - 9)$ da direita para a esquerda) para 90 partículas e $\chi = 0,6$. Note que a escala das abscissas foram alteradas em relação à figura anterior e que as representações irreduzíveis anti-simétrica passam a contribuir para as médias estatísticas a uma temperatura bem menor que no caso de $\chi = 6,0$.

Capítulo 4

Dinâmica clássica a temperatura finita do modelo

Deduzimos aqui a dinâmica clássica conservativa a temperatura finita do modelo, utilizando a abordagem geral válida para todos os sistemas descritos em termos de geradores de grupos de Lie descrita no primeiro capítulo.

4.1 Variáveis canônicas e equações de movimento

Começamos construindo a Lagrangiana térmica do sistema ($\hbar = 1$)

$$L = iTr(DU\dot{U}^\dagger) - Tr(DUHU^\dagger), \quad (4.1)$$

onde D é a matriz densidade diagonal de equilíbrio (eq.(3.4)) e U tem a mesma forma do capítulo anterior, mas os parâmetros agora são dependentes do tempo, ou seja

$$U = \exp [i(z(t)J_+ + z^*(t)J_-)]. \quad (4.2)$$

O segundo termo do lado direito da equação (4.1) já foi calculado na análise estática e suas parcelas estão apresentadas nas equações (3.8)-(3.10). A fim de obtermos a expressão explícita de L , portanto resta-nos calcular

$$Tr(DU\dot{U}^\dagger) = -\frac{(z\dot{z}^* - \dot{z}z^*)}{zz^*} (-\bar{J}_z) \sin^2 \sqrt{zz^*} \quad (4.3)$$

com

$$\bar{J}_z = Tr(DJ_z) = \frac{N}{2} \tanh\left(\frac{\alpha}{2}\right). \quad (4.4)$$

A seguir devemos procurar por um par de variáveis canonicamente conjugadas, haja visto que z e z^* não o são. Para isso, inspecionando a expressão anterior vemos que

$$\delta = z (-2\bar{J}_z)^{1/2} \frac{\sin \sqrt{zz^*}}{\sqrt{zz^*}} \quad (4.5)$$

$$\delta^* = z^* (-2\bar{J}_z)^{1/2} \frac{\sin \sqrt{zz^*}}{\sqrt{zz^*}} \quad (4.6)$$

é uma possível escolha para esse par canônico. Em termos de δ e δ^* a Lagrangiana passa a ser escrita como

$$L = \frac{i}{2}(\dot{\delta}\delta^* - \delta\dot{\delta}^*) - H(\delta, \delta^*), \quad (4.7)$$

onde a Hamiltoniana é

$$H(\delta, \delta^*) = \epsilon(\bar{J}_z + \delta\delta^*) - \frac{1}{2} \frac{\epsilon\chi}{(N-1)} (\delta^2 + \delta^{*2})(2\bar{J}_z + \delta\delta^*) - \frac{\epsilon\kappa}{(N-1)} H_3 \quad (4.8)$$

e

$$\begin{aligned} H_3 = \bar{J}_z + \delta\delta^* + \left(1 + \frac{\delta\delta^*}{2\bar{J}_z}\right)^2 (2\bar{J}_z^2 - \bar{J}_z) - 4 \left(\frac{\delta\delta^*}{2\bar{J}_z}\right) \left(1 + \frac{\delta\delta^*}{2\bar{J}_z}\right) \bar{J}_z^2 + \\ + \left(\frac{\delta\delta^*}{2\bar{J}_z}\right)^2 (2\bar{J}_z^2 + \bar{J}_z), \end{aligned} \quad (4.9)$$

lembrando que $\bar{J}_z^2 = Tr(DJ_z^2) = N/4$ foi calculado no capítulo anterior.

Os valores permitidos para $\delta\delta^*$ são encontrados a partir da expressão (4.5), impondo-se a condição de existência para

$$\sin^2 \sqrt{zz^*} = -\frac{\delta\delta^*}{2\bar{J}_z}, \quad (4.10)$$

ou seja, que o lado direito desta equação tenha valores no intervalo $[0, 1]$. Assim obtemos que

$$0 \leq \delta\delta^* \leq -2\bar{J}_z. \quad (4.11)$$

Propomos agora novas variáveis, desta vez reais, e que, como veremos, constituem-se as variáveis de ação e ângulo da Hamiltoniana quando χ é nulo. Se relacionam as anteriores através da transformação canônica

$$\delta = \sqrt{-\bar{J}_z + I} e^{i\theta} \quad (4.12)$$

$$\delta^* = \sqrt{-\bar{J}_z + I} e^{-i\theta} \quad (4.13)$$

onde $\bar{J}_z \leq I \leq -\bar{J}_z$ e $-\pi \leq \theta \leq \pi$.

Finalmente, a Hamiltoniana escalada por $N/2$ em termos dessas variáveis é expressa por

$$E = \frac{H}{\epsilon N/2} = \eta + \frac{1}{2}(T_h^2 - \eta^2)(\chi \cos(2\theta) - \kappa), \quad (4.14)$$

onde $\eta = \frac{I}{N/2}$, $T_h = \frac{J_z}{N/2} = \tanh\left(\frac{\alpha}{2}\right)$ e os limites do espaço de fase são determinados por

$$T_h \leq \eta \leq -T_h, \quad (4.15)$$

e

$$-\pi \leq \theta \leq \pi. \quad (4.16)$$

Devido ao sistema quântico possuir um espaço de Hilbert finito, seu análogo clássico possui um espaço de fase compacto. O efeito da temperatura, na representação de (η, θ) , é produzir um “encolhimento” dos limites deste espaço de fase

proporcional a T_h , que por sua vez é função do inverso da temperatura como mostram as figuras 4.1. Em 4.1 (a) e (b), os valores de $\chi + \kappa$ são respectivamente 1,5 e 5,0. As linhas tracejadas correspondem ao sistema de interação nula, ou seja, a solução normal. Vemos que no limite de temperatura nula, $T_h = -1,0$, e recuperamos o resultado conhecido na literatura obtido através de estados coerentes[29, 24, 30] ou através da aproximação de Hartree-Fock dependente do tempo [31, 32].

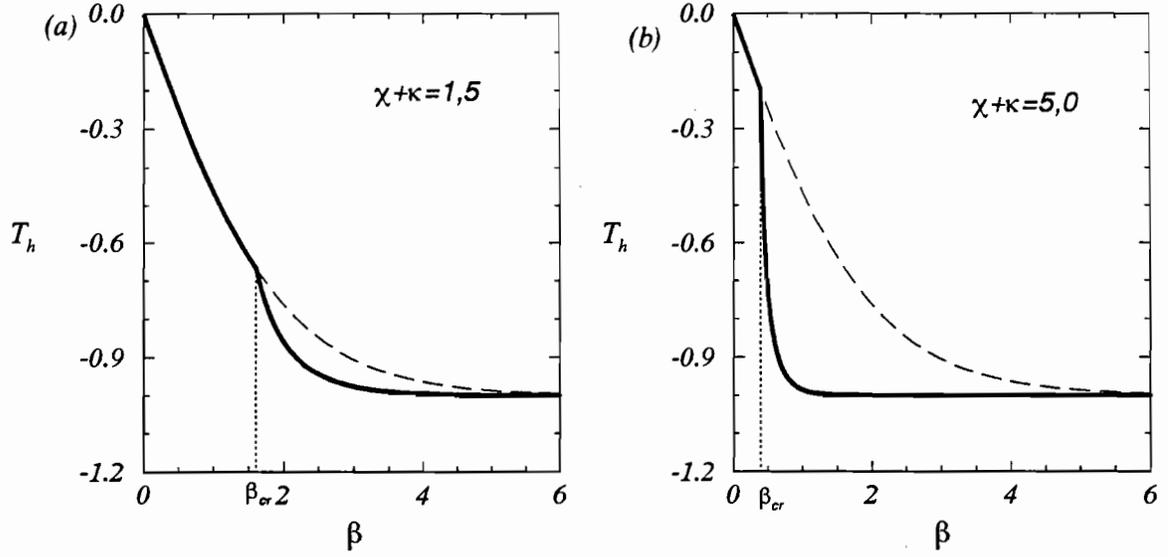


Figura 4.1: T_h como função do inverso da temperatura do sistema β para (a) $(\chi + \kappa) = 1,5$ e (b) $(\chi + \kappa) = 5,0$. As linhas tracejadas correspondem a $(\chi + \kappa) < 1$.

O “encolhimento” do espaço de fase com o aquecimento do sistema pode ser compreendido a partir da interpretação física da variável η , que é bem clara, dado que

$$\eta = \frac{\text{Tr}(DUJ_zU^\dagger)}{N/2} = \frac{\langle J_z(t) \rangle}{N/2} = \frac{1}{N} \langle n_+(t) - n_-(t) \rangle \quad (4.17)$$

onde $\langle n_+(t) \rangle$ e $\langle n_-(t) \rangle$ são respectivamente as populações médias dos níveis superior e inferior em função do tempo. Sendo assim, η nada mais é, senão a média das diferenças das populações dos dois níveis. À medida que a temperatura aumenta a entropia passa a ter um papel mais importante, fazendo com que as configurações de equilíbrio do

sistema tenham, cada vez mais, uma distribuição homogênea das partículas entre os dois níveis. Deste modo, a maximização da entropia proibirá as configurações com poucas partículas em um dos níveis.

Devemos ainda dizer que os pontos de nosso espaço de fases podem ser mapeados sobre uma superfície esférica S^2 de raio unitário, correspondendo a superfície $J^2/N/2$, na qual η é a projeção no eixo de J_z , enquanto a variável θ relaciona-se com uma rotação em torno deste eixo. Esta superfície é conhecida no contexto da óptica quântica como a *esfera de Bloch*[43, 9]. Veja a figura 4.2. Com o aquecimento do sistema, o raio desta esfera decresce, dado que o valor de $\langle J^2 \rangle$ é uma função monotônica decrescente da temperatura como foi visto no capítulo anterior, anulando-se no limite de temperatura infinita.

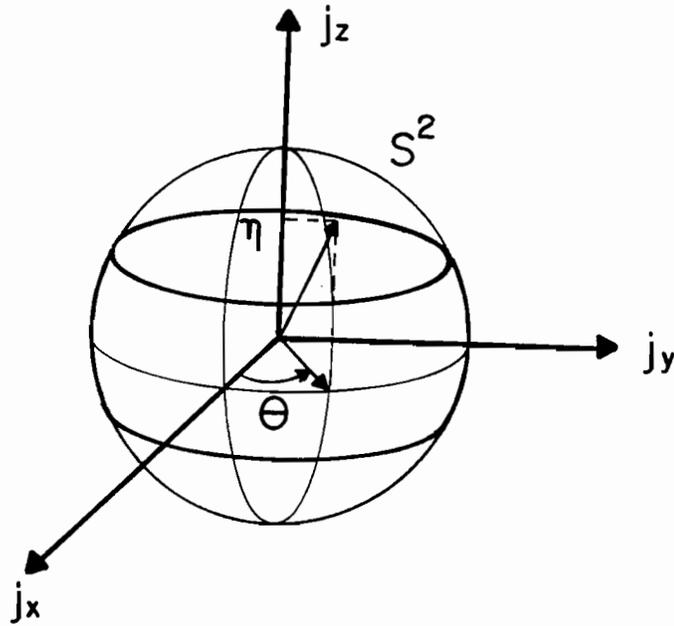


Figura 4.2: Superfície esférica S^2 conhecida como *esfera de Bloch*. Seu raio a temperatura nula é unitário, decrescendo à medida que a temperatura cresce.

Alternativamente propomos

$$\chi_\beta = -\chi T_h, \quad (4.18)$$

$$\kappa_\beta = -\kappa T_h, \quad (4.19)$$

$$\zeta = -\frac{\eta}{T_h}, \quad (4.20)$$

implicando em

$$-1 \leq \zeta \leq 1, \quad (4.21)$$

levando a

$$E = T_h \left\{ \zeta + \frac{1}{2}(1 - \zeta^2)(\chi_\beta \cos(2\theta) - \kappa_\beta) \right\}. \quad (4.22)$$

Redefinindo os parâmetros de interação, verificamos que tanto a energia do sistema quanto a coordenada η são afetadas pela temperatura numa razão proporcional a T_h . Assim, a dinâmica térmica obtida, matematicamente pode ser entendida em termos da dinâmica de temperatura nula num espaço de fase que não depende da temperatura (compare eq.(4.21) com (4.15)) e com a interação enfraquecida por esta. Isto significa que a temperatura não gera aspectos dinâmicos novos em relação ao sistema frio, ou seja, teremos os mesmos pontos fixos e bifurcações, só que agora dependentes da temperatura. (Note que o termo entre chaves na expressão acima é precisamente a Hamiltoniana clássica a temperatura nula e parâmetros de interação χ_β e κ_β .)

Apesar de toda a elegância matemática que esta representação oferece e da importante conclusão apresentada no parágrafo anterior, preferimos continuar a análise dinâmica a partir da representação da eq.(4.14), haja visto que a física assim torna-se mais transparente devido a variável η corresponder diretamente a um observável físico do sistema.

4.2 Pontos fixos e bifurcações

As equações de movimento derivadas a partir de (4.14) são :

$$\dot{\eta} = -\frac{\partial E}{\partial \theta} = \chi(T_h^2 - \eta^2) \sin(2\theta), \quad (4.23)$$

$$\dot{\theta} = \frac{\partial E}{\partial \eta} = 1 - \eta[\chi \cos(2\theta) - \kappa]. \quad (4.24)$$

Como veremos a seguir, a dinâmica pode exibir três tipos de comportamento em função da relação entre os parâmetros de interação χ e κ .

Primeiro caso: $\chi = 0$ e $\kappa \neq 0$

Neste caso as equações de movimento reduzem-se a

$$\dot{\eta} = 0 \implies \eta \text{ é variável de ação} \quad (4.25)$$

$$\dot{\theta} = 1 + \eta\kappa \quad (4.26)$$

e a única condição de equilíbrio a ser imposta é

$$\dot{\theta} = 0 \implies \eta = -\frac{1}{\kappa} \text{ e } -\kappa T_h \geq 1. \quad (4.27)$$

O fato da variável θ ser cíclica aqui, é um reflexo da conservação da forma diagonal da matriz hamiltoniana quântica pelo termo de interação proporcional a κ , que implica na independência temporal do valor médio de J_z . Todas as trajetórias na casca esférica S^2 (fig. 4.2) serão linhas paralelas a linha equatorial, sendo o movimento de rotação .

Para $\kappa < 1$, os únicos pontos estacionários da Hamiltoniana correspondem aos pólos de S^2 , respectivamente $\eta = \pm T_h$ com energias $\pm T_h$ (pólo sul (norte) de S^2 corresponde a todas as partículas no nível de baixo (cima)). A superfície de energia é suavemente ondulada em torno do plano da superfície de energia do sistema sem nenhuma interação e tem esta curvatura diminuída com a temperatura.

Para $\kappa > 1$, a interação produz uma linha de mínimos definida por (4.27) que desaparece com o aquecimento do sistema, precisamente a temperatura de transição de fase termodinâmica. Esse estado de equilíbrio tem ambos os níveis populados, sendo deslocado do pólo sul de S^2 , passando a ser um paralelo ao equador. Sua energia é

$$E = -\frac{(1 + \kappa^2 T_h^2)}{2\kappa}. \quad (4.28)$$

Nas figuras 4.3(a,b) a energia como função de η e θ é apresentada para temperatura nula (a) e $T = T_{cr}$ (b).

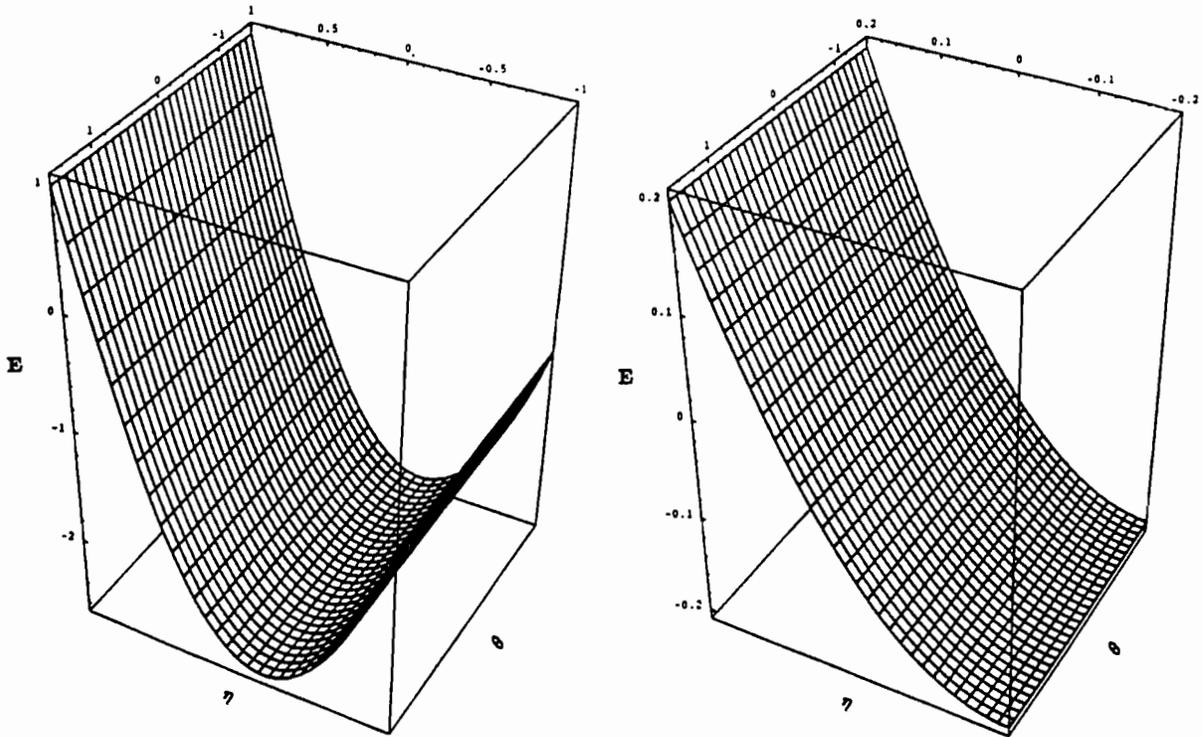


Figura 4.3: Superfície de energia clássica $E(\eta, \theta)$ para os intervalos $+T_h \leq \eta \leq -T_h$, $-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2$ para parâmetros de acoplamento $\kappa = 5,0$ e $\chi = 0,0$ (primeiro caso) para (a) $T_h = -1$ ($T = 0$) e (b) $T_h = -0,2$ ($T = T_{cr}$). Note a redução do intervalo de energia, o encolhimento do espaço de fases e o desaparecimento da linha de mínimos a T_{cr} .

Segundo caso: $\chi \neq 0$ e $\kappa = 0$

Para $\chi < 1$, novamente os únicos pontos estacionários correspondem aos pólos de S^2 e qualitativamente ocorre o mesmo que para $\kappa < 1$ do caso anterior. Todas as trajetórias varrem todos os valores de θ , caracterizando o movimento como de rotação. Veja figura 4.4 (a,b).

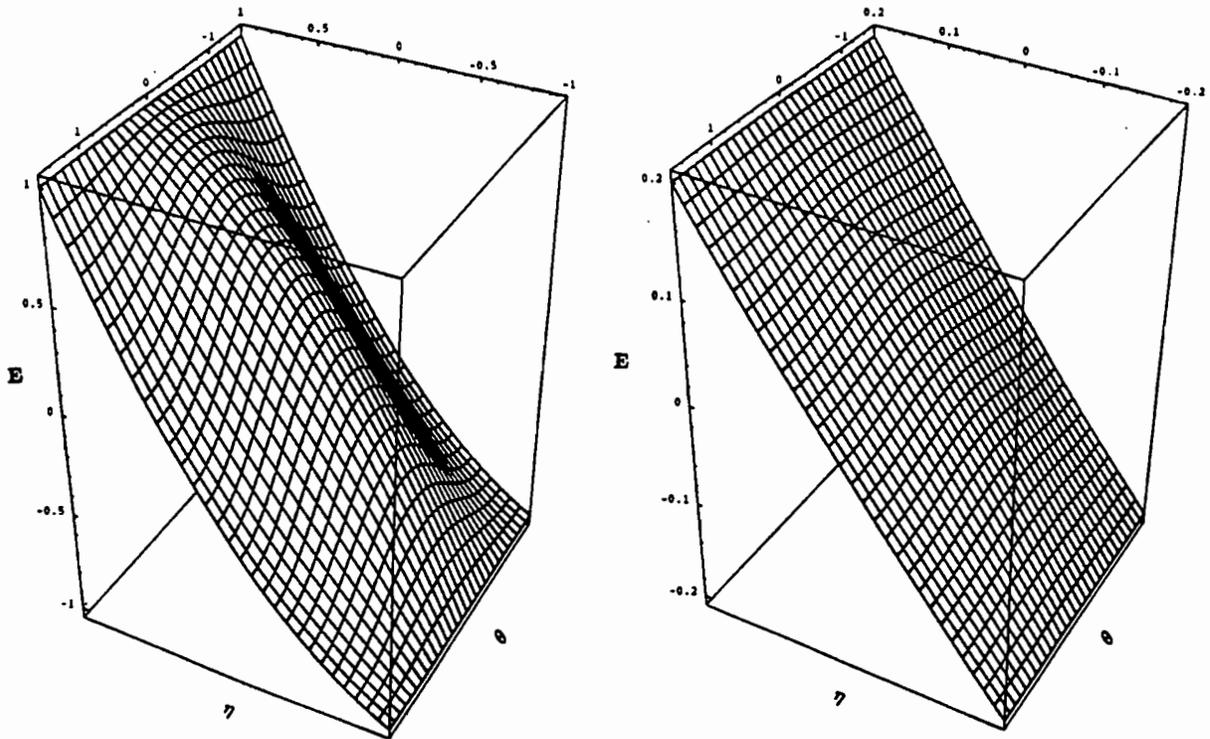


Figura 4.4: Superfície de energia clássica $E(\eta, \theta)$ para os intervalos $+T_h \leq \eta \leq -T_h$, $-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2$ para parâmetros de acoplamento $\chi = 0,6$ e $\kappa = 0,0$ (segundo caso) para (a) $T_h = -1$ ($T = 0$) e (b) $T_h = -0,2$.

Para $\chi > 1$ temos uma bifurcação do equilíbrio e passamos a encontrar os seguintes pontos fixos $P(\eta, \theta)$ (veja figuras 4.6 (a-c) e correspondentes curvas de nível nas figuras 4.5 (a,b)):

a) Dois máximos

$$P_1 = \left(\frac{1}{\chi}, n\pi \right) \quad n = 0, 1 \quad \text{com energia} \quad E_1 = \frac{1 + T_h^2 \chi^2}{2\chi}, \quad (4.29)$$

b) Dois mínimos

$$P_2 = \left(-\frac{1}{\chi}, -\frac{\pi}{2} + n\pi \right) \quad n = 0, 1 \quad E_2 = -E_1, \quad (4.30)$$

c) Quatro pontos de sela pertencentes a separatriz que envolve o movimento de libração em torno dos mínimos.

$$P_3 = \left(T_h, \frac{1}{2} \arccos \left(\frac{1}{\chi T_h} - n\pi \right) \right) \quad n = 0, 1 \quad E_3 = T_h, \quad (4.31)$$

$$P_4 = \left(T_h, -\frac{1}{2} \arccos \left(\frac{1}{\chi T_h} + n\pi \right) \right) \quad n = 0, 1 \quad E_4 = T_h, \quad (4.32)$$

d) Quatro pontos de sela pertencentes a separatriz que envolve o movimento de libração em torno dos máximos.

$$P_5 = \left(-T_h, \frac{1}{2} \arccos \left(-\frac{1}{\chi T_h} - n\pi \right) \right) \quad n = 0, 1 \quad E_5 = -T_h, \quad (4.33)$$

$$P_6 = \left(-T_h, -\frac{1}{2} \arccos \left(\frac{-1}{\chi T_h} + n\pi \right) \right) \quad n = 0, 1 \quad E_6 = -T_h. \quad (4.34)$$

Tais pontos só existem para $-\chi T_h \geq 1$, ou seja, para $\chi \geq 1$ e temperaturas inferiores à temperatura de transição de fase termodinâmica. Nesta situação encontramos dois tipos de movimento: limitado em θ em torno dos pontos de máximos ($E > -T_h$) e mínimos ($E < T_h$) (*libração*) e movimento ilimitado em θ para $T_h \leq E \leq -T_h$

(*rotação*). Note que as coordenadas dos máximos e mínimos não dependem da temperatura, mas sim suas energias, enquanto que cada ponto de sela se desloca com a temperatura em direção ao seu respectivo centro, ou seja, ao centro que é envolvido pela órbita separatriz a qual este ponto de sela pertence. As coordenadas η destes pontos hiperbólicos se movem com a temperatura do mesmo modo que os limites de η , de modo que sempre pertencem às fronteiras do espaço de fase. À temperatura crítica, estas fronteiras encontram os pontos de máximo e mínimo e os pontos de sela pertencentes às separatrizes que envolvem estes centros coincidem com estes.

Para $-\chi T_h \leq 1$, os pólos de S^2 são os únicos pontos estacionários da dinâmica e todas as trajetórias são rotações.

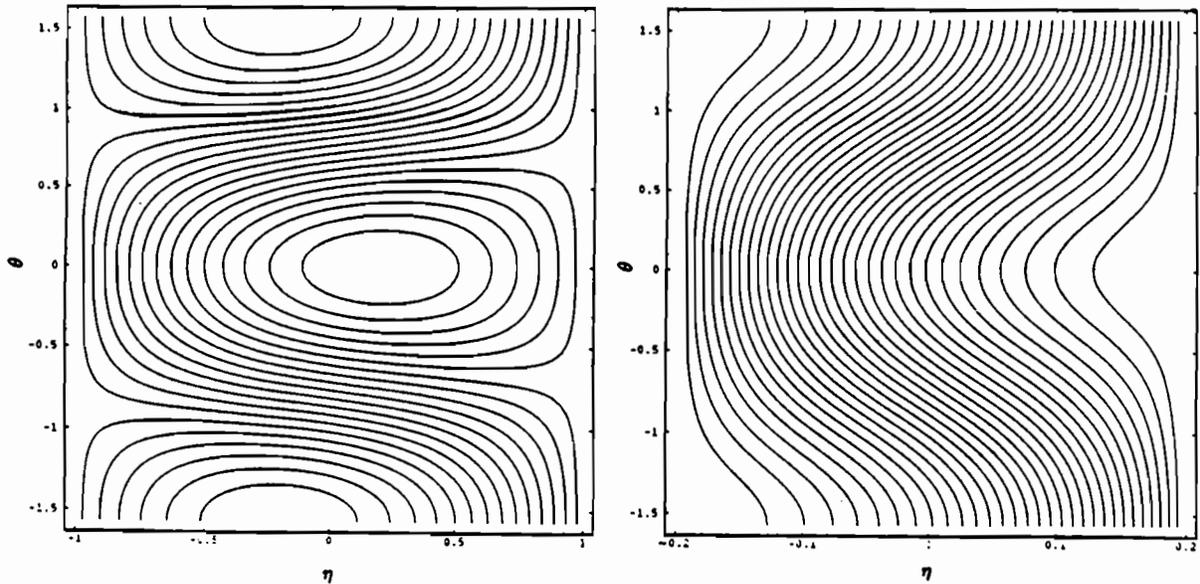


Figura 4.5: Curvas de nível correspondendo as superfícies de energia da figura 4.6 a (a) $T_h = -1,0$ ($T = 0$) e (b) $T_h = -0,2$ ($T = T_{cr}$). Na temperatura de transição de fase todas as órbitas de libração desaparecem e passamos a ter apenas órbitas de rotação no espaço de fases.

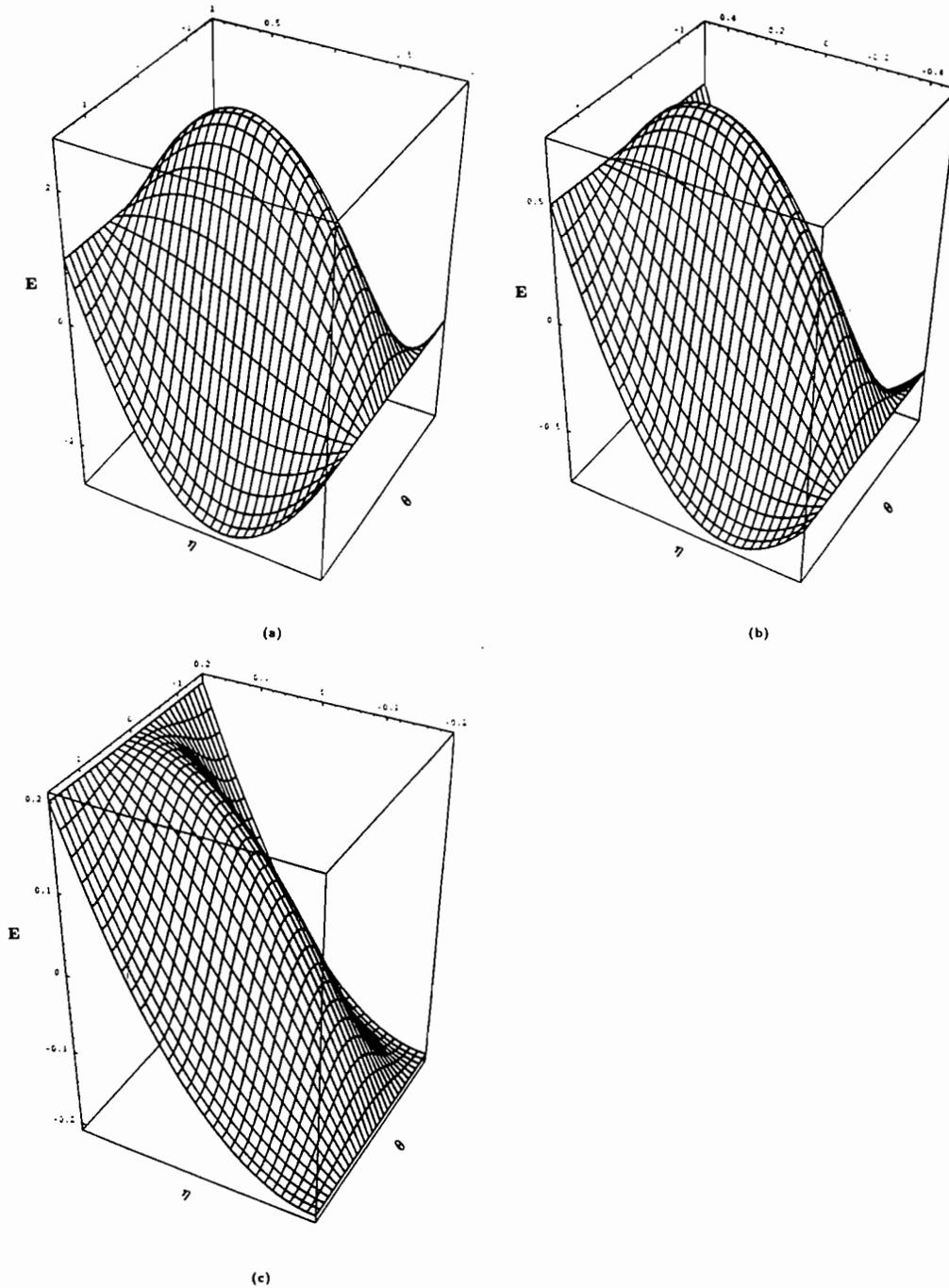


Figura 4.6: Superfície de energia clássica $E(\eta, \theta)$ para os intervalos $+T_h \leq \eta \leq -T_h$, $-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2$ para parâmetros de acoplamento $\chi = 5,0$ e $\kappa = 0,0$ (segundo caso) para (a) $T_h = -1$ ($T = 0$), (b) $T_h = -0,5$ ($0 < T < T_{cr}$) e (c) $T_h = -0,2$ ($T = T_{cr}$). Note o desaparecimento das órbitas libracionais com o aumento da temperatura.

3º caso: $\chi \neq 0$ e $\kappa \neq 0$

Neste caso os parâmetros que definem os pontos fixos são as seguintes combinações de χ e κ :

$$\chi_+ = \chi + \kappa \quad \text{e} \quad \chi_- = \chi - \kappa. \quad (4.35)$$

Quando $\chi_+ T_h < 1$ os únicos pontos estacionários são novamente os pólos de S^2 . Já para $\chi_+ T_h \geq 1$, os pontos fixos e seus respectivos limites de validade são sumarizados na Tabela (4.I). Temos três situações que são esquematizadas na figura 4.7, onde as linhas onduladas representam os intervalos de existência das soluções apresentadas na Tabela (4.I).

A temperatura nula, se $\chi_+ > 1$ os pontos de mínimos sempre existem. Contudo, para que os máximos e respectivos pontos de sela existam, χ deve exceder κ ao menos em uma unidade (1ª situação). Vemos que aqui, assim como no espectro quântico, as interações competem entre si para energias superiores, ocorrendo o oposto para as energias inferiores. Isso ilustra, ou é consistente com o fato das soluções de equilíbrio encontradas na análise termodinâmica dependerem apenas da soma dos parâmetros de interação, não importando o valor individual de cada um deles.

As superfícies de energia das três situações da figura 4.7 são apresentadas respectivamente nas figuras 4.8, 4.9 e 4.10 para vários valores de temperatura.

* * *

As superfícies de energia para estas situações são apresentadas nas Figs. 4.3(a,b) (1º caso), Figs. 4.4(a,b) e 4.6(a-c) (2º caso), Figs. 4.8(a-c), 4.9(a,b) e 4.10(a,b) (3º caso).

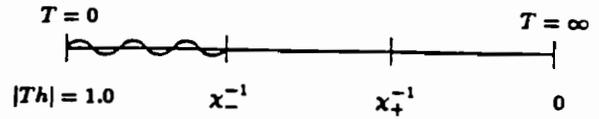
Note que em todas as situações estudadas o efeito de aumentar a temperatura é “enfraquecer” a intensidade de interação, de modo que o sistema tende a situação $\chi = \kappa = 0$, como pode ser visto nas Figs. 4.3(b), 4.4(b), 4.6(c), 4.8(c), 4.9(b) e 4.10(b).

$(n = 0, 1)$	E	η	θ	Classificação	Validade	Intervalo de Temperatura
P_{1n}	$\frac{1+T_h^2x_-^2}{2x_-}$	$\frac{1}{x_-}$	$n\pi$	máximos ou selas	$x_- > 1$ ou $-x_- > 1$	$ T_h \geq x_- ^{-1}$
P_{2n}	$-\frac{1+T_h^2x_+^2}{2x_+}$	$-\frac{1}{x_+}$	$-\frac{\pi}{2} + n\pi$	mínimos	$x_+ \geq 1$	$ T_h \geq x_+^{-1}$
$P_{\frac{3n}{4n}}$	T_h	T_h	$\pm \frac{1}{2} \arccos\left(\frac{1+\kappa T_h}{x T_h}\right) \mp n\pi$	selas	$x_- > 1$ ou $ x_- < 1$ ou $-x_- > 1$	$ T_h \geq x_+^{-1}$ ou $x_+^{-1} \leq T_h \leq -x_-^{-1}$
$P_{\frac{5n}{6n}}$	$-T_h$	$-T_h$	$\pm \frac{1}{2} \arccos\left(\frac{-1+\kappa T_h}{x T_h}\right) \mp n\pi$	selas	$x_- > 1$	$ T_h \geq x_-^{-1}$

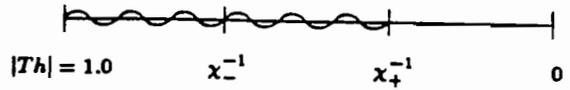
Tabela 4.1: Energias, coordenadas (η, θ) , classificações, intervalos de validade a temperatura nula em função dos parâmetros de acoplamento e intervalos de existência a temperatura finita em função da relação de χ e κ dos doze pontos fixos da Hamiltoniana (3.14) no terceiro caso: $\chi \neq 0$ e $\kappa \neq 0$.

