

**André Schuwartz Ferreira**

# **Sistemas de Bósons Fortemente Correlacionados**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção  
do título de Mestre em Física

**UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE  
INSTITUTO DE FÍSICA**

Orientador: **Dr. Mucio Amado Continentino**

Niterói - Rio de Janeiro  
2001

# Agradecimentos

Agradeço à toda minha família especialmente aos meus pais, José Armínio e Maria José, pelo incentivo que me fez seguir nesta incerta (e não lucrativa) carreira de físico.

Agradeço aos professores da minha graduação na UFES pela boa formação que obtive.

Agradeço ao meu orientador, Múcio Continentino, pelas boas idéias e soluções sem as quais seria impossível realizar este trabalho.

Agradeço aos professores e colegas do grupo de estado sólido pelas elucidativas discussões sobre os assuntos contidos aqui.

Agradeço aos funcionários da UFF especialmente aos da pós-graduação e da biblioteca.

Agradeço aos amigos e colegas, especialmente Wellington e Scheilla (pela ajuda no Latex entre outras), Cláudia (pelas sugestões e referências interessantes), Jorge, Luiz Alberto e Heloize (que ajudaram em muitas coisas mas não lembro agora em quê), Leandro (que pelo menos não criticou), Sérgio (responsável pelo design da “borda” que usei nas transparências) e alguns colegas de Vitória especialmente a Maurício (pelas discussões sobre estado sólido e e-mails engraçados).

Também agradeço ao CNPq e FAPERJ pela bolsa de mestrado.

Agradeço finalmente a todas pessoas que faltaram aqui que também achem que mereçam algum agradecimento.

## Resumo

Foram estudados modelos de bósons correlacionados em uma rede a temperatura nula ( $T = 0$ ). Partimos da hamiltoniana do modelo de Hubbard adaptada para bósons. Em  $T = 0$  observa-se que a inclusão da interação repulsiva permite o aparecimento de um estado isolante onde a princípio o estado fundamental seria sempre superfluido. O modelo é resolvido em diversas aproximações de campo médio e apresentamos um tratamento utilizando Grupo de Renormalização de Campo Médio que permite analisar melhor a transição quântica isolante-superfluido e estimar valores de expoentes críticos. O trabalho apresenta também a solução exata para um modelo de bósons correlacionados interagindo por um potencial de alcance infinito e neste caso estudamos algumas propriedades em temperaturas finitas. Em  $T = 0$  indicamos as semelhanças entre a solução deste modelo idealizado e o modelo de Hubbard com interações locais.

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Sistemas de bósons interagentes . . . . .	1
1.2	Modelo de Hubbard para bósons . . . . .	2
1.2.1	Hamiltoniana do modelo . . . . .	2
1.2.2	Solução do modelo sem “hopping” ( $J = 0$ ) . . . . .	3
1.2.3	Estudo qualitativo do diagrama de fase . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Transições de fase quânticas</b>	<b>8</b>
2.1	Transições de fase . . . . .	8
2.2	Transições a temperatura nula . . . . .	10
2.3	Função de partição . . . . .	11
2.4	Teoria de escala para as transições de fase quânticas . . . . .	12
2.5	Teoria de escala no modelo de Hubbard para bósons . . . . .	14
2.6	Densidade do superfluido e compressibilidade . . . . .	16
2.7	Expoentes críticos . . . . .	18
<b>3</b>	<b>Fase superfluida</b>	<b>20</b>
3.1	Superfluidez do hélio . . . . .	20
3.2	Teoria de Bogoliubov para a superfluidez . . . . .	21
3.2.1	Hamiltoniana de Bogoliubov . . . . .	21
3.2.2	Solução pelo Método da Função de Green . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Modelo de bósons interagentes com potencial de alcance infinito</b>	<b>27</b>
4.1	Modelo de potencial de alcance infinito . . . . .	27
4.2	Simetria partícula-buraco . . . . .	29
4.3	Estado fundamental ( $T = 0$ ) . . . . .	29
4.4	Termodinâmica . . . . .	33
<b>5</b>	<b>Modelo de Hubbard para bósons em campo médio</b>	<b>39</b>
5.1	Introdução . . . . .	39
5.2	Representação por integrais de trajetória e limite de dimensão infinita . . . . .	39
5.3	Campo médio — aproximação de 1 sítio . . . . .	41
5.3.1	Desacoplamento . . . . .	41

5.3.2	Solução pela matriz da hamiltoniana . . . . .	42
5.3.3	Solução por funções de Green . . . . .	47
5.4	Campo médio — aproximação de 2 sítios . . . . .	50
5.4.1	Introdução . . . . .	50
5.4.2	Autoestados da hamiltonina local $\mathcal{H}_l$ . . . . .	52
5.4.3	Cálculo da susceptibilidade para a aproximação de 2 sítios . . . . .	53
5.4.4	Diagrama de fases na aproximação de 2 sítios . . . . .	54
<b>6</b>	<b>Grupo de Renormalização de Campo Médio</b>	<b>56</b>
6.1	Visão geral de Hipótese de Escala e Grupo de Renormalização . . . . .	56
6.2	Grupo de Renormalização de Campo Médio . . . . .	58
6.3	Susceptibilidade dinâmica . . . . .	59
6.4	Grupo de Renormalização de Campo Médio no modelo de Hubbard . . . . .	61
6.4.1	Relação de recorrência . . . . .	61
6.4.2	Superfícies críticas . . . . .	64
6.4.3	Comportamento do gap de energia e expoente $\nu z$ . . . . .	65
6.4.4	Expoente crítico $\nu$ . . . . .	68
6.4.5	Expoente crítico dinâmico $z$ . . . . .	69
<b>7</b>	<b>Resultados e conclusão</b>	<b>71</b>
<b>A</b>	<b>Método das Funções de Green para Estado Sólido</b>	<b>74</b>
A.1	Definição para as funções de Green em estado sólido . . . . .	74
A.2	Representação espectral das funções de Green . . . . .	76
A.3	Função de Green do oscilador harmônico . . . . .	78
<b>B</b>	<b>Função de partição entre estados coerentes do sistema</b>	<b>81</b>
B.1	Estados coerentes do sistema . . . . .	81
B.2	Operador de evolução temporal . . . . .	82
B.3	Função de partição . . . . .	84
<b>C</b>	<b>Função de partição na representação de interação</b>	<b>85</b>
C.1	Representação de interação . . . . .	85
C.2	Função de partição na representação de interação . . . . .	86
<b>D</b>	<b>Parâmetro de ordem complexo</b>	<b>88</b>
D.1	Parâmetro de ordem em um sistema isotrópico . . . . .	88
D.2	Módulo de helicidade . . . . .	88
D.3	Densidade superfluida . . . . .	89
D.4	Compressibilidade e deslocamento de fase na direção “temporal” . . . . .	90

E Solução do modelo de Hubbard para bósons no limite de dimensão infinita	92
F Dedução da susceptibilidade	96

# Lista de Figuras

1.1	Diagrama de fases para o modelo de Hubbard de bósons interagentes a $T = 0$	5
1.2	Gaps de energia e linhas de número de ocupação no diagrama de fase . . . . .	6
1.3	Ilustração da situação instável existente se a linha de densidade constante da fase superfluida não passasse pelo topo do ventre isolante . . . . .	7
3.1	(a)-Potencial típico de interação entre partículas. (b)-Relação de dispersão correspondente ao potencial de (a) . . . . .	26
4.1	Representação de possíveis estados fundamentais do sistema de bósons. . . . .	30
4.2	Região isolante correspondente ao preenchimento semi-inteiro. . . . .	31
4.3	Diagrama de fases do modelo de interação de alcance infinito a $T = 0$ para qualquer dimensão. . . . .	32
4.4	Variação da densidade em função do potencial químico em $d = 1$ para $U = 8t$ e $T = 0.1t$ . . . . .	35
4.5	Variação da densidade em função da temperatura em $d = 1$ para $U = 8t$ . . . . .	36
4.6	Variação do potencial químico em função da temperatura em $d = 1$ para $U = 8t$ . . . . .	37
4.7	Comportamento da energia em função da temperatura em $d = 1$ para $U = 8t$ . . . . .	37
4.8	Comportamento da densidade em função do potencial químico em $d = 1$ para $U = t$ e $T = 0.1t$ . . . . .	38
5.1	Regiões encontradas através do cálculo aproximado (repulsão muito grande). . . . .	44
5.2	Diagrama de fases aproximado com simetria partícula buraco. . . . .	45
5.3	Possível densidade de estados simétrica. . . . .	46
5.4	Diagrama de fases generalizado para a aproximação de repulsão muito grande. . . . .	46
5.5	Diagrama de fases de campo médio obtido por funções de Green. . . . .	50
5.6	Comparativo entre os diagramas de fase obtidos com as aproximações de campo médio de 1 e 2 sítios. . . . .	55
6.1	Mudança de escala em um sistema próximo da criticalidade. . . . .	57
6.2	Grupo de spins fortemente correlacionados $s_i$ representados pelo spin $\theta_1$ após a transformação do Grupo de Renormalização. . . . .	57
6.3	Aproximações de 1 e 2 sítios. Os valores $b$ (campo médio) simulam o restante do sistema. . . . .	59
6.4	Superfícies críticas para $n = 1$ e $d = 2$ . . . . .	65

6.5	Diagrama para $n = 1$ e $d = 2$ obtido pelo GRCM . . . . .	66
6.6	Redução do gap com o aumento de $J$ . . . . .	66
6.7	Comportamento de campo médio do gap de energia da fase isolante. . . . .	67
A.1	Caminho de integração para o cálculo da Transformada de Fourier da função de Green retardada. . . . .	78

# Lista de Tabelas

7.1	Resultados de ponto crítico para a fase isolante de $n = 1$ . . . . .	71
7.2	Resultados do GRCM para os expoentes críticos da fase isolante de $n = 1$ . .	72
7.3	Comparação entre os resultados de ponto crítico em campo médio a $d = 3$ . .	72

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Sistemas de bósons interagentes

A principal motivação de estudar sistemas de bósons interagentes é entender melhor as propriedades de sistemas representados por esse tipo de partículas. Temos exemplos de sistemas desse tipo como He<sup>4</sup> [1], supercondutores granulares comuns [2] e supercondutores de alta temperatura crítica (High- $T_c$ ) [3] onde os pares de Cooper se comportam aproximadamente como bósons.