1ª Situação: $\chi \geq \kappa + 1$

Máximos (P_{1n}) e
correspondentes selas ($P_{5n,6n}$)

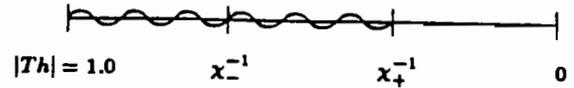


Mínimos (P_{2n}) e
correspondentes selas ($P_{3n,4n}$)

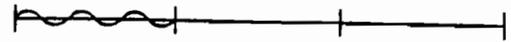


2ª Situação: $\kappa \geq \chi + 1$

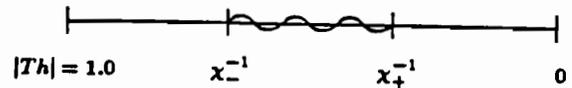
Mínimos (P_{2n})



Pontos de sela dos mínimos P_{1n}

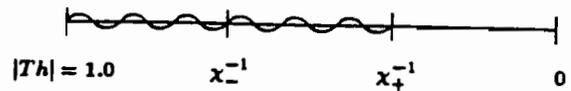


$P_{3n,4n}$



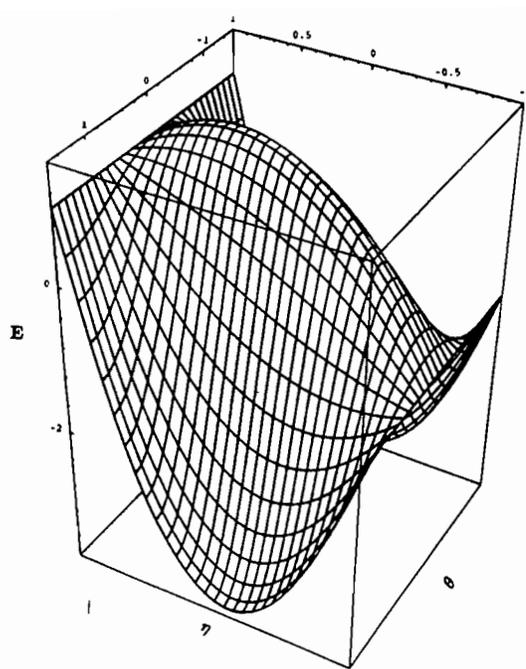
3ª Situação: $|\chi - \kappa| < 1$

Mínimos (P_{2n}) e
pontos de sela ($P_{3n,4n}$)

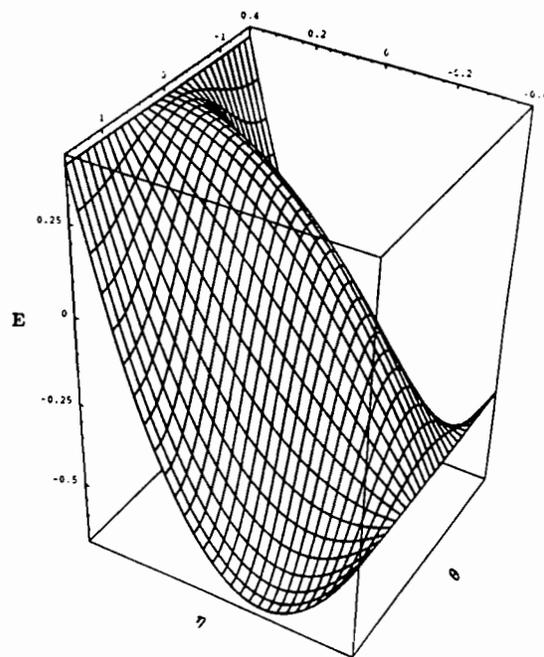


Nas Situações 2ª e 3ª, os máximos e correspondentes selas ($P_{5n,6n}$) não existem.

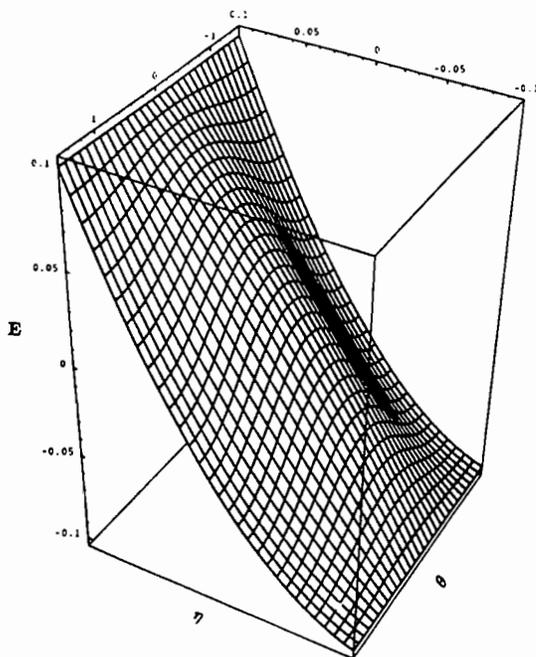
Figura 4.7: As três situações encontradas no terceiro caso como função das relações dos parâmetros de acoplamento χ e κ . Os pontos fixos da tabela anterior são apresentados com seus intervalos de validade marcados por uma linha ondulada.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.8: Superfícies de energia clássica $E(\eta, \theta)$ nos intervalos prévios de variáveis para $\chi = 5,0$ e $\kappa = 2,5$ ($\chi > \kappa + 1$) para (a) $T_h = -1,0$ ($T = 0$), (b) $T_h = -0,4 = 1/\chi_-$ e (c) $T_h = -0,13 = 1/\chi_+$.

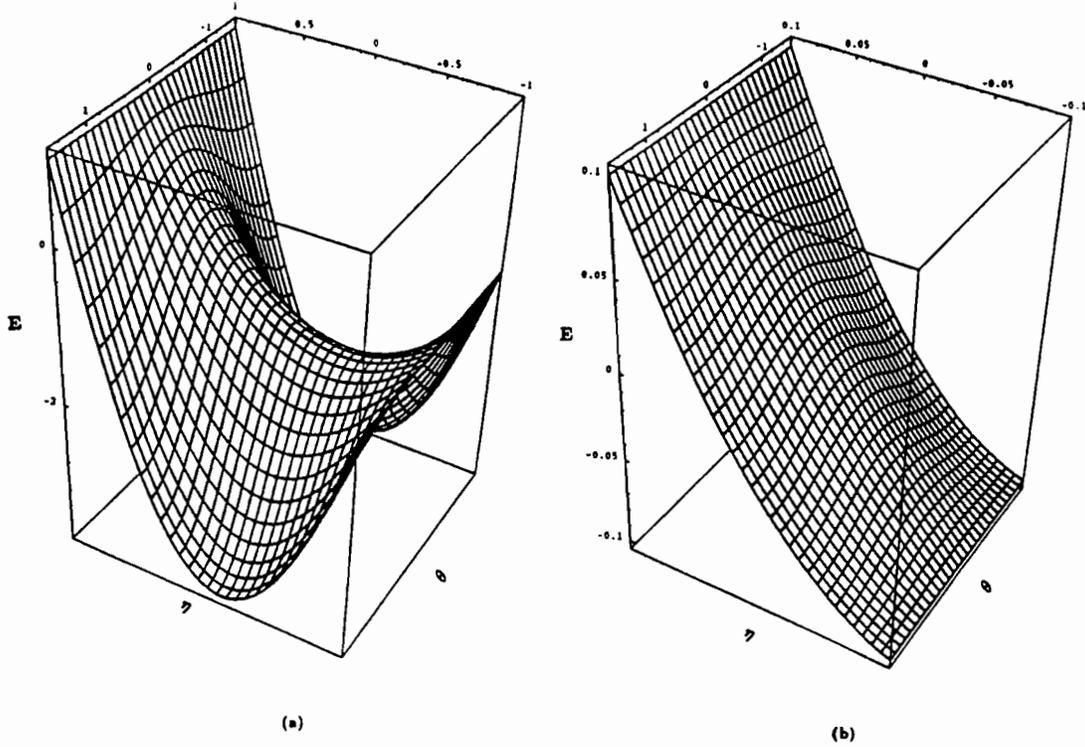


Figura 4.9: Superfícies de energia clássica $E(\eta, \theta)$ nos intervalos prévios de variáveis para $\chi = 2,5$ e $\kappa = 5,0$ ($\kappa > \chi + 1$) para (a) $T_h = -1,0$ ($T = 0$) e (b) $T_h = -0,13 = 1/\chi_+$.

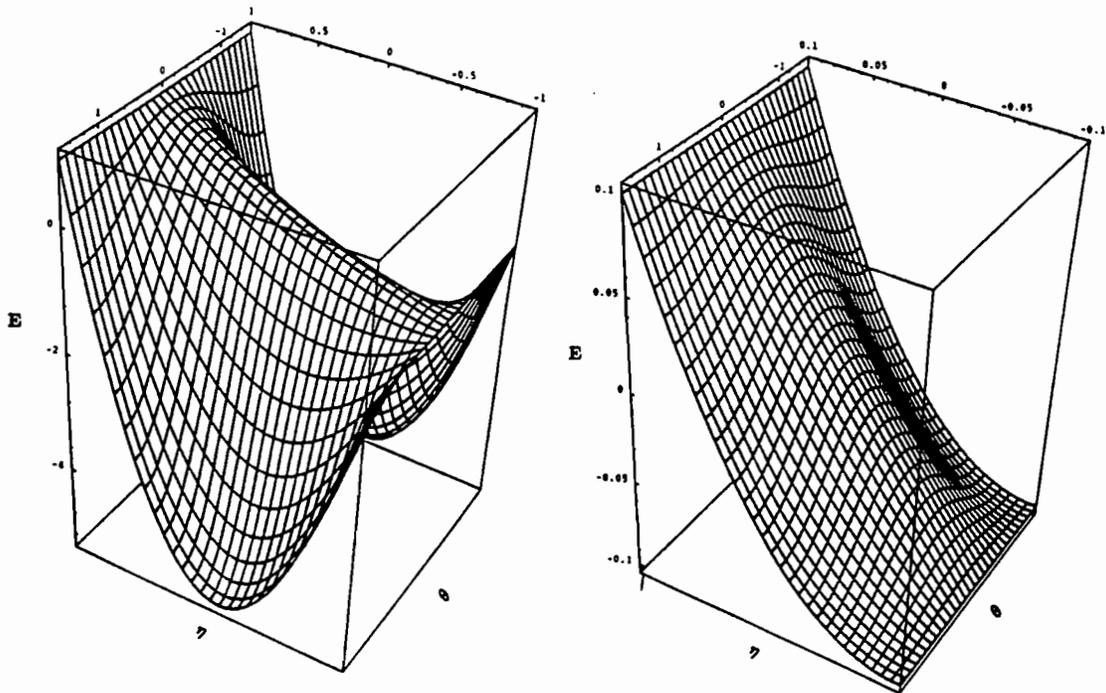


Figura 4.10: Superfícies de energia clássica $E(\eta, \theta)$ nos intervalos prévios de variáveis para $\chi = 5,0$ e $\kappa = 5,5$ ($|\chi_-| < 1$) para (a) $T_h = -1,0$ ($T = 0$) e (b) $T_h = -0,1$.

Interessante também é notar a relação existente entre a dinâmica clássica a temperatura nula e o espectro quântico estudado no capítulo 2. A região harmônica do espectro quântico definida por $-1/2 \leq E \leq 1/2$ tem como contrapartida na dinâmica clássica as órbitas de rotação cujas energias pertencem ao intervalo $[-1,1]$ ¹. Os valores de energia limítrofes desta região harmônica $1/2$ e $-1/2$ conservam este carácter de fronteira no limite clássico. Para $\kappa > 1$ e $\chi = 0$ (1º caso) surgem pares de órbitas para $E \leq -1$. Já para $\chi > 1$ e $\kappa = 0$ (2º caso) surgem movimentos oscilatórios em torno dos centros ($|E| > 1$) sendo que no terceiro caso há uma combinação destes dois efeitos. No espectro quântico pudemos observar dubletos de autovalores para estes intervalos de energia.

Outra relação importante é a existente entre as transições de fase do estado fundamental da dinâmica do sistema clássico e as transições de fase termodinâmicas. Para temperatura nula e $\chi < 1$ temos que o nível (camada) superior do estado de mínimo clássico é completamente despovoado (pólo sul da esfera de Bloch), enquanto que para $\chi > 1$ esta população passa a ser não nula e depender de χ . Esta mudança de comportamento também existe na transição de fase termodinâmica, pois na fase normal a interação não participa na definição dos estados de equilíbrio (sendo esta determinada pelos efeitos térmicos), enquanto que na solução deformada a interação tem papel protagonista. A dinâmica clássica a temperatura finita engloba todos estes aspectos, além de obviamente tratar da evolução temporal conservativa de estados fora do equilíbrio.

¹A diferença de um fator $1/2$ entre os extremos de energia quântico e clássico deve-se ao fato de termos escalado a energia clássica por $N\epsilon/2$ e não apenas por $N\epsilon$ como fizemos na análise quântica.

Capítulo 5

O modelo de Lipkin SU(3)

A versão SU(3) do modelo, assim como sua versão original, consiste em um modelo esquemático exatamente solúvel que foi proposto com o objetivo de servir como um teste não trivial para técnicas aproximativas de muitos corpos, tais como expansões bosônicas[14] e aproximações de Hartree-Fock dependente do tempo em suas diversas extensões [44, 45], entre outras. Em [33], as validades de vários métodos de quantização semiclássica foram estudadas e analisadas para o modelo. Mais recentemente, dentro do contexto da “caologia” quântica e da mecânica semiclássica, o modelo tem sido revisitado devido ao seu limite clássico ser não integrável e apresentar caos. Destacamos o estudo das estatísticas espectrais realizadas a fim de verificar critérios que relacionam características do sistema quântico ao caos de seu análogo clássico[16] e o estudo das estruturas das autofunções em termos de trajetórias clássicas[18, 19, 20, 21] realizado dentro deste mesmo cenário.

5.1 O modelo.

O modelo representa um sistema de N férmions interagentes distribuídos em três níveis ou camadas de degenerescência $\mathcal{N} = N$ cujas energias são denotadas por ϵ_k ($k = 0, 1, 2$). Os estados de partícula única são definidos por dois números quânticos: $k =$

0, 1, 2 (indica o nível ou camada onde está a partícula) e $m = 1, 2, \dots, N$ (determina o particular estado degenerado dentro da camada). A Hamiltoniana do sistema é dada por

$$H = \sum_{k=0}^2 \epsilon_k \left[\sum_{m=1}^N a_{km}^\dagger a_{km} \right] + \frac{1}{2} \sum_{k,l=0}^2 V_{kl} \sum_{m=1}^N \sum_{m'=1}^N a_{km}^\dagger a_{km'}^\dagger a_{lm'} a_{lm}, \quad (5.1)$$

onde a_{km}^\dagger e a_{km} são os operadores fermiônicos de criação e aniquilação de uma partícula no estado m do nível k que obedecem as relações de anti-comutação usuais dadas pelas equações (2.2). Aqui, o termo de interação que espalha pares de partículas pertencentes a níveis distintos não é considerado. Vale notar também que o sinal que precede o termo de interação é positivo e não negativo como fizemos na versão anterior.

Esta é a definição mais geral do modelo, mas como também habitual na literatura, prosseguimos considerando as particulares restrições :

- Os níveis são igualmente espaçados e simetricamente localizados em torno de zero: $\epsilon_2 = -\epsilon_0 \equiv \epsilon$ e $\epsilon_1 = 0$;
- Interações que espalham pares de partículas para o mesmo nível são nulas e interações entre todos os níveis possuem intensidade única, ou seja,
 $V_{kl} \equiv V(1 - \delta_{kl})$.

Definimos os operadores

$$G_{ij} = \sum_{m=1}^N a_{im}^\dagger a_{jm}, \quad G_{ij}^\dagger = G_{ji}, \quad i, j = 0, 1, 2; \quad (5.2)$$

que são os nove geradores do grupo $U(3)$ e satisfazem as relações de comutação

$$[G_{ij}, G_{kl}] = \delta_{jk} G_{il} - \delta_{il} G_{kj}. \quad (5.3)$$

Levando em consideração o vínculo imposto pela conservação do número de partículas do sistema, $G_{00} + G_{11} + G_{22} = N$, restringimo-nos a oito geradores independentes que formam agora uma álgebra de $SU(3)$. Assim podemos reescever a Hamiltoniana como

$$H = G_{22} - G_{00} + \frac{V}{2} (G_{01}^2 + G_{10}^2 + G_{02}^2 + G_{20}^2 + G_{12}^2 + G_{21}^2). \quad (5.4)$$

O parâmetro de interação escalado é definido da forma usual, ou seja,

$$\chi = \frac{V(N-1)}{\epsilon}. \quad (5.5)$$

As soluções de H são portanto classificadas de acordo com as representações irredutíveis de $SU(3)$ e conseqüentemente a matriz hamiltoniana de ordem 3^N subdivide-se em blocos não interagentes. Devemos lembrar que isto ocorre devido ao fato da interação não alterar o rótulo m do estado das partículas.

A segunda simetria surge devido a Hamiltoniana espalhar apenas pares de partículas, implicando na conservação da paridade da população de cada camada ou nível. Assim temos que

$$[H, \hat{\Pi}_1] = [H, \hat{\Pi}_2] = 0, \quad (5.6)$$

onde

$$\hat{\Pi}_1 = \exp(i\pi G_{11}) \quad \text{e} \quad \hat{\Pi}_2 = \exp(i\pi G_{22}), \quad (5.7)$$

são os operadores paridade. Isto divide os estados em quatro conjuntos que foram rotulados em [16] de acordo com as paridades do nível fundamental, do primeiro estado excitado e do segundo estado excitado denotando paridade par por e (even) e ímpar por o (odd). Assim para N par temos os conjuntos eee , ooo , oeo e oee ; e para N ímpar os conjuntos ooo , oeo , eeo e oeo .

5.2 Sua solução exata e o espectro de energia

A versão SU(3) do modelo preserva uma série de importantes características da versão apresentada na parte I. Podemos citar as mais relevantes: espaço de Hilbert finito, o carácter $1/N$ do modelo, divisão deste espaço de Hilbert em sub-blocos que não se conectam o que implica na redução da dimensão mínima da matriz a ser diagonalizada e a conservação da paridade das populações dos níveis. Contudo há também importantes aspectos novos, e é nosso objetivo apresentar nesta seção alguns destes que julgamos ser mais relevantes para nossa análise.

Começamos analisando a representação irredutível simétrica, explorando o comportamento do espectro em função do parâmetro de interação χ . Vamos utilizar os auto-estados dos operadores diagonais do grupo como base vetorial de nosso espaço de Hilbert, representando-os por $|n_1, n_2\rangle$ onde n_1 é o número de partículas no primeiro nível excitado (camada do meio) e n_2 é o número de partículas no segundo nível excitado (camada superior). Devido a conservação do número de partículas a população do nível fundamental (camada inferior) é dada por $n_0 = N - n_1 - n_2$. As ações dos geradores do grupo sobre os *estados da representação simétrica* são dadas pelas equações (C.20) a (C.26) de onde imediatamente tiramos os elementos da matriz hamiltoniana *para este multiplete* na forma

$$\begin{aligned} \frac{H}{N\epsilon} = \frac{1}{N\epsilon} \langle n'_1, n'_2 | H | n_1, n_2 \rangle = & \frac{1}{N} (n_2 - n_0) \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} + \frac{\chi}{2N(N-1)} \cdot \\ & \cdot \left\{ \sqrt{n_1(n_1-1)(n_0+1)(n_0+2)} \delta_{n_1-2, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} + \right. \\ & + \sqrt{(n_1+1)(n_1+2)n_0(n_0-1)} \delta_{n_1+2, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} + \\ & + \sqrt{n_2(n_2-1)(n_0+1)(n_0+2)} \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2-2, n'_2} + \\ & + \sqrt{(n_2+1)(n_2+2)n_0(n_0-1)} \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2+2, n'_2} + \\ & \left. + \sqrt{(n_1+1)(n_1+2)n_2(n_2-1)} \delta_{n_1+2, n'_1} \delta_{n_2-2, n'_2} + \right. \end{aligned}$$

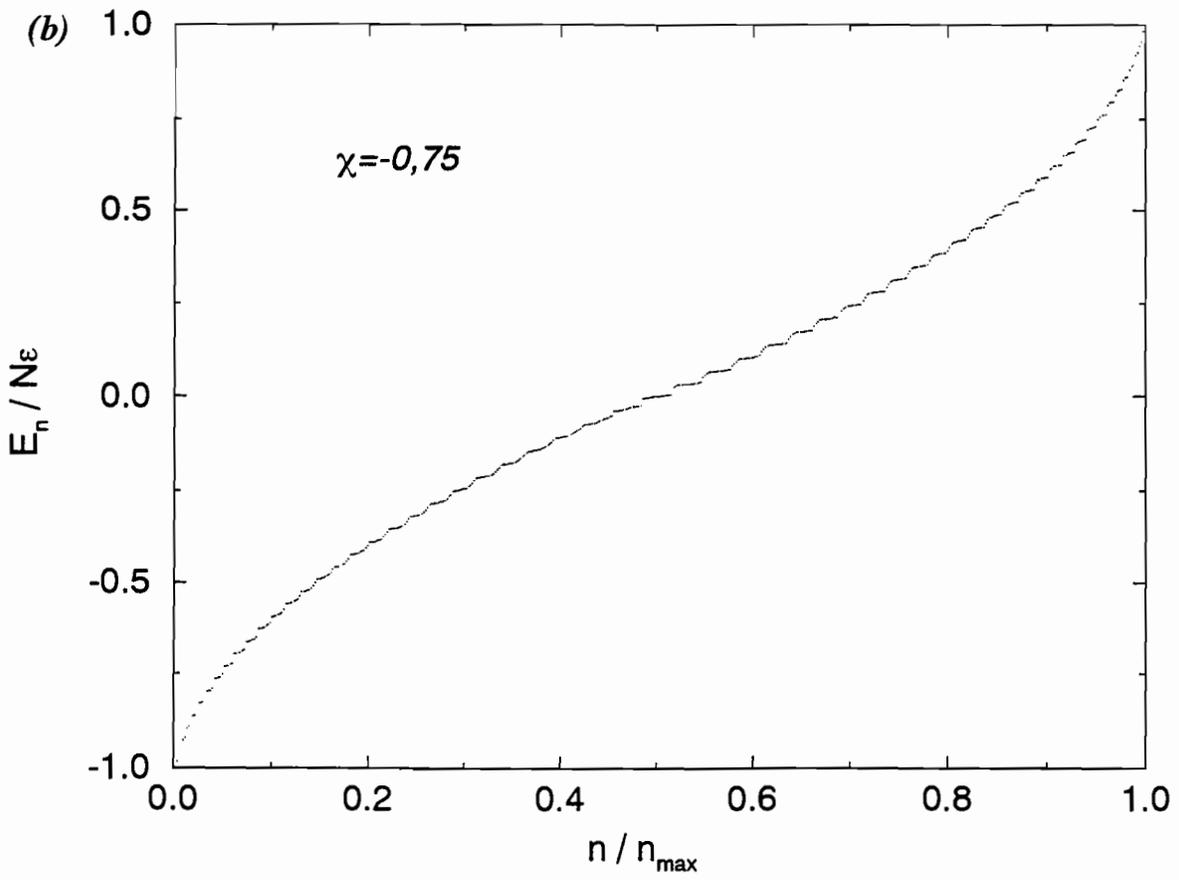
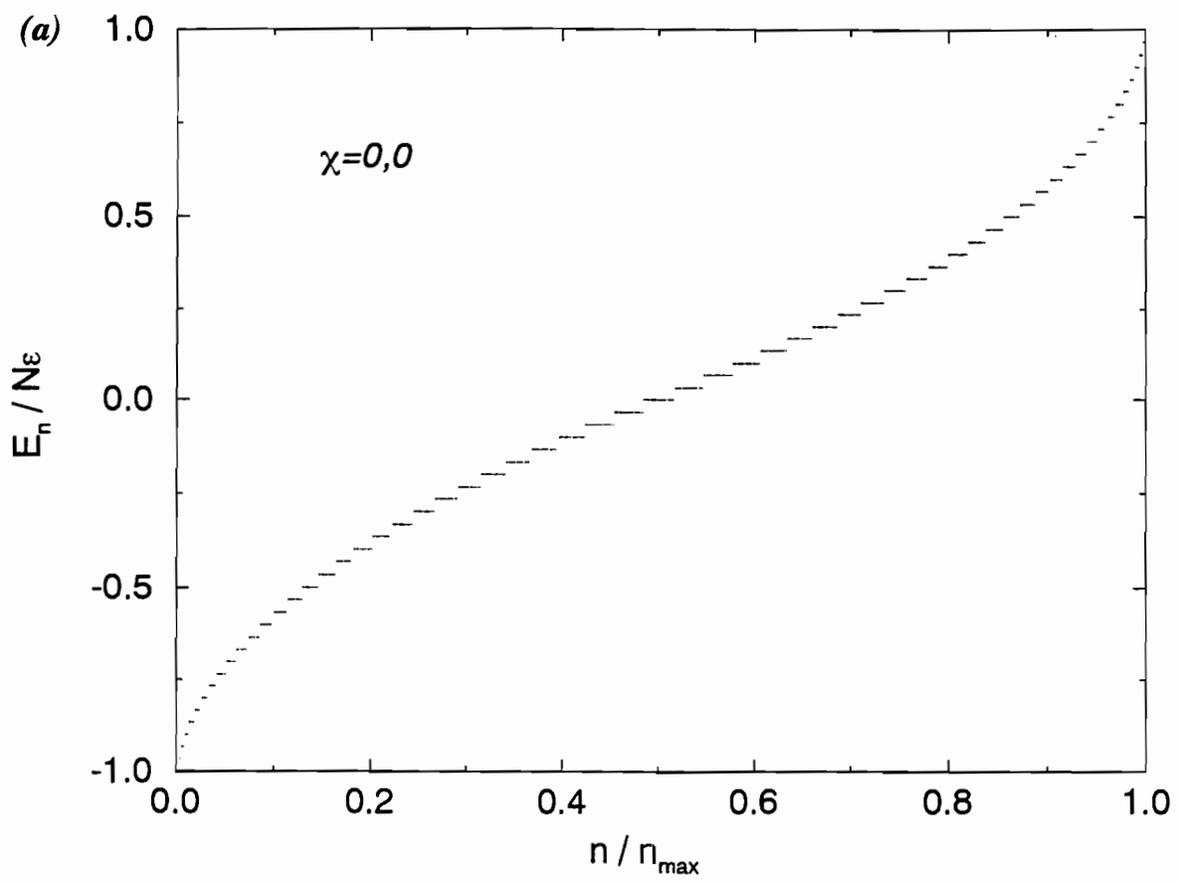
$$+ \sqrt{(n_2 + 1)(n_2 + 2)n_1(n_1 - 1)} \delta_{n_1-2, n'_1} \delta_{n_2+2, n'_2} \}. \quad (5.8)$$

Esta matriz também é esparsa pois não há mais que sete elementos não nulos em cada linha, e em banda dado que $|n_1 - n'_1| \leq 2$ e $|n_2 - n'_2| \leq 2$. Além disso, os deltas de Kronecker mostram explicitamente a conservação das paridades das populações dos níveis.

Aqui, como no capítulo 2, vamos analisar os autovalores de energia $E_n/N\epsilon$ em função de n/n_{max} , sendo n o rótulo do nível e n_{max} a dimensão da representação irredutível. Para as representações simétricas, fixamos N em 30 partículas, o que define n_{max} em 496 autovalores.

Para χ nulo o espectro de energia, apresentado na figura 5.1(a), é todo constituído por degraus igualmente espaçados, mas que possuem diferentes números de autovalores. Os degraus nos extremos do espectro contêm poucos estados, enquanto que os localizados na região central são os mais povoados. A distribuição dos quatro conjuntos de simetria definidos pelas paridades das populações das três camadas ocorre com alguma regularidade para interação nula (cada degrau possui auto-estados pertencentes a dois dos quatro conjuntos e têm como primeiros vizinhos degraus caracterizados pelos outros dois conjuntos). Contudo, à proporção que o parâmetro de interação cresce, os degraus são destruídos e esta regularidade é perdida.

Na figura 5.1(b) temos o espectro para $\chi = -0,75$ onde observamos a deformação parcial dos degraus, eliminando os intervalos maiores entre os autovalores. Para $\chi = -1,0$ a estrutura de degraus é quase toda destruída, tornando mais suave a curva que une os autovalores. Em 5.1(c) apresentamos os espectros para $\chi = -2, -4, -6$ e -10 notando que estes tendem a ficar mais irregulares para interações maiores, além de expandir os intervalos de energias escaladas. Verificamos também que os espectros não são simétricos em torno do autovalor de energia nulo.



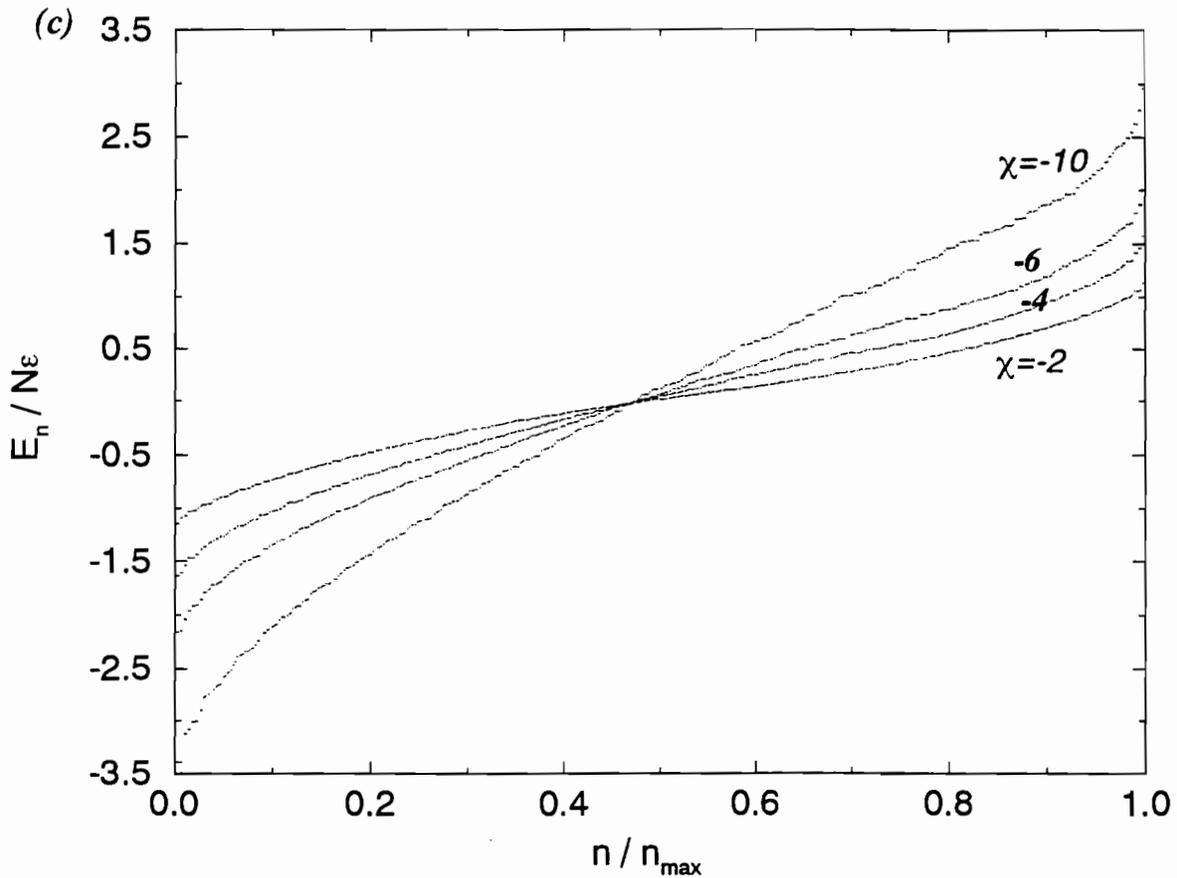


Figura 5.1: Autovalores de energia da representação simétrica para $N=30$ partículas (496 autovalores) e parâmetros de interação (a) $\chi=0,0$; (b) $-0,75$ e (c) -2 ; -4 ; -6 e -10 .

Para as representações anti-simétricas, as equações (C.20) a (C.26) deixam de ser válidas. Aqui encontramos uma das importantes diferenças entre este modelo e a versão de dois níveis. As representações anti-simétricas possuem estruturas cinemáticas e dinâmicas distintas em relação a representação simétrica no sentido em que há nestas representações um terceiro grau de liberdade, inerte na representação simétrica dado que ali a ação dos operadores G_{12} e G_{21} é trivial em relação a atuação dos outros dois pares de operadores de deslocamento que geram a álgebra do grupo.

Estes multipletos apresentam assim uma estrutura mais complexa e tanto os estados, quanto a ação dos geradores do grupo devem ser calculados a partir das relações

de comutação do grupo. Maiores detalhes a respeito desse cálculo podem ser encontrados no apêndice C. Vamos nos restringir aqui a apresentar as representações e seus autovalores de energia para $\chi = -6$ para sistemas de 4 e 6 partículas.

Para um sistema de quatro partículas os 3^4 estados são distribuídos nas representações irreduzíveis

$$[3] \otimes [3] \otimes [3] \otimes [3] = [15] \oplus 3 [15'] \oplus 2 [\bar{6}] \oplus 3 [3]. \quad (5.9)$$

Estas são representadas na figura 5.2 onde dispomos os estados em diagramas do tipo $y \times t_3$, como apresentado no apêndice C.

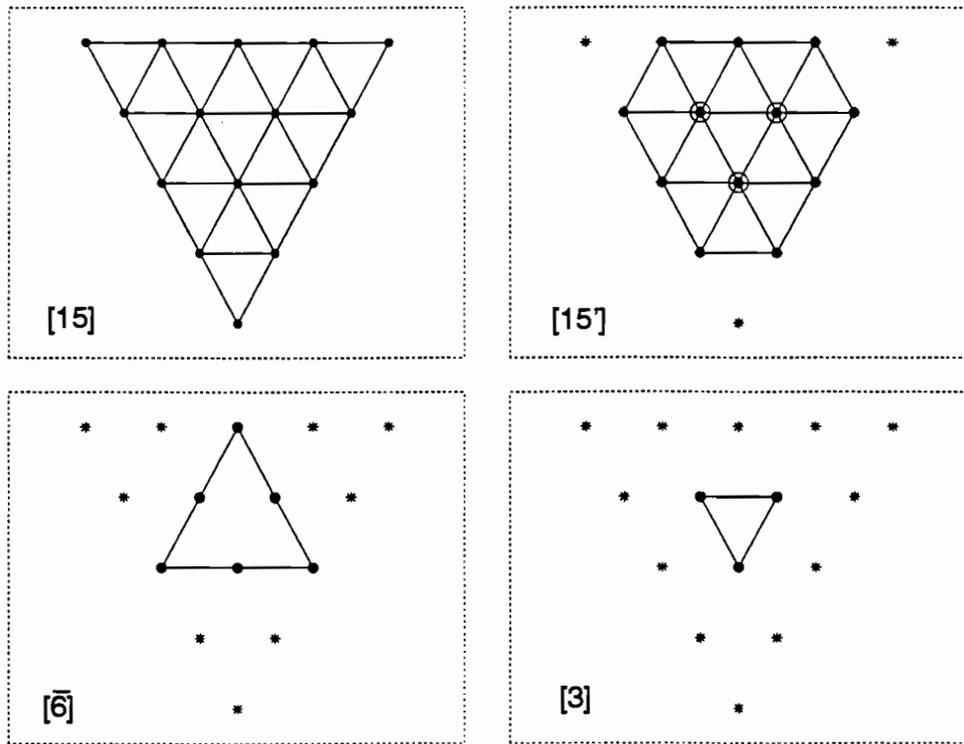


Figura 5.2: Representações irreduzíveis de um sistema de 4 partículas. Nas representações anti-simétricas os asteriscos mostram as posições não ocupadas por estados, enquanto que os círculos circuncêntricos indicam o número de estados que ocupam a mesma posição no diagrama.

Seus autovalores de energia são apresentados na figura 5.3 de acordo com as representações conforme indicado pela legenda.

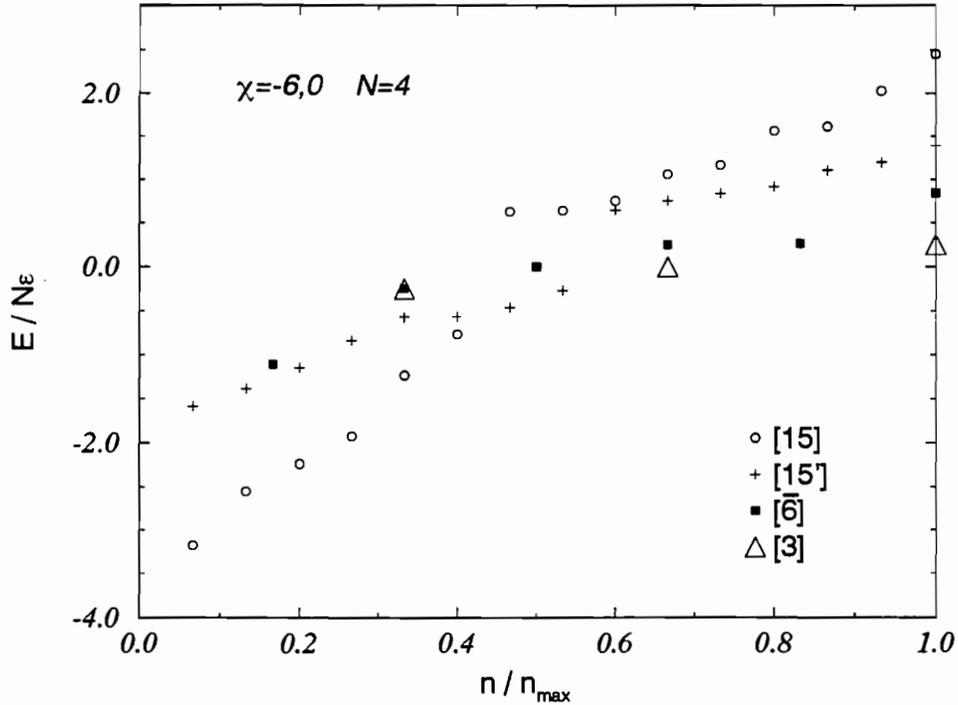


Figura 5.3: Autovalores de energia de um sistema de 4 partículas para $\chi = -6, 0$ separados de acordo com suas representações irredutíveis conforme indicado na legenda. Note que n_{max} varia de uma representação para outra e que seu valor é dado pelo rótulo que identifica os multipletos.

Para um sistema de seis partículas temos as seguintes representações irredutíveis

$$\begin{aligned}
 [3] \otimes [3] \otimes [3] \otimes [3] \otimes [3] \otimes [3] &= [28] \oplus 5 [35] \oplus 9 [27] \oplus 10 [10] \oplus 5 [\overline{10}] \oplus 16 [8] \oplus 5 [1] = \\
 &= (6, 0) + 5 (4, 1) + 9 (2, 2) + 10 (3, 0) + 5 (0, 3) + 16 (1, 1) + 5 (0, 0). \quad (5.10)
 \end{aligned}$$

Estas são representadas na figura 5.4 em função de y e t_3 do mesmo modo que na figura 5.2. A trivial representação $[1] \equiv (0, 0)$ compõe-se de um único estado localizado na posição central dos diagramas. Todos os autovalores de energia são apresentados na figura 5.5.

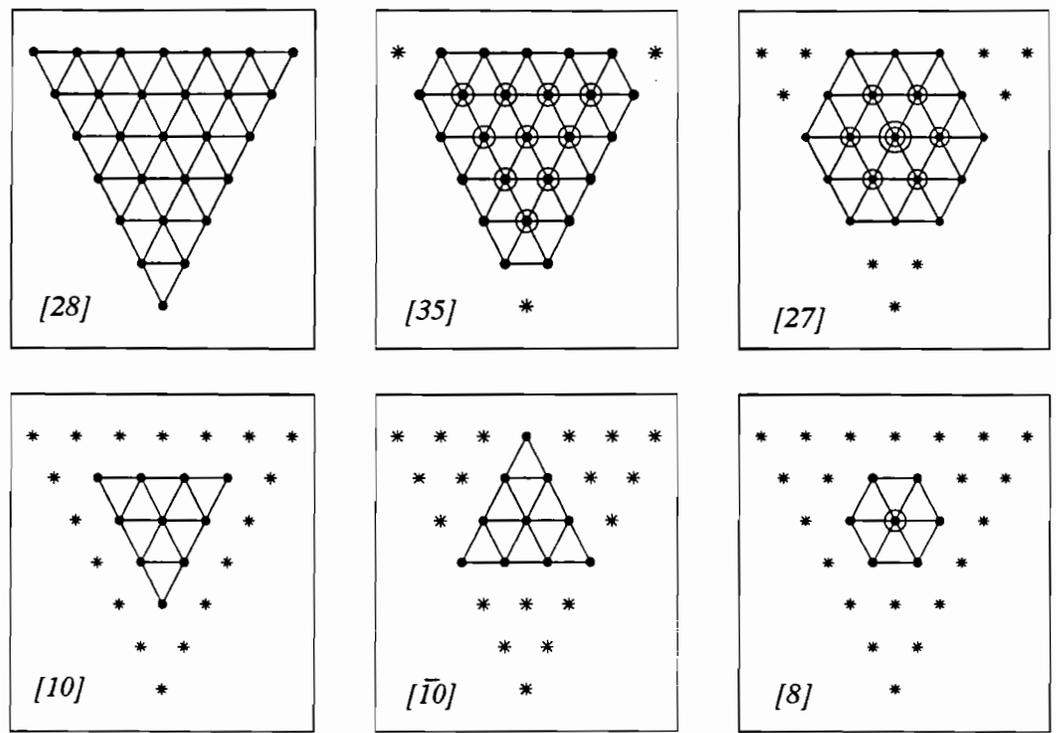


Figura 5.4: Representações irredutíveis de um sistema de 6 partículas.

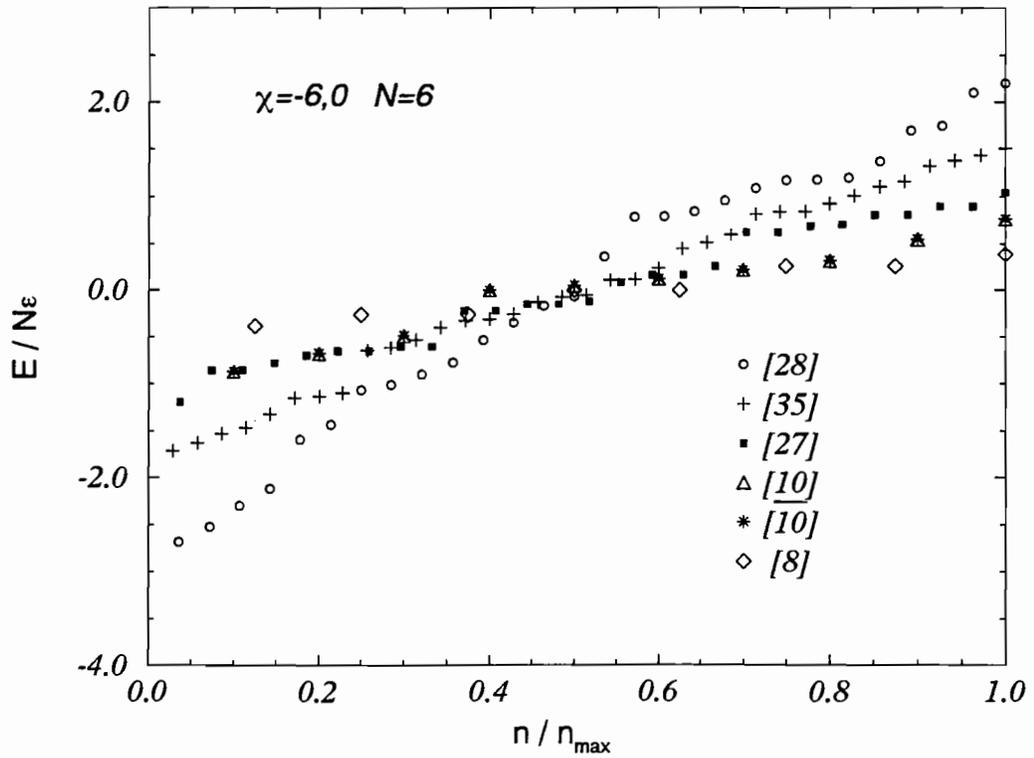


Figura 5.5: Autovalores de energia para $N = 6$ e $\chi = -6, 0$.

Capítulo 6

A termodinâmica do modelo SU(3)

Apresentamos neste capítulo uma análise detalhada das propriedades termodinâmicas do modelo de Lipkin SU(3). Aplicamos aqui a mesma técnica variacional de campo médio utilizada no capítulo 3 obtendo duas transições de fase que dependem da relação entre o parâmetro de acoplamento χ e a temperatura do sistema. Várias soluções matemáticas que extremam a energia livre foram encontradas, mas apenas três destas correspondem a soluções físicas do sistema. Na última seção, apresentamos o cálculo exato para N finito e comparamos seus resultados com os de campo médio.

6.1 Estados de equilíbrio

Iniciamos construindo a matriz densidade de campo médio na forma

$$D_0 = K \exp(-\beta h_{CM}), \quad (6.1)$$

onde

$$\begin{aligned} h_{CM} = & \alpha_1(G_{11} - G_{00}) + \alpha_2(G_{22} - G_{00}) + \alpha_3 G_{01} + \\ & + \alpha_3^* G_{10} + \alpha_4 G_{02} + \alpha_4^* G_{20} + \alpha_5 G_{12} + \alpha_5^* G_{21}, \end{aligned} \quad (6.2)$$

sendo que $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathfrak{R}$ e $\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5 \in \mathcal{C}$. K é o termo de normalização. Os oito parâmetros variacionais, α_i 's, são obtidos minimizando-se a energia livre apresentada

pela equação (3.3).

Aqui também é conveniente trabalhar com a forma diagonal de D_0 . Para isso propomos

$$D = UD_0U^\dagger = \frac{1}{Z} e^{\beta_1(G_{11}-G_{00})} e^{\beta_2(G_{22}-G_{00})}, \quad (6.3)$$

onde

$$Z = z^N = \text{Tr}(e^{\beta_1(G_{11}-G_{00})} e^{\beta_2(G_{22}-G_{00})}), \quad (6.4)$$

$$U = U_3U_2U_1 = e^{is_3} e^{is_2} e^{is_1}, \quad (6.5)$$

com

$$s_1 = z_1G_{10} + z_1^*G_{01}, \quad s_2 = z_2G_{20} + z_2^*G_{02}, \quad s_3 = z_3G_{21} + z_3^*G_{12}; \quad (6.6)$$

$$\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R} \quad \text{e} \quad z_1, z_2, z_3 \in \mathbb{C}. \quad (6.7)$$

A energia livre passa a ser expressa por

$$\beta F = \beta \text{Tr}(DUHU^\dagger) + \text{Tr}(D \ln D). \quad (6.8)$$

Utilizando a eq.(3.7) calculamos a expressão acima e podemos perceber, analogamente ao que obtivemos na análise do modelo de dois níveis, que as partes reais de z_1 , z_2 e z_3 são irrelevantes às propriedades estacionárias do sistema *para interações atrativas* ($\chi < 0$)¹. Sendo assim, devido a essa particularidade, temos nosso conjunto de parâmetros variacionais reduzido a cinco elementos reais: $\theta_1 = iz_1$, $\theta_2 = iz_2$, $\theta_3 = iz_3$, β_1 e β_2 .

A energia livre escalada por N passa a ser escrita como

¹Vale lembrar que na versão de três níveis optamos por trabalhar com $\chi < 0$ para interações atrativas e $\chi > 0$ para interações repulsivas, inversamente ao que fizemos no modelo SU(2).

$$\begin{aligned}
\bar{F} = \frac{F}{N} = & -\cos(2\theta_2)(T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3) + \frac{1}{2} \sin(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3) T_3 + \\
& + \sin^2 \theta_1 (T_1 + \sin^2 \theta_3 T_3 - \sin^2 \theta_2 (T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3)) + \\
& + \frac{\chi}{4} \left\{ \cos^2 \theta_2 \sin^2(2\theta_3) T_3^2 + \sin^2(2\theta_2) (T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3)^2 + \right. \\
& + \left. \left\{ \sin(2\theta_1) (T_1 - \sin^2 \theta_2 T_2) + T_3 [\sin(2\theta_1) (1 + \sin^2 \theta_2) \sin^2 \theta_3 + \right. \right. \\
& \left. \left. + \cos(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3)] \right\}^2 \right\} - \frac{1}{\beta} (\beta_1 T_1 + \beta_2 T_2 + \ln z), \quad (6.9)
\end{aligned}$$

onde

$$T_1 = \frac{\text{Tr}(D(G_{00} - G_{11}))}{N} = \frac{e^{-(\beta_1 + \beta_2)} - e^{\beta_1}}{z}, \quad (6.10)$$

$$T_2 = \frac{\text{Tr}(D(G_{00} - G_{22}))}{N} = \frac{e^{-(\beta_1 + \beta_2)} - e^{\beta_2}}{z}, \quad (6.11)$$

$$T_3 = \frac{\text{Tr}(D(G_{11} - G_{22}))}{N} = T_2 - T_1, \quad (6.12)$$

e

$$z = e^{\beta_1} + e^{\beta_2} + e^{-(\beta_1 + \beta_2)}. \quad (6.13)$$

Para minimizá-la com respeito a estes parâmetros fazemos

$$\frac{\partial \bar{F}}{\partial \theta_1} = \frac{\partial \bar{F}}{\partial \theta_2} = \frac{\partial \bar{F}}{\partial \theta_3} = \frac{\partial \bar{F}}{\partial \beta_1} = \frac{\partial \bar{F}}{\partial \beta_2} = 0. \quad (6.14)$$

$$(6.15)$$

Este sistema de equações é explicitamente apresentado no apêndice D pelas equações (D.1) a (D.4). Sua análise numérica revela que as condições de mínimo são satisfeitas

quando $\theta_3 = 0$ ou π . Substituindo este resultado nas equações (D.1) e (D.2) obtemos expressões analíticas para os candidatos às soluções θ_1 e θ_2 em vários intervalos de χ e temperatura. Estes são apresentados na Tabela 6.I.

n	θ_1	θ_2	intervalo de χ
1	0	0	-
2	0	$\frac{\pi}{2}$	-
3	0	$\frac{1}{2} \arccos\left(\frac{-2}{\chi T_2}\right)$	$ \chi \geq 2$
4	$\frac{\pi}{2}$	0	-
5	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{2}$	-
6	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{1}{2} \arccos\left(\frac{-1}{\chi T_2}\right)$	$ \chi \geq 1$
7	-	$\frac{\pi}{2}$	$T_1 = T_2$
8	$\arcsin \sqrt{2 + \chi(T_2 - 2T_1)}$	$\arcsin \sqrt{T_1/T_2}$	$1 \leq \chi \leq 2$
9	$\frac{1}{2} \arccos\left(\frac{-1}{\chi T_1}\right)$	0	$ \chi \geq 1$
10	$\frac{1}{2} \arccos\left(\frac{1}{\chi(T_2 - T_1)}\right)$	$\frac{\pi}{2}$	-
11	$\frac{1}{2} \arccos\left(\frac{3}{3 + 2\chi(T_2 - 2T_1)}\right)$	$\arcsin \sqrt{\frac{3 + \chi(2T_2 - T_1)}{3\chi T_2}}$	$ \chi \geq 3$

Tabela 6.I: Candidatos a mínimos da energia livre encontrados resolvendo (D.1) e (D.2) para $\theta_3 = 0$ (ou π).

Estas soluções são substituídas nas eqs. (D.4) e encontramos β_1 e β_2 numericamente. Verificamos que as soluções que correspondem a mínimos são três (1, 9 e 11

na Tabela 6.I), cada uma delas válida para diferentes intervalos de χ e β . São elas:

- **Regime de Acoplamento Forte (SCR):** Válido para $\chi \leq -3$ e $\beta \geq \beta_{cr1}$, sendo que β_{cr1} é encontrado numericamente e apresentado nas figuras. Estas condições são sintetizadas por

$$\boxed{\chi T_1 \leq -3.} \quad (6.16)$$

Os parâmetros neste caso são

$$\beta_1 = \beta_2 \implies T_1 = T_2 = T, \quad (T_3 = 0), \quad (6.17)$$

$$\cos(2\theta_1) = \frac{3}{3 - 2\chi T}, \quad \sin^2 \theta_2 = \frac{3 + \chi T}{3\chi T}, \quad \theta_3 = 0. \quad (6.18)$$

- **Regime de Acoplamento Intermediário (ICR):** Válido para $\chi \leq -1$ e intervalo de temperatura encontrado numericamente

$$\beta_{cr2} \leq \beta \leq \beta_{cr1} \quad \text{para} \quad \chi \leq -3, \quad (6.19)$$

$$\beta \geq \beta_{cr2} \quad \text{para} \quad -3 \leq \chi \leq -1, \quad (6.20)$$

ou em forma mais compacta

$$\boxed{-3 \leq \chi T_1 \leq -1.} \quad (6.21)$$

E os parâmetros

$$\cos(2\theta_1) = -\frac{1}{\chi T_1}, \quad \theta_2 = 0, \quad \theta_3 = 0. \quad (6.22)$$

- **Regime de Acoplamento Fraco (WCR):** Válido para todos valores de χ sendo um mínimo apenas quando

$$\beta \leq \beta_{cr2} \quad \text{para} \quad \chi \leq -1 \quad (6.23)$$

e

$$\forall \beta \quad \text{para} \quad -1 \leq \chi \leq 0, \quad (6.24)$$

ou em forma mais compacta

$$\boxed{\chi T_1 \geq -1.} \quad (6.25)$$

E os parâmetros

$$\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = 0, \quad \beta_1 = 0, \quad \beta_2 = -\beta. \quad (6.26)$$

As temperaturas de transição de fase são encontradas numericamente e as únicas expressões analíticas que as definem são $\chi T_1 = -1$ e $\chi T_1 = -3$. Assim, concluímos que o equilíbrio estatístico é definido pelo parâmetro $\chi' = \chi T_1$. A fase de acoplamento fraco é análoga a fase normal do modelo de dois níveis, correspondendo a situação onde a interação não tem qualquer papel na definição dos estados de equilíbrio. É um extremo de F para qualquer χ e temperatura, sendo solução de mínimo e portanto física para temperaturas suficientemente altas ou fracas intensidades de interação. Já a fase de acoplamento forte corresponde a situação na qual a interação predomina na caracterização dos estados de equilíbrio, sendo ativa em todos os níveis, haja visto que θ_1 e θ_2 são não nulos. A fase intermediária corresponde a situação entre as duas anteriores, pois nesta, a interação é parcialmente quebrada pelos efeitos térmicos e como veremos de forma mais detalhada na próxima seção, passa a atuar apenas nos dois níveis inferiores. Esta fase é análoga a solução deformada do modelo de Lipkin SU(2). As soluções SCR e ICR só existem na condição de mínimo desaparecendo nas temperaturas de transição de fase.

Como poderemos ver no próximo capítulo, as soluções termodinâmicas estão intimamente ligadas aos estados fundamentais da dinâmica clássica, de modo que cada fase termodinâmica corresponde a um ponto de mínimo da Hamiltoniana clássica a temperatura nula e as transições de fase correspondem às bifurcações destes pontos como função de χ . A temperatura nula, $T_1 = 1$, e as equações (6.16), (6.21) e (6.25) reduzem-se exatamente aos intervalos de existência destes pontos fixos da dinâmica a temperatura nula.

6.2 Propriedades termodinâmicas

Apresentamos nesta seção uma análise detalhada das quantidades termodinâmicas de interesse do modelo que nos permitirá uma compreensão e caracterização das fases termodinâmicas do sistema.

Iniciamos apresentando a energia livre como função do inverso da temperatura para três parâmetros de acoplamento nas figuras 6.1 (a-c). Em 6.1 (a), $\chi = -6, 0$ e temos as três soluções presentes e duas transições de fase: a primeira delas, da fase SCR para ICR, ocorre em $\beta_{cr1} = 0, 4621$ e a segunda da solução ICR para WCR em $\beta_{cr2} = 0, 4258$. Na figura 6.1(b) que corresponde a um valor menor de χ , encontramos apenas uma transição de fase, da solução ICR para a WCR. Neste caso, a solução SCR não existe. A figura 6.1(c) não apresenta qualquer transição de fase, a solução WCR é a única.

A entropia e a energia interna são mostradas na figura 6.2 para $\chi = -6, 0$. Embora contínuas, ambas são não analíticas nas temperaturas de transição de fase. Para baixas temperaturas a entropia é muito pequena e a energia livre é dominada pela contribuição da energia interna. À medida que a temperatura cresce, isto é invertido como esperado.

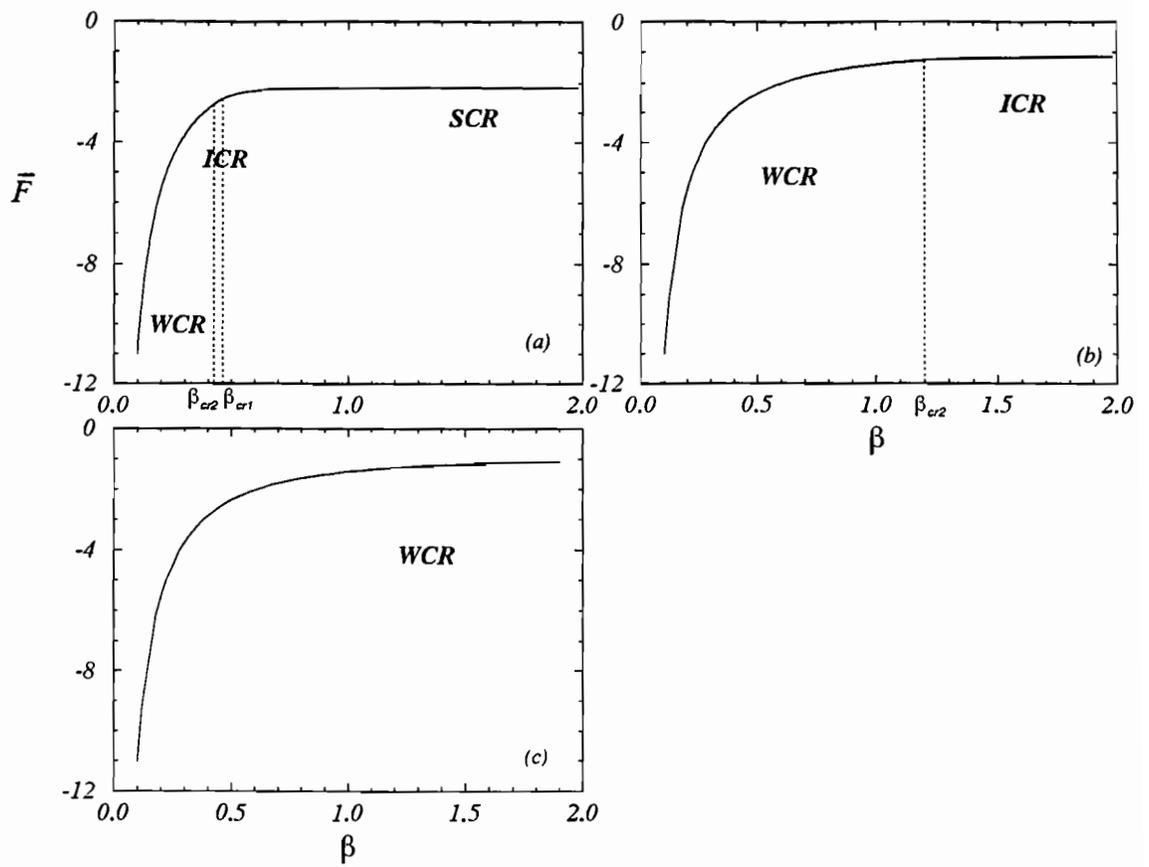


Figura 6.1: Energia livre \bar{F} como função do inverso da temperatura para três valores de parâmetro de acoplamento (a) $\chi = -6, 0$; (b) $\chi = -2, 0$ e em (c) $-1 \leq \chi \leq 0$. Note que em (a) temos três fases (separadas pelas linhas pontilhadas), em (b) duas fases e em (c) apenas uma. Os inversos das temperaturas críticas são indicados.

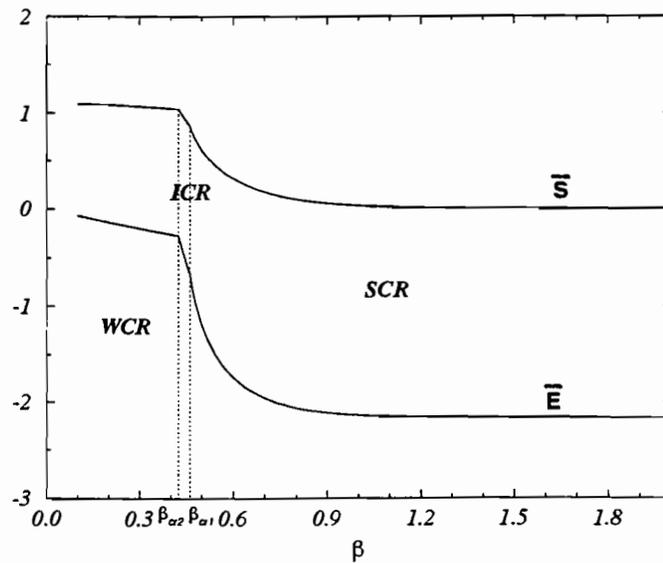


Figura 6.2: Energia interna \bar{E} e entropia \bar{S} como função de β para $\chi = -6, 0$.

Outra quantidade instrutiva é a média das diferenças das populações dos níveis como função de χ e β , a saber

$$P_{01} = \frac{\langle T_1 \rangle}{N} = \frac{\text{Tr}(DU(G_{00} - G_{11})U^\dagger)}{N} = \cos(2\theta_1)(T_1 + \sin^2 \theta_3 T_3 + \sin^2 \theta_2(T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3)) + \sin(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3) T_3, \quad (6.27)$$

$$P_{02} = \frac{\langle T_2 \rangle}{N} = \frac{\text{Tr}(DU(G_{00} - G_{22})U^\dagger)}{N} = \cos(2\theta_2)(T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3) + \frac{1}{2} \sin(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3) T_3 - \sin^2 \theta_1(T_1 + \sin^2 \theta_3 T_3) - \sin^2 \theta_2(T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3), \quad (6.28)$$

onde $P_{01(02)}$ é a diferença das populações médias do primeiro (segundo) nível excitado e do nível fundamental.

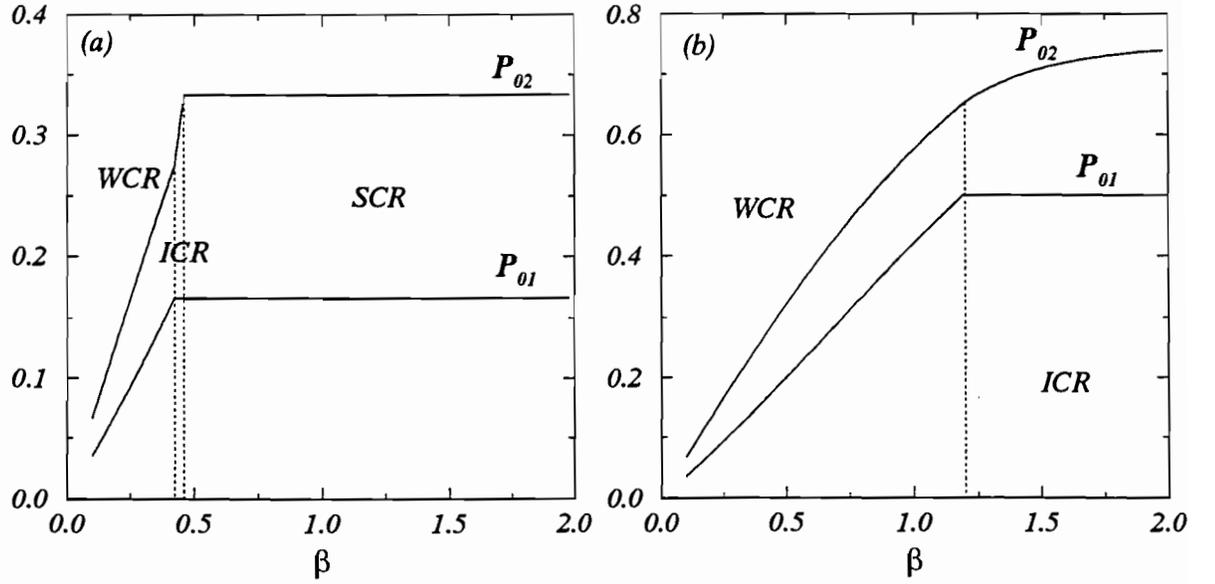


Figura 6.3: P_{01} e P_{02} como função de β para dois valores de parâmetros de acoplamento (a) $\chi = -6, 0$ e (b) $\chi = -2, 0$. Note que variamos as escalas das ordenadas.

São apresentadas nas figuras 6.3 (a) e (b). Para o regime de acoplamento forte ambas as diferenças de populações são mantidas constantes até $\beta = \beta_{cr1}$. Isto revela o papel predominante do termo de interação nesta fase termodinâmica. Para $\beta_{cr2} \leq \beta \leq \beta_{cr1}$ vemos que a temperatura efetivamente diminui este papel. Neste caso a diferença de população entre os níveis 0 e 2 diminui, enquanto o comportamento da diferença entre os níveis 0 e 1 permanece o mesmo. Abaixo de β_{cr2} a interação deixa de ter qualquer papel, e como esperado, o sistema tenderá a popular todos os níveis igualmente como requer a maximização da entropia. Assim, concluímos que aumentar a temperatura efetivamente “enfraquece” o acoplamento.

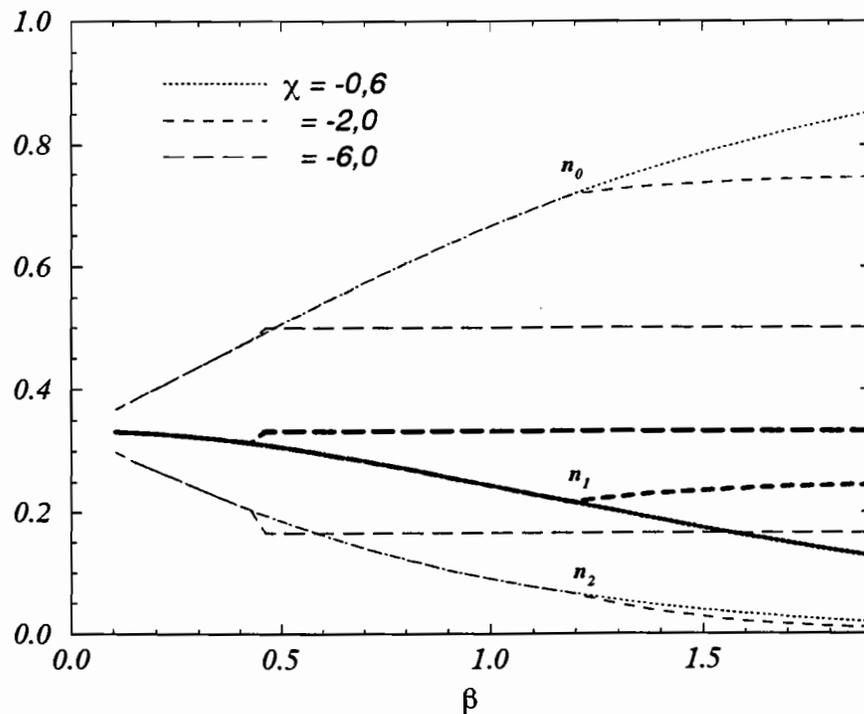


Figura 6.4: Populações médias dos níveis n_0 (três linhas de traços finos na parte superior do gráfico), n_1 (traços grossos) e n_2 (três linhas de traços finos na parte inferior do gráfico) como função de β para os três valores de χ indicados na legenda.

A figura 6.4 apresenta as populações de cada um dos três níveis em função de β

para três valores de χ . Como já vimos, na fase de acoplamento forte as populações dos níveis permanecem constantes. Na fase intermediária os níveis 0 e 1 cedem mesmo número de partículas para o nível 2 proporcionalmente a χ . Na fase de acoplamento fraco as curvas independem de χ . n_0 continua decrescendo e n_2 crescendo, enquanto que n_1 passa a aumentar.

As duas transições de fase de segunda ordem são claramente refletidas no calor específico do sistema, mostrado na figura 6.5. Os comportamentos dos parâmetros de ordem são apresentados na figura 6.6. Os valores médios dos operadores $(G_{02} + G_{20})/2$ e $(G_{01} + G_{10})/2$ podem ser escolhidos como parâmetros de ordem da primeira ($SCR \rightarrow ICR$) e segunda ($ICR \rightarrow WCR$) transições de fase respectivamente. Temos que

$$\langle G_{10} \rangle = -\frac{\sin(2\theta_1)}{2}(T_1 - \sin^2 \theta_2 T_2) \quad \text{e} \quad \langle G_{20} \rangle = -\frac{\cos(2\theta_1) \sin(2\theta_1)}{2} T_2. \quad (6.29)$$

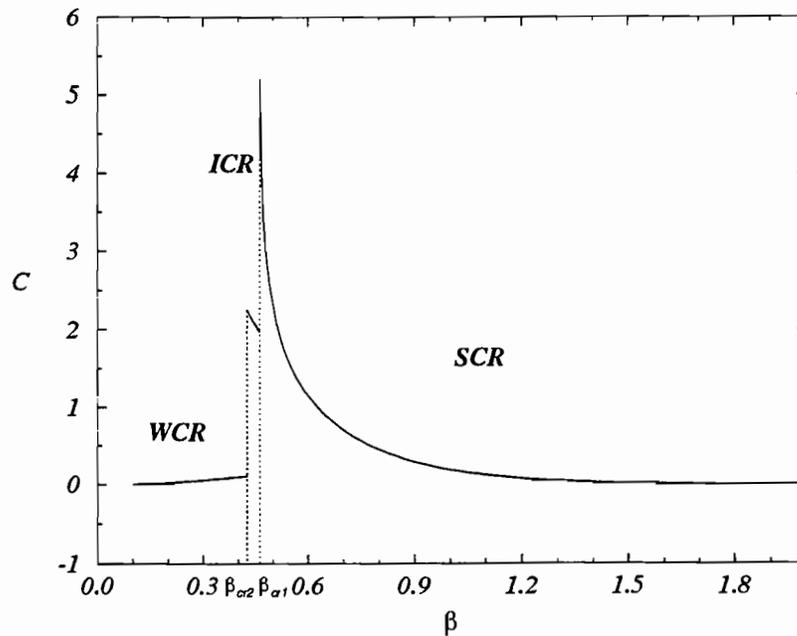


Figura 6.5: Calor específico do sistema em função de β para $\chi = -6, 0$. As transições de fase de segunda ordem são evidenciadas.

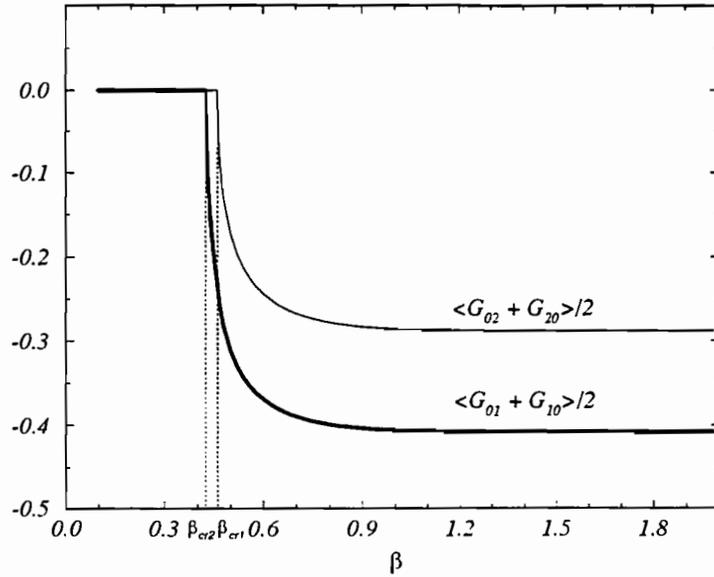


Figura 6.6: Parâmetros de ordem $\langle G_{02} + G_{20} \rangle / 2$ e $\langle G_{01} + G_{10} \rangle / 2$ das transições de fase $SCR \rightarrow ICR$ e $ICR \rightarrow WCR$ respectivamente como função de β para $\chi = -6, 0$.

Suas interpretações reforçam algo que já foi discutido: a supressão das transições de partículas devidas à dinâmica envolvendo o nível 2 (1ª transição de fase) e o nível 1 (2ª transição de fase).

Calculamos também os valores médios dos operadores de Casimir de segunda ordem C_2 (equação (C.2)) e de terceira ordem C_3 (C.3) escalados respectivamente por N^2 e N^3 . Seus valores dependem apenas de χ e β não dependendo da particular condição inicial escolhida, ou seja, para todas as trajetórias de um sistema com determinada temperatura e parâmetro de interação, estes valores médios são os mesmos que os da condição de equilíbrio estatístico. Notamos que estes valores a temperatura nula, sempre são iguais a 1,0, o que corresponde aos valores dos operadores de Casimir da representação simétrica. À medida que a temperatura cresce estas médias diminuem o que corresponderia, dentro do contexto quântico, à participação dos estados das outras representações do sistema nas médias estatísticas. Vemos na figura 6.7(a) que para $\chi \leq -3$ isto ocorre em um intervalo de temperatura inferior, mas próximo a da transição de fase $SCR \rightarrow ICR$. Já para sistemas com $-3 \leq \chi \leq 0$, isto ocorre a qualquer temperatura finita. Isto é observado na figura 6.7 (b).