No caso de sistemas bosônicos a inclusão de interação em geral enriquece muito os resultados obtidos por modelos teóricos explicando novos aspectos de sistemas medidos experimentalmente. Em um sistema puro de bósons, por exemplo, o estado fundamental a  $T = 0$  é sempre superfluido na ausência de interações. A inclusão de uma interação repulsiva permite o aparecimento de uma nova fase isolante que explica o recente interesse no estudo de transições superfluido-isolante para sistemas de bósons [4] (a análoga a este tipo de transição para sistemas fermiônicos é transição metal-isolante). Vamos considerar neste trabalho efeitos de localização devidos exclusivamente a interações e não levaremos em conta os efeitos de desordem. A transição superfluido-isolante neste caso é então uma *transição de Mott* pois a fase isolante aparece apenas em decorrência da interação repulsiva em questão.

Como procedemos em sistemas de férmions o primeiro passo que imaginamos que permite incluir interações é considerar um modelo de “gás de bósons em uma rede” do tipo:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{b}_i^\dagger \mathbf{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (1.1)$$

onde o primeiro termo representa a energia cinética que permite o movimento dos bósons pela rede <sup>1</sup> e o segundo o potencial de interação entre partículas. Podemos utilizar transformadas de Fourier para escrever o modelo em uma forma mais interessante

---

<sup>1</sup>Os operadores em segunda quantização  $\mathbf{b}$  e  $\mathbf{b}^\dagger$  estão definidos com mais detalhes na próxima seção.

no espaço dos momentos (o que será de utilidade nos capítulos posteriores):

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} \quad (1.2)$$

onde

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2\pi} \int e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) d(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (1.3)$$

Usaremos esta hamiltoniana no estudo da teoria de Bogoliubov para a condensação (fase superfluida a  $T = 0$ ) e para encontrar a solução exata do modelo no limite em que o alcance da interação é infinito. Para este último é notável a solução exata para elétrons a temperaturas finitas e em qualquer dimensão [5]. Repetindo os passos para o sistema de bósons a solução é trivial em  $T = 0$  mas o cálculo da função de partição para temperaturas finitas se torna mais complicado na medida que a soma é feita sobre um número de ocupação ilimitado em cada estado. Mesmo assim, no sistema de bósons, estudamos numericamente algumas grandezas a temperaturas finitas que permitem boa comparação com o modelo de elétrons exatamente solúvel e até mesmo com sistemas reais de bósons.

Outro modelo muito utilizado que é um ponto de partida para estudo destes sistemas corresponde à adaptação do modelo de Hubbard para bósons. Para este modelo fazemos aqui uma introdução mais detalhada visto que dele vamos extrair os principais resultados deste trabalho.

## 1.2 Modelo de Hubbard para bósons

### 1.2.1 Hamiltoniana do modelo

O modelo de Hubbard foi originalmente introduzido como uma descrição dos elétrons em metais de transição para o entendimento de propriedades magnéticas. Para sistemas de bósons é comum adaptar o modelo para partículas sem spin ( $s=0$ ) através da seguinte hamiltoniana:

$$\mathcal{H}_B = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{b}_i^{\dagger} \mathbf{b}_j - \mu \sum_i \mathbf{n}_i + \frac{U}{2} \sum_i \mathbf{n}_i (\mathbf{n}_i - 1) \quad (1.4)$$

onde  $\mathbf{b}_l$  é um operador que aniquila bósons no sítio  $l$  de uma rede regular de dimensão  $d$  e  $\mathbf{b}_l^{\dagger}$  é o operador que cria bósons no sítio  $l$ . Temos as seguintes relações de comutação para esses operadores:

$$[\mathbf{b}_i, \mathbf{b}_j^{\dagger}] = \delta_{ij} \quad (1.5)$$

$$[\mathbf{b}_i, \mathbf{b}_j] = [\mathbf{b}_i^{\dagger}, \mathbf{b}_j^{\dagger}] = 0 \quad (1.6)$$

e podemos também escrever o operador número:

$$\mathbf{n}_i = \mathbf{b}_i^\dagger \mathbf{b}_i. \quad (1.7)$$

A aplicação do operador número em um autoestado  $|n\rangle$  fornece  $n|n\rangle$ .

O primeiro termo é responsável pelos saltos de bósons entre os sítios da rede. Os operadores criam e destroem bósons nos sítios primeiros vizinhos  $i$  e  $j$ . O parâmetro  $J$  é a constante de “hopping” que determina a probabilidade com que estas partículas mudam de sítio e por isso está relacionada com a energia cinética. A notação  $\langle ij \rangle$  representa a soma entre os vizinhos mais próximos.

O segundo termo representa o potencial químico dos bósons. Mudando o valor de  $\mu$  podemos alterar o número total de partículas no sistema. Enfatizamos que o potencial químico para um gás de bósons sem interação deve ser sempre negativo ou nulo mas a inclusão da interação  $U$  elimina essa restrição<sup>2</sup>.

O último termo é o mais interessante pois representa um potencial de interação que atua apenas em bósons no mesmo sítio. Esta interação de curto alcance simplifica de fato o problema e em geral é a interação dominante como argumentado por J. Hubbard (1963) [6] (apesar da argumentação ter sido originalmente feita para elétrons em metais, o modelo se mostra também eficiente na discussão de outros sistemas).

O estudo do modelo de Hubbard para bósons neste trabalho é feito pela hamiltoniana (1.4) e envolve a solução aproximada em campo médio no limite  $U \rightarrow \infty$ , a solução no limite de dimensão infinita [4]; campo médio para um [7] e dois sítios utilizando técnicas de funções de Green e finalmente a utilização do Grupo de Renormalização de Campo Médio para as aproximações de 1 e 2 sítios.

### 1.2.2 Solução do modelo sem “hopping” ( $J = 0$ )

Antes de entrarmos no estudo mais detalhado do modelo de Hubbard para bósons que será feito nos próximos capítulos é interessante avaliar alguns aspectos qualitativos do diagrama de fases resultante do modelo. Algumas características interessantes podem ser derivadas da solução sem “hopping” onde o sistema está em um estado isolante visto que não permitimos movimento dos bósons pelos sítios.

Observamos que fazendo  $J = 0$  a hamiltoniana envolve apenas operadores número. Supomos nesse caso que os autoestados  $|m_i\rangle$  são soluções que diagonalizam a hamiltoniana  $\mathcal{H}_B$ . Aplicando o operador  $\mathcal{H}_B$  por sítio nos autoestados  $|m_i\rangle$  temos:

---

<sup>2</sup>Comentamos mais sobre esta restrição no capítulo 4 onde estudamos uma solução exata para bósons interagentes em uma rede  $d$  dimensional.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_B|m_i\rangle &= -\mu\mathbf{n}_{bi}|m_i\rangle + \frac{U}{2}\mathbf{n}_{bi}(\mathbf{n}_{bi} - 1)|m_i\rangle \\
 \mathcal{H}_B|m_i\rangle &= -\mu m_i|m_i\rangle + \frac{U}{2}m_i(m_i - 1)|m_i\rangle \\
 E_B^0 &= \langle m_i|\mathcal{H}_B|m_i\rangle = -\mu m_i + \frac{U}{2}m_i(m_i - 1)
 \end{aligned} \tag{1.8}$$

O número de ocupação do estado fundamental deve ser aquele que minimiza a energia por sítio  $E_B^0$ . Para encontrar esse valor derivamos a energia em relação ao número de ocupação  $m_i$  encontrando

$$\frac{\partial E_B^0}{\partial m_i} = -\mu + \frac{U}{2}(2m_i - 1).$$

Minimizando temos

$$\frac{\partial E_B^0}{\partial m_i} = 0 \rightarrow m_i = \frac{\mu}{U} + \frac{1}{2} \tag{1.9}$$

Como  $m_i$  é um número inteiro a solução é do tipo:

$$m_0(\mu/U) = \begin{cases} 0 & \text{se } \mu/U \leq 0 \\ 1 & \text{se } 0 \leq \mu/U \leq 1 \\ \vdots & \vdots \\ n & \text{se } n-1 \leq \mu/U \leq n \end{cases} \tag{1.10}$$

onde fizemos  $m_i = m_0(\mu/U)$  independente do sítio. Portanto o sistema está em um estado isolante e o número de partículas por sítio é igual para todos os sítios sendo determinado pela solução (1.10).