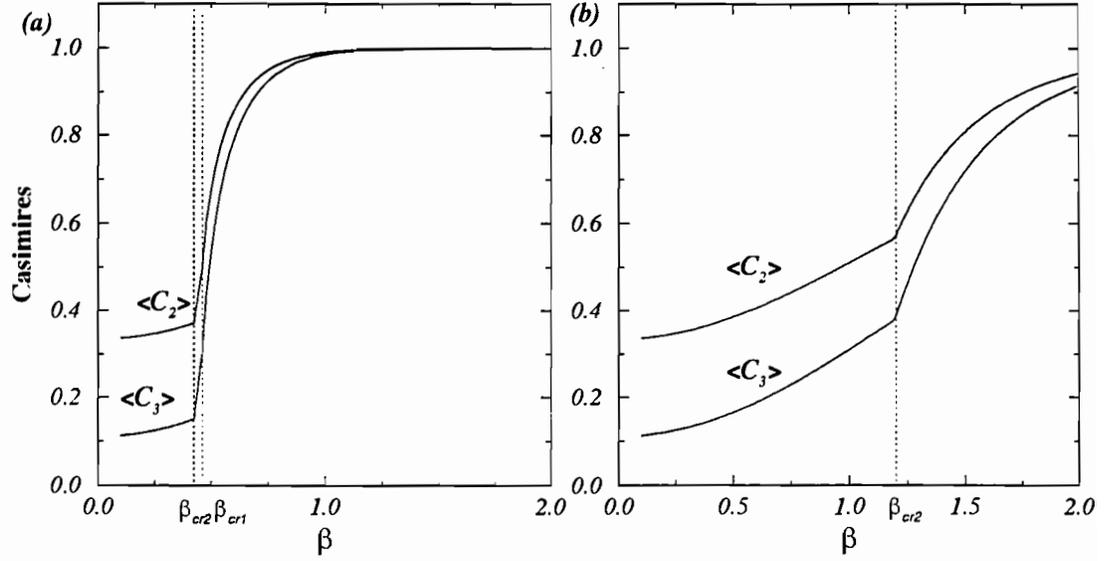


Figura 6.7: Valores médios dos operadores de Casimir de $SU(3)$ de segunda ordem C_2 e de terceira ordem C_3 escalados respectivamente por N^2 e N^3 em função de β para (a) $\chi = -6, 0$ e (b) $\chi = -2, 0$. As diferentes fases termodinâmicas são separadas por linhas pontilhadas e as temperaturas críticas são indicadas.

6.3 Cálculo termodinâmico exato: resultados de N finito.

A aproximação de campo médio que utilizamos envolve todas as representações irredutíveis do grupo $SU(3)$. É possível investigar seus papéis no cálculo exato para N finito e para isto calculamos a contribuição relativa de cada representação irredutível definindo

$$P_{[a]} = \sum_{E_j \in [a]} Y_{[a]} \frac{\exp(-\beta E_j)}{Z}, \quad (6.30)$$

onde $Y_{[a]}$ é a multiplicidade da representação $[a]$ e Z é a função partição calculada sobre todos os 3^N estados do espaço de Hilbert.

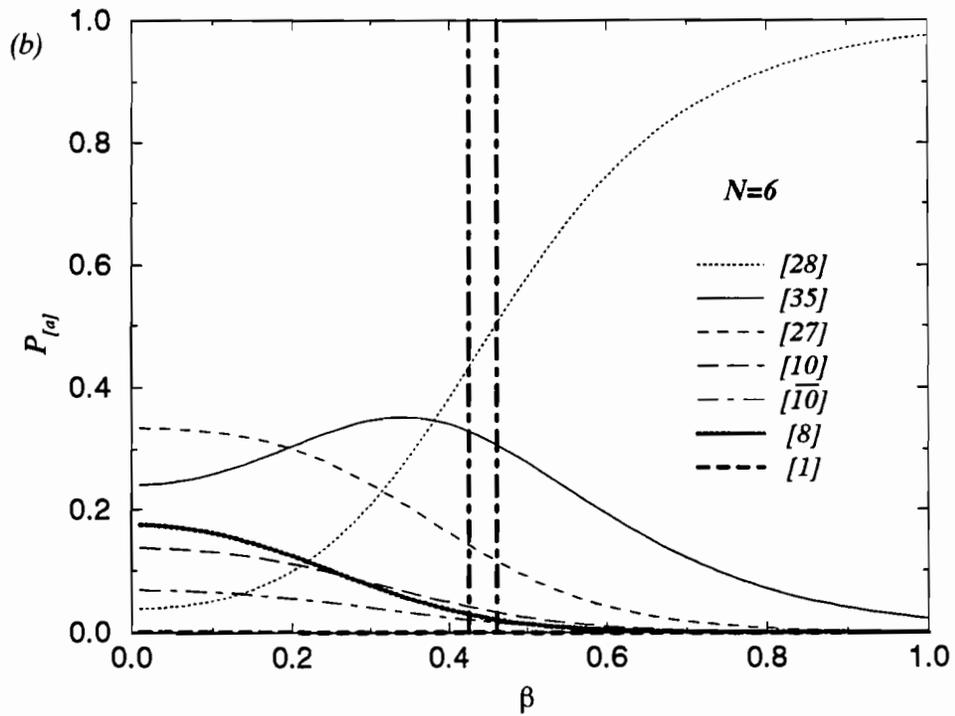
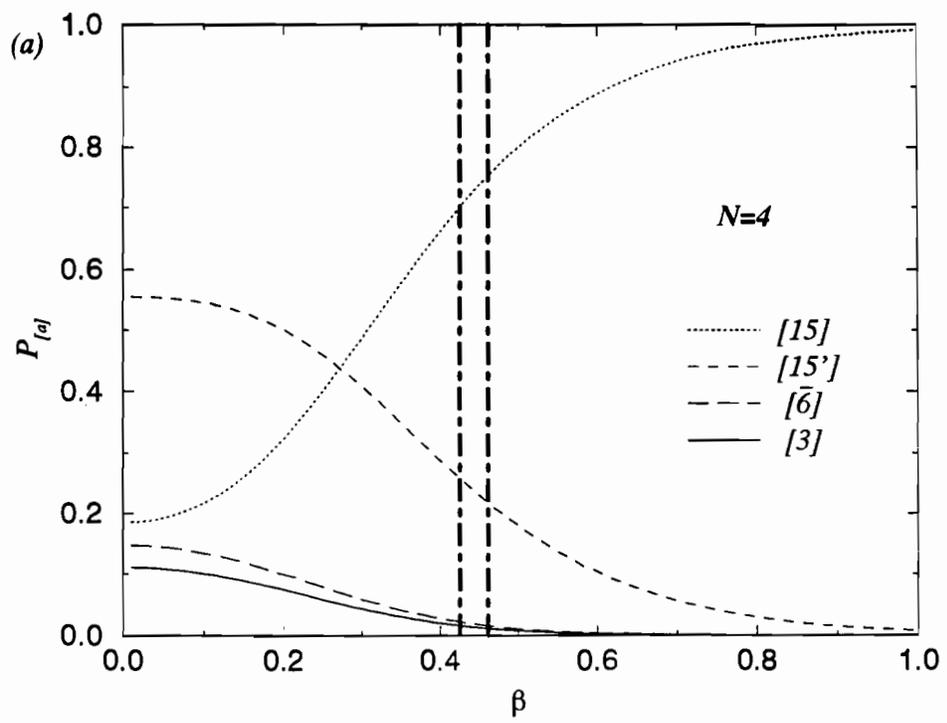


Figura 6.8: Participação das representações irredutíveis nas médias estatísticas para $\chi = -6, 0$ e sistemas de (a) 4 partículas e (b) 6 partículas. As RI são indicadas nas legendas e apresentadas nas figuras 5.2 e 5.4.

Na figura 6.8 temos $P_{[a]}$ como função do inverso da temperatura para $\chi = -6, 0$ e (a) 4 partículas e (b) 6 partículas. As representações irreduzíveis já foram apresentadas no capítulo anterior (figuras 5.2 e 5.4) e são indicadas conforme a legenda. Vemos que para o regime de acoplamento forte a principal contribuição vem da representação simétrica. À medida que a temperatura cresce as outras representações passam a dar contribuições não desprezíveis. Este resultado é consistente com o que observamos através dos valores médios de campo médio dos operadores de Casimir do grupo, como vimos na figura 6.7. Este comportamento é similar ao observado no modelo de Lipkin SU(2) conforme vimos na figura 3.9.

Comparamos também para este modelo os resultados de campo médio com alguns resultados exatos calculados para N finito.

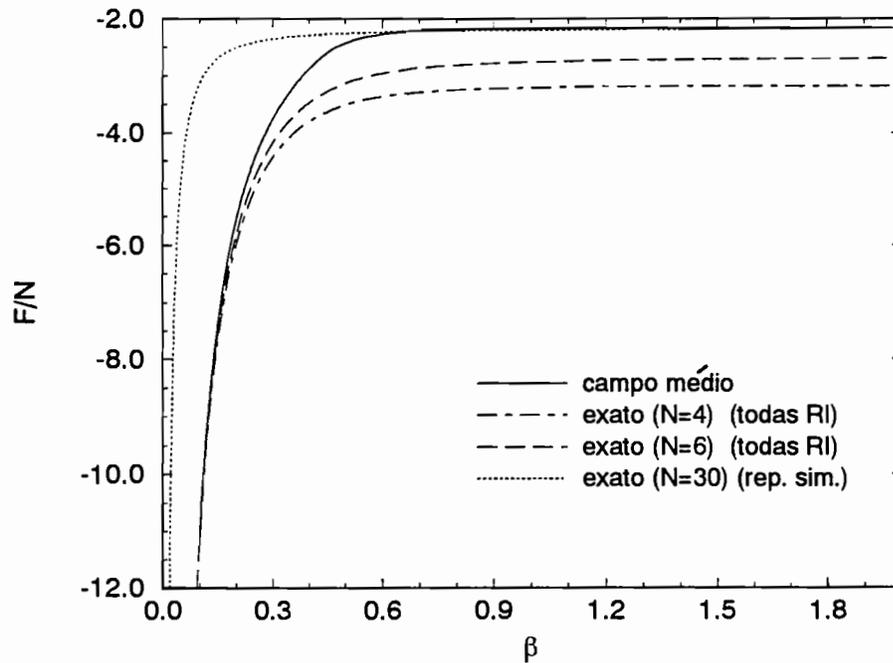


Figura 6.9: Energia livre calculada para $\chi = -6, 0$. Comparamos os resultados de campo médio, cálculo exato para 4 e 6 partículas onde foram considerados todos os estados acessíveis ao sistema e exato para 30 partículas onde consideramos apenas os estados da representação simétrica.

Na figura 6.9 apresentamos a energia livre obtida pelo cálculo de campo médio e cálculo exato para $N = 4$ e $N = 6$, onde consideramos os estados de todas as representações irredutíveis e $N = 30$ onde só consideramos os estados da representação simétrica. Como podemos ver no apêndice C, o cálculo da matriz hamiltoniana para as representações anti-simétricas torna-se muito laborioso à proporção que N cresce, de modo que não calculamos todos os estados para sistemas maiores que os de 6 partículas. Contudo é possível observar, ainda para pequenos N , que as curvas exatas tendem a convergir com as de campo médio. Já observando a curva pontilhada, verificamos novamente que para $\chi = -6$, a temperaturas suficientemente baixas, a representação simétrica domina o sistema, dado que esta curva apresenta boa concordância com a de campo médio.

Dado que as curvas obtidas para a energia interna e entropia são muito similares às curvas do modelo de Lipkin $SU(2)$ (figuras 3.8(b) e (c) para $N = 4$ e 6) optamos por omiti-las.

Capítulo 7

Dinâmica clássica a temperatura finita do modelo de Lipkin SU(3)

Neste capítulo estudamos os efeitos de temperatura finita na dinâmica clássica conservativa do modelo de Lipkin de três níveis.

7.1 Lagrangiana e Hamiltoniana clássicas térmicas

Começamos construindo a Lagrangiana clássica térmica do sistema,

$$L = i \text{Tr}(DU\dot{U}^\dagger) - \text{Tr}(DUHU^\dagger), \quad (7.1)$$

onde D é a matriz densidade diagonal de equilíbrio dada pela equação (6.3). A transformação U também tem a mesma forma do capítulo anterior, mas agora com seus parâmetros dependentes do tempo, isto é,

$$U = U_3 U_2 U_1 = e^{is_3(t)} e^{is_2(t)} e^{is_1(t)}, \quad (7.2)$$

onde

$$s_1(t) = z_1(t)G_{10} + z_1^*(t)G_{01}, \quad (7.3)$$

$$s_2(t) = z_2(t)G_{20} + z_2^*(t)G_{02}, \quad (7.4)$$

$$s_3(t) = z_3(t)G_{21} + z_3^*(t)G_{12}. \quad (7.5)$$

O primeiro termo do lado direito de (7.1) é dado por

$$\begin{aligned} \frac{Tr(DU\dot{U}^\dagger)}{N} = & \frac{\dot{z}_3 z_3^* - z_3 \dot{z}_3^*}{2z_3 z_3^*} S_3^2 T_3 + \frac{\dot{z}_2 z_2^* - z_2 \dot{z}_2^*}{2z_2 z_2^*} S_2^2 (T_2 - S_3^2 T_3) + \\ & + \frac{\dot{z}_1 z_1^* - z_1 \dot{z}_1^*}{2z_1 z_1^*} S_1^2 \left\{ T_1 + S_3^2 T_3 - S_2^2 (T_2 - S_3^2 T_3) + \right. \\ & + i \frac{(z_1 z_2^* z_3 - z_1^* z_2 z_3^*)}{\sqrt{z_1 z_1^*} \sqrt{z_2 z_2^*} \sqrt{z_3 z_3^*}} \frac{C_1 S_2 S_3 C_3}{S_1} T_3 \left. \right\} + \\ & + i \frac{(\dot{z}_1 z_1^* + z_1 \dot{z}_1^*)}{2z_1 z_1^*} (z_1 z_2^* z_3 + z_1^* z_2 z_3^*) \frac{S_2 S_3 C_3}{\sqrt{z_2 z_2^*} \sqrt{z_3 z_3^*}} T_3 \quad (7.6) \end{aligned}$$

com

$$S_j = \sin \sqrt{z_j z_j^*}, \quad C_j = \cos \sqrt{z_j z_j^*}, \quad R_j = \sqrt{z_j z_j^*}, \quad j = 1, 2, 3; \quad (7.7)$$

e T_1 , T_2 e T_3 dados pelas equações (6.10) a (6.12). Seus valores correspondentes às soluções de equilíbrio termodinâmico foram encontrados numericamente no capítulo anterior para interações atrativas e são apresentados na figura 7.1 para (a) $\chi = -2$ e (b) $\chi = -6$.

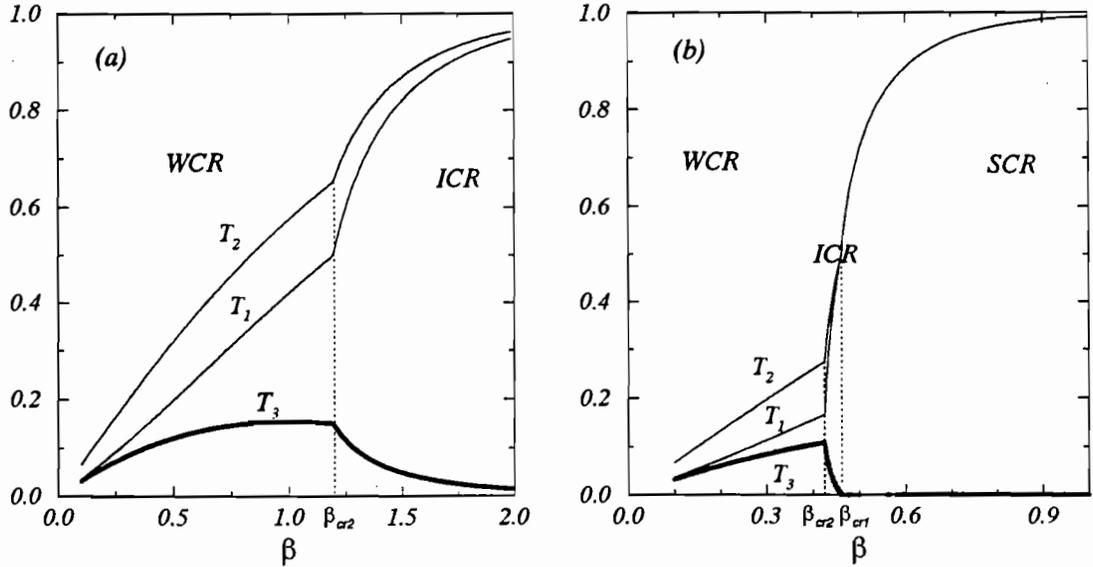


Figura 7.1: T_1 , T_2 e T_3 em função de β para (a) $\chi = -2$ e (b) $\chi = -6$. Note que para a fase SCR, T_3 anula-se.

O segundo termo do lado direito da equação (7.1) corresponde a Hamiltoniana do sistema. Em termos das variáveis z_1 , z_2 e z_3 é dada por

$$\begin{aligned}
\frac{\mathcal{H}(z_i, z_i^*)}{N} = & (-1 + 2S_2^2)(T_2 - S_3^2 T_3) + i(z_1 z_2^* z_3 - z_1^* z_2 z_3^*) \frac{S_1 C_1 S_2 S_3 C_3}{R_1 R_2 R_3} T_3 + \\
& + S_1^2 \{T_1 + S_3^2 T_3 - S_2^2 (T_2 - S_3^2 T_3)\} + \frac{\chi}{2} \left\{ -(z_1^2 + z_1^{*2}) \left(\frac{S_1 C_1}{R_1} \right)^2 \cdot \right. \\
& \cdot \left\{ T_1 + S_3^2 T_3 - S_2^2 (T_2 - S_3^2 T_3) \right\}^2 + \left\{ [(z_2 z_3^*)^2 + (z_2^* z_3)^2] C_1^4 + \right. \\
& + \left[\left(\frac{z_1 z_2^* z_3}{z_1^*} \right)^2 + \left(\frac{z_1^* z_2 z_3^*}{z_1} \right)^2 \right] S_1^4 + 2 \left(\frac{z_1}{z_1^*} + \frac{z_1^*}{z_1} \right) R_2^2 R_3^2 C_1^2 S_1^2 \left. \right\} \cdot \\
& \cdot \left(\frac{S_2 S_3 C_3}{R_2 R_3} \right)^2 T_3^2 + \left\{ (z_1 z_2 z_3^* - z_1^* z_2^* z_3) C_1^2 + \left(\frac{z_1^2 z_2^* z_3}{z_1^*} - \frac{z_1^* z_2 z_3^*}{z_1} \right) S_1^2 \right\} \cdot \\
& \cdot 2i \frac{S_1 C_1 S_2 S_3 C_3}{R_1 R_2 R_3} T_3 [T_1 + S_3^2 T_3 - S_2^2 (T_2 - S_3^2 T_3)] - (z_2^2 + z_2^{*2}) \cdot \\
& \cdot \left(\frac{C_1 S_2 C_2}{R_2} \right)^2 (T_2 - S_3^2 T_3)^2 + [(z_1 z_3)^2 + (z_1^* z_3^*)^2] \left(\frac{S_1 C_2 S_3 C_3}{R_1 R_3} \right)^2 T_3^2 + \\
& - 2i (z_1 z_2 z_3 - z_1^* z_2^* z_3^*) \frac{S_1 C_1 S_2 C_2^2 S_3 C_3}{R_1 R_2 R_3} T_3 (T_2 - S_3^2 T_3) - (z_3^2 + z_3^{*2}) \cdot \\
& \cdot \left(\frac{C_1 C_2 S_3 C_3}{R_3} \right)^2 T_3^2 + [(z_1^* z_2)^2 + (z_1 z_2^*)^2] \left(\frac{S_1 S_2 C_2}{R_1 R_2} \right)^2 [T_2 - S_3^2 T_3]^2 + \\
& - 2i (z_1^* z_2 z_3 - z_1 z_2^* z_3^*) \frac{S_1 C_1 S_2 C_2^2 S_3 C_3}{R_1 R_2 R_3} T_3 (T_2 - S_3^2 T_3) \left. \right\}. \quad (7.8)
\end{aligned}$$

Como foi feito anteriormente, tentamos expressar os três graus de liberdade do sistema em termos de variáveis canônicas através de inspeções e manipulações de (7.6). Contudo, apesar do teorema de Darboux [1] garantir a existência das formas canônicas, não obtivemos êxito em nossas muitas tentativas, exceto para o caso onde $T_3 = 0$ ($T_2 = T_1$). Esta particular situação corresponde precisamente a fase de acoplamento forte do sistema (SCR) e também a situação de temperatura nula, onde $T_1 = T_2 = 1$ para qualquer valor de χ . Para estes casos, a dinâmica clássica do sistema reduz-se a apenas dois graus de liberdade. Temos aqui então um importante efeito da temperatura na dinâmica clássica deste modelo: o surgimento de um terceiro grau de

liberdade inexistente a temperatura nula. A fim de investigar este novo efeito, vamos estudar o movimento de pequenas amplitudes em torno dos estados de equilíbrio termodinâmico.

Vale ressaltar neste ponto que procuramos fazer uso de outros métodos e meios para definir a estrutura simplética do espaço de fase clássico, mas não obtivemos sucesso nesta tarefa. Por esse motivo, estudaremos a dinâmica posteriormente na seção 7.4 através de uma abordagem alternativa já apresentada na seção 1.1.

Vamos então agora a análise perturbativa, cujos resultados principais estão publicados em [46].

7.2 Movimento de pequenas amplitudes

As flutuações de pequenas amplitudes em torno do equilíbrio são descritas pela Lagrangiana de segunda ordem[47]

$$\mathcal{L}^{(2)} = \sum_{i=1}^3 \frac{i}{2} (\dot{\gamma}_i \gamma_i^* - \gamma_i \dot{\gamma}_i^*) - \mathcal{H}^{(2)}(\gamma_i, \gamma_i^*), \quad (7.9)$$

com

$$\mathcal{H}^{(2)}(\gamma_i, \gamma_i^*) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \gamma_1^* & \gamma_2^* & \gamma_3^* & \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \\ \gamma_1^* \\ \gamma_2^* \\ \gamma_3^* \end{pmatrix}, \quad (7.10)$$

onde as variáveis $\gamma_i, \gamma_i^*, i = 1, 2, 3$ são variáveis canônicas relacionadas a pequenos desvios $\delta z_i, \delta z_i^*$ das soluções de equilíbrio e A, B são matrizes 3×3 que serão definidas de acordo com cada uma das três fases termodinâmicas.

As frequências RPA (frequências de pequenas oscilações) são dadas pela equação

$$\Omega_i^2 u = (A + B) \cdot (A - B) u, \quad i = 1, 2, 3. \quad (7.11)$$

Discutiremos agora este movimento de pequenas amplitudes em torno das soluções de equilíbrio termodinâmico para cada um dos regimes do sistema:

- **Regime de acoplamento fraco (WCR):** O estado de equilíbrio estatístico deste regime corresponde a um mínimo absoluto da energia livre do sistema e como vimos é definido por

$$z_1 = z_2 = z_3 = 0, \quad \beta_1 = 0, \quad \beta_2 = -\beta. \quad (7.12)$$

Sendo válido para $\chi T_1 \geq -1$, esta solução tem a seguinte energia interna e energia livre

$$\frac{E_0}{N} = -T_2, \quad e \quad \frac{F_0}{N} = -\frac{1}{\beta}(\ln[1 + 2 \cosh(\beta)]). \quad (7.13)$$

Neste regime introduzimos as seguintes variáveis canônicas

$$\gamma_1 = \delta z_1 \sqrt{T_1}, \quad \gamma_2 = \delta z_2 \sqrt{T_2}, \quad \gamma_3 = \delta z_3 \sqrt{T_3}. \quad (7.14)$$

Assim, as matrizes A e B são dadas por

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} -\chi T_1 & 0 & 0 \\ 0 & -\chi T_2 & 0 \\ 0 & 0 & -\chi T_3 \end{pmatrix}, \quad (7.15)$$

e finalmente obtemos as seguintes frequências RPA:

$$\Omega_1 = \sqrt{1 - \chi^2 T_1^2}, \quad \Omega_2 = \sqrt{4 - \chi^2 T_2^2}, \quad \Omega_3 = \sqrt{1 - \chi^2 T_3^2}. \quad (7.16)$$

- **Regime de acoplamento intermediário (ICR):** Os estados de equilíbrio estatístico, correspondendo a dois mínimos simétricos de F , são válidos para $-3 \leq \chi T_1 \leq -1$ e definidos por



$$z_1 = -z_1^* = \pm ia, \quad \cos(2a) = \frac{-1}{\chi T_1}, \quad (7.17)$$

$$z_2 = z_3 = 0, \quad (7.18)$$

$$\ln\left(\frac{P_2^2}{P_0 P_1}\right) = -3\beta, \quad \ln\left(\frac{P_2 P_1}{P_0^2}\right) = -\frac{3\beta}{2}(T_1 \chi - 1), \quad (7.19)$$

onde $P_j = \text{Tr}(DG_{jj})$, $j = 0, 1, 2$. A energia de equilíbrio por partícula é

$$\frac{E_0}{N} = -T_2 + T_1 \sin^2(a) + \frac{T_1^2 \chi \sin^2(2a)}{4}. \quad (7.20)$$

Introduzimos as variáveis canônicas

$$\gamma_1 = \delta z_1 \sqrt{T_1 \sin(2a)/2a}, \quad \gamma_2 = \delta z_2 \sqrt{T_2}, \quad \gamma_3 = \delta z_3 \sqrt{T_3}, \quad (7.21)$$

e obtemos as seguintes matrizes de RPA em termos de a :

$$A_{ij} = B_{ij} = 0, \quad i \neq j \quad (7.22)$$

$$A_{11} = \frac{\csc(2a)}{2a} \left(a \sin(2a) + 2a^2 \cos(2a) + \frac{\chi}{2} T_1 (a \sin(4a) - 2 \sin^2(2a) + 4a^2 \cos(4a)) \right),$$

$$A_{22} = 2 - \sin^2(a) - \frac{\chi}{2} T_1 \sin^2(2a), \quad A_{33} = 1 + \sin^2(a) + \frac{\chi}{2} T_1 \sin^2(2a),$$

$$B_{11} = \frac{\csc(2a)}{2a} \left(a \sin(2a) - 2a^2 \cos(2a) + \frac{\chi}{2} T_1 (a \sin(4a) - 2 \sin^2(2a) - 4a^2 \cos(4a)) \right),$$

$$B_{22} = -T_2 \chi, \quad B_{33} = -T_3 \chi.$$

Finalmente, as frequências RPA são

$$\Omega_1 = \sqrt{2[(\chi T_1)^2 - 1]}, \quad (7.23)$$

$$\Omega_2 = \frac{1}{2} \sqrt{(3 - \chi T_1)^2 - (2\chi T_2)^2}, \quad (7.24)$$

$$\Omega_3 = \frac{1}{2} \sqrt{(3 + \chi T_1)^2 - (2\chi T_3)^2}. \quad (7.25)$$

- **Regime de acoplamento forte (SCR):** Neste regime os estados de equilíbrio estatístico são quatro mínimos de F válidos para $\chi T_1 \leq -3$. Ocorrem para $T_3 = 0$, $T_1 = T_2$ e portanto o comportamento do sistema independe das variáveis z_3, z_3^* . Deste modo, as matrizes RPA reduzem-se a matrizes 2×2 e as equações RPA envolvem somente flutuações das variáveis z_1, z_1^*, z_2 e z_2^* . Além disso, para esta fase podemos definir variáveis canônicas para movimentos de grandes amplitudes como veremos na próxima seção. No equilíbrio estatístico as variáveis γ_i, γ_i^* são imaginárias puras dadas por $\gamma_1 = -\gamma_1^* = \pm ia$, e $\gamma_2 = -\gamma_2^* = \pm ib$, onde $a^2 = T_1/3$ e $b^2 = (3 + T_1\chi)/(3\chi)$. A energia tem o valor

$$\frac{E_0}{N} = -T_1 + a^2 + 2b^2 + \chi \left((a^2 + b^2)(T_1 - a^2 - b^2) + a^2b^2 \right). \quad (7.26)$$

As matrizes RPA em termos de a e b têm as formas

$$A = \begin{pmatrix} 1 - \chi(3a^2 + b^2) & 0 \\ 0 & 2 - \chi(a^2 + 3b^2) \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \chi(3a^2 - T_1) & 2ab\chi \\ 2ab\chi & \chi(3b^2 - T_2) \end{pmatrix}. \quad (7.27)$$

Dado que $T_1 = T_2$ obtemos as frequências RPA

$$\Omega_i = \sqrt{\frac{4}{3} \left[(T_1\chi)^2 - 3 \pm \sqrt{9 + 3(T_1\chi)^2} \right]}, \quad i = 1, 2. \quad (7.28)$$

Devemos ressaltar que o terceiro grau de liberdade e portanto as terceiras frequências só existem para $T_3 \neq 0$. Veja (7.14) e (7.21).

No limite de temperatura nula, para todos os sistemas, $T_3 \rightarrow 0$, T_1 e $T_2 \rightarrow 1$ e as frequências RPA reduzem-se aos resultados da ref.[33]:

$$i = 1, 2 \quad \Omega_i = \begin{cases} \sqrt{1 - \chi^2}, \sqrt{4 - \chi^2}, & -1 < \chi < 0 \\ \sqrt{2(\chi^2 - 1)}, \frac{1}{2}\sqrt{3(\chi + 3)(1 - \chi)}, & -3 < \chi < -1 \\ \sqrt{\frac{4}{3} \left[\chi^2 - 3 \pm \sqrt{3\chi^2 + 9} \right]}, & \chi < -3. \end{cases}$$

Nas figuras 7.2 (a) e (b) apresentamos as frequências RPA respectivamente para $\chi = -2$ e $\chi = -6$.

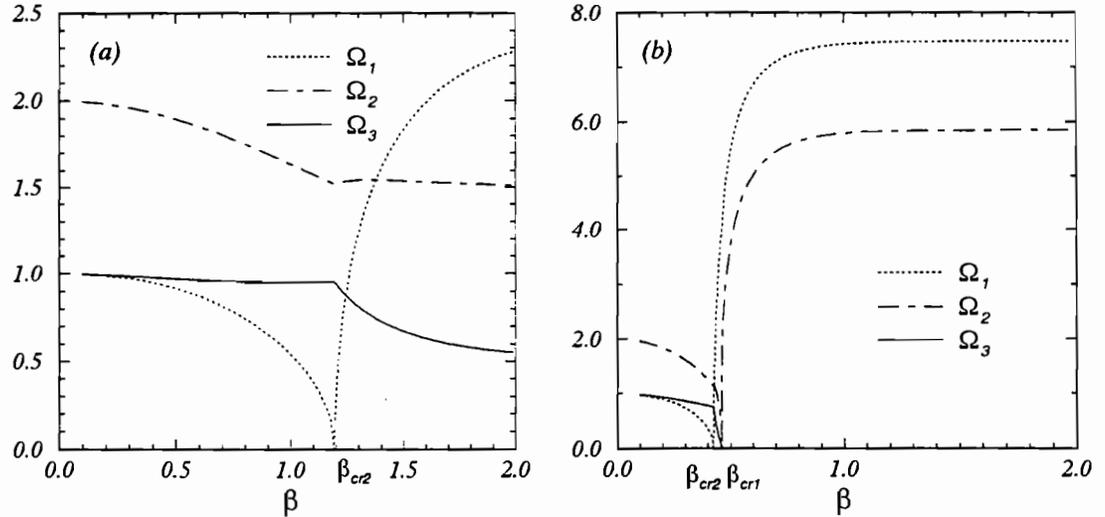


Figura 7.2: Frequências RPA como função de β para (a) $\chi = -2$ e (b) $\chi = -6$. Note o surgimento do terceiro modo na transição de fase $SCR \rightarrow ICR$.

Notamos que para temperaturas finitas o terceiro grau de liberdade é excitado enquanto que para temperatura nula e para a fase de acoplamento forte permanece inerte. Esta característica da dependência da temperatura dos modos de pequenas oscilações é também descrita na ref. [48] para um modelo similar.

7.3 Movimento de grandes amplitudes no regime de acoplamento forte

Como mencionamos anteriormente, na fase de acoplamento forte o termo T_3 anula-se e a dinâmica clássica do modelo restringe-se a dois graus de liberdade. Somos então capazes de encontrar variáveis canonicamente conjugadas e analisar a dinâmica completa do sistema, definindo o comportamento a temperatura finita dos pontos estacionários de forma análoga ao estudo da ref.[18] realizado para temperatura nula

e caracterizando as trajetórias clássicas por todo espaço de fase. Assim sendo, *para esta fase* definimos dois pares de variáveis canonicamente conjugadas

$$\gamma_1 = z_1 \frac{\sin \sqrt{z_1 z_1^*}}{\sqrt{z_1 z_1^*}} \cos \sqrt{z_2 z_2^*} \sqrt{T}, \quad (7.29)$$

$$\gamma_2 = z_2 \frac{\sin \sqrt{z_2 z_2^*}}{\sqrt{z_2 z_2^*}} \sqrt{T}, \quad (T \equiv T_1 = T_2). \quad (7.30)$$

Em termos destas variáveis a equação (7.6) reduz-se a

$$\frac{Tr(DU\dot{U}^\dagger)}{N} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^2 \dot{\gamma}_k \gamma_k^* - \gamma_k \dot{\gamma}_k^*, \quad (7.31)$$

e a Hamiltoniana clássica é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}_{cl}}{N} = & -T + 2\gamma_2 \gamma_2^* + \gamma_1 \gamma_1^* + \frac{\chi}{2} \{ -(T - \gamma_1 \gamma_1^* - \gamma_2 \gamma_2^*) \cdot \\ & \cdot (\gamma_1^2 + \gamma_1^{*2} + \gamma_2^2 + \gamma_2^{*2}) + (\gamma_1^* \gamma_2)^2 + (\gamma_1 \gamma_2^*)^2 \}. \end{aligned} \quad (7.32)$$

Um dos efeitos de temperatura na dinâmica é restringir o espaço de fases do sistema, veja eq. (7.29) e (7.30)

$$0 \leq \gamma_2 \gamma_2^* \leq T \quad (7.33)$$

e

$$0 \leq \frac{\gamma_1 \gamma_1^*}{T - \gamma_2 \gamma_2^*} \leq 1. \quad (7.34)$$

Sendo conveniente expressar a Hamiltoniana clássica em termos de variáveis reais definimos

$$\gamma_2 = \sqrt{\eta_2} e^{i\theta_2} \quad e \quad \gamma_1 = \sqrt{\eta_1} e^{i\theta_1}, \quad (7.35)$$

com os intervalos de valores permitidos

$$0 \leq \eta_1 + \eta_2 \leq T. \quad (7.36)$$

No limite de grandes N , a Hamiltoniana clássica por partícula é definida por

$$E = \frac{\mathcal{H}_{cl}}{N} = -T + 2\eta_2 + \eta_1 + \chi\{-(T - \eta_1 - \eta_2)[\eta_1 \cos(2\theta_1) + \eta_2 \cos(2\theta_2)] + \eta_1\eta_2 \cos[2(\theta_1 - \theta_2)]\}. \quad (7.37)$$

No limite de temperatura nula recuperamos o resultado previamente obtido em [18] (equação 2.9). Encontramos apenas uma diferença de sinal decorrente de uma diferença de fase existente entre as definições das variáveis de ângulo dos dois trabalhos que pode ser eliminada por uma transformação canônica simples.

Nossas variáveis η_1 e η_2 são as variáveis de ação do sistema de interação nula e relacionam-se com as populações N_k dos níveis (ou camadas) escaladas pelo número de partículas do sistema por

$$N_1 = \frac{\text{Tr}(DUG_{11}U^\dagger)}{N} = \frac{\text{Tr}(DG_{11})}{N} + \eta_1, \quad (7.38)$$

$$N_2 = \frac{\text{Tr}(DUG_{22}U^\dagger)}{N} = \frac{\text{Tr}(DG_{22})}{N} + \eta_2, \quad (7.39)$$

$$N_0 = \frac{\text{Tr}(DUG_{00}U^\dagger)}{N} = \frac{\text{Tr}(DG_{00})}{N} - \eta_1 - \eta_2. \quad (7.40)$$

Os intervalos de valores restritos destas variáveis definidos pela eq. (7.36) decorre da conservação do número de partículas do sistema ($\sum_{k=0}^2 N_k = 1$). Poderíamos utilizar as variáveis N_k em lugar de η_k , mas isto implica em termos vários termos independentes do tempo a mais na Hamiltoniana clássica.

Alternativamente, ainda podemos definir novas variáveis independentes da temperatura

$$\Gamma_1 = \frac{\gamma_1}{\sqrt{T}} = z_1 \frac{\sin \sqrt{z_1 z_1^*}}{\sqrt{z_1 z_1^*}} \cos \sqrt{z_2 z_2^*} \implies \mathcal{I}_1 = \frac{\eta_1}{T}, \quad (7.41)$$

$$\Gamma_2 = \frac{\gamma_2}{\sqrt{T}} = z_2 \frac{\sin \sqrt{z_2 z_2^*}}{\sqrt{z_2 z_2^*}} \implies \mathcal{I}_2 = \frac{\eta_2}{T}, \quad (7.42)$$

e uma constante de acoplamento efetiva

$$\chi_{\beta} = \chi T, \quad (7.43)$$

obtendo

$$\frac{L}{N} = T \frac{i}{2} \sum_{k=1}^2 (\dot{\Gamma}_k \Gamma_k^* - \Gamma_k \dot{\Gamma}_k^*) - T \mathcal{E}, \quad (7.44)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = \frac{E}{T} = & -1 + 2\mathcal{I}_2 + \mathcal{I}_1 + \chi_{\beta} \{ -(1 - \mathcal{I}_1 - \mathcal{I}_2) [\mathcal{I}_1 \cos(2\theta_1) + \mathcal{I}_2 \cos(2\theta_2)] + \\ & + \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 \cos[2(\theta_1 - \theta_2)] \}. \end{aligned} \quad (7.45)$$

e

$$0 \leq \mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2 \leq 1. \quad (7.46)$$

Esta é precisamente a Hamiltoniana clássica a temperatura nula com parâmetro de interação χ_{β} . Daí podemos concluir que o efeito de temperatura na fase de acoplamento forte é o mesmo observado no modelo de Lipkin SU(2) e no modelo do Maser de Dicke [7] (também caótico), ou seja, a temperatura não traz aspectos dinâmicos novos em relação ao sistema de temperatura nula, produzindo o que usualmente denomina-se “scaling” (escalonamento). Entretanto é necessário termos claro que os estados térmicos não podem ser simulados simplesmente mudando-se parâmetros da Hamiltoniana fria e são efetivamente distintos em relação aos estados do sistema de temperatura nula.

7.3.1 Equações de movimento, pontos fixos e bifurcações no regime de acoplamento forte

As equações de movimento para o regime de acoplamento forte obtidas a partir da Hamiltoniana (7.37) são dadas por

$$\dot{\eta}_1 = -\frac{\partial E}{\partial \theta_1} = 2\eta_1\chi \{-(T - \eta_1 - \eta_2) \sin(2\theta_1) + \eta_2 \sin[2(\theta_1 - \theta_2)]\}, \quad (7.47)$$

$$\dot{\eta}_2 = -\frac{\partial E}{\partial \theta_2} = -2\eta_2\chi \{(T - \eta_1 - \eta_2) \sin(2\theta_2) + \eta_1 \sin[2(\theta_1 - \theta_2)]\}, \quad (7.48)$$

$$\dot{\theta}_1 = \frac{\partial E}{\partial \eta_1} = 1 + \chi \{-(T - 2\eta_1 - \eta_2) \cos(2\theta_1) + \eta_2 [\cos(2\theta_2) + \cos[2(\theta_1 - \theta_2)]]\}, \quad (7.49)$$

$$\dot{\theta}_2 = \frac{\partial E}{\partial \eta_2} = 2 + \chi \{\eta_1 [\cos(2\theta_1) + \cos[2(\theta_1 - \theta_2)]] - (T - \eta_1 - 2\eta_2) \cos(2\theta_2)\}. \quad (7.50)$$

O modelo tem uma estrutura clássica muito rica como já foi previamente estudado no limite de temperatura nula na ref. [18]. Estudamos aqui treze dos quatorze pontos estacionários analiticamente. Apresentamos na Tabela 7.I as energias, coordenadas e intervalos de validade destas soluções a temperatura finita. São rotuladas de A a N em ordem crescente de energia para a situação onde $\chi > 0$. O décimo quarto ponto, rotulado por G , só pode ser encontrado numericamente e por ser de pouco interesse aqui foi deixado de lado. Os traços nas variáveis θ_k indicam que qualquer valor para estas satisfaz as condições de equilíbrio, e ocorrem quando as respectivas variáveis η_k são nulas.

Na figura 7.3 temos as energias dos pontos estacionários a temperatura nula para interações atrativas e repulsivas em função de χ . Os únicos pontos de equilíbrio estável são os de menor energia para cada valor de χ (N (4 mínimos) para $\chi < -3$; K (2 mínimos) para $-3 < \chi < -1$; H (1 mínimo) para $-1 < \chi < +1$ e A (2 mínimos) para $\chi > 1$). As linhas pontilhadas foram utilizadas apenas para destacar soluções distintas.

Ponto	E	η_1	η_2	θ_1	θ_2	Validade
A	$\frac{-(\chi T+1)^2}{4\chi}$	$\frac{\chi T-1}{2\chi}$	0	0	-	$ \chi T \geq 1$
B	$\frac{-(\chi^2 T^2+4)}{4\chi}$	0	$\frac{\chi T-2}{2\chi}$	-	0	$ \chi T \geq 2$
C	$\frac{-(\chi T+1)^2}{5\chi}$	$\frac{\chi T-4}{5\chi}$	$\frac{\chi T+1}{5\chi}$	0	0	$\chi T \leq -1$ ou $\chi T \geq 4$
D	$\frac{-(\chi T-1)^2}{4\chi}$	$\frac{\chi T+1}{2\chi}$	$\frac{\chi T-1}{2\chi}$	$\theta_2 + \frac{\pi}{2}$	$\cos(2\theta_2) = \frac{3-\chi T}{2}$	$1 \leq \chi T \leq 5$
E	$\frac{-(\chi^2 T^2-5)}{5\chi}$	$\frac{3T}{5}$	$\frac{\chi T+5}{5\chi}$	0	$\frac{\pi}{2}$	$ \chi T \geq 5$
F	$\frac{-(\chi T-1)^2}{5\chi}$	$\frac{\chi T+4}{5\chi}$	$\frac{3(\chi T-1)}{5\chi}$	$\frac{\pi}{2}$	0	$\chi T \leq -4$ ou $\chi T \geq 1$
H	$-T$	0	0	-	-	$\forall \chi, T$
I	0	T	0	$\cos(2\theta_1) = \frac{-1}{\chi T}$	-	$ \chi T \geq 1$
J	$+T$	0	T	-	$\cos(2\theta_2) = \frac{-2}{\chi T}$	$ \chi T \geq 2$
K	$\frac{(\chi T-1)^2}{4\chi}$	$\frac{\chi T+1}{2\chi}$	0	$\frac{\pi}{2}$	-	$ \chi T \geq 1$
L	$\frac{\chi^2 T^2+4}{4\chi}$	0	$\frac{\chi T+2}{2\chi}$	-	$\frac{\pi}{2}$	$ \chi T \geq 2$
M	$\frac{(\chi T+1)^2}{4\chi}$	$\frac{\chi T-1}{2\chi}$	$\frac{\chi T+1}{2\chi}$	$\cos(2\theta_1) = \frac{-(\chi T+3)}{2\chi T}$	θ_1	$\chi T \leq -1$ ou $\chi T \geq 3$
N	$\frac{\chi^2 T^2+3}{3\chi}$	$\frac{T}{3}$	$\frac{\chi T+3}{3\chi}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{2}$	$ \chi T \geq 3$

Tabela 7.I: Energias, coordenadas η_1 , η_2 , θ_1 e θ_2 e intervalos de validade como função do parâmetro de interação χ e do termo dependente da temperatura $T = T_1 = T_2$ de treze dos quatorze pontos fixos da Hamiltoniana (7.37) para a fase de acoplamento forte. Os pontos são rotulados de A a N. A solução G foi omitida e pode ser encontrada apenas numericamente.

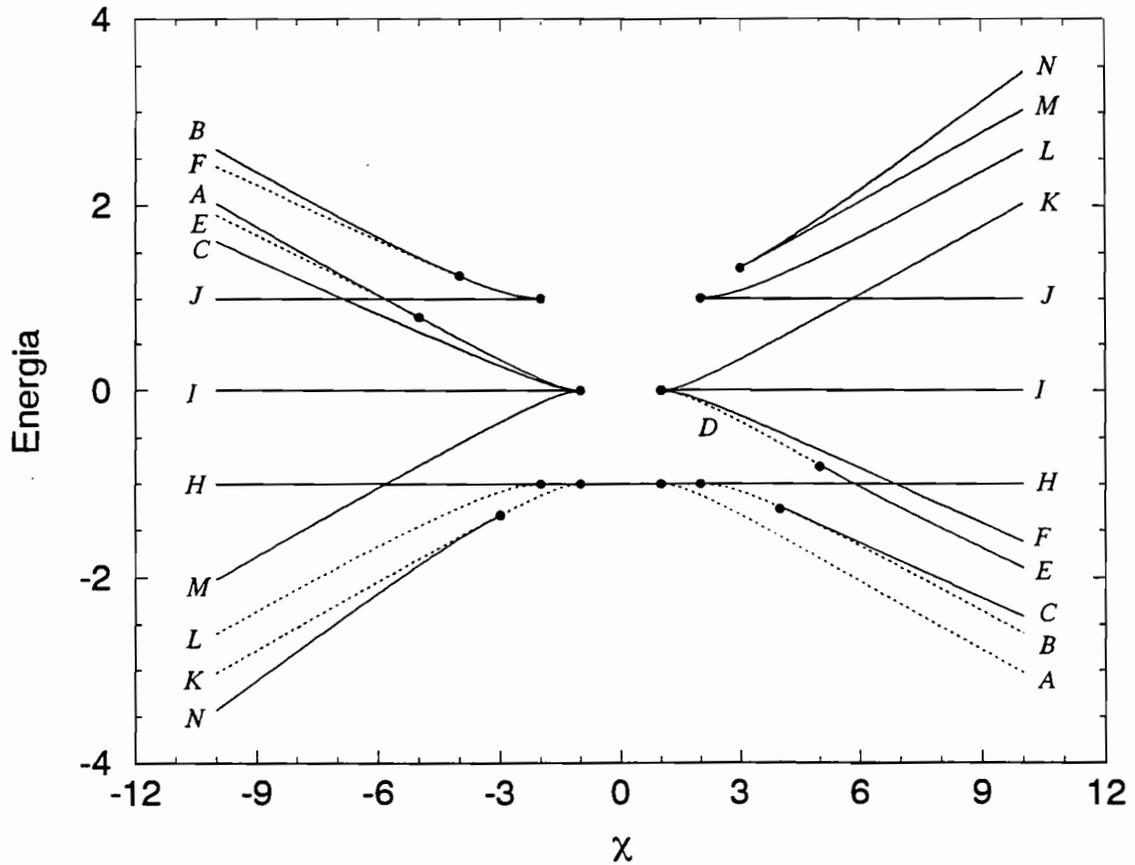


Figura 7.3: Energia clássica dos pontos estacionários como função do parâmetro χ para temperatura nula. As bifurcações de soluções são indicadas pelos círculos pretos e as linhas pontilhadas destacam as soluções. Exceto as soluções de mínimo todos os pontos são de equilíbrio instável. Para interações atrativas temos três soluções de mínimo (N, K e H) enquanto que para repulsivas temos apenas duas (A e H).

É importante notar as diferenças entre as bifurcações dos mínimos dos casos de interação atrativa e repulsiva. Para valores negativos de χ temos duas bifurcações de equilíbrio. Para $-1 \leq \chi \leq 0$ temos um único mínimo absoluto (solução H). Em $\chi = -1$, esta bifurca-se em outros dois mínimos (solução K) e passa a ser uma solução de sela. A solução K permanece assim no intervalo $-3 \leq \chi \leq -1$. Em $\chi = -3$ surgem quatro mínimos simétricos correspondendo a solução N. A solução K passa a ser instável então. Para valores positivos de χ temos apenas uma bifurcação: para $0 \leq \chi \leq 1$, a solução H é única e em $\chi = 1$ surge a solução A que corresponde

a dois mínimos. A solução H passa então a ser instável. Nossa análise diverge em relação a ref. [18] em dois aspectos: quanto ao intervalo de validade de alguns pontos fixos (D , I , J e K) e quanto a estabilidade dos pontos.

Estas soluções de estado fundamental da Hamiltoniana, assim como suas bifurcações relacionam-se intimamente com os regimes termodinâmicos e suas transições de fase. Mesmos sem realizar os cálculos podemos prever que para interações repulsivas teremos apenas uma transição de fase entre duas fases termodinâmicas e que a fase análoga ao regime de acoplamento forte não existe nesta situação.

7.3.2 Seções de Poincaré no regime de acoplamento forte

O modelo de Lipkin $SU(3)$ é integrável quando o parâmetro de interação do sistema é nulo. Além da energia, temos então as conservações das populações de cada um dos três níveis ou camadas. As órbitas clássicas estão sobre toros invariantes bi-dimensionais cujas variáveis de ação são as ocupações dos dois níveis excitados. Já quando χ deixa de ser nulo estas populações deixam de ser conservadas e o sistema passa a ser não integrável, apresentando movimento caótico em regiões do espaço de fase caracterizadas pela energia do sistema e por χ . Nas proximidades dos pontos mínimos as órbitas são regulares. À medida que nos afastamos destes pontos em direção a energias maiores, observamos a destruição de toros invariantes e a ocupação crescente do espaço de fase por órbitas caóticas.

A título de ilustração, apresentamos algumas seções de Poincaré da dinâmica neste regime de trabalho. Devido ao fato de que para $\chi T_1 \leq -3$ a temperatura não traz aspectos dinâmicos novos ao sistema, basta considerarmos a situação de temperatura nula. Na figura 7.4 (a)-(d) apresentamos seções de Poincaré para várias trajetórias para $\chi = -6$, temperatura nula e energias crescentes de (a) a (d) próximas ao ponto de equilíbrio N . As seções foram feitas através do plano $\eta_2 = 0,166$ (valor próximo

a coordenada η_2 do ponto N) para $0 \leq \theta_2 \leq \pi/2$ (condição necessária para definir a seção como um difeomorfismo) e apresentadas em representação polar das variáveis (η_1, θ_1) para o hemisfério superior ($0 \leq \theta_1 \leq \pi$). Note que à medida que nos afastamos do ponto estável os toros invariantes são destruídos e que as órbitas caóticas passam a ocupar porções maiores das regiões do espaço de fase acessíveis a energia do sistema.

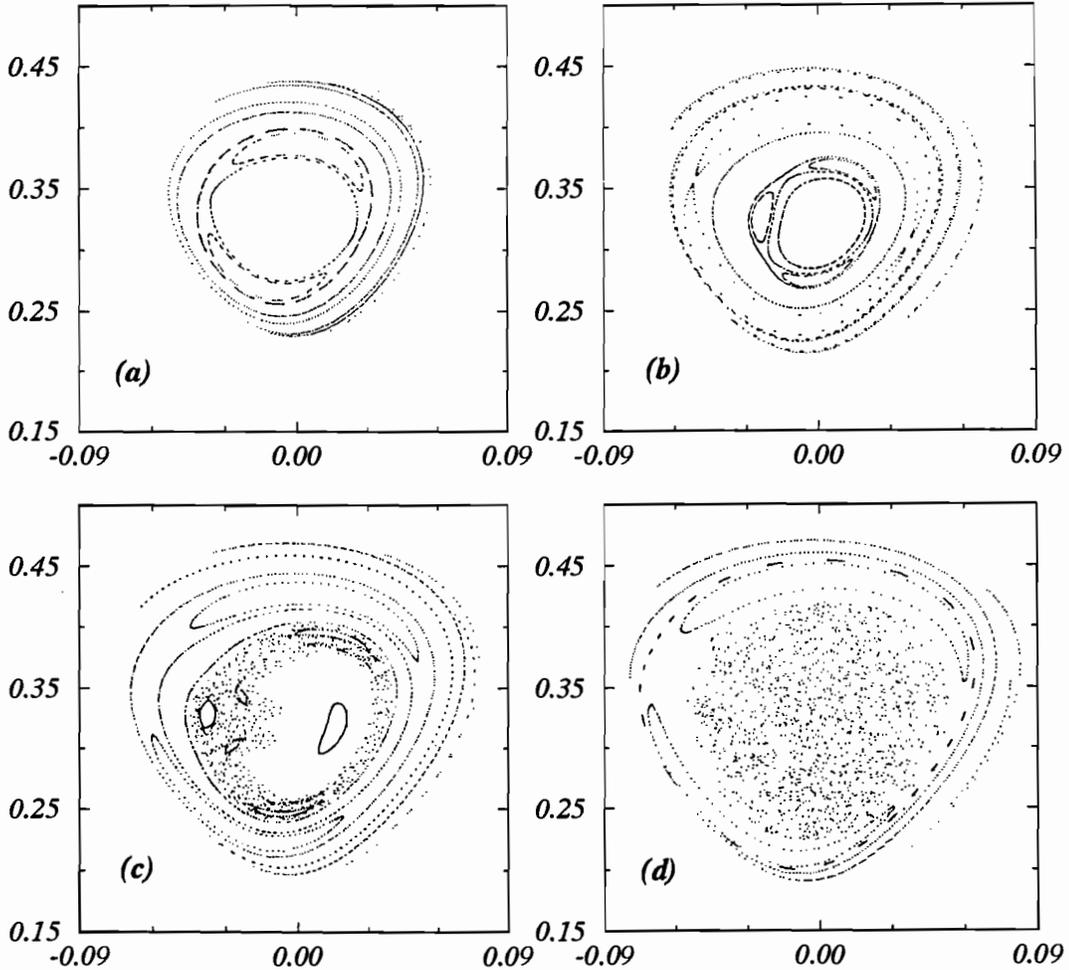


Figura 7.4: Seções de Poincaré para várias trajetórias a temperatura nula e $\chi = -6$ próximas ao ponto de mínimo N através do plano $\eta_2 = 0,166$ para $0 \leq \theta_2 \leq \pi/2$ e (a) $E=-2,1$; (b) $E=-2,07$; (c) $E=-2,05$ e (d) $E=-2,03$. São apresentadas em variáveis polares (η_1, θ_1) apenas para o hemisfério superior ($0 \leq \theta_1 \leq \pi$). (Observação: Os dados do ponto N são $\eta_1^N = 0,333$; $\eta_2^N = 0,166$; $\theta_1^N = \pi/2$; $\theta_2^N = \pi/2$ e $E^N = -2,166$).

A seguir aplicamos um formalismo alternativo, simples e adequado para a análise do movimento nas fases ICR e WCR já apresentado no capítulo 1. Isto finalmente tornará possível a exploração e compreensão do novo grau de liberdade que surge a partir da transição de fase do regime de interação forte para a intermediária para $\chi < -3$ e a temperatura finita para $\chi > -3$. Verificaremos também os efeitos dos novos termos não lineares que surgem na Hamiltoniana clássica do sistema.

7.4 Movimento de grandes amplitudes para todos os regimes

Analisamos aqui a dinâmica clássica térmica a partir das equações de movimento de Heisenberg [24] válidas para a evolução temporal dos valores médios dos geradores G_{jk} da álgebra de Lie em termos dos quais a Hamiltoniana é expressa, dadas por

$$i \frac{d}{dt} \text{Tr}(DUG_{jk}U^\dagger) = \text{Tr}(DU[G_{jk}, H]U^\dagger) \quad (7.51)$$

onde $j, k = 0, 1, 2$, H é a Hamiltoniana (5.4) do sistema e como já vimos G_{jk} são os nove geradores de $U(3)$ que obedecem as regras de comutação (5.3) e conservam as quantidades

$$C_1 = \sum_i G_{ii} = N, \quad (7.52)$$

$$C_2 = \sum_{i,j} G_{ij}G_{ji}, \quad (7.53)$$

$$C_3 = \sum_{i,j,k} G_{ij}G_{jk}G_{ki}. \quad (7.54)$$

Devido a conservação de C_1 , a álgebra de $U(3)$ restringe-se a de $SU(3)$, cujos operadores de Casimir são C_2 e C_3 . U e D são da forma apresentada na seção 7.1. Tomaremos o limite clássico deste sistema ($N \rightarrow \infty$), onde a variância de qualquer

operador anula-se, ou seja

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2) = 0. \quad (7.55)$$

Assim a dinâmica clássica do sistema é regida pelas nove equações diferenciais não independentes, devido às conservações (7.52), (7.53) e (7.54) (além da energia do sistema), cujas variáveis são os limites clássicos dos valores médios dos geradores da álgebra. São elas:

$$i\dot{X}_{01} = X_{01} + \chi((I_0 - I_1)X_{10} - X_{20}X_{21} + X_{12}X_{02}), \quad (7.56)$$

$$i\dot{X}_{10} = -X_{10} + \chi((I_1 - I_0)X_{01} + X_{02}X_{12} - X_{21}X_{20}), \quad (7.57)$$

$$i\dot{X}_{02} = 2X_{02} + \chi((I_0 - I_2)X_{20} - X_{10}X_{12} + X_{21}X_{01}), \quad (7.58)$$

$$i\dot{X}_{20} = -2X_{20} + \chi((I_2 - I_0)X_{02} - X_{12}X_{10} + X_{01}X_{21}), \quad (7.59)$$

$$i\dot{X}_{12} = X_{12} + \chi((I_1 - I_2)X_{21} - X_{01}X_{02} + X_{10}X_{20}), \quad (7.60)$$

$$i\dot{X}_{21} = -X_{21} + \chi((I_2 - I_1)X_{12} - X_{02}X_{01} + X_{10}X_{20}), \quad (7.61)$$

$$i\dot{I}_0 = \chi(X_{01}^2 - X_{10}^2 + X_{02}^2 - X_{20}^2), \quad (7.62)$$

$$i\dot{I}_1 = \chi(X_{10}^2 - X_{01}^2 + X_{12}^2 - X_{21}^2), \quad (7.63)$$

$$i\dot{I}_2 = \chi(X_{20}^2 - X_{02}^2 + X_{21}^2 - X_{12}^2). \quad (7.64)$$

Vale ressaltar que estas são as mesmas equações de Heisenberg que determinam a evolução temporal exata do sistema quântico. Esta dinâmica é restrita ao limite clássico quando tomamos os valores médios dos geradores, aqui, dentro da nossa aproximação de campo médio, no limite de $N \rightarrow \infty$. Devido à (7.55) basta calcularmos os valores médios dos operadores X_{jk} e I_j escalados por N . Estes são dados por

$$\begin{aligned} X_{01} = \frac{1}{N} \text{Tr}(DUG_{01}U^\dagger) &= -iz_1 \frac{S_1 C_1}{R_1} \left\{ T_1 + S_3^2 T_3 - S_2^2 (T_2 - S_3^2 T_3) \right\} + \\ &- \left\{ z_2 z_3^* \frac{C_1^2 S_2 S_3 C_3}{R_2 R_3} + \frac{z_1 z_2^* z_3}{z_1^*} \frac{S_1^2 S_2 S_3 C_3}{R_2 R_3} \right\} T_3, \end{aligned} \quad (7.65)$$

$$X_{02} = \frac{1}{N} \text{Tr}(DUG_{02}U^\dagger) = -iz_2 \frac{C_1 S_2 C_2}{R_2} (T_2 - S_3^2 T_3) + z_1 z_3 \frac{S_1 C_2 S_3 C_3}{R_1 R_3} T_3, \quad (7.66)$$

$$X_{12} = \frac{1}{N} \text{Tr}(DUG_{12}U^\dagger) = -iz_3 \frac{C_1 C_2 S_3 C_3}{R_3} T_3 + z_1^* z_2 \frac{S_1 S_2 C_2}{R_1 R_2} (T_2 - S_3^2 T_3), \quad (7.67)$$

$$X_{10} = X_{01}^*, \quad X_{20} = X_{02}^*, \quad X_{21} = X_{12}^*, \quad (7.68)$$

$$\begin{aligned} I_0 = \frac{1}{N} \text{Tr}(DUG_{00}U^\dagger) &= \text{Tr}(DG_{00}) - S_2^2 (T_2 - S_3^2 T_3) - S_1^2 [T_1 + S_3^2 T_3 - S_2^2 (T_2 - S_3^2 T_3)] + \\ &\quad - i(z_1 z_2^* z_3 - z_1^* z_2 z_3^*) \frac{S_1 C_1 S_2 S_3 C_3}{R_1 R_2 R_3} T_3, \end{aligned} \quad (7.69)$$

$$\begin{aligned} I_1 = \frac{1}{N} \text{Tr}(DUG_{11}U^\dagger) &= \text{Tr}(DG_{11}) - S_3^2 T_3 + S_1^2 [T_1 + S_3^2 T_3 - S_2^2 (T_2 - S_3^2 T_3)] + \\ &\quad + i(z_1 z_2^* z_3 - z_1^* z_2 z_3^*) \frac{S_1 C_1 S_2 S_3 C_3}{R_1 R_2 R_3} T_3, \end{aligned} \quad (7.70)$$

$$I_2 = \frac{1}{N} \text{Tr}(DUG_{22}U^\dagger) = \text{Tr}(DG_{22}) + S_3^2 T_3 + S_2^2 (T_2 - S_3^2 T_3), \quad (7.71)$$

onde os termos S_j , C_j , R_j e T_j já apresentados previamente. Note que I_k é o valor médio do número de partículas no nível k e que $I_0 + I_1 + I_2 = 1$, reflexo na dinâmica clássica da relação (7.52).

Finalmente é conveniente definirmos novas variáveis dadas por

$$X_{01} = S_\alpha + iA_\alpha, \quad (7.72)$$

$$X_{02} = S_\beta + iA_\beta, \quad (7.73)$$

$$X_{12} = S_\gamma + iA_\gamma, \quad (7.74)$$

onde $S_\alpha, A_\alpha, S_\beta, A_\beta, S_\gamma, A_\gamma \in \mathfrak{R}$. Em termos destas variáveis a Hamiltoniana do sis-

tema é da forma

$$\mathcal{H} = \frac{H}{N} = I_2 - I_0 + \frac{\chi}{2} \{S_\alpha^2 - A_\alpha^2 + S_\beta^2 - A_\beta^2 + S_\gamma^2 - A_\gamma^2\}, \quad (7.75)$$

e as equações de movimento tornam-se

$$i\dot{I}_0 = 4\chi(S_\alpha A_\alpha + S_\beta A_\beta), \quad (7.76)$$

$$i\dot{I}_1 = 4\chi(-S_\alpha A_\alpha + S_\gamma A_\gamma), \quad (7.77)$$

$$i\dot{I}_2 = -4\chi(S_\beta A_\beta + S_\gamma A_\gamma), \quad (7.78)$$

$$i\dot{S}_\alpha = A_\alpha + \chi\{-A_\alpha(I_0 - I_1) + 2(A_\beta S_\gamma + S_\beta A_\gamma)\}, \quad (7.79)$$

$$i\dot{A}_\alpha = -S_\alpha \{1 + \chi(I_0 - I_1)\}, \quad (7.80)$$

$$i\dot{S}_\beta = 2A_\beta + \chi\{-A_\beta(I_0 - I_2) + 2(A_\alpha S_\gamma - S_\alpha A_\gamma)\}, \quad (7.81)$$

$$i\dot{A}_\beta = -S_\beta \{2 + \chi(I_0 - I_2)\}, \quad (7.82)$$

$$i\dot{S}_\gamma = A_\gamma + \chi\{-A_\gamma(I_1 - I_2) - 2(A_\beta S_\alpha + S_\beta A_\alpha)\}, \quad (7.83)$$

$$i\dot{A}_\gamma = -S_\gamma \{1 + \chi(I_1 - I_2)\}. \quad (7.84)$$

Este é o sistema de equações diferenciais que efetivamente estudaremos através de integração numérica como será apresentado na próxima subseção. Antes de prosseguirmos nesta direção, vamos brevemente tentar compreender as variáveis clássicas em termos das quais a nossa dinâmica é descrita. Como já mencionamos, o terceiro grau de liberdade não traz novidades em relação às interpretações das variáveis I_k , haja visto que continuam sendo as mesmas e transparentes: são o análogo clássico do número de ocupação de cada uma das três camadas, obedecendo uma equação de vínculo. Continuam também sendo as variáveis de ação do sistema não perturbado (χ nulo). Já as variáveis que são o análogo clássico dos operadores de transição requerem uma análise mais cuidadosa. Estas podem ser convenientemente expressas por

$$X_{01} = \langle G_{01} \rangle = \rho_\alpha e^{i\theta_\alpha}, \quad (7.85)$$

$$X_{02} = \langle G_{02} \rangle = \rho_\beta e^{i\theta_\beta}, \quad (7.86)$$

$$X_{12} = \langle G_{12} \rangle = \rho_\gamma e^{i\theta_\gamma}. \quad (7.87)$$

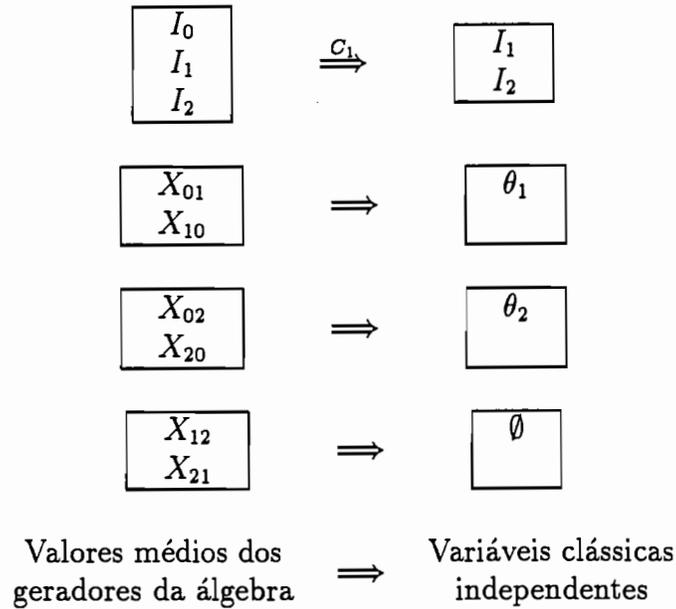
Particularmente, a temperatura nula e no regime de acoplamento forte (situações onde T_3 é nulo) estas variáveis assumem a forma

$$X_{01} = \sqrt{I_0 I_1} e^{i\theta_1}, \quad (7.88)$$

$$X_{02} = \sqrt{I_0 I_2} e^{i\theta_2}, \quad (7.89)$$

$$X_{12} = \sqrt{I_1 I_2} e^{i(\theta_1 - \theta_2)}, \quad (7.90)$$

ou seja, o módulo destas variáveis são funções conhecidas das variáveis tipo “ação”. Assim por exemplo, temos que o termo ρ_α é expresso em termos de I_0 e I_1 , implicando no fato de que das variáveis X_{01} e X_{10} na verdade obtemos informação de apenas uma variável clássica independente e não duas como se pode esperar no caso geral. Esta variável independente é precisamente a variável θ_1 , canonicamente conjugada a I_1 . Análogo ocorre com X_{02} e X_{20} que relacionam-se a θ_2 . Já X_{12} e X_{21} apresentam algo mais curioso: além do módulo, também sua fase é função das variáveis clássicas já conhecidas. Esquemáticamente temos que



Para o Lipkin SU(2) temos algo análogo

$$\langle J_z \rangle = I, \quad (7.91)$$

$$\left. \begin{aligned} \langle J_+ \rangle &= f(I) e^{i\theta} \\ \langle J_- \rangle &= f(I) e^{-i\theta} \end{aligned} \right\} \text{apenas uma variável clássica independente: } \theta$$

Assim a dinâmica clássica descrita em termos dos valores médios de três geradores da álgebra de SU(2) reduz-se a um único grau de liberdade.

Concluimos portanto que a dinâmica clássica do modelo de Lipkin SU(3), a temperatura nula e na SCR, além da redução de dimensão do sistema de 9 para 6 devido às já mencionadas constantes de movimento, também apresenta uma redução de 6 para 4 devido à particular interrelação entre X_{12} , X_{01} , X_{02} , I_0 , I_1 e I_2 .

Já para as fases intermediárias e fracas esta última redução é inexistente e as equações (7.88), (7.89) e (7.90) não são mais respeitadas. Além das tentativas analíticas, investigações numéricas foram implementadas: ao longo da integração numérica de órbitas da ICR monitoramos algumas quantidades, como por exemplo $(X_{01} X_{10} / (I_0 I_1))$. Para temperatura nula e SCR, o valor desta é constante e igual a 1. Já para ICR, é uma função que varia vertiginosamente com o tempo. Da mesma forma acompanhamos a quantidade $\theta_\gamma \pm (\theta_\alpha - \theta_\beta)$ e encontramos, em lugar do valor nulo, o mesmo padrão de comportamento.

Vale mencionar também que alguns esforços foram investidos no sentido de se realizar duas tarefas, que entretanto, não foram finalizadas por se revelarem excessivamente laboriosas. Tentamos analiticamente definir para o sistema de três graus de liberdade pares de variáveis canonicamente conjugadas, que apesar de teoricamente factível, novamente não se revelou uma tarefa simples. Do mesmo modo, iniciamos o estudo analítico dos pontos de estabilidade desta dinâmica, não finalizado por ter-se tornado demasiadamente longo e complexo.

Prosseguimos agora com o estudo da dinâmica de nosso sistema através de uma investigação numérica.

7.4.1 Investigação numérica

Utilizamos uma rotina da Biblioteca “Numerical Recipes” em fortran que faz uso do método de Runge Kutta de quinta ordem para integrar estas equações. Os dados de entrada são a energia E , a constante de interação χ e os termos que definem a temperatura T_1 e T_2 . As condições iniciais complexas z_1 , z_2 e z_3 são geradas aleatoriamente. Dado este $\{z_k\}$, as variáveis dinâmicas são calculadas a partir das eqs. (7.65)-(7.71) e obtemos a trajetória integrando (7.76)-(7.84). Cabe salientar que o movimento com três graus de liberdade se passa sobre uma subvariedade de dimensão 5 devido às conservações de (7.52)-(7.54) e da energia do sistema. Na prática, eliminamos apenas uma dimensão utilizando (7.52) e integramos um conjunto de oito equações acopladas.

Devido ao sistema passar a ter um número de graus de liberdade maior que dois, teremos um fluxo hamiltoniano com algumas características radicalmente novas em relação ao sistema de dois graus de liberdade, características essas que têm sido objeto de estudos na literatura [4, 6, 1]. Podemos citar duas delas: Para uma dinâmica com dois graus de liberdade, as superfícies KAM bidimensionais dividem o “volume” tridimensional de mesma energia no espaço de fase em um conjunto de volumes fechados, cada um destes envolvido e limitado por superfícies KAM (assim como linhas isolam regiões em um plano). Para três graus de liberdade as superfícies KAM tridimensionais não dividem mais o volume de energia de dimensão cinco em um conjunto de volumes fechados (assim como linhas não separam um volume tridimensional em regiões distintas). Para $n > 2$ graus de liberdade, as superfícies KAM não dividem o volume de energia de $(2n - 1)$ dimensões em regiões distintas. Assim neste caso, de modo genérico, todas as camadas estocásticas da superfície de energia no espaço

de fases são conectadas em uma única rede complexa denominada teia de Arnold. Esta rede permeia todo o espaço de fase, interceptando ou estando infinitesimalmente próxima a todos os pontos. Este movimento é conhecido como a difusão de Arnold [49, 50]. Observa-se, porém, que este processo é muito lento em relação ao tempo de difusão da trajetória dentro de sua camada estocástica de origem. O segundo aspecto novo da dinâmica reside no fato de que a conservação de energia não mais evita grandes movimentos estocásticos ao longo das camadas para tempos grandes. Apesar de não estarmos particularmente interessados em investigar estes aspectos, é importante tê-los em mente e levar em conta suas implicações.

A seguir apresentamos dois métodos utilizados para estudar a dinâmica de três graus de liberdade, um que fornece informações de caráter qualitativo e outro que fornece informações quantitativas. O primeiro destes consiste em um método gráfico. Devido às seções de Poincaré passarem a ter quatro dimensões como veremos a seguir, algumas representações gráficas alternativas foram adotadas, possibilitando uma comparação qualitativa entre trajetórias do sistema a temperatura nula com trajetórias da ICR e WCR. O segundo método consiste no cálculo do maior expoente de Lyapunov da dinâmica e do volume caótico do sistema, ou seja, o volume do espaço de fase no qual ao menos um dos expoentes de Lyapunov é positivo. Esta análise permite-nos caracterizar a dinâmica do sistema a temperatura finita através de um critério quantitativo e definitivo.