Se  $\mu/U =$  inteiro temos dois estados degenerados para cada sítio diferindo de um bóson de ocupação entre eles. Podemos avaliar a energia para adicionar ou retirar uma partícula nesta solução ( $J = 0$ ). Já conhecemos a energia para  $n$  bósons por sítio:

$$E_n = -\mu n + \frac{U}{2}n(n-1) \tag{1.11}$$

e se adicionamos uma partícula no sítio:

$$E_{n+1} = -\mu(n+1) + \frac{U}{2}(n+1)n. \tag{1.12}$$

A diferença de energia é então:

$$\Delta E_+ = -\mu + Un \tag{1.13}$$

e como, de acordo com (1.10),  $n-1 \leq \mu/U \leq n$ , obtemos:

$$\underbrace{0}_{\frac{\mu}{U}=n} \leq \Delta E_+ \leq \underbrace{U}_{\frac{\mu}{U}=n-1} \tag{1.14}$$

Se, por outro lado, retiramos uma partícula, obtemos a energia:

$$E_{n-1} = -\mu(n-1) + \frac{U}{2}(n-1)(n-2) \quad (1.15)$$

e a diferença de energia é agora:

$$\Delta E_- = \mu - U(n-1) \quad (1.16)$$

portanto

$$\underbrace{0}_{\frac{\mu}{U}=n-1} \leq \Delta E_- \leq \underbrace{U}_{\frac{\mu}{U}=n}. \quad (1.17)$$

Observamos que no extremo  $\mu/U = n$  é possível criar uma partícula com energia de excitação nula e no extremo  $\mu/U = n-1$  é possível criar um buraco com energia de excitação nula. Essas regiões de  $\mu/U =$  inteiro devem estar então no estado superfluido se fizermos  $J \neq 0$  mesmo que arbitrariamente pequeno.

Para as outras regiões ( $\mu/U \neq$  inteiro) há um gap de energia para criar uma partícula ou buraco e a energia necessária para passar para o estado superfluido do sistema aumenta quando nos afastamos dos pontos de  $\mu/U =$  inteiro sendo máxima no ponto médio. Quando fazemos  $J \neq 0$  mas pequeno, a energia cinética ( $\approx J$ ) pode ser insuficiente para adicionar ou remover uma partícula e por isso deve haver uma região finita (com  $J \neq 0$ ) no diagrama de fase onde temos ainda a fase isolante.

### 1.2.3 Estudo qualitativo do diagrama de fase

De acordo com a solução com  $J = 0$  da seção anterior podemos esperar um diagrama de fase similar ao esboçado na Figura 1.1. Podemos explicar sucintamente

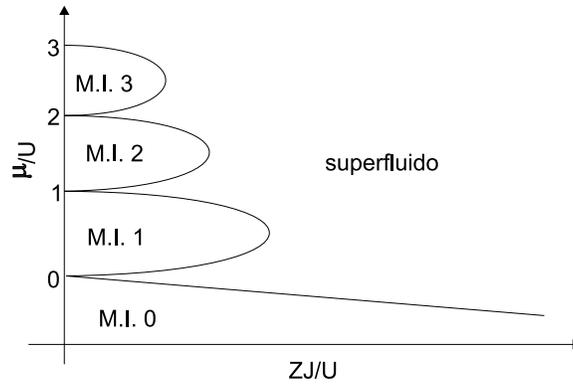


Figura 1.1: Diagrama de fases para o modelo de Hubbard de bósons interagentes a  $T = 0$

alguns aspectos deste diagrama:

- Na seção anterior observamos que nos pontos com  $\mu/U \neq$  inteiro precisamos de alguma energia para passar para o estado superfluido. Esta energia repulsiva

pode ser compensada pela energia cinética relacionada com  $J$ . Existe então uma região no plano em que a energia cinética não é suficiente para vencer este “gap” e por isso estamos, mesmo a  $J \neq 0$ , em um estado isolante. Os ventres da figura são explicados então pelo fato da energia repulsiva ser máxima nos pontos  $\mu/U = \text{semi-inteiro}$  e nula nos pontos  $\mu/U = \text{inteiro}$ . O formato exato destes ventres isolantes deve ser encontrado resolvendo-se o modelo, por isso, é claro, os ventres da Figura 1.1 são apenas um esboço previsto do resultado. As fases isolantes têm outra característica importante: são fases incompressíveis, isto é,  $\partial\rho/\partial\mu = 0$  (o número de bósons por sítio é constante). Essas regiões isolantes com um valor de densidade quantizado e um gap de energia para as excitações são conhecidas como *Isolantes de Mott*.

- Podemos observar os gaps de energia  $E_p$  (energia necessária para adicionar uma partícula no sistema) ou  $E_h$  (energia necessária para criar um buraco no sistema) na Figura 1.2. Essas energias são exatamente a diferença entre uma reta que passa pela linha de  $\mu/U = \text{constante}$  e o ponto imediatamente acima ou abaixo no limite da fase isolante. Notamos isso pois se aumentarmos  $\mu$  continuamente mantendo  $J$  constante chegamos eventualmente a um ponto nesta fronteira onde há energia suficiente para adicionar uma partícula no sistema e por isso permitir uma transição para a fase superfluida. Da mesma forma, diminuindo  $\mu$ , podemos criar um buraco que provoca a mesma transição.

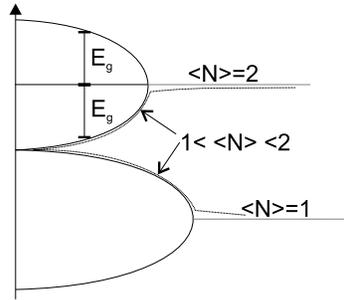


Figura 1.2: Gaps de energia e linhas de número de ocupação no diagrama de fase

- Note que a fase superfluida se estende até  $J = 0$  nos pontos onde  $\mu/U = \text{inteiro}$ . Isso acontece pois, como encontramos na seção anterior, se  $\mu/U = \text{inteiro}$ , é energeticamente idêntico ter  $n$  ou  $n - 1$  partículas por sítio. Por isso nestes pontos não há barreira a adição ou remoção de partículas ocorrendo então uma transição para a fase superfluida para  $J$  arbitrariamente pequeno. Na verdade quando estudamos a solução com  $J = 0$  encontramos explicitamente que nestes pontos a energia para criar uma partícula ou um buraco é nula.
- Podemos observar ainda na Figura 1.2 as curvas de densidade constante do diagrama de fase (linhas indicadas). Cada linha  $\langle N \rangle = n$  encontra a fronteira do

Isolante de Mott no ponto com  $J$  máximo. Isso deve acontecer pois se esta linha encontrasse a fronteira em outro ponto podemos mostrar que a compressibilidade  $\partial\rho/\partial\mu$  próxima ao topo seria negativa (ver Figura 1.3). Para densidades não inteiras entre  $n$  e  $n + 1$  a curva acompanha a fronteira na região superfluida terminando no eixo  $J = 0$  no ponto especial  $\mu/U = \text{inteiro}$ .

Figura 1.3: Se a linha com número de ocupação inteira da fase superfluida não tocar a fronteira no topo do ventre podemos imaginar uma transição em que teríamos compressibilidade negativa.

- Distinguímos dois tipos de transição superfluido-isolante: uma delas é conhecida como *transição genérica* e ocorre em qualquer ponto de fronteira excetuando o topo do ventre isolante do diagrama de fase. Pode ser entendida como a adição ou remoção de partículas no Isolante de Mott e faz com que a densidade mude continuamente do valor fixo inteiro de partículas por sítio quando cruzamos a fronteira. O outro tipo de transição, que chamaremos de *transição especial* ou *transição a densidade fixa*, ocorre no topo do ventre e não há mudança de densidade pois é nesse ponto que a linha de  $\langle N \rangle = n$  toca a fronteira. Nesse caso  $J$  suficientemente grande permite que os bósons vençam a repulsão e se locomovam na rede produzindo um estado superfluido sem a adição ou remoção de partículas. Este outro tipo de transição é movida então por uma física diferente e por isso pode pertencer a uma diferente classe de universalidade [4].

O principal objetivo do próximo capítulo, além de uma breve revisão a respeito de transições de fase quânticas, é construir a teoria de escala para as transições que discutiremos aqui.

# Capítulo 2

## Transições de fase quânticas

### 2.1 Transições de fase

Grande parte deste trabalho procura caracterizar a transição quântica entre a fase isolante e a superfluida do modelo de Hubbard para bósons. Antes disso vamos então comentar alguns aspectos das transições de fase quânticas e transições de fase em geral<sup>1</sup>.