Método Gráfico: “Seções de Poincaré”

O conceito de superfície de seção ou seção de Poincaré pode ser generalizado para sistemas com $n > 2$ graus de liberdade. Para o caso usual, $n = 2$, dentre as quatro coordenadas do espaço de fase (vinculadas pela conservação de energia), fixamos uma delas definindo a superfície de seção. Consideramos então as intersecções sucessivas da trajetória com esta seção que satisfaçam ainda uma outra condição: que uma

outra das coordenadas tenha valor dentro de um intervalo restrito predeterminado a fim de que o mapa de Poincaré seja definido como um difeomorfismo. Desde que esta condição seja satisfeita, passamos a ignorar esta coordenada do ponto de intersecção da trajetória com a seção (o que equivale a se fazer uma projeção “parcial” da trajetória nesta coordenada) e coletamos o outro par de coordenadas definindo um conjunto de pontos. Estes poderão estar sobre uma variedade de dimensão um, caso haja ao menos uma constante de movimento além da energia, ou sobre uma variedade de dimensão até dois, caso não haja esta conservação. Para $n > 2$ temos que a superfície de seção é definida como uma variedade de $(2n - 2)$ dimensões e consideramos as intersecções sucessivas da trajetória com esta superfície. Assim sendo em nosso caso de três graus de liberdade, as seções de Poincaré possuem quatro dimensões e o conjunto de pontos desta poderão estar sobre variedades de 2 a 4 dimensões.

Apesar de termos definido e implementado nossa metodologia de análise gráfica antes mesmo de fazer uma pesquisa bibliográfica mais apurada sobre o tema, vale a pena apresentarmos previamente algumas técnicas e resultados já desenvolvidos e publicados. Recorrendo a literatura, encontramos em [6] citações do trabalho de C.Froeschlé [51] e [52]. M.Gutzwiller se refere a este como sendo um dos poucos pioneiros que tiveram a coragem de penetrar nesta selva (seções de Poincaré de quatro dimensões). Em [51] são descritos e usados dois métodos gráficos para estudar sistemas dinâmicos com três graus de liberdade: *corte em fatias e vista estereográfica*. Um conjunto de pontos com quatro coordenadas (x, y, u, w) definem a seção de Poincaré. O método de visões estereográficas consiste em reter apenas três destas coordenadas (por exemplo (x, y, w)) e representar os pontos definidos em um espaço tridimensional fazendo uso de técnicas estereográficas, o que equivale a fazer uma projeção da seção de Poincaré ao longo de uma coordenada. Este é o método principal. O segundo, o corte em fatias, consiste em seccionar a superfície do método anterior por um outro

plano, por exemplo, $y = 0$. Na prática esta seção deve ter uma espessura a fim de que possa conter algum ponto. Assim projeta-se por exemplo, no plano (x, w) , os pontos para os quais $-\epsilon < y < \epsilon$, sendo ϵ uma quantidade pequena. Froeschlé apresenta os resultados e conclusões para ambos os métodos, definindo intervalos dos parâmetros do sistema para os quais observa-se uma transição de movimento regular a caótico. No segundo trabalho, através de análise numérica estuda a divergência de trajetórias com condições iniciais próximas (essencialmente é o cálculo do maior expoente de Lyapunov) que confirma os resultados do primeiro trabalho. Apesar deste sucesso, consideramos que estas técnicas são extremamente complicadas e restritivas. A análise das representações gráficas do primeiro método exige uma inspeção muito cuidadosa, requerendo um treinamento prévio de vistas estereográficas que não julgamos simples, nem tão pouco prático e na realidade é de acurácia limitada. O segundo, mais razoável, exige uma integração numérica de cada trajetória por um tempo muito maior. Problemas relativos a precisão numérica e tempos de integração acabam por restringir demasiadamente o número de pontos coletados de uma órbita e portanto qualquer conclusão a seu respeito.

Optamos por analisar dois tipos de representações gráficas das seções de Poincaré de nossa dinâmica. São elas:

1. plotamos $I_1 \times I_2$ quando a trajetória passa por $A_\alpha = 0$ e $S_\alpha > 0$ (estas condições definem a seção), $S_\beta > 0$ e $A_\beta > 0$ (condição necessária para que o mapa seja um difeomorfismo). Ao menos para a temperatura nula e para a fase SCR estas condições implicam em $\theta_1 = 0$ e $0 < \theta_2 < \pi/2$, onde θ_1 e θ_2 são as variáveis tipo “ângulo” definidas por (7.35).
2. plotamos $I_1 \cos(\Theta) \times I_1 \sin(\Theta)$, quando trajetória passa por I_2 fixo, $S_\beta > 0$ e

$A_\beta > 0$, onde

$$\cos(\Theta) \equiv \frac{S_\alpha}{\sqrt{S_\alpha^2 + A_\alpha^2}}, \quad (7.92)$$

ou seja, a parte real de $\langle G_{01} \rangle$ dividida por sua norma e

$$\sin(\Theta) \equiv \frac{A_\alpha}{\sqrt{S_\alpha^2 + A_\alpha^2}}, \quad (7.93)$$

ou seja, a parte imaginária de $\langle G_{01} \rangle$ dividida por sua norma.

Para $T_3 = 0$ (temperatura nula ou SCR), a variável Θ do ítem (2) é exatamente a variável canonicamente conjugada a I_1 e estas representações gráficas são precisamente as seções apresentadas na figura 7.4. Já as representações do ítem (1), na situação de T_3 nulo, equivalem a se fazer uma seção da trajetória no plano $\theta_1 = 0$. Cabe salientar que o mapa do ítem (1) só é válido para $\chi \neq 0$ para que o fluxo hamiltoniano não tangencie a seção. Esta condição é necessária para definir-se o mapa de Poincaré.

A seguir apresentamos os resultados obtidos (atente para o fato de que as escalas variam muito de figura à figura).

Na figura 7.5 apresentamos seções $I_1 \times I_2$ para $\chi = -6$ e temperatura nula (são análogas as da fase SCR dado que a temperatura só produz um “scaling” nesta fase) e energias crescentes (a) $E = -2,10$; (b) $E = -2,07$; (c) $E = -2,05$ e (d) $E = -2,03$. Estes valores são próximos a energia do ponto N que é o mínimo da dinâmica para $\chi < -3$ ($E_{min} = -2,1666$). Os parâmetros desta figura são os mesmos da figura 7.4, e estas são apresentadas apenas para exemplificar os gráficos do tipo (1). Verificamos o mesmo comportamento do sistema da figura anterior (trajetórias são regulares próximas ao ponto de mínimo, tornando-se caóticas à medida que se afastam em energia). A análise a temperatura finita destes gráficos leva às mesmas conclusões que para o tipo (2), de modo que nos restringiremos a apresentar apenas os resultados deste último tipo.

Na figura 7.6 apresentamos (I_1, Θ) para $\chi = -2, 0$, temperatura nula e energias crescentes (a) $E = -1, 12$; (b) $E = -1, 10$; (c) $E = -1, 00$ e (d) $E = -0, 90$. Estas trajetórias são próximas ao ponto K ($E_{min} = -1, 125$), que é mínimo da dinâmica para $-3 < \chi < -1$. Note que a uma energia 11% maior que a mínima, órbitas são ainda nitidamente regulares (veja figura 7.6(c)). A seção é definida para I_2 fixo igual a 0,001 em (a) e (b) e igual a 0,05 em (c) e (d).

Já na figura 7.7, ainda para $\chi = -2, 0$, tomamos $\beta = 1, 62$. Estes parâmetros situam o sistema na fase ICR. Vale lembrar que para este valor de χ , a fase SCR não existe e T_3 deixa de ser nulo assim que a temperatura deixa de ser nula. As trajetórias desta figura têm energias (a) $E = -0, 97$; (b) $E = -0, 90$ e (c) $E = -0, 85$. O valor da energia mínima, ou seja, do ponto K é agora $-0, 9732$. Estes gráficos apresentam diferenças radicais em relação a figura anterior: a uma energia 0,33% maior que a mínima, as órbitas, *aparentemente*, já perdem sua regularidade. Podemos também observar o surgimento de uma estrutura nova nas proximidades de $\Theta = \pm \frac{\pi}{2}$ na figura 7.7(c), inexistentes em 7.6(d), sua respectiva a temperatura nula.

Para uma temperatura ainda maior, $\beta = 1, 2$ que é bem próxima a temperatura de transição de fase entre a ICR e WCR temos que o sistema apresenta um comportamento ainda mais distinto. Para esses parâmetros a energia mínima é $-0, 6584$. Na figura 7.8 apresentamos representações gráficas para trajetórias para (a) $E = -0, 655$ e I_2 fixo igual a 0,067 e (b) $E = -0, 60$ e $I_2 = 0, 08$ fixo. Note que mesmo para órbitas muito próximas a E_{min} , a variável Θ (agora não canonicamente conjugada a I_1) varia muito, praticamente de 0 a 2π . Esperaríamos que variasse muito pouco em torno de 0 ou π .

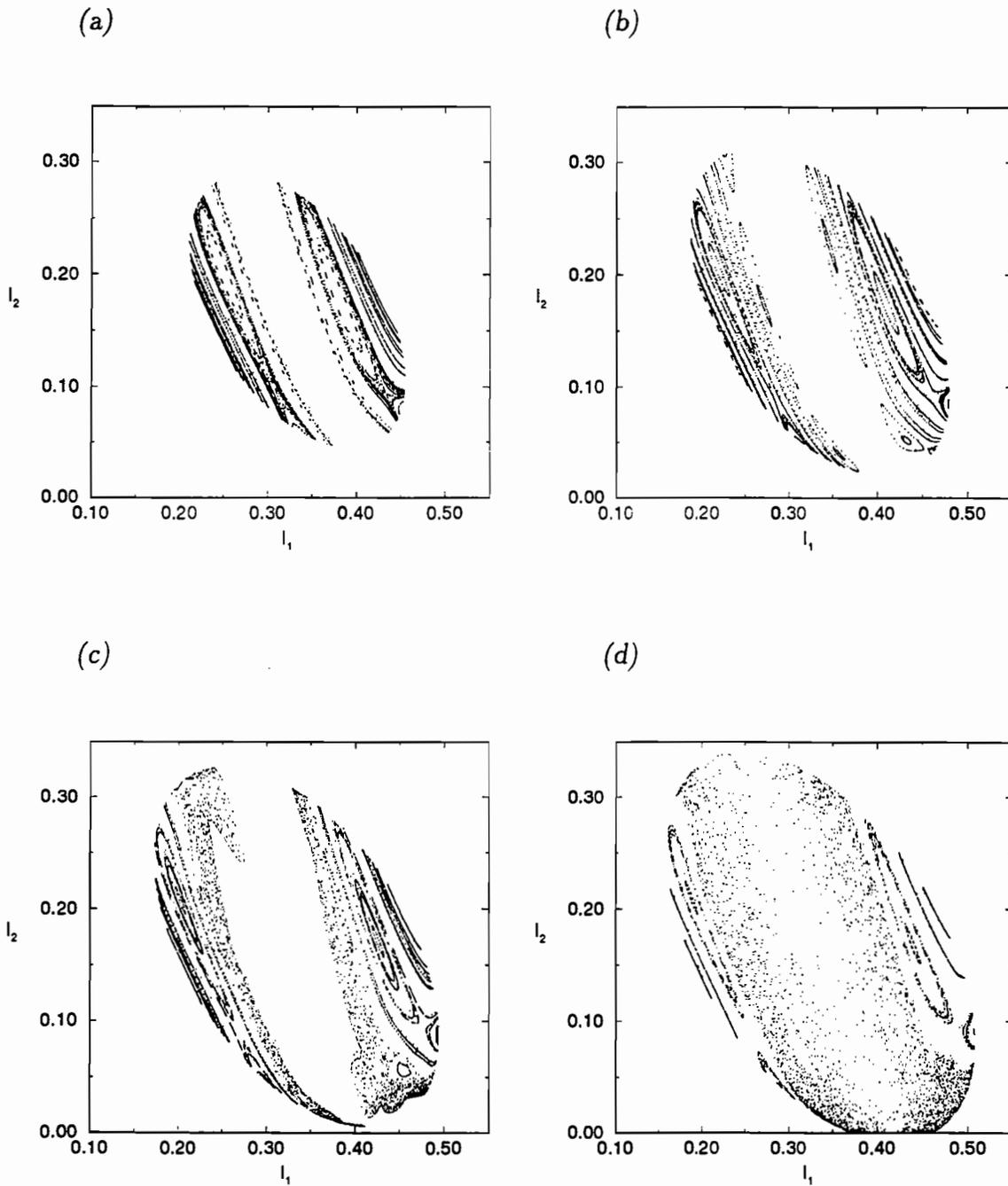


Figura 7.5: Representações gráficas do tipo (1) para várias trajetórias próximas ao ponto mínimo N a temperatura nula, $\chi = -6$ e energias crescentes (a) $E = -2,10$; (b) $E = -2,07$; (c) $E = -2,05$ e (d) $E = -2,03$. Ilustram representações do tipo (1) e devem ser comparadas às figuras 7.4.

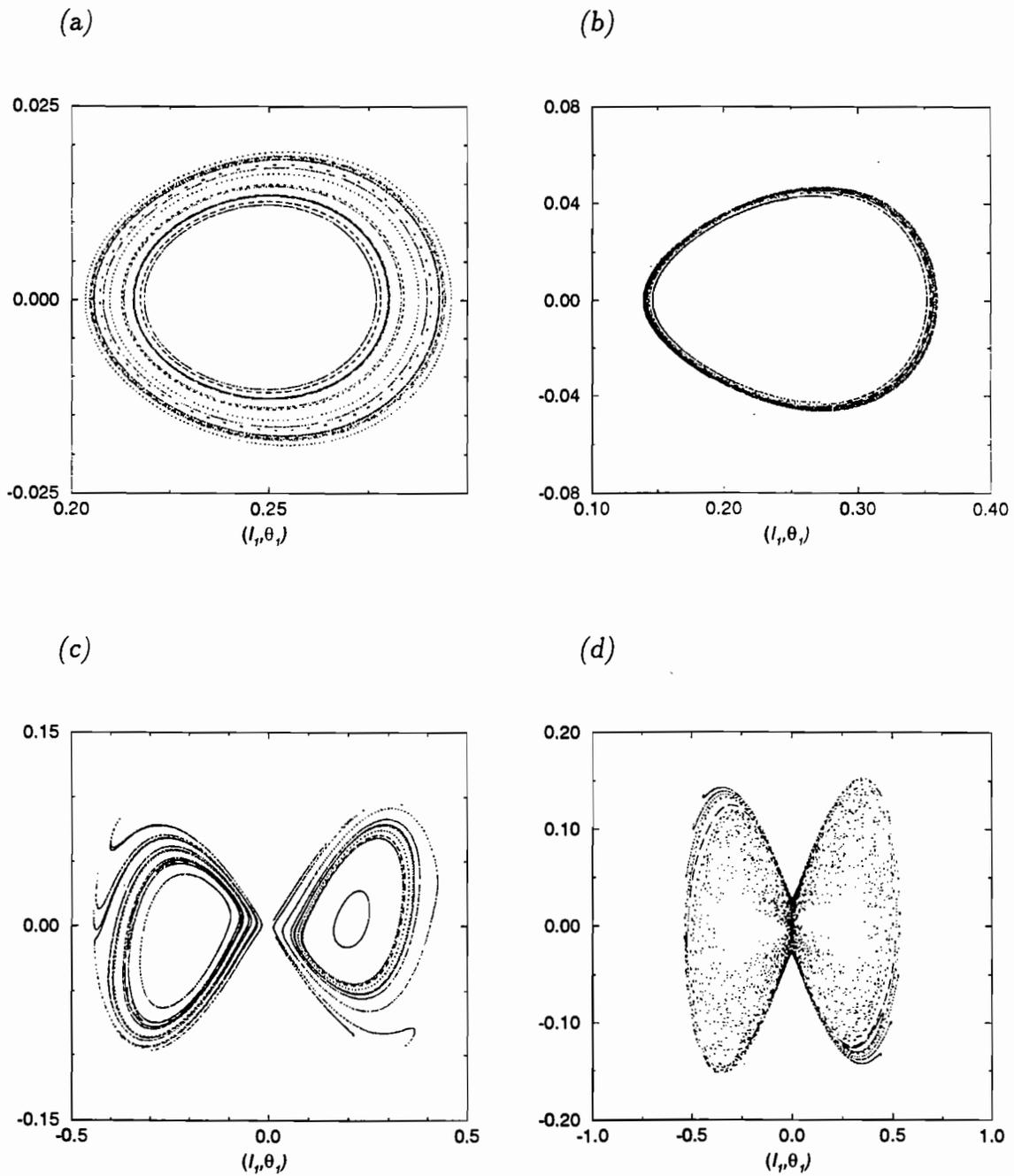


Figura 7.6: Representações gráficas do tipo (2) para várias trajetórias próximas ao ponto mínimo K a temperatura nula, $\chi = -2$ e energias crescentes (a) $E = -1,12$; (b) $E = -1,10$; (c) $E = -1,00$ e (d) $E = -0,90$. As seções são definidas para I_2 fixo igual a 0,001 em (a) e (b) e 0,050 em (c) e (d).

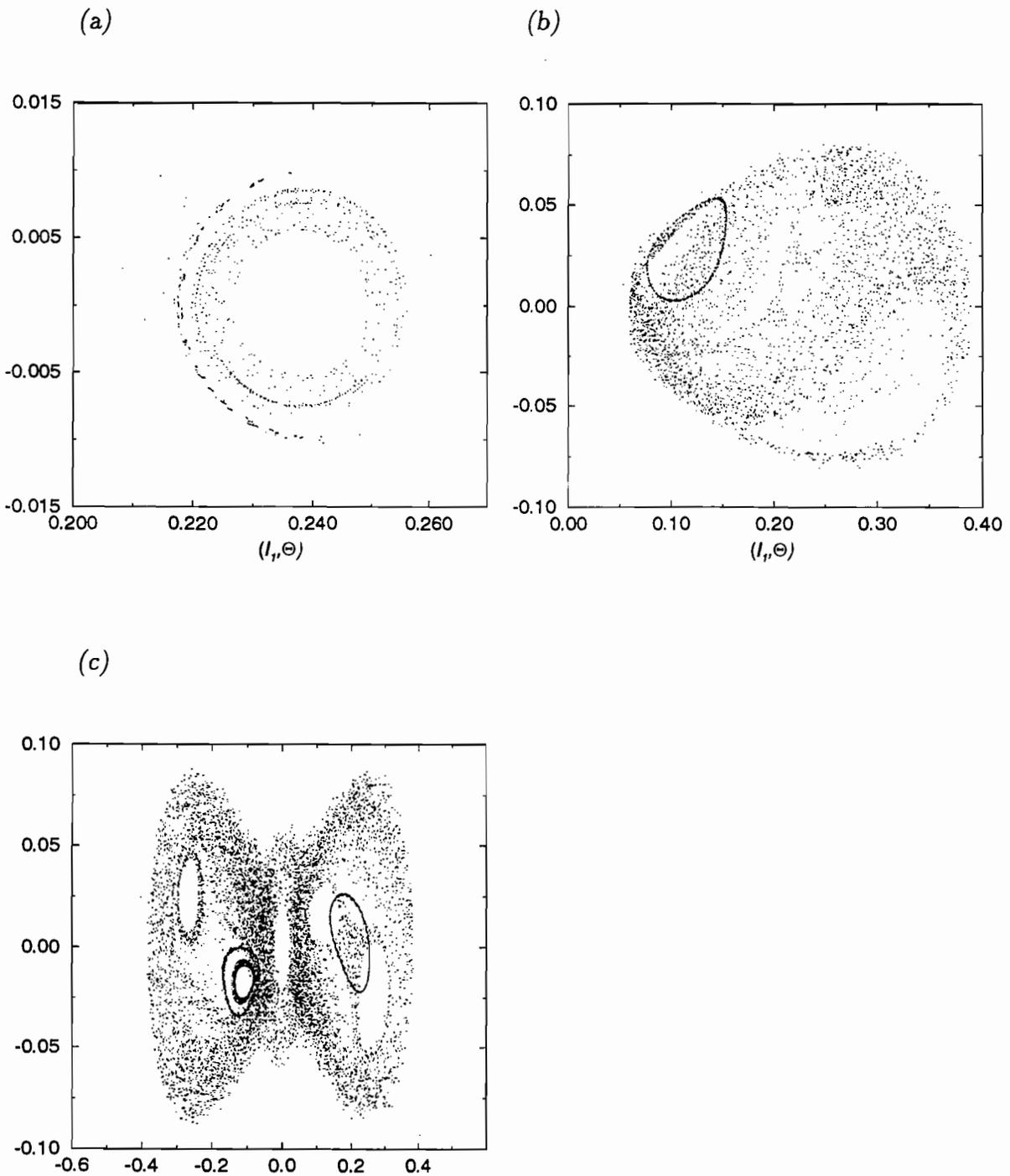


Figura 7.7: Representações gráficas do tipo (2) para várias trajetórias próximas ao ponto mínimo K a temperatura finita $\beta = 1,62$, $\chi = -2$ e energias crescentes (a) $E = -0,97$; (b) $E = -0,90$ e (c) $E = -0,85$. I_2 fixo igual a (a) 0,024; (b) 0,050 e (c) 0,100. Energia mínima para estes parâmetros é $-0,9732$ e $T_3 = 0,0353$.

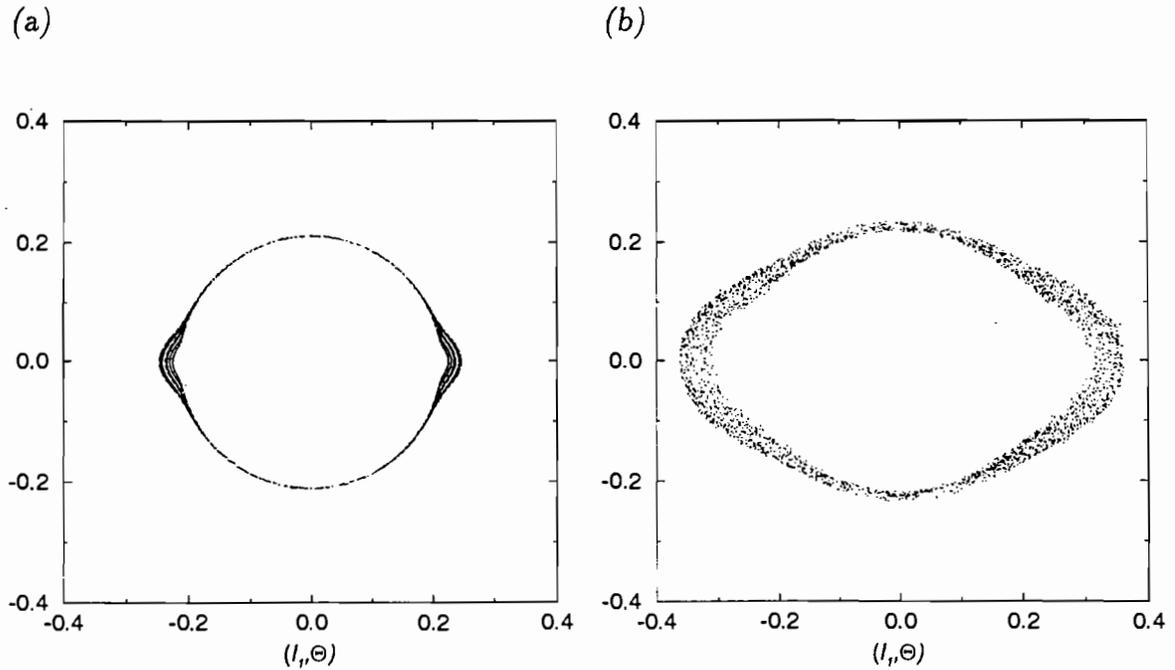


Figura 7.8: Mesmo que para figura anterior para temperatura finita $\beta = 1, 2$, $\chi = -2$ e energias crescentes (a) $E = -0,655$ e $I_2^{fixo} = 0,067$ e (b) $E = -0,60$ e $I_2^{fixo} = 0,08$. Esta temperatura é próxima a temperatura de transição de fase $ICR \rightarrow WCR$. $E_{min} = -0,6584$ e $T_3 = 0,1474$.

Estas representações gráficas nos possibilitaram uma análise qualitativa de onde pudemos concluir e/ou comprovar que:

1. O efeito da temperatura na dinâmica clássica das fases ICR e WCR realmente não é um “scaling”, pois os padrões observados nos gráficos destas fases são completamente distintos dos gráficos de temperatura nula.
2. Terceiro grau de liberdade é realmente ativo nestas fases. Se houvesse alguma outra conservação no sistema além da energia, isto seria refletido nos gráficos, a exemplo do que ocorre no sistema de temperatura nula onde pontos das representações gráficas do tipo (1) e (2) estão sobre variedades de dimensão dois e não quatro.

3. Nossas representações gráficas não servem absolutamente para qualificar o sistema dinâmico como regular ou caótico. A análise dos expoentes de Lyapunov, apresentada a seguir, revelou que padrões esboroados em nossas representações podem corresponder a uma trajetória com todos expoentes de Lyapunov nulos, enquanto que curvas aparentemente regulares, podem apresentar o maior expoente de Lyapunov, apesar de pequeno, finito. Esta última situação se refere àquela onde é preciso integrar a trajetória por tempos muito longos para se verificar sua divergência exponencial, não sendo um problema específico do tipo de representação gráfica que utilizamos.
4. Representações gráficas de um sistema dinâmico com três graus de liberdade realmente não é algo trivial de se tratar e particularmente nos foi útil devido ao nosso sistema sofrer uma transição de quatro para seis dimensões. De uma forma qualitativa pudemos observar que realmente há aspectos dinâmicos novos trazidos pela temperatura para as fases ICR e WCR.

A seguir apresentamos o segundo método utilizado para estudar numericamente a dinâmica de nosso sistema.

Método Quantitativo: Expoentes de Lyapunov e Volume Caótico

Aplicamos aqui o mesmo procedimento adotado por D.C.Meredith [16] em seu estudo da dinâmica clássica do modelo a temperatura nula, a fim de caracterizar quantitativamente os efeitos térmicos na dinâmica do sistema nas fases ICR e WCR: o cálculo do maior expoente de Lyapunov e do volume caótico do sistema.

Dada uma particular trajetória com condição inicial \vec{x}_0 , consideramos uma trajetória vizinha cuja distância à primeira seja $|d_0|$. Integramos então estas duas tra-

jetórias, monitorando em intervalos de tempo τ a distância entre elas. Definimos então o expoente de Lyapunov como

$$\lambda(\vec{x}_0, t) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{|d(t)|}{|d_0|}. \quad (7.94)$$

Este expoente mede a taxa média no tempo da separação exponencial de órbitas vizinhas. Em [53], Benettin, Galgani e Strelcyn realizaram um estudo numérico do cálculo desta quantidade estabelecendo um procedimento largamente adotado (do qual também fazemos uso aqui): a renormalização da distância entre as trajetórias em intervalos de tempo τ evitando problemas numéricos (“overflows”). Verificam também que λ independe da distância inicial escolhida e da métrica adotada. Isto relaciona o expoente de Lyapunov à particular trajetória originalmente considerada, caracterizando-a.

Assim temos que expoentes de Lyapunov positivos indicam que a trajetória é linearmente instável, medindo a divergência média de órbitas vizinhas, enquanto que os negativos medem sua convergência. Para sistemas Hamiltonianos a soma de todos os expoentes é nula, enquanto que para sistemas dissipativos é negativa.

Estamos interessados apenas em calcular o maior dos expoentes, dado que basta que apenas um deles seja positivo para caracterizar a trajetória como caótica. Dado que nosso sistema é Hamiltoniano, estes poderão ser apenas positivos ou nulos.

Faremos nossa pesquisa variando a energia do sistema para valores fixos do parâmetro de interação e da temperatura. Calculamos então o volume caótico, ou seja, a fração do espaço de fase acessível a estes parâmetros χ, β, E na qual o expoente de Lyapunov é positivo.

Na prática dividimos o intervalo completo de valores de energias acessíveis ao sistema para determinados χ e β em um número razoável de intervalos menores que chamaremos de “bins”, adotando intervalos variáveis de acordo com a região

de energia. Para regiões localizadas no interior do espectro, estes “bins” são mais largos, ficando mais estreitos nas extremidades do espectro onde verificamos existir uma variação mais rápida do comportamento do sistema.

Para cada um destes “bins”, sorteamos cem condições iniciais com energias pertencentes ao respectivo intervalo de energia do “bin” e calculamos então os expoentes de Lyapunov destas trajetórias, definindo quantas dentre estas possuem o maior expoente positivo e quantas possuem este expoente nulo. Esta decisão foi tomada observando visualmente o comportamento do gráfico $\lambda(t)$ em função do tempo em escala log-log para cada uma das trajetórias. O expoente zero típico decresce como $1/t$, enquanto que o positivo a partir de um instante passa a ser constante.

A seguir apresentamos os resultados obtidos. Para temperatura nula, calculamos o volume caótico em função da energia do sistema para $\chi = -6$ e $\chi = -2$ apresentado na figura 7.9. O espectro de energia foi dividido em 34 intervalos(bins) para $\chi = -6$ e em 22 para $\chi = -2$. Os intervalos de energia do sistema foram renormalizados no intervalo $[0,1]$ a fim de facilitar a comparação. Verificamos que o volume caótico para $\chi = -2$ é menor que para $\chi = -6$, principalmente nas extremidades do espectro.

Adotamos $\chi = -2$ para fazer as análises dos efeitos de temperatura dada a conveniência de não existir a fase de acoplamento forte para este parâmetro, mas sim as fases ICR e WCR. O cálculo do volume caótico foi realizado para quatro temperaturas: (a) nula, (b) $\beta = 1,2$ (ICR, proximamente a transição de fase), (c) $\beta = 1,0$ (WCR, máximo valor absoluto de T_3 para $\chi = -2$) e (d) $\beta = 0,5$ (WCR). Estes foram escolhidos verificando-se o comportamento de T_3 em função de β e seu valor relativo a T_1 e T_2 , de modo a percorrer as situações onde os máximos efeitos de T_3 pudessem ser verificados.

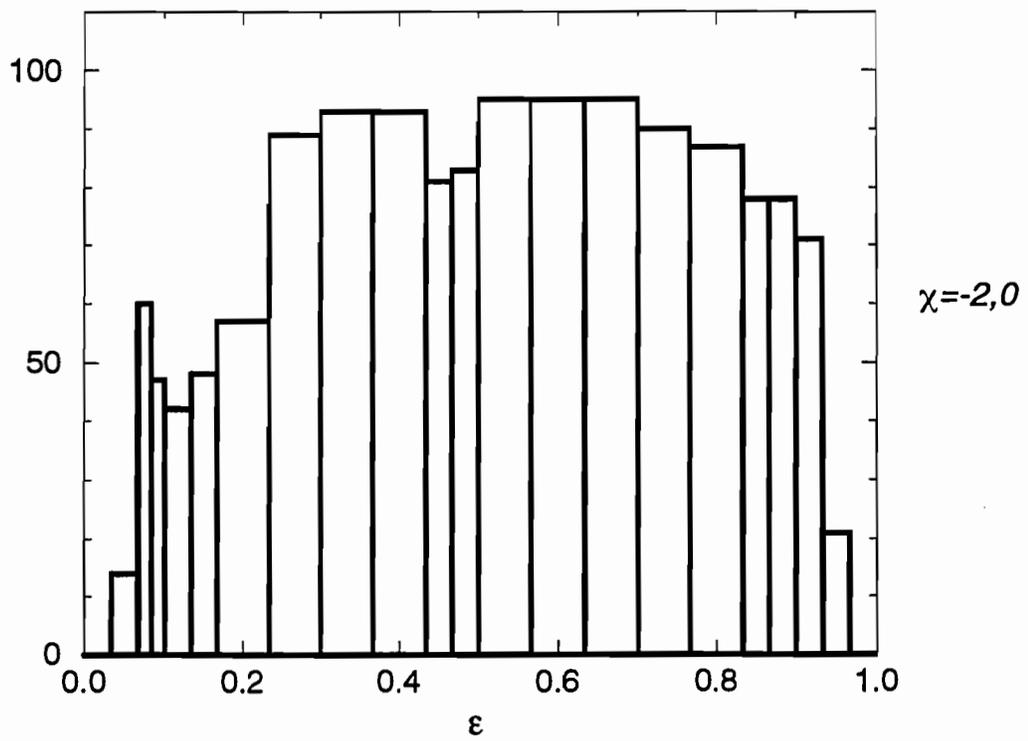
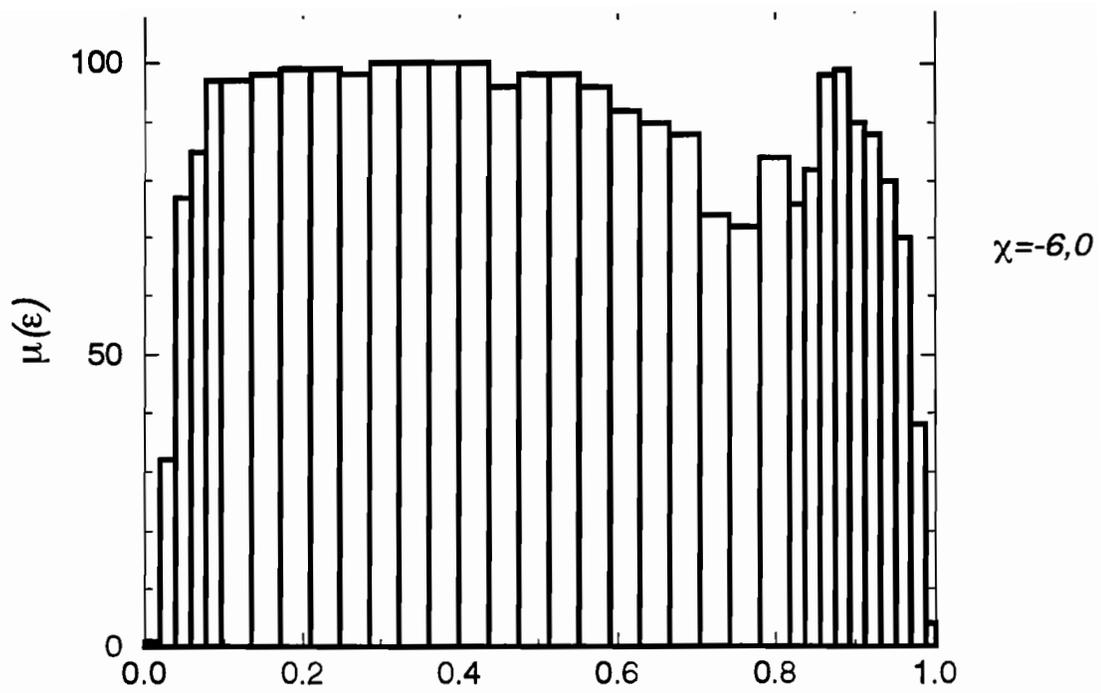


Figura 7.9: Volume caótico do sistema como função da energia renormalizada a temperatura nula para $\chi = -6,0$ e $\chi = -2,0$.