Nos referimos usualmente a transições de fase quando observamos uma mudança brusca das propriedades de um sistema. Essas transições podem ser estudadas pela termodinâmica e são caracterizadas por singularidades nos potenciais termodinâmicos e, conseqüentemente, por singularidades também nas grandezas físicas no ponto de transição. Uma transição de fase “clássica” é movida pelo efeito térmico e portanto é caracterizada por uma temperatura de transição (temperatura crítica). Por isso, próximo a uma transição dessa espécie, procuramos descrever o comportamento singular das grandezas físicas do sistema através de comportamentos assintóticos em função de uma variável térmica

$$t = \frac{(T_c - T)}{T_c}. \quad (2.1)$$

Para algumas grandezas importantes o comportamento assintótico é descrito por:

- Calor específico (campo nulo):

$$c \propto t^{-\alpha} \quad (2.2)$$

- Susceptibilidade isotérmica:

$$\chi \propto t^{-\gamma} \quad (2.3)$$

---

<sup>1</sup>Não estamos interessados aqui em uma longa revisão sobre os diversos métodos de estudo de transições de fase, para isso há longa bibliografia especializada.

Definimos em muitos casos também, para caracterizar as transições, um parâmetro  $\phi$ , conhecido como parâmetro de ordem. O parâmetro de ordem caracteriza a fase do sistema assumindo o valor  $\phi = 0$  em toda região de uma das fases e qualquer valor  $\phi \neq 0$  na região da fase oposta. No caso de um ferromagneto, por exemplo, o parâmetro de ordem pode ser a magnetização  $m$  que assume um valor não nulo na fase “ordenada” ( $T < T_c$ ) e um valor nulo na fase “desordenada” ( $T > T_c$ ). O comportamento assintótico do parâmetro de ordem também é estudado:

$$\phi \propto t^\beta \quad (2.4)$$

Na presença de campos externos estamos interessados ainda no comportamento assintótico do parâmetro de ordem em relação ao campo conjugado na isoterma crítica:

$$\phi(t=0) \propto |H_e|^{1/\delta} \text{sgn}(H_e) \quad (2.5)$$

onde  $H_e$  é o campo externo<sup>2</sup> e  $\text{sgn}(x)$  é a função sinal.

Observamos que o comportamento assintótico das funções termodinâmicas é determinado pelos expoentes das relações acima conhecidos como expoentes críticos. Estes expoentes não são independentes e estão relacionados entre si por algumas desigualdades derivadas da termodinâmica:

- Desigualdade de Rushbrooke

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (2.6)$$

- Primeira desigualdade de Griffiths

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad (2.7)$$

- Segunda desigualdade de Griffiths

$$\gamma \geq \beta(\delta - 1) \quad (2.8)$$

- Desigualdade de Fisher

$$\gamma \geq (2 - \eta)\nu \quad (2.9)$$

- Desigualdade de Josephson

$$d\nu \geq 2 - \alpha. \quad (2.10)$$

Nas duas últimas relações  $d$  é a dimensão e os expoentes  $\nu$  e  $\eta$  são expoentes referentes ao comportamento assintótico respectivamente do:

- Comprimento de correlação  $\xi$

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \quad (2.11)$$

---

<sup>2</sup>Esse campo não é necessariamente um campo magnético mas muitas vezes um campo externo “generalizado”. Neste trabalho vamos considerar, por exemplo, o termo de energia cinética do modelo de Hubbard para bósons como um campo externo em capítulos posteriores.

- Função de correlação  $\Gamma(\mathbf{r}) = \langle \Phi(\mathbf{r})\Phi(0) \rangle - \langle \Phi(0) \rangle^2$

$$\Gamma(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad (2.12)$$

É interessante observar que na criticalidade ( $t = 0$ ) essas desigualdades entre expoentes críticos são satisfeitas como igualdades e conhecidas como leis de escala.

Observamos finalmente que de forma geral o expoente crítico associado ao comportamento assintótico de uma grandeza  $F$  é obtido por

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln|F(t)|}{\ln|t|}. \quad (2.13)$$

Relação utilizada em capítulos posteriores.

## 2.2 Transições a temperatura nula

Transições de fase podem ocorrer também a  $T = 0$ . Essas transições envolvem uma mudança no estado fundamental através da variação de um ou mais parâmetros da hamiltoniana do sistema. Este parâmetro pode ser por exemplo a dopagem em um supercondutor de alta temperatura crítica ou a desordem em um condutor próximo a sua transição metal isolante. As transições a temperatura nula apresentam como principal diferença (em relação as transições a temperaturas finitas) a necessidade imprescindível de levar em conta os efeitos quânticos do sistema. Na verdade é difícil saber exatamente a que temperatura os efeitos quânticos se tornam importantes na descrição de um sistema mas é certo que a  $T = 0$  esses efeitos são relevantes. Por isso nos referimos a transições a  $T = 0$  como transições de fase quânticas enquanto as demais transições a temperaturas finitas são denominadas “clássicas” mesmo quando envolvem sistemas essencialmente quânticos como hélio líquido ou supercondutores. Transições de fase a temperatura finita em sistemas quânticos desse tipo podem ser perfeitamente explicadas pela mecânica estatística clássica visto que as transições de fase em geral<sup>3</sup> são usualmente acompanhadas por um comprimento e um tempo de correlação divergentes. Neste caso as correlações de grande comprimento de onda são bem capturadas classicamente. Podemos dizer resumidamente que um sistema quântico se comporta classicamente quando a “temperatura” excede as “frequências” de interesse, isto é

$$\hbar\omega^* \ll K_B T_c \quad (2.14)$$

onde  $\omega^*$  é a frequência associada as flutuações quânticas. Como vimos, se a transição é acompanhada por um tempo de correlação divergente  $\omega^* \rightarrow 0$  quando  $T \rightarrow T_c$  e por isso para qualquer transição com  $T \neq 0$  encontramos uma temperatura suficientemente

---

<sup>3</sup>Quando nos referimos a “transições de fase em geral” queremos dizer tanto as transições de fase clássicas quanto as quânticas.

próxima de  $T_c$  tal que a relação (2.14) é satisfeita. Ou seja, sempre encontramos uma temperatura suficientemente próxima de  $T_c$  para qual o sistema se comporta quase classicamente. Para transições em  $T = 0$  não podemos dizer o mesmo, o que torna este tipo de transição de fase diferente e justificando sua referência por transição de fase quântica<sup>4</sup>.

Os métodos utilizados no tratamento de transições e modelos essencialmente quânticos são bem descritos no recente artigo de revisão de Sachdev [8] e em seu livro [7].

## 2.3 Função de partição

A função de partição de um sistema pode ser calculada de acordo com a expressão geral

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_n \langle n | e^{-\beta\mathcal{H}} | n \rangle. \quad (2.15)$$

Um desenvolvimento interessante para o cálculo da função de partição em modelos quânticos é a formulação por meio de integrais de trajetória. O que fazemos é associar o parâmetro  $\beta$  a uma “propagação temporal quântica”. Seguimos então a mesma idéia desenvolvida por Feynman para calcular a amplitude de transição entre dois estados do sistema observando que a única diferença é que a evolução temporal comum é substituída pelo evolução em um “tempo” imaginário  $\tau = -i\hbar\beta$ . Escrevemos o operador:

$$e^{-\beta\mathcal{H}} = [e^{-(1/\hbar)\delta\tau\mathcal{H}}]^M \quad (2.16)$$

onde dividimos o intervalo  $\tau$  em  $M$  pedaços infinitesimais ( $M \rightarrow \infty$ ). A função de partição (2.15) pode ser escrita então como

$$Z = \sum_n \sum_{m_1, m_2, \dots, m_M} \langle n | e^{-(1/\hbar)\delta\tau\mathcal{H}} | m_1 \rangle \langle m_1 | e^{-(1/\hbar)\delta\tau\mathcal{H}} | m_2 \rangle \dots \dots \langle m_M | e^{-(1/\hbar)\delta\tau\mathcal{H}} | n \rangle \quad (2.17)$$

e observamos que podemos continuar entendendo a relação como uma soma por todas as configurações possíveis do sistema se considerarmos o “tempo” como uma dimensão extra que se estende até  $\hbar\beta$ . O interessante é que para  $T = 0$  esta direção extra diverge e podemos considerar de fato o sistema quântico como um sistema clássico de  $d + 1$  dimensões. Na maioria das vezes, no entanto, a dimensão temporal é anisotrópica em relação as dimensões espaciais e neste caso a transcrição do modelo quântico para um modelo clássico de dimensão maior é mais complicada.

É útil então observar a expressão da função de partição neste novo formalismo. No apêndice B derivamos a relação para a função de partição entre os estados coerentes

<sup>4</sup>Para temperaturas muito baixas os efeitos quânticos são observados experimentalmente e influem até mesmo em transições térmicas se  $T_c \approx 0$ .

do sistema<sup>5</sup>. O resultado para a função de partição é

$$Z = \int \mathcal{D}(\phi_\alpha^*(\tau)) \mathcal{D}(\phi_\alpha(\tau)) e^{-\int_0^{\beta\hbar} [\hbar \sum_\alpha \phi_\alpha^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_\alpha(\tau) + \mathcal{H}(\phi_\alpha^*(\tau), \phi_\alpha(\tau))]} \quad (2.18)$$

onde observamos que a ação efetiva possui além da hamiltoniana escrita em um formato de segunda quantização um termo extra relacionado com a nova dimensão temporal que pode ser complexo e anisotrópico nesta nova dimensão.

## 2.4 Teoria de escala para as transições de fase quânticas

As transições de fase quânticas, como discutimos nas seções anteriores, são caracterizadas por divergências de um comprimento e um tempo característicos:

$$\xi \sim \delta^{-\nu} \quad (2.19)$$

$$\tau \sim \delta^{-\nu z} \quad (2.20)$$

que definem respectivamente os expoentes críticos  $\nu$  e  $z$ . Repare que o expoente  $z$  é definido devido a possível anisotropia entre a dimensão temporal e as dimensões espaciais. No caso isotrópico temos simplesmente  $z = 1$  e a divergência do “comprimento de correlação temporal” na criticalidade é idêntica a divergência do comprimento de correlação espacial.

A variável que mede a distância do ponto crítico  $\delta$  é do tipo  $J - J_c$  onde  $J$  é um parâmetro da hamiltoniana. De acordo com a hipótese de Kadanoff é possível reescalar

$$J' = b^{-y} J \quad (2.21)$$

$$\delta' = b^a \delta \quad (2.22)$$

$$\tau' = b^z \tau \quad (2.23)$$

onde o fator de escala  $b = (L/L')$ ,  $L$  e  $L'$  são as dimensões lineares do sistema original e do sistema reescalado respectivamente. Podemos relacionar estes expoentes  $y$  e  $a$  com os expoentes críticos. O comprimento de correlação deve escalar como

$$\xi'(|\delta'|) = \frac{\xi(|\delta|)}{b} \quad (2.24)$$

para um valor de  $b$  arbitrário. Usando (2.22) temos

$$\xi'(b^a |\delta|) = \frac{\xi(|\delta|)}{b} \quad (2.25)$$

---

<sup>5</sup>Usamos a relação para a função de partição entre estados coerentes neste trabalho pois as hamiltonianas se encontram em um formato de segunda quantização.

e fazendo  $b^a|\delta| = 1$  ou  $b = |\delta|^{-1/a}$  encontramos para o comportamento do comprimento de correlação próximo da criticalidade

$$\xi = |\delta|^{-1/a}\xi'. \quad (2.26)$$

Portanto, de acordo com (2.19) o expoente  $\nu$  é

$$\nu = \frac{1}{a}. \quad (2.27)$$

Para encontrar a relação com o expoente  $z$  basta exigir que a incerteza

$$\Delta E \Delta \tau \geq \hbar \quad (2.28)$$

seja invariante de escala. Observamos que  $\Delta E$  (uma energia) deve escalar como  $J$  (outra energia) em (2.21) e o tempo característico escala como (2.23) na medida que podemos escrever

$$\begin{aligned} \Delta E' \Delta \tau' &= \Delta E \Delta \tau \quad (\text{invariante de escala}) \\ \Rightarrow b^{(z-y)} \Delta E \Delta \tau &= \Delta E \Delta \tau \\ &\Rightarrow z = y. \end{aligned} \quad (2.29)$$

A parte singular da energia livre a  $T = 0$  se comporta como:

$$f_s = \frac{F_s}{L^d} = Jf(\delta) \quad (2.30)$$

e por isso reescalando por  $L' = L/b$  temos

$$f'_s = \frac{F_s}{(L')^d} = b^d f_s = J'f(|\delta'|). \quad (2.31)$$

Usando (2.21) e (2.22) encontramos

$$b^d f_s = b^{-y} J'f(b^a|\delta|) \quad (2.32)$$

e fazendo  $b = |\delta|^{-1/a}$  temos

$$\frac{f_s}{J} = |\delta|^{\frac{y+d}{a}} f(1). \quad (2.33)$$

Mas a parte singular da densidade de energia se comporta como

$$f_s \propto |\delta|^{2-\alpha} \quad (2.34)$$

o que define o expoente  $\alpha$ . Com o uso das relações para  $z$  e  $\nu$  (2.27) e (2.29) em (2.33) obtemos que a densidade de energia livre escala como

$$f_s \propto |\delta|^{\nu(d+z)} \quad (2.35)$$

e portanto os expoentes satisfazem a igualdade

$$2 - \alpha = \nu(d + z). \quad (2.36)$$

Podemos observar que esta relação é idêntica a desigualdade de Josephson satisfeita como igualdade com uma dimensão efetiva  $d + z$ . Como já argumentamos, é característica das transições a  $T = 0$ , onde a dinâmica do sistema deve obrigatoriamente ser levada em conta, que o “tempo” seja tomado como uma dimensão. Se  $z = 1$ , tempo e espaço são isotrópicos, e o modelo quântico de  $d$  dimensões pode ser tratado como um modelo clássico em  $(d + 1)$  dimensões, isso deve incluir as relações entre os expoentes críticos que devem valer para a dimensão efetiva  $d + 1$ . A relação de escala acima para as transições de fase quânticas é conhecida como relação de hiperescala por envolver uma dimensão efetiva diferente da dimensão espacial do sistema<sup>6</sup>.

## 2.5 Teoria de escala no modelo de Hubbard para bósons

No modelo de Hubbard para bósons definimos a variável crítica  $\delta$  como

$$\delta = \frac{\mu - \mu_c}{U} \quad (2.37)$$

para as transições genéricas onde a densidade muda quando cruzamos a fronteira entre as fases e

$$\delta = \frac{J - J_c}{U} \quad (2.38)$$

para a transição especial feita com  $\mu$  constante e passando pelo topo do ventre isolante onde não há variação da densidade. Há sentido nesta definição na medida que  $U$  representa a energia de repulsão que tende a organizar as partículas em um estado isolante e os outros parâmetros competem com esta repulsão. Para um determinado valor da razão  $J_c/U$  ou  $\mu_c/U$  esperamos então que ocorra uma transição de fases.

Associamos às flutuações quânticas um tempo de correlação divergente  $\tau \propto \delta^{-\nu z}$ , por isso a frequência associada se anula como  $\omega^* \propto \delta^{\nu z}$ . As energias que também se anulam na transição de fase estão assim relacionadas com  $\hbar\omega^*$  e por isso o “gap” de energia da fase isolante deve se anular com

$$E_g \propto \delta^{\nu z}. \quad (2.39)$$

Esse resultado permite estimar o produto  $\nu z$  como faremos na seção 6.4.3.

De acordo com a teoria de escala usual esperamos ainda que as funções de correlação exibam formas de escala. A susceptibilidade (em relação ao parâmetro de ordem) definida como

$$\chi(r, \tau) = \langle T_\tau \phi_r(\tau) \phi_0^\dagger(0) \rangle - \langle \phi_r(\tau) \rangle \langle \phi_0^\dagger(0) \rangle \quad (2.40)$$

---

<sup>6</sup>Para um estudo completo das teorias de escala em transições quânticas nos referimos à [9].

deve se comportar próximo à criticalidade como

$$\chi(r, \tau) \sim r^{-(d+z-2+\eta)} g(r\xi^{-1}, \tau\xi^{-z}) \quad (2.41)$$

definindo o expoente  $\eta$  de forma que a lei de escala  $\gamma = \nu(2 - \eta)$  seja válida com  $\gamma$  caracterizando a divergência da susceptibilidade estática a campo nulo. Também é interessante considerar o efeito de um campo externo  $h$  que corresponde a um termo na hamiltoniana da forma

$$\mathcal{H}_{ext} = - \sum_i h (\phi_i^* + \phi_i) \quad (2.42)$$

onde a dependência temporal e da posição dos campos foi omitida para simplificar a notação. Na presença deste campo a parte singular da energia livre escala de forma completa como

$$f_s(\delta, h) \sim \delta^{\nu(d+z)} Y(h\delta^{-\lambda_h}) \quad (2.43)$$

que se reduz a forma anterior (2.35) quando  $h = 0$ . Observando que

$$\chi(\omega = 0) \sim \frac{\partial^2 f_s}{\partial h^2} \quad (2.44)$$

temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f_s}{\partial h^2} &= \frac{\partial}{\partial h} \left[ \delta^{\nu(d+z)} \frac{\partial Y}{\partial(h\delta^{-\lambda_h})} \frac{\partial(h\delta^{-\lambda_h})}{\partial h} \right] \\ &= \delta^{\nu(d+z)} \delta^{-\lambda_h} \frac{\partial^2 Y}{\partial^2(h\delta^{-\lambda_h})} \frac{\partial(h\delta^{-\lambda_h})}{\partial h} \\ &= \delta^{\nu(d+z)} \delta^{-2\lambda_h} \frac{\partial^2 Y}{\partial^2(h\delta^{-\lambda_h})} \\ \frac{\partial^2 f_s}{\partial h^2} &= \delta^{\nu(d+z)-2\lambda_h} Y''(h\delta^{-\lambda_h}). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Se  $h = 0$