Volume caotico $\chi=-2,0$

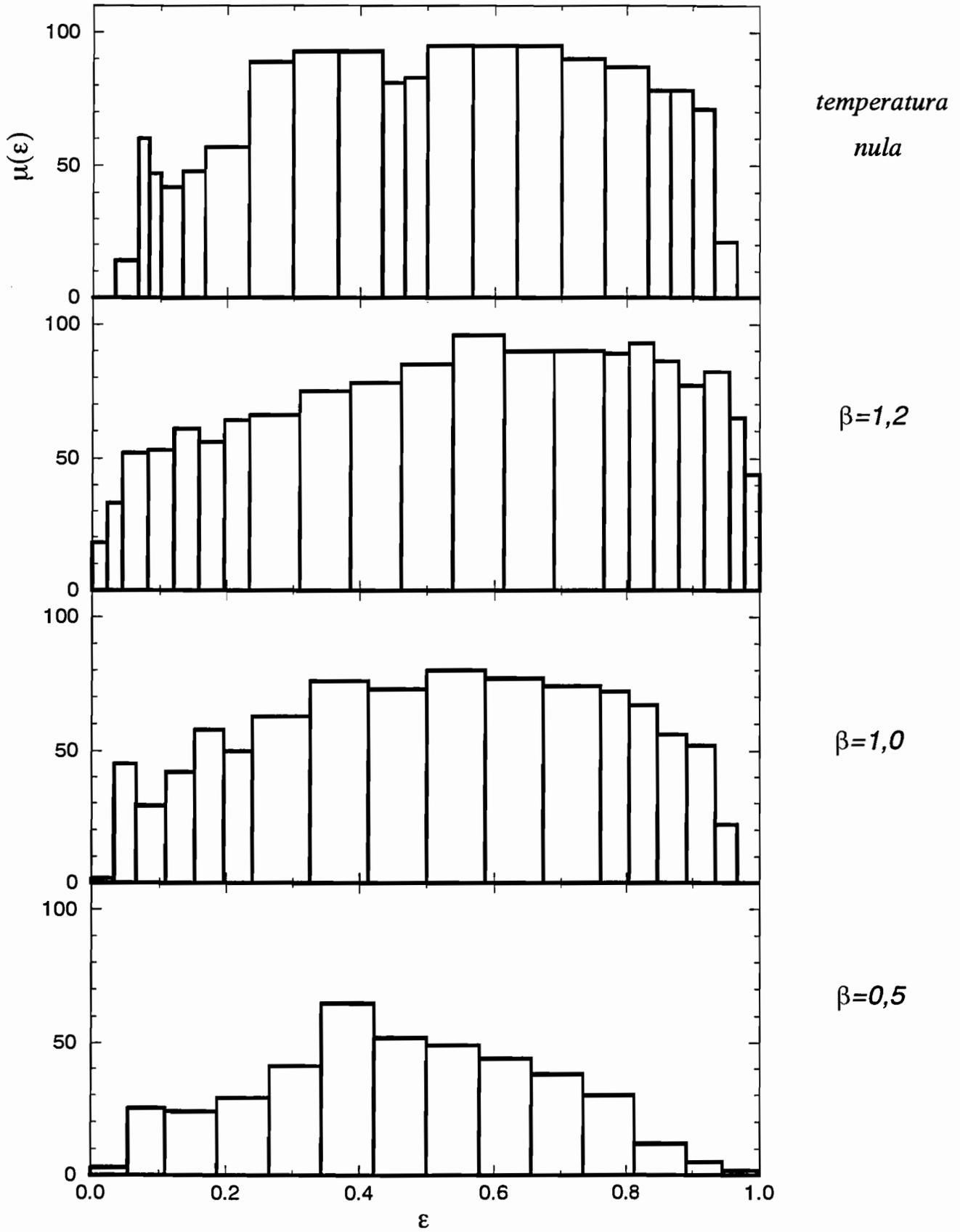


Figura 7.10: *Volume caótico do sistema como função da energia renormalizada para $\chi = -2,0$ e quatro temperaturas distintas: nula, $\beta = -1,2$ (ICR), $\beta = -1,0$ (WCR) e $\beta = -0,5$ (WCR).*

Na figura 7.10 observamos que sistematicamente o volume caótico do sistema cresce com o aumento da temperatura em ambas as fases, afetando mais acentuadamente os extremos do espectro. Isto nos leva a concluir que o aumento de temperatura produz o mesmo efeito no caos do sistema que diminuir o parâmetro de interação. Os muitos termos não lineares proporcionais a T_3 na Hamiltoniana não causam aumento do volume caótico do sistema como poderíamos esperar.

A título de ilustração apresentamos a figura 7.11, onde são comparadas as representações gráficas do tipo (1) e (2) com os expoentes de Lyapunov de duas trajetórias, uma representada por pontos e linha tracejada e a outra por círculos e linha sólida. Em ambos casos, trajetórias com padrão esborado na representação gráfica apresentam expoentes de Lyapunov tipicamente nulos. Desta forma, concluímos que as representações gráficas adotadas não servem para caracterizar a regularidade ou caoticidade das trajetórias, o que poderia ser esperado, dado que estamos projetando seções de quatro dimensões em apenas duas dimensões.

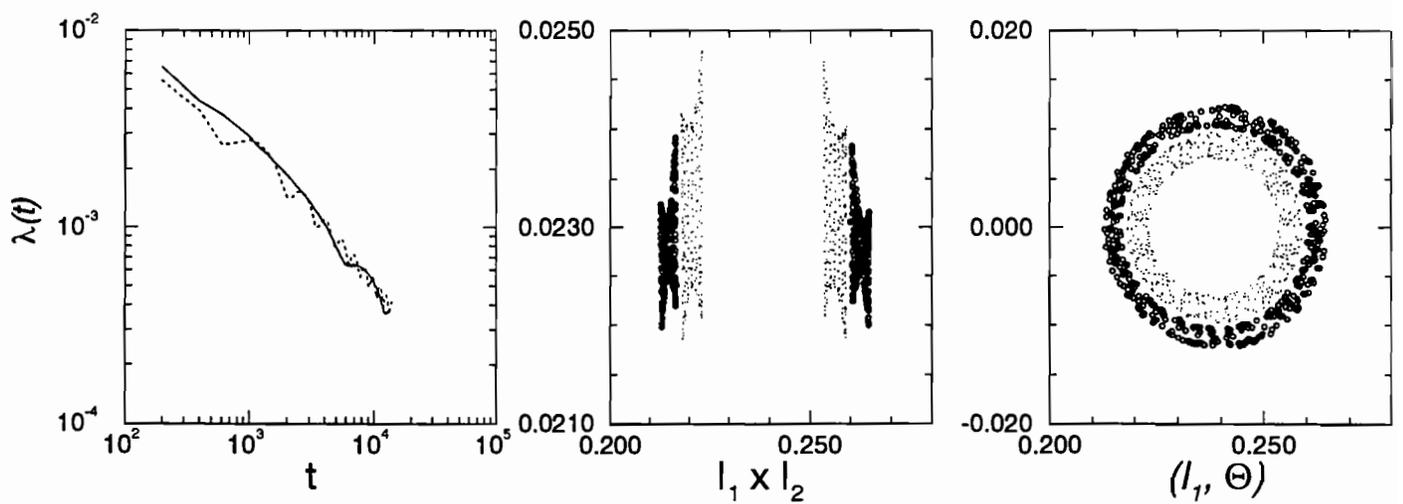


Figura 7.11: Maior expoente de Lyapunov como função do tempo, representação gráfica do tipo (1) e do tipo (2) de duas trajetórias. Uma delas é representada por linha sólida e círculos e a outra por linhas tracejadas e pontos. Note que ambos os expoentes decrescem continuamente com o tempo, caracterizando-os como nulos (trajetória regular) enquanto que nas representações gráficas encontramos padrões esboroados, que seriam típicos de trajetórias caóticas.

Capítulo 8

Conclusões

O presente trabalho contém um estudo detalhado de efeitos de temperatura finita nas versões integrável e não-integrável do modelo de Lipkin-Meshkov-Glick. Utilizamos uma técnica oriunda da teoria de muitos corpos não relativística que permite incorporar misturas estatísticas dentro do contexto do tratamento de campo médio. Deste ponto de vista, o modelo adotado nos parece ideal pois no limite de $N \rightarrow \infty$ a solução de campo médio é exata.

No que se refere a termodinâmica da versão $SU(3)$ do modelo, como discutido extensamente no texto do trabalho, caracterizam-se duas transições de fase de segunda ordem e portanto três regimes distintos, denominados SCR, ICR e WCR. A conclusão mais importante deste estudo é que os efeitos térmicos tendem a contrabalançar os efeitos dinâmicos, isto é, enfraquecer efetivamente o acoplamento. Esta situação possui um análogo na dinâmica térmica. A análise desta última, entretanto é muito mais complicada de todos os pontos de vista. Todos os estudos contêm tal riqueza de detalhes e complexidade que só puderam ser analisados numericamente. Essa riqueza revela aspectos interessantes e até mesmo inesperados: o surgimento de um novo grau de liberdade, cuja caracterização não pôde ser feita em termos de pares de variáveis canonicamente conjugadas (a não ser no regime de acoplamento forte, quando os efeitos térmicos são triviais). Em contrapartida, o estudo das equações de

Heisenberg para os geradores do grupo nos mostrou efeitos essencialmente causados por esse novo grau de liberdade. Outro aspecto que vale mencionar refere-se as seções de Poincaré comumente utilizadas em sistemas de dois graus de liberdade para caracterizar porções regulares e caóticas do espaço de fase: no presente trabalho mostramos que *o uso não cuidadoso* desta ferramenta pode ser desorientador para sistemas com mais de dois graus de liberdade. Uma análise ingênua das representações gráficas que utilizamos poderia nos levar a concluir pelo aumento de caos com a temperatura. No entanto uma análise quantitativa mais precisa, através de expoentes de Lyapunov e o cálculo do volume caótico do espaço de fase revela exatamente o contrário. Já a utilização adequada das seções não se revelou uma ferramenta eficiente para este fim.

Acreditamos que, embora nosso resultado seja dependente do modelo escolhido, deva ser geral. Investigações em outros modelos podem ser interessantes neste contexto, em especial àqueles que podem ser diretamente relacionados a observáveis tais como susceptibilidade magnética e outras propriedades termodinâmicas. O estudo de flutuações estatísticas nos parece também um campo promissor e possível de ser investigado com as ferramentas que dispomos. O ideal seria tratar um sistema suficientemente realístico e rico onde os efeitos térmicos aqui previstos pudessem ter uma contrapartida experimental.

Apêndice A

Cálculo dos traços

Apresentamos aqui o cálculo dos traços utilizados no capítulo 3 e 4.

Iniciamos por

$$Tr(DJ_z) = \frac{Tr(e^{\alpha J_z} J_z)}{Tr(e^{\alpha J_z})} = \sum_{\text{todos estados}} \frac{\langle jm | e^{\alpha J_z} J_z | jm \rangle}{\langle jm | e^{\alpha J_z} | jm \rangle} \quad (\text{A.1})$$

onde a somatória é feita sobre todos os estados acessíveis ao sistema. É conveniente tratarmos nosso sistema de dois níveis de degenerescência N como N sistemas de dois níveis. Assim, definindo

$$\mathcal{J}z_p = \frac{1}{2} (a_{p+1}^\dagger a_{p+1} - a_{p-1}^\dagger a_{p-1}) \quad (\text{A.2})$$

podemos expressar o operador de quase-spin na forma

$$J_z = \sum_{p=1}^N \mathcal{J}z_p. \quad (\text{A.3})$$

Os estados do sistema escrevemos como

$$|jm\rangle = |m_1 m_2 m_3 \dots m_N\rangle = \bigotimes_{p=1}^N |m_p\rangle, \quad (\text{A.4})$$

onde m_p são estados de partícula única e podem assumir valores $+1/2$ e $-1/2$.

O denominador de (A.1) é então dado por

$$\begin{aligned}
Tr(e^{\alpha J_z}) &= \sum_{\text{todos estados}} \langle m_1 m_2 \dots m_N | e^{\alpha J_{z1}} e^{\alpha J_{z2}} \dots e^{\alpha J_{zN}} | m_1 m_2 \dots m_N \rangle = \\
&= \prod_{p=1}^N \sum_{m_p=\pm 1/2} \langle m_p | e^{\alpha J_{zp}} | m_p \rangle = \prod_{p=1}^N (e^{\alpha/2} + e^{-\alpha/2}) = \\
&= [2 \cosh(\alpha/2)]^N.
\end{aligned} \tag{A.5}$$

O numerador de (A.1) é facilmente obtido:

$$Tr(e^{\alpha J_z} J_z) = \frac{\partial}{\partial \alpha} Tr(e^{\alpha J_z}) = 2^{(N-1)} N \cosh^{(N-1)}(\alpha/2) \sinh(\alpha/2). \tag{A.6}$$

E finalmente obtemos que

$$Tr(DJ_z) = \frac{N}{2} \tanh\left(\frac{\alpha}{2}\right). \tag{A.7}$$

Analogamente

$$\begin{aligned}
Tr(DJ_z^2) &= \frac{Tr(e^{\alpha J_z} J_z^2)}{Tr(e^{\alpha J_z})} = \frac{1}{Tr(e^{\alpha J_z})} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} Tr(e^{\alpha J_z}) = \\
&= \frac{N}{4} \left\{ (N-1) \tanh^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + 1 \right\}.
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Outro termo de interesse é o

$$Tr(DJ_x) = \frac{1}{Tr(e^{\alpha J_z})} \sum_{m=\text{todos estados}} \sum_{m'=\text{todos estados}} \langle m | e^{\alpha J_z} | m' \rangle \langle m' | J_x | m \rangle. \tag{A.9}$$

Dado que

$$\langle m' | J_x | m \rangle = \lambda_1 \delta_{m',m+1} + \lambda_2 \delta_{m',m-1} \tag{A.10}$$

e

$$\langle m' | e^{\alpha J_z} | m \rangle = e^{\alpha m} \delta_{m,m'}, \quad (\text{A.11})$$

obtemos que

$$\boxed{Tr(DJ_x) = 0.} \quad (\text{A.12})$$

Analogamente

$$\boxed{Tr(DJ_y) = Tr(DJ_x J_z) = Tr(DJ_y J_z) = 0.} \quad (\text{A.13})$$

Finalmente, o último termo a ser calculado é o

$$\begin{aligned} Tr(DJ_x^2) &= \frac{1}{Tr(e^{\alpha J_z})} \sum_{\substack{\text{todos} \\ \text{estados}}} \langle m_1 m_2 \dots m_N | \\ &e^{\alpha J_{z_1}} e^{\alpha J_{z_2}} \dots e^{\alpha J_{z_N}} \sum_{k=1}^N \sum_{i=1}^N \mathcal{J}_{x_i} \mathcal{J}_{x_k} | m_1 m_2 \dots m_N \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Como

$$\langle m' | \mathcal{J}_x^2 | m \rangle = \frac{1}{4} \delta_{m,m'} \quad \Rightarrow \quad \delta_{ik}, \quad (\text{A.15})$$

obtemos que

$$\begin{aligned} Tr(DJ_x^2) &= \frac{1}{Tr(e^{\alpha J_z})} \sum_{\substack{m_p = \pm 1/2 \\ p=1, \dots, N}} \langle m_1 m_2 \dots m_N | \\ &e^{\alpha J_{z_1}} e^{\alpha J_{z_2}} \dots e^{\alpha J_{z_N}} (\mathcal{J}_{x_1}^2 + \mathcal{J}_{x_2}^2 + \dots + \mathcal{J}_{x_N}^2) | m_1 m_2 \dots m_N \rangle = \\ &= \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{\text{estados}} \langle m_1 \dots m_N | \prod_p e^{\alpha J_{z_p}} \mathcal{J}_{x_i}^2 | m_1 \dots m_N \rangle}{\sum_{\text{estados}} \langle m_1 \dots m_N | \prod_p e^{\alpha J_{z_p}} | m_1 \dots m_N \rangle} = \\ &= \frac{\sum_{i=1}^N \sum \langle m_i | e^{\alpha J_{z_i}} \mathcal{J}_{x_i}^2 | m_i \rangle}{\sum \langle m_i | e^{\alpha J_{z_i}} | m_i \rangle} = \sum_{i=1}^N \frac{1/4 e^{\alpha/2} + 1/4 e^{-\alpha/2}}{e^{\alpha/2} + e^{-\alpha/2}} = \frac{N}{4}. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Da mesma forma

$$\text{Tr}(DJ_y^2) = \text{Tr}(DJ_x^2) = \frac{N}{4}.$$

(A.17)

Apêndice B

Multiplicidades das representações irreduzíveis do grupo SU(2)

Apresentamos aqui uma possível dedução da expressão das multiplicidades das representações irreduzíveis do grupo SU(2). A abordagem não tem por objetivo apresentar sofisticadas técnicas matemáticas, mas sim tem pretensões didáticas, visando familiarizar iniciantes com as construções das representações irreduzíveis do grupo e de seus estados, principalmente os das representações anti-simétricas que são as menos triviais.

Para a representação simétrica, $j = \frac{N}{2}$, o resultado é imediato pois só há uma possibilidade para este multipletto. Para os demais casos, calculamos o número de estados anti-simétricos linearmente independentes cujos autovalores de J_z sejam $-j$ e que sejam estados de menor peso de um multipletto (atuação de J_- nestes estados produz resultado nulo).

Seja o estado fundamental

$$|\phi\rangle = \prod_{p=1}^N a_{p-}^\dagger |0\rangle \quad (\text{B.1})$$

onde $|0\rangle$ é o estado de vácuo e a_{p-}^\dagger é o operador fermiônico de criação de uma partícula no estado p do nível inferior (as regras de comutação eq.(2.2) são obedecidas). Este

é o estado de menor peso da representação simétrica, identificado por $j = N/2$ e $m = -N/2$. Os demais estados do multipletto são obtidos aplicando-se o operador J_+ a este consecutivamente até que o estado $m = +N/2$ seja atingido.

Para os outros multipletos adotamos o procedimento a seguir:

Seja

$$|\phi_1\rangle = \sum_{p=1}^N a_{p+}^\dagger a_{p-} \epsilon_p |\phi\rangle \quad (\text{B.2})$$

tal que

$$J_- |\phi_1\rangle = 0 \quad \text{onde} \quad J_- = \sum_{p=1}^N a_{p-}^\dagger a_{p+}, \quad (\text{B.3})$$

o que implica em

$$\sum_{p=1}^N \epsilon_p = 0. \quad (\text{B.4})$$

Em (B.2) temos N variáveis ϵ_p ($p = 1, \dots, N$) que submetidas a equação de vínculo (B.4), resultam em $(N-1)$ variáveis independentes. Assim, temos $(N-1)$ autovetores que são estados de menor peso das representações irredutíveis cujo $j = \frac{N}{2} - 1$.

Da mesma forma propomos

$$|\phi_2\rangle = \sum_{p=1}^N \sum_{p'=1}^N a_{p+}^\dagger a_{p'+}^\dagger a_{p-} a_{p'-} \epsilon_{pp'} |\phi\rangle \quad (\text{B.5})$$

onde

$$\epsilon_{pp'} = 0 \quad \text{se} \quad p = p' \quad (\text{B.6})$$

$$\text{e} \quad \epsilon_{pp'} = \epsilon_{p'p}. \quad (\text{B.7})$$

Impomos que

$$J_- |\phi_2\rangle = 0 \quad \implies \quad \text{Nequações } j = 1, \dots, N: \quad \sum_{p=1}^N \epsilon_{pj} = 0. \quad (\text{B.8})$$

Considerando as imposições (B.6) e (B.7) ficamos com $\frac{N(N-1)}{2}$ variáveis $\epsilon_{pp'}$ que sujeitas as N equações de vínculo (B.8) reduzem-se a $\frac{N(N-3)}{2}$ variáveis independentes. Portanto, temos $\frac{N(N-3)}{2}$ multipletos com $j = \frac{N}{2} - 2$.

Analogamente, propomos ainda

$$|\phi_3\rangle = \sum_{p,p',p''=1}^N a_{p+}^\dagger a_{p'+}^\dagger a_{p''+}^\dagger a_{p''-} a_{p'-} a_{p-} \epsilon_{pp'p''} |\phi\rangle \quad (\text{B.9})$$

onde

$$\epsilon_{pp'p''} \text{ não nulo se e somente se } p \neq p' \neq p''; \quad (\text{B.10})$$

e

$$\epsilon_{pp'p''} \text{ não alterado por qualquer permutação de } p, p', p''. \quad (\text{B.11})$$

Impondo a condição

$$J_- |\phi_3\rangle = 0 \quad \implies \quad C_{N,3-1} \text{ equações de vínculo.} \quad (\text{B.12})$$

Assim o número de variáveis livres e de multipletos com $j = \frac{N}{2} - 3$ é dado por

$$C_{N,3} - C_{N,3-1}. \quad (\text{B.13})$$

Sucessivamente, para n partículas excitadas e $j = \frac{N}{2} - n$ teremos

$$C_{N,n} - C_{N,n-1} \quad (\text{B.14})$$

multipletos. Substituindo n por $\frac{N}{2} - j$ chegamos finalmente a

$$Y(N, j) = C_{N,(\frac{N}{2}-j)} - C_{N,(\frac{N}{2}-j-1)}. \quad (\text{B.15})$$

Definidos os estados de menor peso de cada multiplete os demais estados são encontrados aplicando-se o operador de subida J_+ a estes.

Apêndice C

O Grupo SU(3)

Este grupo matemático ocupou um papel decisivo no desenvolvimento da física de hádrons no início da década de 60 [54]. Nesta época, a física de hádrons era descrita por um caos no sentido literal da palavra. Havia duas grandes famílias de partículas, os bárions e os mésons, com conhecidas cargas, massas e estranhezas, mas sem qualquer ordem. Foi neste contexto que Murray Gell-Mann em 1961 propôs um modelo geométrico, misterioso para aquele momento, que classificava os bárions e mésons de acordo com suas cargas e estranhezas: o chamado EIGHTFOLD WAY[55]. (Essencialmente o mesmo esquema foi proposto independentemente por Ne'eman). Este modelo teve reconhecido sucesso ao prever teoricamente a partícula Ω_- , calculando sua massa e seu tempo de vida média. Ofereceu uma estrutura de organização, marcando o início da era moderna da física de partículas. Logo a seguir, em 64, Gell-Mann e Zweig propõe o modelo de quarks, baseado também na estrutura matemática do grupo SU(3).

SU(3) [56, 57, 58, 59] é um grupo de Lie de dimensão $8 = 3^2 - 1$ cujos geradores satisfazem as regras de comutação dadas por

$$[G_{ij}, G_{kl}] = \delta_{jk}G_{il} - \delta_{il}G_{kj} \quad i, j, k, l = 0, 1, 2, \quad (C.1)$$

e sujeitos ao vínculo $\sum_{i=0}^2 G_{ii} = N$, sendo N uma constante.

Há dois operadores invariantes ou operadores de Casimir que comutam com todos os outros dados por

$$C_2 = \sum_{i,j} G_{ij}G_{ji}, \quad (C.2)$$

$$C_3 = \sum_{i,j,k} G_{ij}G_{jk}G_{ki}. \quad (C.3)$$

Podemos definir o grupo $SU(3)$ como o conjunto das matrizes unitárias com determinante $+1$. Para uma determinada representação, os geradores do grupo são matrizes 3×3 Hermitianas de traço nulo. Esta característica de traço nulo vem da condição de que o determinante seja $+1$.

Qualquer matriz desse grupo pode ser expressa na forma

$$U(a_k) = \exp \left\{ \frac{1}{2} i \sum_{k=1}^8 a_k \frac{\lambda_k}{2} \right\}, \quad (C.4)$$

onde os a_k são oito parâmetros reais e arbitrários e λ_k formam a base mais utilizada para o grupo, proposta por Gell-Mann em 1962. São elas

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} & & \\ \lambda_6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \lambda_7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} & \lambda_8 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (C.5)$$

Assim, em termos de $F_k = \lambda_k/2$, definimos novos operadores do grupo da forma

$$T_{\pm} = F_1 \pm iF_2 = G_{12}^{21}, \quad (\text{C.6})$$

$$U_{\pm} = F_6 \pm iF_7 = G_{01}^{10}, \quad (\text{C.7})$$

$$V_{\pm} = F_4 \pm iF_5 = G_{02}^{20}, \quad (\text{C.8})$$

$$T_3 = F_3 = \frac{1}{2}(G_{22} - G_{11}), \quad (\text{C.9})$$

$$Y = \frac{2}{\sqrt{3}}F_8 = \frac{1}{3}(-2G_{00} + G_{11} + G_{22}), \quad (\text{C.10})$$

onde os operadores da primeira coluna a esquerda correspondem ao usual conjunto de geradores de Gell-Mann, enquanto que os do último termo à direita correspondem as formas definidas por (5.2), mais apropriadas para o modelo de Lipkin SU(3).

As operações de comutação do grupo permitem que apenas dois dos oitos geradores sejam representados por matrizes diagonais. Isto implica que o SU(3) é um grupo de ordem 2, e em geral o grupo SU(n) é de ordem $n - 1$. A escolha usual para os geradores diagonais, como pode ser observado em (C.5) é T_3 e Y . Seus autovalores são denotados por t_3 e y e são usados para rotular os *estados*, enquanto que os autovalores dos operadores de Casimir C_2 e C_3 identificam as *representações irredutíveis*. Alternativamente escolhemos os operadores G_{11} e G_{22} como operadores diagonais e seus respectivos autovalores n_1 e n_2 como os rótulos dos estados. Esta escolha é conveniente pois os autovalores de G_{kk} correspondem as populações de cada um dos níveis (camadas) k . Tanto quanto possível vamos nos referenciar as duas formas: a primeira por ser mais conhecida e a segunda por ser mais apropriada para nossa análise.

Vamos agora fazer uma breve pausa na análise do grupo SU(3) para recordamos algumas propriedades do familiar SU(2), dado que a comparação entre estes pode esclarecer alguns pontos. São elas:

1. O operador $C = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2 \equiv J^2$ comuta com todos os três geradores do grupo (J_z, J_+, J_-) , sendo portanto chamado operador invariante ou de

Casimir. A ação dos operadores do grupo em um estado pode transformá-lo em outro, mas não altera o autovalor de J^2 , o que significa dizer que só age dentro de um multiplete. Deste modo cada representação pode ser identificada pelo autovalor de J^2 .

2. Apenas um dos três geradores pode ser diagonalizado: a escolha convencional é J_z . Os estados de uma representação podem ser identificados pelo autovalor de J_z , usualmente denotado por m .
3. Seja o máximo autovalor de J_z igual a j , então há $(2j + 1)$ estados em um multiplete implicando que j pode assumir apenas valores inteiros ou semi-inteiros.
4. Os possíveis valores de m são $j, j - 1, j - 2, \dots, -j$.
5. O autovalor de J^2 é dado por $j(j + 1)$.
6. Há apenas um estado para cada m em uma dada representação irredutível (caracterizada por um dado valor de j).
7. Uma dada representação irredutível pode ser representada em apenas *uma dimensão*, ou seja por uma linha reta na forma:

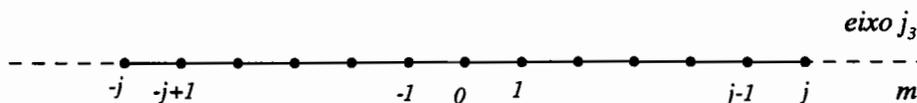


Figura C.1: Representação gráfica da representação j do grupo $SU(2)$.

Já para o grupo $SU(3)$, devido a dois de seus geradores serem simultaneamente diagonais, precisamos de duas dimensões para visualizar as suas representações. Análoga-

mente ao $SU(2)$, os operadores T_{\pm} , U_{\pm} , V_{\pm} são operadores de “subida” e “descida” tanto para t_3 , quanto para y . Já para os geradores e rótulos alternativos, G_{20} e G_{02} são operadores de subida e descida para n_2 , enquanto que G_{10} e G_{01} são para n_1 . G_{12} e G_{21} alterando ambos.

Na figura abaixo temos uma ilustração das redes bidimensionais formadas pelos estados de uma representação, onde indicamos a atuação dos operadores deslocamento em função dos dois conjuntos de rótulos: (a) $y \times t_3$ e em (b) $n_2 \times n_1$. Em (a) os intervalos dos eixos são escolhidos de modo que as linhas formadas pelos geradores formem ângulos de 60° umas com as outras. Em (b) temos uma disposição menos usual dos estados, mas que apresenta explicitamente as populações dos níveis ou camadas do modelo de Lipkin $SU(3)$.

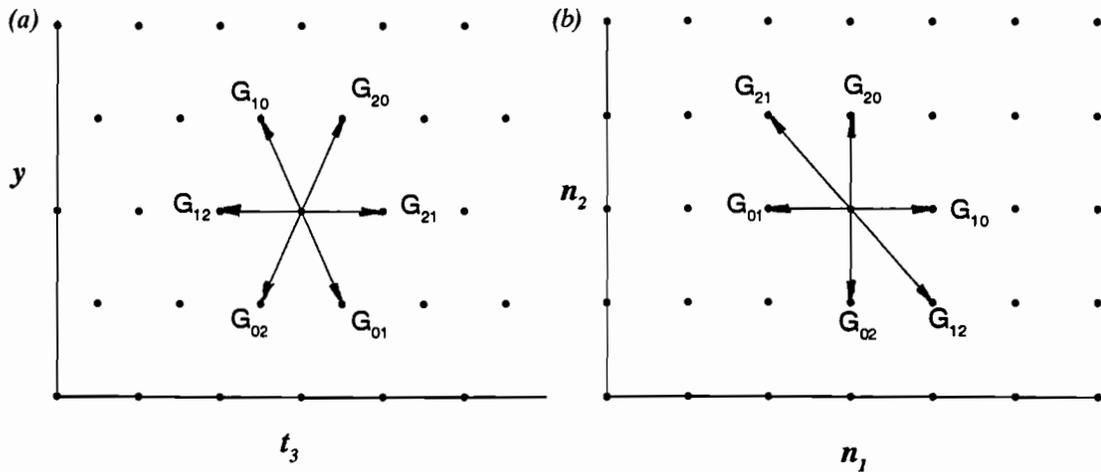


Figura C.2: Ação dos operadores de deslocamento sobre as redes bidimensionais. Em (a) estados são dispostos em função dos autovalores dos geradores diagonais y e t_3 , enquanto que em (b) em função de n_2 e n_1 .

Todos estados podem ser gerados por repetidas aplicações dos operadores deslocamento a qualquer um dos estados. Para representações de dimensão finita o número de posições ocupadas é finito. Dado que um estado de fronteira é atingido, a ação de

operadores deslocamento neste estado em direção ao exterior da representação terá resultado nulo. A natureza da representação é definida pelos lugares ocupados e suas respectivas ocupações.

A ocupação de cada posição da rede é definida pelos resultados obtidos através de diferentes caminhos tomados pela rede para alcançar esta posição. Diretamente das relações de comutação e da ação dos geradores nos estados podemos deduzir esta e uma série de outras propriedades válidas para todas as representações. Algumas delas são:

1. As fronteiras são sempre fechadas e convexas.
2. Não existem lugares desocupados no interior da fronteira.
3. A forma geral da fronteira é um hexágono de lados p (número de intervalos da base superior do polígono) e q (número de intervalos de sua base inferior). É comum designar um multipletto pelo par ordenado (p, q) ou pelo número de estados que contem.
4. Os multipletos são simétricos em relação ao eixo y .
5. A multiplicidade dos estados de fronteira é sempre 1. Ao caminhar em direção ao interior do multipletto, a multiplicidade de cada linha aumenta em 1, até ser atingida uma linha triangular a partir da qual a multiplicidade permanece constante.
6. De modo geral, o número de estados de um multipletto é dado por

$$m = \frac{1}{2}(p + 1)(q + 1)(p + q + 2). \quad (\text{C.11})$$

7. Estados que ocupam a mesma posição na representação gráfica, apesar de possuírem mesmos valores de t_3 e y (ou n_1 e n_2), pertencem a diferentes sub-grupos

de $SU(2)$. Ilustramos com o seguinte exemplo para explicar melhor: o multipletto apresentado a seguir pode ser entendido como a superposição de três figuras de multiplicidade 1.

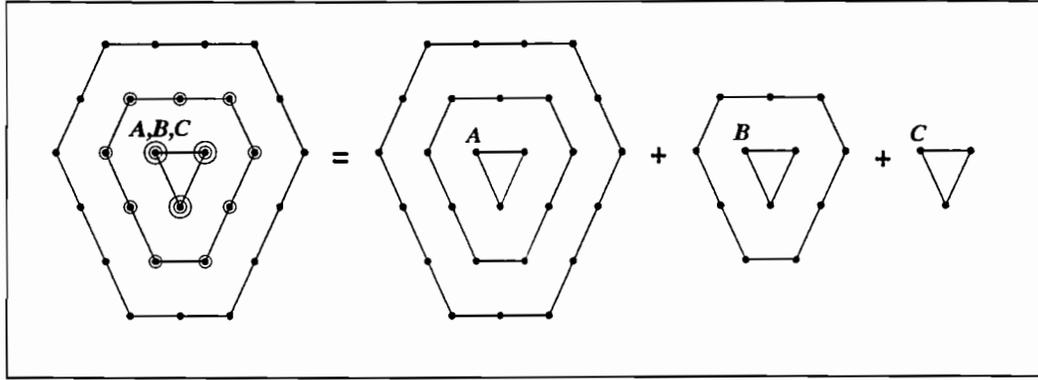


Figura C.3: A representação $[42] \equiv (3, 2)$ é apresentada no diagrama da esquerda. A direita separamos estados de acordo com os distintos sub-grupos de $SU(2)$ em ordem decrescente de dimensão. Os estados A , B e C que possuem os mesmos autovalores dos geradores diagonais distinguem-se por pertencerem a diferentes multipletos de $SU(2)$ como apresentado na próxima figura.

É preciso deixar claro que as figuras da direita *não* constituem representações irredutíveis, já que é possível passar de uma para outra através de transformações unitárias. Como ilustração, tomamos os estados A , B e C da figura. Apesar de ocuparem a mesma posição no diagrama da esquerda, pertencem a diferentes multipletos de $SU(2)$. Os operadores G_{21} (T_+), G_{12} (T_-) e $G_{22} - G_{11}$ (T_3) formam um sub-grupo de $SU(2)$, como pode ser facilmente verificado pelas matrizes λ_1 , λ_2 e λ_3 . Essas são precisamente as matrizes de Pauli acrescidas de uma terceira linha e de uma terceira coluna, ambas nulas. Sendo assim podemos decompor os estados desta linha em multipletos na forma apresentada na próxima figura,

onde cada sub-grupo de $SU(2)$ é caracterizado pelo seu rótulo t .

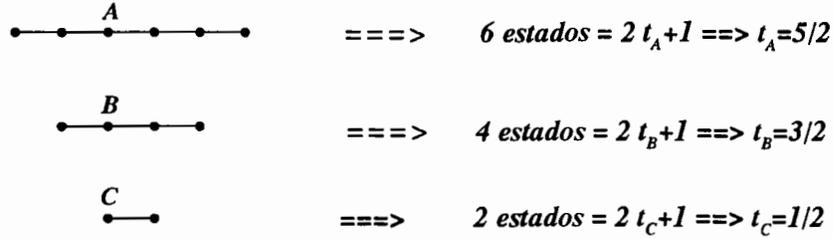


Figura C.4: Sub-grupos de $SU(2)$ dos estados A , B e C caracterizados por diferentes t . Contudo, note que t_z , o autovalor do gerador diagonal de $SU(2)$ é o mesmo para todos os estados: $t_z = -1/2$.

Então o rótulo auxiliar t pode também ser utilizado na identificação dos estados, mas é preciso deixarmos claro que T^2 não é um operador de Casimir de $SU(3)$. Também devemos dizer que não é único. Podemos utilizar $U^2 = \frac{1}{2}(U_+U_- + U_-U_+) + U_3$ ou qualquer outro sub-grupo de $SU(2)$.

C.1 Representações Fundamentais

Além da trivial representação do singlete unitário $(0,0)$, as representações mais simples do grupo são $(1,0)$ e $(0,1)$, denotadas também por $[3]$ e $[3^*]$ respectivamente e apresentadas na figura (C.5). Em contraste com o que ocorre em $SU(2)$, as duas representações fundamentais são *não equivalentes*. A representação fundamental de interesse para o nosso modelo é a representação $[3]$ que é constituída pelos autoestados dos operadores diagonais:

$$u = \begin{pmatrix} q \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad d = \begin{pmatrix} 0 \\ q \\ 0 \end{pmatrix} \quad s = \begin{pmatrix} q \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.12})$$

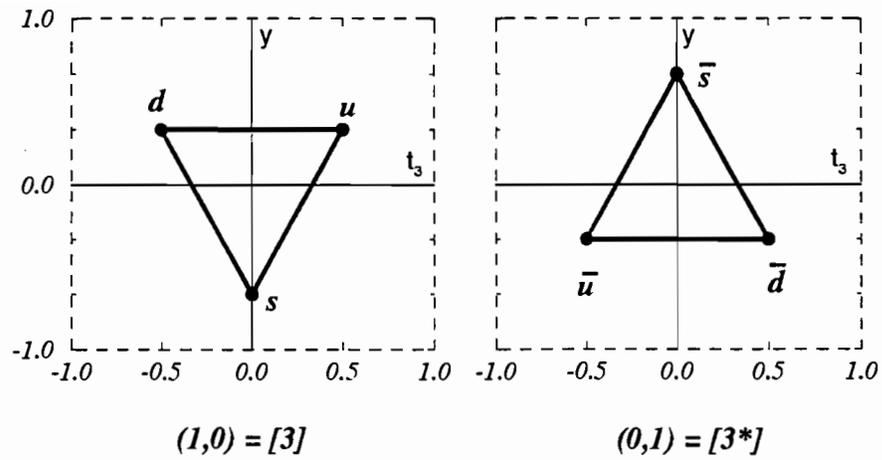


Figura C.5: Representações gráficas de $[3]$ e $[3^*]$.

A cada estado da representação $[3]$ associamos um estado físico de partícula única do modelo de Lipkin $SU(3)$, a saber, s corresponde a partícula localizada nível inferior, d corresponde ao estado no qual a partícula encontra-se no nível do meio e u à partícula no nível superior.