$$\chi(\omega = 0) = \frac{\partial^2 f_s}{\partial h^2} \sim \delta^{-\gamma} \quad (2.46)$$

e encontramos  $\lambda_h$  em função dos expoentes conhecidos

$$2\lambda_h = \gamma + \nu(d+z). \quad (2.47)$$

O parâmetro de ordem é  $M \propto \langle b \rangle \sim \partial f_s / \partial h$ . Derivando a forma de escala completa da energia livre na presença do campo encontramos

$$\frac{\partial f_s}{\partial h} \sim \delta^{\nu(d+z)-\lambda_h} Y'(h\delta^{-\lambda_h}) \quad (2.48)$$

e a campo nulo ( $h = 0$ ) a forma de escala é dada pelo expoente  $\beta$ :

$$M \sim \delta^\beta. \quad (2.49)$$

Encontramos agora para  $\lambda_h$

$$\lambda_h = \nu(d + z) - \beta. \quad (2.50)$$

As duas relações para  $\lambda_h$  permitem generalizar a lei de hiperescala entre  $\beta$  e  $\eta$ :

$$2\beta = \nu(d + z - 2 + \eta) \quad (2.51)$$

onde usamos a lei supostamente válida para  $\gamma$ :

$$\gamma = \nu(2 - \eta). \quad (2.52)$$

Outros observáveis podem ter a forma de escala derivada de (2.43). A parte singular da compressibilidade  $\kappa_s$ , por exemplo, é dada por

$$\kappa_s = \frac{\partial^2 f}{\partial \mu^2}. \quad (2.53)$$

Para as *transições genéricas* onde  $\delta = \mu - \mu_c$  a derivação em relação a  $\mu$  é equivalente a derivação em relação a  $\delta$  o que permite escrever a campo nulo

$$\kappa_s \sim \frac{\partial^2 f}{\partial \delta^2} \sim \delta^{\tilde{\nu}(d+\tilde{z})-2}. \quad (2.54)$$

Como por outro lado  $f_s \propto \delta^{2-\tilde{\alpha}}$  esperamos a forma de escala

$$\kappa_s \sim \delta^{-\tilde{\alpha}}. \quad (2.55)$$

Portanto podemos generalizar para as transições genéricas a relação de hiperescala

$$\tilde{\alpha} = 2 - \tilde{\nu}(d + \tilde{z}). \quad (2.56)$$

Enfatizamos, no entanto, que para a transição especial, com  $\delta = J - J_c$ , a construção da lei de hiperescala acima não é válida visto que a derivação em relação a  $\mu$  não é equivalente a derivação em relação a  $\delta$ . Para evitar esse tipo de confusão usamos expoentes com o til ( $\tilde{\phantom{x}}$ ) para as transições genéricas a partir deste ponto.

## 2.6 Densidade do superfluido e compressibilidade

É possível também encontrar o comportamento de escala da densidade do superfluido assim como o comportamento geral da compressibilidade do modelo. A densidade do superfluido é um observável físico importante visto que neste caso está intimamente relacionada ao parâmetro de ordem que por sua vez é difícil de se observar diretamente. Mostramos no apêndice D que a densidade do superfluido está ligada a uma “rigidez” sobre a rotação espacial do parâmetro de ordem complexo  $\phi(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r})e^{i\varphi}$  [10]. Da mesma forma observamos que a compressibilidade está

ligada a variação na direção temporal da fase  $\varphi$  do parâmetro de ordem [4]. Os resultados do apêndice permitem então descrever a variação da densidade de energia livre da ação efetiva em função de  $\varphi$  como:

$$\delta f = i\hbar\rho\dot{\varphi} + \frac{1}{2}\kappa(\hbar\dot{\varphi})^2 + \frac{1}{2}(\hbar\rho_s/m)(\nabla\varphi)^2 + \dots \quad (2.57)$$

Isto é, escrevemos a ação efetiva da função de partição entre os estados coerentes (veja apêndice B) próxima a fase ordenada como

$$S = \int d^d r \int_0^{\beta\hbar} d\tau [i\hbar\rho\dot{\varphi} + \frac{1}{2}\kappa(\hbar\dot{\varphi})^2 + \frac{1}{2}(\hbar\rho_s/m)(\nabla\varphi)^2 + \dots] \quad (2.58)$$

e com este resultado podemos extrair formas de escala para a compressibilidade total e densidade do superfluido.

Começamos impondo uma rotação na direção temporal da fase  $\varphi$  de  $\Delta\varphi = \theta$  entre  $\tau = 0$  e  $\tau = \beta\hbar$ . Fica evidente que a densidade de energia varia como

$$\delta f \approx \frac{1}{2}\kappa(\hbar\langle\dot{\varphi}\rangle)^2 \quad (2.59)$$

para variações pequenas. Portanto como

$$\langle\dot{\varphi}\rangle = \frac{\theta}{\beta\hbar} \quad (2.60)$$

encontramos um comportamento da densidade de energia livre como

$$\delta f \sim \frac{\kappa}{\beta^2} \quad (2.61)$$

O que fazemos é utilizar que a derivação dessas relações para compressibilidade e densidade utilizam um sistema finito (pois temos que impor condições de contorno nas paredes para conseguir a variação de fase do parâmetro de ordem complexo como descrevemos no apêndice D). Isso permite, de acordo com uma teoria de *finite-size scaling* usual<sup>7</sup>, dizer que a densidade de energia livre tem um comportamento de escala

$$f_s(\delta, L, \beta) \sim \delta^{\nu(d+z)} Y(\xi/L, \xi^z/\beta\hbar) \quad (2.62)$$

onde  $L^d$  é a dimensão espacial e  $\beta\hbar$  é a dimensão temporal do sistema. A variação  $\Delta f$  para o sistema finito se comporta então como

$$\Delta f \sim \delta^{\nu(d+z)} \tilde{Y}(\xi/L, \xi^z/\beta\hbar) \quad (2.63)$$

onde  $\tilde{Y}$  é a diferença entre as funções de escala nas duas paredes. Finalmente, para  $L \rightarrow \infty$  e  $\beta \rightarrow \infty$ , esperamos comportamento equivalente a (2.61) em função da extensão temporal  $\beta$ :

$$\frac{\kappa}{\beta^2} \sim \delta^{\nu(d+z)} \tilde{Y}(\xi/L, \xi^z/\beta\hbar). \quad (2.64)$$

<sup>7</sup>Para uma boa discussão sobre finite-size scaling nos referimos novamente à [10].

Isso indica claramente que a função de escala  $\tilde{Y}$  deve se comportar como

$$\tilde{Y} \sim (\xi^z / \beta \hbar)^2 \quad (2.65)$$

quando  $\beta \rightarrow \infty$ , resultando em uma forma de escala para a compressibilidade do tipo

$$\kappa \sim \xi^{2z} \delta^{\nu(d+z)} \quad (2.66)$$

e como  $\xi \sim \delta^{-\nu}$  podemos deduzir que

$$\kappa \sim \delta^{\nu(d-z)}. \quad (2.67)$$

Podemos utilizar o mesmo raciocínio e impor uma mudança de fase espacial do parâmetro de ordem complexo obtendo

$$\delta f \sim \frac{\rho_s}{\beta^2} \quad (2.68)$$

e a função de escala  $\tilde{Y}$  se comportaria agora quando  $L \rightarrow \infty$  como

$$\tilde{Y} \sim (\xi/L)^2 \quad (2.69)$$

e deduzimos então o comportamento de escala para a densidade do superfluido

$$\begin{aligned} \rho_s &\sim \xi^2 \delta^{\nu(d+z)} \\ \Rightarrow \rho_s &\sim \delta^{\nu(d+z-2)}. \end{aligned} \quad (2.70)$$

## 2.7 Expoentes críticos

As relações de escala anteriores permitem obter um resultado interessante para o produto de expoentes críticos  $\tilde{z}\tilde{\nu}$  da transição genérica. Usamos que as fases isolantes de Mott são incompressíveis ( $\kappa = 0$ ) e por isso a compressibilidade total não tem parte analítica na transição. Isso permite igualar as formas de escala obtidas para a parte singular (2.54) e para a compressibilidade total (2.67):

$$\begin{aligned} \tilde{\nu}(d + \tilde{z}) - 2 &= \tilde{\nu}(d - \tilde{z}) \\ \tilde{\nu}\tilde{z} &= 1. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Este é um resultado exato que deve ser consistente enquanto as relações de escala (2.54) e (2.67) forem válidas. Na verdade, a igualdade vale até mesmo quando essas relações são violadas (acima da dimensão crítica superior) [4]. Esse resultado permite também encontrar a dimensão crítica superior para essa transição usando, por exemplo, o comportamento de escala da densidade (2.70) e procurando o valor de  $d$  tal que os

expoentes assumam seus valores de campo médio. Neste caso, como  $\tilde{\alpha} = 0$  e  $\rho_s \sim \delta^{1-\tilde{\alpha}}$  temos  $\rho_s \sim \delta^1$  e portanto:

$$\delta^{\tilde{\nu}(d+\tilde{z}-2)} \sim \delta^1 \quad (2.72)$$

Usando o resultado  $\tilde{\nu}\tilde{z} = 1$  e o valor de campo médio  $\tilde{\nu} = 1/2$  encontramos:

$$\tilde{d}_c = 2. \quad (2.73)$$

Para a transição especial, é possível mostrar, devido a natureza complexa do parâmetro de ordem da transição superfluida, que estamos na mesma classe de universalidade do modelo XY em  $(d + 1)$  dimensões e  $d_c = 3$  [4].

# Capítulo 3

## Fase superfluida

### 3.1 Superfluidadez do hélio

Podemos liquefazer o hélio a pressão atmosférica (1 atm) reduzindo a temperatura para menos de 4.2 Kelvin. Reduzindo ainda mais a temperatura ( $\approx 2.17$  Kelvin) observamos que o comportamento do hélio (nos referimos ao  $^4\text{He}$ ) muda de uma fase líquida normal para uma nova fase com propriedades interessantes. O hélio nesta nova fase é denominado superfluido devido a suas propriedades anormais para um líquido<sup>1</sup>, como por exemplo a viscosidade extremamente baixa.

Para explicar o comportamento do superfluido alguns modelos se destacaram como o desenvolvido por Landau em 1941<sup>2</sup> que construiu uma hidrodinâmica quântica para o hélio líquido a baixas temperaturas estudando seus níveis de energia. Landau explicou várias das propriedades do superfluido desta forma. De outra maneira, Fritz London (London F., *Superfluids*, New York, Dover, volume I - 1961) usou métodos de mecânica estatística quântica e mostrou que bósons, como o  $^4\text{He}$ , sofrem um tipo de condensação no espaço dos momentos a baixas temperaturas similar ao fenômeno de condensação no espaço real.

Vamos analisar a fase superfluida aqui utilizando essa idéia de condensação do sistema no estado fundamental (condensação de Bose-Einstein) e um modelo de bósons interagentes a baixas temperaturas desenvolvido e resolvido por Bogoliubov. A aproximação de Bogoliubov será resolvida, no entanto, utilizando técnicas de função de Green. Para isso fazemos no apêndice A breve introdução ao Método das Funções de Green para Estado Sólido.

---

<sup>1</sup>Para uma análise interessante das propriedades do superfluido de  $^4\text{He}$  veja por exemplo Zemansky M. W., *Heat and Thermodynamics*, quinta edição.

<sup>2</sup>Veja por exemplo: Landau L. D., Lifshits E. M., *Statistical Physics*, Addison-Wesley (1959).

## 3.2 Teoria de Bogoliubov para a superfluidez

### 3.2.1 Hamiltoniana de Bogoliubov

Os problemas de bósons correlacionados podem ser descritos pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} \quad (3.1)$$

onde  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  é a energia cinética e no segundo termo  $V_{\mathbf{q}}$  é dado por

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\Omega} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3r \text{ com } \mathbf{r} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j \quad (3.2)$$

e descreve a interação entre os bósons. Quando estamos a baixas temperaturas os bósons começam a se condensar no estado fundamental do sistema. Os fenômenos de superfluidez começam a ser observados quando um número macroscópico dessas partículas está no estado fundamental. Por isso, em 1946, Bogoliubov foi capaz de explicar a superfluidez a partir de simples considerações. Ele considerou que se queremos estudar o sistema no estado superfluido podemos desprezar termos na hamiltoniana de ordem menor em relação ao número  $N_0$  de partículas no estado fundamental. Ou seja,  $N_0 \gg N_e$  (número de partículas no estado fundamental é muito maior que o número de partículas nos estados excitados) e por isso os termos da soma na hamiltoniana que não contém  $N_0$  podem ser desprezados. Para avaliar se os termos contém ou não  $N_0$  dividimos a segunda soma da hamiltoniana em outras somas como se segue:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}=\mathbf{k}'=0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_0 \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0 \text{ ou } \mathbf{k}' \neq 0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Avaliando os somatórios separadamente temos para a segunda soma

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}=\mathbf{k}'=0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_0 &= \frac{1}{2} \underbrace{V_0 \mathbf{b}_0^{\dagger} \mathbf{b}_0^{\dagger} \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_0}_{\mathbf{k}=\mathbf{k}'=0, \mathbf{q}=0} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_0 \end{aligned}$$

e podemos utilizar as relações entre o número  $N_0$  e os operadores

$$\mathbf{b}_0^{\dagger} \mathbf{b}_0 = N_0 \quad (3.4)$$

$$\mathbf{b}_0 \mathbf{b}_0^{\dagger} = (N_0 - 1) \approx N_0 \quad (3.5)$$

$$\mathbf{b}_0 \mathbf{b}_0 \approx \mathbf{b}_0^{\dagger} \mathbf{b}_0^{\dagger} \approx N_0 \quad (3.6)$$

a última relação se torna válida pois por exemplo o operador  $\mathbf{b}^\dagger_0 \mathbf{b}^\dagger_0$  atuando em um estado com  $N_0$  partículas com  $k = 0$  fornece  $\sqrt{(N_0 + 1)(N_0 + 2)}$  vezes o autoestado com  $N + 2$  partículas. Como  $N_0 \gg 2$  é válida a aproximação acima. A segunda soma fica então:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}=\mathbf{k}'=0,\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{-\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{q}} \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_0 &= \frac{1}{2} V_0 N_0^2 + \\ &+ \frac{1}{2} N_0 \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{-\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Para a terceira soma

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k} \neq 0 \text{ ou } \mathbf{k}' \neq 0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} &= \\ &= \sum_{\mathbf{k}'=0, \mathbf{k} \neq 0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{q}} \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_{\mathbf{k}} + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}=0, \mathbf{k}' \neq 0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{-\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'} \mathbf{b}_0 + \\ &\sum_{\mathbf{k}' \neq 0 \text{ e } \mathbf{k} \neq 0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

e podemos observar que encontramos  $N_0$  para  $q = 0$  e  $k = q$  na primeira soma,  $q = 0$  e  $k' = -q$  na segunda soma e  $k = -k' = q \neq 0$  para a última soma. Desprezamos todos os demais termos e obtemos:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k} \neq 0 \text{ ou } \mathbf{k}' \neq 0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} &\approx V_0 \sum_{\mathbf{k}'=0, \mathbf{k} \neq 0, \mathbf{q}=0} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}} \mathbf{b}^\dagger_0 \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_{\mathbf{k}} + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}'=0, \mathbf{k}=\mathbf{q} \neq 0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_0 \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{q}} \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_{\mathbf{q}} + V_0 \sum_{\mathbf{k}=0, \mathbf{k}' \neq 0, \mathbf{q}=0} \mathbf{b}^\dagger_0 \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}'} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'} \mathbf{b}_0 + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}=0, \mathbf{k}'=-\mathbf{q} \neq 0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{-\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_0 \mathbf{b}_{-\mathbf{q}} \mathbf{b}_0 + \sum_{\mathbf{k}=-\mathbf{k}'=\mathbf{q} \neq 0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_0 \mathbf{b}^\dagger_0 \mathbf{b}_{-\mathbf{q}} \mathbf{b}_{\mathbf{q}} \end{aligned}$$

e portanto supondo  $V_{\mathbf{q}} = V_{-\mathbf{q}}$

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k} \neq 0 \text{ ou } \mathbf{k}' \neq 0, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}'} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} &\approx 2V_0 N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} + \\ &+ 2N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} + N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{-\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Finalmente substituindo (3.7) e (3.8) em (3.3) encontramos

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} V_0 N_0^2 + V_0 N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} + \\ &+ N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} + \frac{N_0}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} (\mathbf{b}^\dagger_{-\mathbf{k}} \mathbf{b}^\dagger_{\mathbf{k}} + \mathbf{b}_{-\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (3.9)$$

Podemos melhorar ainda a forma da hamiltoniana com a aproximação

$$\frac{1}{2}V_0N_0^2 + V_0N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \mathbf{b}_{\mathbf{k}} = \frac{N_0V_0}{2} \left( N_0 + 2 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} n_{\mathbf{k}} \right) \approx \frac{1}{2}N^2V_0 \quad (3.10)$$

válida pois  $N_0 \approx N$  e  $N_0 + 2N_e \approx N$ . Definindo finalmente

$$N_0V_{\mathbf{k}} = \eta_{\mathbf{k}} \quad (3.11)$$

$$\eta_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}} \approx \hbar\omega_{\mathbf{k}}, \quad (3.12)$$

no limite  $N_0 \gg N_e$ , encontramos a hamiltoniana estudada por Bogoliubov:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}N_0^2V_0 + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \mathbf{b}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k}} (\mathbf{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^\dagger + \mathbf{b}_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{-\mathbf{k}}). \quad (3.13)$$

Observamos que o terceiro termo da hamiltoniana ainda representa uma dificuldade para solução do problema. O estudo perturbativo leva a representações conhecidas como “diagramas perigosos”. Bogoliubov conseguiu então resolver o problema diretamente mostrando que era possível diagonalizar a hamiltoniana através da definição de um novo conjunto de operadores

$$\alpha_{\mathbf{k}} = (\cos \theta_{\mathbf{k}}) \mathbf{b}_{\mathbf{k}} - (\sin \theta_{\mathbf{k}}) \mathbf{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \quad (3.14)$$

que permitia escrever a hamiltoniana como:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \quad (3.15)$$

ajustando os valores de  $\omega_{\mathbf{k}}$  e  $\theta_{\mathbf{k}}$ .