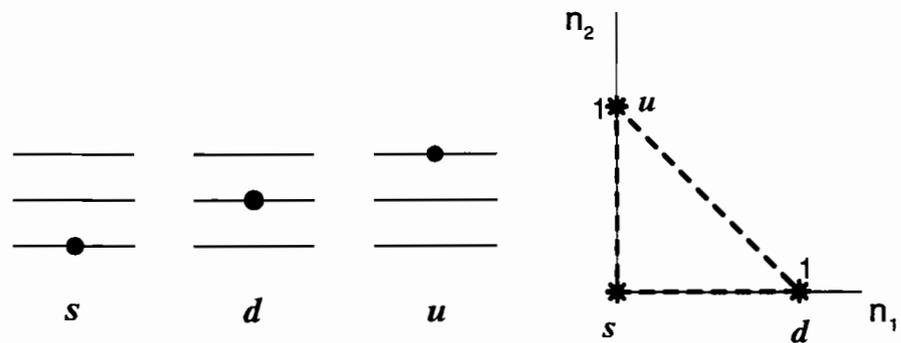


Figura C.6: Representação esquemática dos estados de partícula única. O diagrama da direita apresenta os estados em função de n_2 e n_1 .

Nestes estados agem os operadores expressos em termos das matrizes λ_k de Gell-Mann. Os autovalores das geradores diagonais G_{00} , G_{11} e G_{22} , e de T_3 e Y , assim como as atuações dos operadores não diagonais são apresentados na tabela a seguir.

	n_0	n_1	n_2	t_3	y	G_{21}	G_{12}	G_{20}	G_{02}	G_{10}	G_{01}
s	1	0	0	0	-2/3	0	0	u	0	d	0
d	0	1	0	-1/2	1/3	u	0	0	0	0	s
u	0	0	1	+1/2	1/3	0	d	0	s	0	0

Tabela C.1

C.2 Produtos de Multipletos e suas Reduções

Tomando o produto direto da representação irredutível [3] consigo mesma, podemos gerar as representações de ordens superiores. Contudo estas representações são redutíveis. Podemos citar dois métodos que podem ser utilizados para decompor estas representações: através de “Tableaux” de Young ou pelo método gráfico que apresentamos a seguir.

Este procedimento gráfico baseia-se no fato de que os autovalores dos operadores diagonais são números aditivos. Ilustramos esta técnica pelo produto [3] por [3], configuração que corresponde a um sistema de duas partículas no modelo de Lipkin $SU(3)$. Inicialmente desenhamos uma das representações, a primeira parcela. A cada estado da primeira representação, sobrepomos a segunda representação, colocando o centro da segunda sobre cada um dos estados da primeira consecutivamente. As posições ocupadas por esses estados da segunda representação com suas respectivas multiplicidades formam a representação produto. Os estados produzidos são formados

pela composição do estado central originário $|e_1\rangle$ da primeira representação com cada um dos estados $|e_2\rangle$ da segunda. Representamos os estados produtos por $|e_1e_2\rangle$ como pode ser observado na figura .

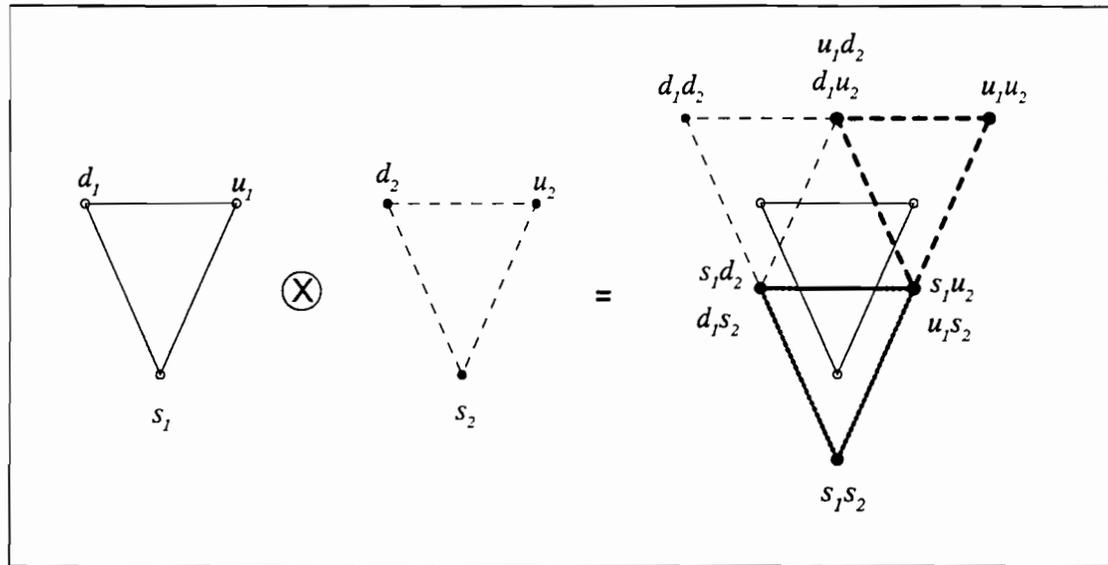


Figura C.7: Produto direto $[3] \otimes [3]$.

A redução da representação produto é realizada aplicando-se as regras de multiplicidade dos multipletos (item 5), mencionadas anteriormente, iniciando-se sempre pelas fronteiras (que tem multiplicidade 1 para todos os seus estados). Em nosso exemplo como a fronteira possui forma triangular todas as camadas internas terão multiplicidade 1. Extraímos estes estados do diagrama. Aplicamos aos restantes estados as regras até que todos sejam eliminados. Assim temos que $[3] \otimes [3] = [6] \oplus [\bar{3}]$, como apresentado na figura (C.8).

Para o modelo de Lipkin $SU(3)$, para obtermos os multipletos de um sistema de três partículas devemos fazer o produto direto destes com $[3]$, ou seja :

$$[3] \otimes [3] \otimes [3] = [6] \otimes [3] \oplus [\bar{3}] \otimes [3] = [10] \oplus [8] \oplus [8] \oplus [1]. \quad (C.13)$$

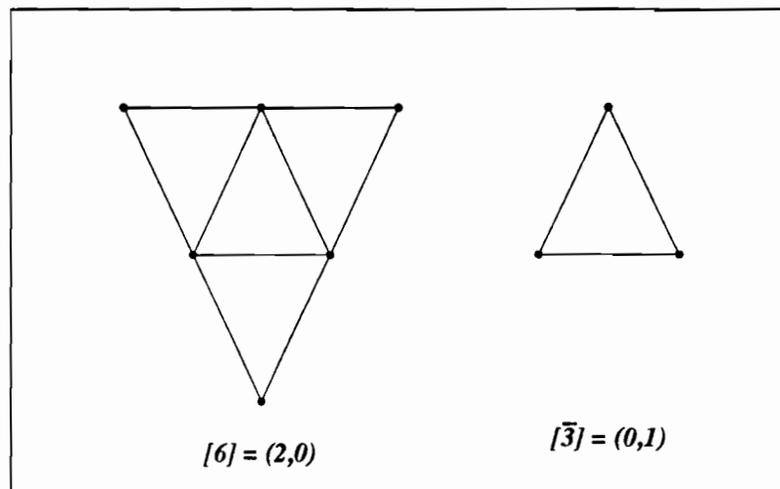


Figura C.8: Representações irredutíveis resultantes do produto direto $[3] \otimes [3]$.

C.3 Construção dos estados e ação dos geradores do grupo

Supondo que as representações irredutíveis são determinadas, há pelo menos dois métodos que podem ser utilizados para a definição de seus estados e a atuação dos geradores do grupo em cada um destes.

C.3.1 Primeiro Método

Iniciamos identificando o estado de menor peso da representação irredutível, isto é, o estado no qual a atuação de todos os operadores de descida G_{01} , G_{02} e G_{12} leva a resultados nulos. Tanto no diagrama $t_3 \times y$ (fig.C.2(a)), quanto no diagrama $n_2 \times n_1$ (fig.C.2(b)), este localiza-se na primeira posição à esquerda da linha inferior. A partir deste, definimos todos os outros estados iniciando pelo primeiro substrato, ou seja pelos estados pertencentes aos maiores sub-grupos de $SU(2)$ (sub-grupos que contém os estados da fronteira). Aplicando-se G_{21} consecutivamente percorremos todos os estados de cada um destes sub-grupos de T^2 (definidos por G_{12} , G_{21} e $G_{11} - G_{22}$)

partindo de cada extremo à esquerda e atingindo o extremo à direita do diagrama (a), após passar por todos estados do sub-grupo. Já no diagrama (b) estes sub-grupos são percorridos na direção inclinada, de baixo para cima e da direita para a esquerda. Cada um destes sub-grupos é alcançado pela atuação consecutiva de G_{10} no estado de menor peso e quando todas as possibilidades para este são esgotadas, pela atuação de G_{20} . Novamente vamos utilizar um exemplo para ilustração. Para 4 partículas, os 3^4 estados são distribuídos nas representações irreduzíveis:

$$[3] \otimes [3] \otimes [3] \otimes [3] = [15] \oplus 3 [15'] \oplus 2 [\bar{6}] \oplus 3 [3] \quad (\text{C.14})$$

Tomaremos a representação $[15']$ como exemplo:

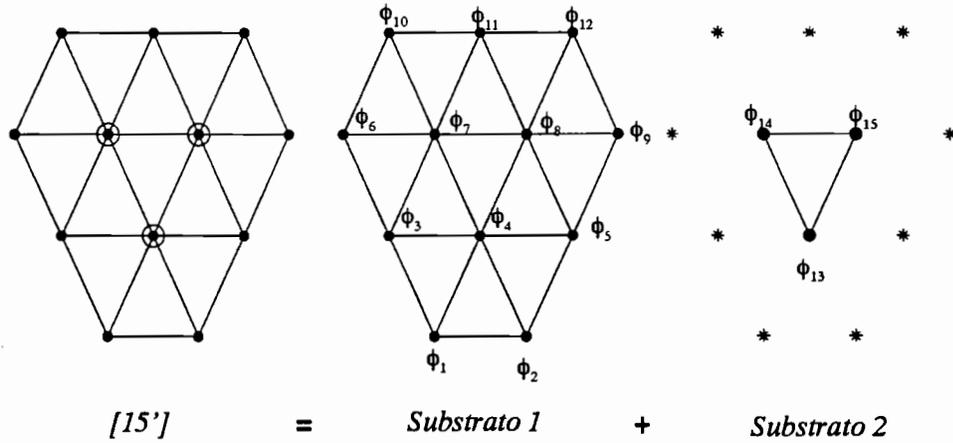


Figura C.9: Representação irreduzível $[15']$ separada em dois substratos de acordo com os sub-grupos de $SU(2)$. No substrato 2 os asteriscos representam as posições desocupadas.

Definimos os estados do primeiro substrato como

$$\begin{aligned}
 \phi_1 &= \phi, \quad \phi_2 = G_{21} \phi_1, \\
 \phi_3 &= G_{10} \phi_1, \quad \phi_4 = G_{21} \phi_3, \quad \phi_5 = G_{21} \phi_4, \\
 \phi_6 &= G_{10} \phi_3, \quad \phi_7 = G_{21} \phi_6, \quad \phi_8 = G_{21} \phi_7, \quad \phi_9 = G_{21} \phi_8, \\
 \phi_{10} &= G_{20} \phi_6, \quad \phi_{11} = G_{21} \phi_{10}, \quad \phi_{12} = G_{21} \phi_{11}.
 \end{aligned}$$

O primeiro estado do segundo substrato a ser definido é ϕ_{13} que pertence ao subgrupo de T^2 com apenas um estado. Considerando que $G_{20} \phi_1$ deve levar a uma combinação linear de ϕ_4 e ϕ_{13} (misturando portanto estados de subgrupos distintos de T^2), obtemos que

$$\phi_{13} = (\alpha G_{20} + \beta G_{10}) \phi_1 \quad (\text{C.15})$$

de modo que $G_{12}\phi_{13} = G_{21}\phi_{13} = 0$ e que $\langle \phi_{13} | \phi_4 \rangle = 0$. Uma possível escolha é

$$\phi_{13} = (G_{20} - G_{10}G_{21}) \phi_1. \quad (\text{C.16})$$

Os estados do segundo substrato são dados por

$$\phi_{14} = G_{10} \phi_{13}, \quad \phi_{15} = G_{21} \phi_{14}. \quad (\text{C.17})$$

Definindo os estados desta forma, as atuações dos geradores do grupo em cada um destes podem ser calculadas através das relações de comutação. Exemplificando: o cálculo de $G_{10} \phi_2 = G_{10} G_{21} \phi_1$. Lembrando que $\phi_4 = G_{21}G_{10} \phi_1$, $\phi_{13} = (G_{20} - G_{10}G_{21})\phi_1$ e que $G_{10}G_{21} = -G_{20} + G_{21}G_{10}$ obtemos

$$G_{10} \phi_2 = \left\{ \frac{1}{2}G_{10}G_{21} + \frac{1}{2}(-G_{20} + G_{21}G_{10})\phi_1 \right\} = \frac{1}{2}(\phi_4 - \phi_{13}). \quad (\text{C.18})$$

Por este simples exemplo, podemos notar que o cálculo da ação de todos os geradores sobre todos os estados é uma laboriosa e longa tarefa.

C.3.2 Segundo Método

A diferença essencial entre este e o primeiro método reside na forma em que definimos os estados. Aqui expressamos explicitamente os estados como combinações lineares dos 3^N estados $|e_1 e_2 \cdots e_N\rangle$ formados pelo produto direto das representações irredutíveis, como pudemos observar no procedimento gráfico mencionado acima. Definimos o estado de menor peso da representação de modo que sejam nulos os produtos internos deste com todos os outros estados de todas as representações que ocupam a

mesma posição no diagrama $y \times t_3$ (ou $n_2 \times n_1$). Verificamos também que sejam satisfeitas as condições $G_{02}\phi_1 = G_{12}\phi_1 = G_{01}\phi_1 = 0$ e $\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = 1$. Os estados do primeiro substrato, são obtidos simplesmente pela ação dos operadores subida em sequência análoga a do primeiro método, segundo as atuações dos geradores definidas na tabela C.1 e lembrando que

$$\begin{aligned}
 \mathcal{O}|e_1 e_2 e_3 \cdots e_j \cdots e_N\rangle &= \mathcal{O}_1 1_2 1_3 \cdots 1_j \cdots 1_N |e_1 e_2 e_3 \cdots e_j \cdots e_N\rangle + \\
 &+ 1_1 \mathcal{O}_2 1_3 \cdots 1_j \cdots 1_N |e_1 e_2 e_3 \cdots e_j \cdots e_N\rangle + \\
 &+ 1_1 1_2 \mathcal{O}_3 \cdots 1_j \cdots 1_N |e_1 e_2 e_3 \cdots e_j \cdots e_N\rangle + \\
 &+ 1_1 \vdots 1_3 \cdots \mathcal{O}_j \cdots 1_N |e_1 \cdots \cdots e_j \cdots e_N\rangle + \\
 &+ 1_1 1_2 1_3 \cdots 1_j \cdots \mathcal{O}_N |e_1 e_2 e_3 \cdots e_j \cdots e_N\rangle, \quad (C.19)
 \end{aligned}$$

onde \mathcal{O} representa um dos geradores do grupo. Todos estados são então devidamente normalizados.

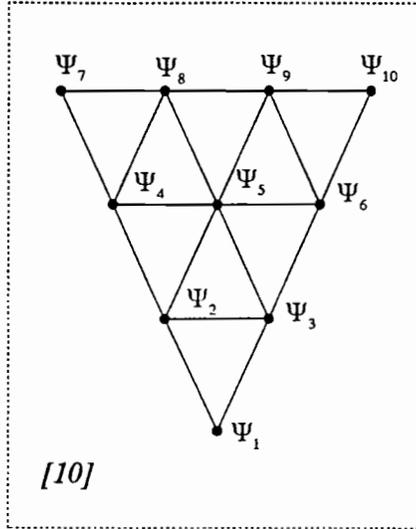
O estado “semente” do segundo substrato é obtido analogamente ao primeiro método, assim como todos os estados desse substrato.

As ações dos geradores do grupo sobre todos os estados são então calculadas explicitamente.

Exemplificamos este método com as representações irredutíveis simétrica e primeira anti-simétrica para um sistema de 3 partículas:

1. Representação Simétrica $[10] \equiv (3, 0)$.

Estados trivialmente construídos como somas normalizadas de todos estados da base vetorial.



$$\begin{aligned}
 \Psi_1 &= sss, \\
 \Psi_2 &= 1/\sqrt{3} (dss + sds + ssd), \\
 \Psi_3 &= 1/\sqrt{3} (uss + sus + ssu), \\
 \Psi_4 &= 1/\sqrt{3} (sdd + dsd + dds), \\
 \Psi_5 &= 1/\sqrt{6} (dsu + sdu + usd + sud + dus + uds), \\
 \Psi_6 &= 1/\sqrt{3} (suu + usu + uus), \\
 \Psi_7 &= ddd, \\
 \Psi_8 &= 1/\sqrt{3} (ddu + udd + dud), \\
 \Psi_9 &= 1/\sqrt{3} (duu + udu + uud), \\
 \Psi_{10} &= uuu.
 \end{aligned}$$

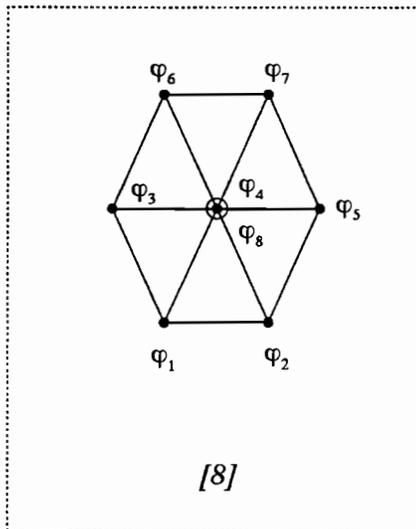
2. Representação Anti-Simétrica [8] $\equiv (1, 1)$.

Cálculo de φ_1 :

$$\varphi_1 = \frac{\alpha dss + \beta sds + \gamma ssd}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2}} \quad \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}.$$

Impondo $\langle \Psi_2 | \varphi_1 \rangle = 0$, obtemos que $\alpha + \beta + \gamma = 0$.

Escolhendo, por exemplo, $\alpha = 1, \beta = -1$ e $\gamma = 0$, obtemos:



$$\begin{aligned}
 \varphi_1 &= 1/\sqrt{2} (dss - sds), \\
 \varphi_2 &= 1/\sqrt{2} (uss - sus), \\
 \varphi_3 &= 1/\sqrt{2} (dsd - sdd), \\
 \varphi_4 &= 1/2 (usd + dsu - sud - sdu), \\
 \varphi_5 &= 1/\sqrt{2} (usu - suu), \\
 \varphi_6 &= 1/\sqrt{2} (dud - udd), \\
 \varphi_7 &= 1/\sqrt{2} (duu - udu).
 \end{aligned}$$

Para o cálculo de φ_8 :

- Calculamos $G_{20}\varphi_1$;
- Igualamos este resultado a $x\varphi_4 + y\varphi_8$;
- Fatoramos φ_4 definindo x ;
- Os termos restantes compõe φ_8 ;
- Calculamos termo de normalização .

Assim definimos $\varphi_8 = 1/\sqrt{12}(2(dus - uds) + dsu - usd - sdu + sud)$.

* * *

No primeiro método há maior facilidade na definição dos estados da representação e maior dificuldade no cálculo da ação dos geradores do grupo em cada um destes.

Já no segundo método, a forma com que se define os estados é mais trabalhosa, contudo o cálculo da ação dos geradores nestes é mais imediata. Este método também oferece um algoritmo implementável computacionalmente.

Cabe lembrar que pode-se realizar todos esses cálculos simplesmente utilizando os 3^N estados da citada base vetorial e a ação dos geradores definidas conforme a tabela C.1 e equação (C.19). A classificação dos autoestados de acordo com as representações irredutíveis pode ser feita através do cálculo dos operadores de Casimir C_2 e C_3 . Vale lembrar, contudo, que a dimensão deste espaço cresce rapidamente, tornando cada vez mais delicada esta classificação.

C.3.3 Representações irredutíveis simétricas

Devido as representações irredutíveis simétricas terem apenas um estado em cada posição do diagrama $y \times t_3$ ou $n_2 \times n_1$, o que equivale dizer que estas representações só possuem o primeiro substrato, podemos facilmente definir a atuação dos geradores

do grupo em cada estado. Para isso basta identificar os estados pelos autovalores dos operadores diagonais. A escolha mais conveniente para o nosso caso é n_2 e n_1 . O valor de n_0 é dado por $n_0 = N - n_1 - n_2$. Estes rótulos, no modelo de Lipkin SU(3), são as populações de cada um dos níveis ou camadas do sistema. Assim temos que

$$G_{jj} |n_1, n_2\rangle = n_j |n_1, n_2\rangle, \quad j = 0, 1, 2 \quad (\text{C.20})$$

$$G_{01} |n_1, n_2\rangle = \sqrt{(n_0 + 1) n_1} |n_1 - 1, n_2\rangle, \quad (\text{C.21})$$

$$G_{10} |n_1, n_2\rangle = \sqrt{n_0 (n_1 + 1)} |n_1 + 1, n_2\rangle, \quad (\text{C.22})$$

$$G_{02} |n_1, n_2\rangle = \sqrt{(n_0 + 1) n_2} |n_1, n_2 - 1\rangle, \quad (\text{C.23})$$

$$G_{20} |n_1, n_2\rangle = \sqrt{n_0 (n_2 + 1)} |n_1, n_2 + 1\rangle, \quad (\text{C.24})$$

$$G_{12} |n_1, n_2\rangle = \sqrt{(n_1 + 1) n_2} |n_1 + 1, n_2 - 1\rangle, \quad (\text{C.25})$$

$$G_{21} |n_1, n_2\rangle = \sqrt{n_1 (n_2 + 1)} |n_1 - 1, n_2 + 1\rangle. \quad (\text{C.26})$$

Apêndice D

Derivadas da energia livre de campo médio (6.9)

A fim de encontrar as soluções de mínimo da energia livre de campo médio do modelo de Lipkin SU(3), calculamos suas derivadas em relação aos parâmetros variacionais obtendo

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{F}}{\partial \theta_1} &= \cos(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3) T_3 + \sin(2\theta_1) \left(T_1 + \sin^2 \theta_3 T_3 - \sin^2 \theta_2 (T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3) \right) + \\ &+ \chi \left\{ \sin(2\theta_1) (T_1 - \sin^2 \theta_2 T_2) + T_3 [\sin(2\theta_1) (1 + \sin^2 \theta_2) \sin^2 \theta_3 + \cos(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3)] \right\} \\ &\quad \left\{ \cos(2\theta_1) (T_1 - \sin^2 \theta_2 T_2) + T_3 [\cos(2\theta_1) (1 + \sin^2 \theta_2) \sin^2 \theta_3 - \sin(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3)] \right\} \\ &= 0,\end{aligned}\tag{D.1}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{F}}{\partial \theta_2} &= 2 \sin(2\theta_2) (T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3) + \sin(2\theta_1) \cos \theta_2 \sin(2\theta_3) \frac{T_3}{2} - \sin^2 \theta_1 \sin(2\theta_2) (T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3) + \\ &+ \frac{\chi}{4} \left\{ -\sin(2\theta_2) \sin^2(2\theta_3) T_3^2 + 2 \sin(4\theta_2) (T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3)^2 + \right. \\ &+ 2 \left\{ \sin(2\theta_1) (T_1 - \sin^2 \theta_2 T_2) + T_3 [\sin(2\theta_1) (1 + \sin^2 \theta_2) \sin^2 \theta_3 + \cos(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3)] \right\} \\ &\quad \left. \left\{ -\sin(2\theta_1) \sin(2\theta_2) T_2 + T_3 [\sin(2\theta_1) \sin(2\theta_2) \sin^2 \theta_3 + \cos(2\theta_1) \cos \theta_2 \sin(2\theta_3)] \right\} \right\} \\ &= 0,\end{aligned}\tag{D.2}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{F}}{\partial \theta_3} &= \cos(2\theta_2) \sin(2\theta_3) T_3 + \sin(2\theta_1) \sin \theta_2 \cos(2\theta_3) T_3 + \sin^2 \theta_1 \sin(2\theta_3) T_3 (1 + \sin^2 \theta_2) + \\
&+ \frac{\chi}{2} T_3 \left\{ \cos^2 \theta_2 \sin(4\theta_3) T_3 - \sin^2(2\theta_2) \sin(2\theta_3) (T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3) + \right. \\
&+ \left. \{ \sin(2\theta_1) (T_1 - \sin^2 \theta_2 T_2) + T_3 [\sin(2\theta_1) (1 + \sin^2 \theta_2) \sin^2 \theta_3 + \cos(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3)] \} \right. \\
&\left. \{ \sin(2\theta_1) (1 + \sin^2 \theta_2) \sin(2\theta_3) + 2 \cos(2\theta_1) \sin \theta_2 \cos(2\theta_3) \} \right\} \\
&= 0, \tag{D.3}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{F}}{\partial \beta_j} &= -[\cos(2\theta_2) + \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2] A_{j2} + \sin^2 \theta_1 A_{1j} + (A_{j2} - A_{1j}) \\
&\quad \left\{ \cos(2\theta_2) \sin^2 \theta_3 + \frac{1}{2} \sin(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3) + \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_3 (1 + \sin^2 \theta_2) \right\} \\
&+ \frac{\chi}{2} \left\{ (A_{j2} - A_{1j}) \cos^2 \theta_2 \sin^2(2\theta_3) T_3 + \sin^2(2\theta_2) (T_2 - \sin^2 \theta_3 T_3) [A_{j2} - (A_{j2} - A_{1j}) \sin^2 \theta_3] + \right. \\
&+ \left. \{ \sin(2\theta_1) (T_1 - \sin^2 \theta_2 T_2) + T_3 [\sin(2\theta_1) (1 + \sin^2 \theta_2) \sin^2 \theta_3 + \cos(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3)] \} \right. \\
&\left. \{ \sin(2\theta_1) (A_{1j} - A_{j2} \sin^2 \theta_2) + (A_{j2} - A_{1j}) [\sin(2\theta_1) (1 + \sin^2 \theta_2) \sin^2 \theta_3 + \right. \\
&\left. + \cos(2\theta_1) \sin \theta_2 \sin(2\theta_3)] \} \right\} - \frac{1}{\beta} (T_j + \beta_1 A_{1j} + \beta_2 A_{j2} + \frac{\partial}{\partial \beta_j} \ln z) = 0, \quad j = 1, 2 \tag{D.4}
\end{aligned}$$

onde

$$A_{11} = \frac{\partial T_1}{\partial \beta_1} = -\frac{1}{z^2} (e^{-\beta_1} + 4e^{-\beta_2} + e^{(\beta_1 + \beta_2)}), \tag{D.5}$$

$$A_{22} = \frac{\partial T_2}{\partial \beta_2} = -\frac{1}{z^2} (e^{-\beta_2} + 4e^{-\beta_1} + e^{(\beta_1 + \beta_2)}), \tag{D.6}$$

$$A_{12} = A_{21} = \frac{\partial T_1}{\partial \beta_2} = \frac{\partial T_2}{\partial \beta_1} = -\frac{1}{z^2} (2e^{-\beta_1} + 2e^{-\beta_2} - e^{(\beta_1 + \beta_2)}), \tag{D.7}$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta_j} \ln z = \frac{1}{z} (e^{\beta_j} - e^{-(\beta_1 + \beta_2)}), \quad j = 1, 2. \tag{D.8}$$

Encontramos as soluções deste sistema e verificamos quais dentre estas correspondem a mínimos da energia livre do sistema. Estes resultados são apresentados no capítulo 6.

Referências

- [1] V.I.Arnold, *Métodos Matemáticos da Mecânica Clássica* (Mir, Moscou, 1987).
- [2] J.Guckenheimer e P.Holmes, *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems and Bifurcations of Vector Fields* (Springer Verlag, New York, 1983).
- [3] R.L.Devaney, *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems* (Addison Wesley, Redwood City, 1989).
- [4] A.J.Lichtenberg e M.A.Lieberman, *Regular and Stochastic Motion* (Springer Verlag, New York, 1983).
- [5] A.M.O. de Almeida, *Sistemas Hamiltonianos: Caos e Quantização* (Editora da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1990).
- [6] M.C.Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1990).
- [7] A.H.Blin, B.Hiller, M.C.Nemes e J. da Providência, *Finite-temperature dynamics of the chaotic maser model*, J.Phys. A **25** (1992) 2243-2252.
- [8] A.H.Blin, B.Hiller, M.C.Nemes e J. da Providência, *Thermal linear response of the chaotic maser model*, J.Phys. A **26** (1993) 581-589.
- [9] F.T.Arecchi, E.Courtens, R.Gilmore e H.Thomas, *Atomic Coherent States in Quantum Optics*, Phys.Rev.A **6** (1972) 2211-2237.
- [10] A.M.Perelomov, *Generalized coherent states and some of their applications*, Sov.Phys.Usp. **20** (1977) 703-720.

- [11] J.R.Klauder e B.S.Skagerstam, *Coherent States: Applications in Physics and Mathematical Physics* (World Scientific, Singapura, 1985) e referências contidas ali.
- [12] W.-M. Zhang, D.H.Feng e R.Gilmore, *Coherent states: Theory and some applications*, Rev.Mod.Phys. **62** (1990) 867-927.
- [13] H.J.Lipkin, N.Meshkov e A.J.Glick, *Validity of many-body approximation methods for a solvable model. (I) Exact solutions and perturbation theory*, Nucl.Phys. **62** (1965) 188-198.
- [14] S.Y.Li, A.Klein e R.M.Dreizler, *Boson Expansions for a Soluble Model of Interacting Fermions with $SU(3)$ Symmetry*, J.Math.Phys. **11** (1970) 975-985.
- [15] C.J.Thompson, *Classical Equilibrium Statistical Mechanics* (Oxford Science Publ., New York, 1988).
- [16] D.C.Meredith, S.E.Koonin e M.R.Zirnbauer, *Quantum chaos in a schematic shell model*, Phys.Rev. A **37** (1988) 3499-3513.
- [17] E.J.Heller, *Bound-State Eigenfunctions of Classically Chaotic Hamiltonian Systems: Scars of Periodic Orbits*, Phys.Rev.Lett **53** (1984) 1515-1518.
- [18] P.Leboeuf e M.Saraceno, *Structure of eigenfunctions in terms of classical trajectories in an $SU(3)$ schematic shell model*, Phys.Rev. A **41** (1990) 4614-4624.
- [19] P.Leboeuf, *El Límite Semiclásico de Sistemas Clásicamente no Integrables*, tese de doutoramento (Universidade de Buenos Aires, Buenos Aires, junho de 1989).
- [20] P.Leboeuf e M.Saraceno, *Eigenfunctions of non-integrable systems in generalised phase spaces*, J.Phys. A **23** (1990) 1745-1764.
- [21] P.Leboeuf, D.C.Meredith e M.Saraceno, *Quantum Localization on Classical Periodic Orbits*, Ann.Phys.(N.Y.) **208** (1991) 333-345.

- [22] J.da Providência e C.Fiolhais, *Mean-field theories with mixed states and associated boson expansions*, Nucl.Phys. A **435** (1985) 190-204.
- [23] J.da Providência e C.Fiolhais, *A note on thermal bosons*, Nucl.Phys. A **516** (1990) 53-61.
- [24] P.Kramer e M.Saraceno, *Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Physics*, Lecture Notes in Physics **140** (Springer-Verlag, New York, 1981).
- [25] L.G.Yaffe, *Large N limits as classical mechanics*, Rev.Mod.Phys. **54** (1982) 407-435.
- [26] L.G.Yaffe, *Large-N quantum mechanics and classical limits*, Physics Today, agosto de 1983, 50-57.
- [27] M.Trindade dos Santos, *Cicatrizes de Órbitas Periódicas na Interação de Emparelhamento*, dissertação de mestrado (Universidade de São Paulo, São Paulo, 1992).
- [28] G.Q.Pellegrino, *Aspectos de Integrabilidade e Caos Relacionados a Quebra de Simetria em Modelos de Poucos Spins*, tese de doutoramento (Universidade Estadual de Campinas - IFGW, Campinas,1994).
- [29] R.Gilmore e D.H.Feng, *Phase transitions in nuclear matter described by pseudospin hamiltonians*, Nucl.Phys. A **301** (1978) 189-204.
- [30] R.Gilmore, *Catastrophe Theory for Scientists and Engineers* (Dover, NewYork, 1981).
- [31] K.K.Kan, P.C. Lichtner, M.Dworzecka e J.J.Griffin, *Time dependent Hartree-Fock dynamics and phase transition in Lipkin-Meshkov-Glick model*, Phys.Rev.C **21** (1980) 1098-1103.
- [32] K.K.Kan, J.J.Griffin, P.C.Lichtner e M.Dworzecka, *TDHF eigenstates: gauge invariant periodic solutions*, Nucl.Phys. A **332** (1979) 109-124.

- [33] R.D.Williams e S.E.Koonin, *Semiclassical Quantization of the Shell Model*, Nucl.Phys. A **391** (1982) 72-92.
- [34] E.H.Lieb, *The classical limit of quantum spin systems*, Commun.math.Phys. **31** (1973) 327-340.
- [35] A.S.Davydov, *Quantum Mechanics* (Pergamon Press, Oxford, 1976) cap. XI.
- [36] R.D.Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many Body Problem* (McGraw-Hill, New York, 1967), cap. 4 e 7 .
- [37] J.P.Blaizot e G.Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems* (MIT Press, Cambridge, 1986).
- [38] R.Gilmore e D.H.Feng, *Studies of the ground-state properties of the Lipkin-Meshkov-Glick model via the atomic coherent states*, Phys.Lett B **76** (1978) 26-28.
- [39] D.Agassi, H.J.Lipkin e N.Meshkov, *Validity of many-body approximation methods for a solvable model. (IV) The deformed Hartree-Fock solution*, Nucl.Phys. **86** (1966) 321-331.
- [40] D.Galetti, A.F.R. de Toledo Piza, *Symmetries and time evolution in discrete phase spaces: a soluble model calculation*, Physica A **214** (1995) 207-228.
- [41] S.D.Prado, *Propriedades Magnéticas de um Gás de Elétrons Semiclássico*, tese de doutoramento (Universidade Estadual de Campinas - I.F.G.W., Campinas, 1995).
- [42] M.O.Terra, A.H.Blin, B.Hiller, M.C.Nemes, C.Providência e J. da Providência, *Temperature dependence of bifurcation of equilibria in the $SU(2)$ Lipkin model*, J.Phys. A **27** (1994) 697-713.
- [43] H.M.Nussenzveig, *Introduction to Quantum Optics* (Gordon and Breach, New York, 1973).

- [44] G.Holzwarth e T.Yukawa, *Choice of the Constraining Operator in the Constrained Hartree-Fock*, Nucl.Phys. A **219** (1974) 125-140 .
- [45] E.Moya de Guerra e F.Villars, *ATDHF versus TDHF in a Soluble Model*, Nucl.Phys. A **298** (1978) 109-121.
- [46] C. da Providência, J. da Providência e M.O.Terra, *Finite temperature SU(3) LMG model: mean-field versus exact calculation*, J.Phys.G **22** (1996) 351-360.
- [47] P.Ring e P.Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, Berlim, 1980).
- [48] J. da Providência, M.Yamamura e A.Kuriyama, *Pertubative description of the temperature dependence of the resonance width*, Phys.Rev. C **50** (1994) 1720-1722.
- [49] V.I.Arnold , Russian Math.Surveys **18** (1963) 85.
- [50] V.I.Arnold e A.Avez, *Ergodic Problems of Classical Mechanics* (Benjamin, New York, 1968).
- [51] C.Froeschlé, *Numerical Study of Dynamical Systems with Three Degrees of Freedom. I.Graphical Displays of Four-Dimensional Sections*, Astron. & Astrophys. **4** (1970) 115-128.
- [52] C.Froeschlé, *Numerical Study of Dynamical Systems with Three Degrees of Freedom. II.Numerical Displays of Four-Dimensional Sections*, Astron. & Astrophys. **5** (1970) 177-183.
- [53] G.Benettin, L.Galgani, J.M.Strelcyn, *Kolmogorov entropy and numerical experiments*, Phys.Rev. A **14** (1976) 2338-2345.
- [54] D.Griffiths, *Introduction to Elementary Particles* (Jonh Wiley&Sons, Singapura,1987).

- [55] Trabalhos originais estão coletados em M.Gell-Mann e Y.Ne'eman, *The Eightfold Way* (Benjamim, NewYork,1964).
- [56] S.Gasiorowicz, *Elementary Particle Physics* (John Wiley, New York, 1966).
- [57] M.R.Robilotta, *Notas do curso de Pós-graduação "Física de Hádrõs"* (Instituto de Física - Universidade de São Paulo, 1991).
- [58] T.P Cheng, *Gauge Theory of Elementary Particle Physics* (Claredon, Oxford,1984).
- [59] M.Moshinsky, *Group theory and many-body problem* (Gordon and Breach, New York, 1968).