### 3.2.2 Solução pelo Método da Função de Green

O problema representado pela hamiltoniana (3.13) pode ser resolvido através da técnica das funções de Green no lugar das Transformações de Bogoliubov. O termo da hamiltoniana que nos causa problemas é representado pelos produtos de operadores  $\mathbf{b}_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{-\mathbf{k}}$  e  $\mathbf{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^\dagger$  e por isso é interessante calcular a função de Green  $\langle\langle b_{\mathbf{k}}(t) | b_{-\mathbf{k}}(0) \rangle\rangle$  ou  $\langle\langle b_{\mathbf{k}}^\dagger(t) | b_{-\mathbf{k}}^\dagger(0) \rangle\rangle$  (vamos nesta seção retirar a notação de negrito para vetores e operadores quando não houver risco de confusão). Portanto vamos partir para a solução do problema a partir do cálculo de  $\langle\langle b_{\mathbf{k}}(t) | b_{-\mathbf{k}}(0) \rangle\rangle$ . Para isso vamos encontrar sua cadeia de equações do movimento.

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle b_{\mathbf{k}}(t) | b_{-\mathbf{k}}(0) \rangle\rangle = i\delta(t) \underbrace{\langle\langle [b_{\mathbf{k}}(t), b_{-\mathbf{k}}(0)] \rangle\rangle}_{=0} + \langle\langle [b_{\mathbf{k}}(t), \mathcal{H}] | b_{-\mathbf{k}}(0) \rangle\rangle \quad (3.16)$$

onde fizemos como usualmente  $\hbar = 1$ . Calculando o comutador

$$[b_k(t), \mathcal{H}] = \omega_k b_k(t) + \eta_k b_{-k}^\dagger(t) \quad (3.17)$$

a primeira equação é dada por

$$i \frac{d}{dt} G_k^{(1)}(t) = \omega_k G_k^{(1)}(t) + \eta_k G_k^{(2)}(t) \quad (3.18)$$

onde definimos

$$\langle \langle b_k(t) | b_{-k}(0) \rangle \rangle = G_k^{(1)}(t) \quad (3.19)$$

$$\langle \langle b_{-k}^\dagger(t) | b_{-k}(0) \rangle \rangle = G_k^{(2)}(t). \quad (3.20)$$

Da mesma forma calculamos a equação do movimento para  $G_k^{(2)}(t)$ . Encontramos

$$i \frac{d}{dt} G_k^{(2)}(t) = i\delta(t) - \omega_{-k} G_k^{(2)}(t) - \eta_k G_k^{(1)}(t) \quad (3.21)$$

e observamos que a cadeia de equações se fecha visto que aparece na segunda equação a função de Green  $G_k^{(1)}(t)$ . Como  $V_k = V_{-k}$  escrevemos o sistema de equações diferenciais para as funções  $G_k^{(1)}(t)$  e  $G_k^{(2)}(t)$ :

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} G_k^{(1)}(t) &= \omega_k G_k^{(1)}(t) + \eta_k G_k^{(2)}(t) \\ i \frac{d}{dt} G_k^{(2)}(t) &= i\delta(t) - \omega_k G_k^{(2)}(t) - \eta_k G_k^{(1)}(t). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Esse sistema de equações pode ser resolvido utilizando-se as transformadas de Fourier das funções de Green:

$$G_{AB}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt} G_{AB}(t) dt \quad (3.23)$$

$$G_{AB}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iEt} G_{AB}(E) dE \quad (3.24)$$

encontrando o novo sistema:

$$\begin{aligned} EG_k^{(1)}(E) &= \omega_k G_k^{(1)}(E) + \eta_k G_k^{(2)}(E) \\ EG_k^{(2)}(E) &= \frac{i}{2\pi} - \omega_k G_k^{(2)}(E) - \eta_k G_k^{(1)}(E) \end{aligned} \quad (3.25)$$

que tem solução para  $G_k^{(1)}(E)$

$$G_k^{(1)}(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{\eta_k}{E^2 - (\omega_k^2 - \eta_k^2)}. \quad (3.26)$$

Podemos comparar esta solução com a função de Green do oscilador harmônico  $G_0(E)$  — equação (A.37). Obtivemos então excitações a partir do estado fundamental semelhantes a de partículas bosônicas de energia

$$\hbar\Omega_k = \sqrt{\hbar^2\omega_k^2 - \eta_k^2} \quad (3.27)$$

o que é equivalente a solução direta de Bogoliubov!

Retornando as variáveis iniciais do problema temos

$$\hbar\Omega_k = \sqrt{(\varepsilon_k + N_0V_k)^2 - (N_0V_k)^2} \quad (3.28)$$

ou

$$\hbar\Omega_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + 2\varepsilon_k N_0V_k}. \quad (3.29)$$

Escolhendo  $V_k$  como na Figura 3.1-a, a energia cinética sendo dada por

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (3.30)$$

encontramos uma relação de dispersão como a da Figura 3.1-b. As propriedades de superfluidez do  $\text{He}^4$  podem ser explicadas por esta relação de dispersão. As partículas sofrem o efeito de viscosidade através de colisões, no entanto, no estado fundamental, a Figura 3.1-b mostra que precisamos de muita energia para as excitações em relação a quantidade de momento transportada. Isso implica que partículas abaixo de uma certa velocidade crítica dada pelo coeficiente angular da reta tracejada na figura não colidem, não sofrendo portanto efeitos de viscosidade. Em adição, a quantidade de movimento carregada deve ser muito grande visto que as partículas de hélio são “partículas pesadas”. Então, em baixas temperaturas, temos poucas partículas com momento suficiente para sofrerem espalhamento e conseqüentemente os efeitos de viscosidade. De fato, a baixas temperaturas, o líquido de  $\text{He}^4$  se comporta como superfluido abaixo de uma certa velocidade crítica como prevê a teoria. O valor dessa velocidade crítica no entanto não está de acordo com os experimentos na medida que a hamiltoniana de Bogoliubov não leva em conta todos os tipos de excitação do sistema.

Observamos também que para pequenos valores de  $k$  (limite hidrodinâmico) podemos desprezar a energia  $\varepsilon_k^2$  visto que deve ser proporcional a  $k^4$  já que nesta fase  $\varepsilon_k \approx \hbar^2 k^2 / 2M$ . Encontramos nesse caso

$$\omega_k \approx \sqrt{\frac{N_0 V_k}{M}} k \quad (3.31)$$

e as excitações se parecem mais com excitações coletivas (como fônons) do que com excitações de partícula livre. As excitações em torno do mínimo da relação de dispersão Landau denominou de *rótons*. Os rótons são excitações associadas a um momento  $\hbar k$  que se parecem com fônons mas possuem “velocidade de grupo nula” devido ao mínimo

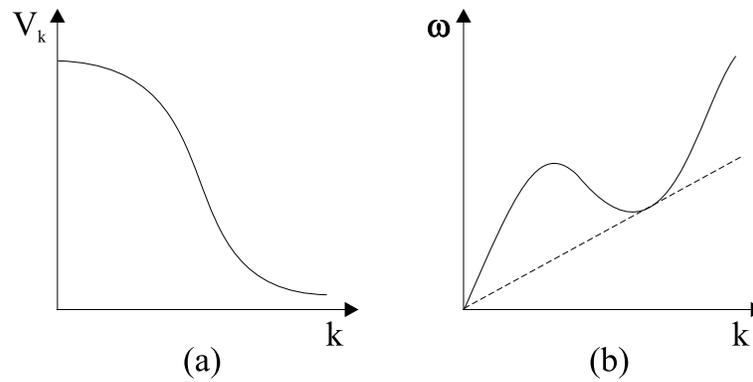


Figura 3.1: (a)-Potencial típico de interação entre partículas. (b)-Relação de dispersão correspondente ao potencial de (a)

da relação de dispersão onde  $d\omega/dk = 0$ . A inclusão dessas excitações de energia maior, interações róton-róton e róton-fônon permitem explicar diversas características do superfluido<sup>3</sup>.

---

<sup>3</sup>Veja por exemplo Feynman R. P., *Statistical Mechanics, A Set of Lectures*, Editora W. A. Benjamin (1972).

# Capítulo 4

## Modelo de bósons interagentes com potencial de alcance infinito

### 4.1 Modelo de potencial de alcance infinito

No estudo de problemas de física que não possuem solução exata utilizamos diversas aproximações que, algumas vezes, não deixam clara a validade da solução obtida. Logo é importante estudar modelos, mesmo idealizados, que apresentem solução simples e exata. Encontramos a solução para esses modelos nos baseando em métodos confiáveis e portanto podemos usar o resultado para averiguar a validade de algumas soluções de modelos semelhantes embora mais realistas.

Apresentamos aqui um modelo de bósons interagindo através de um potencial de alcance infinito. Esse potencial idealizado é o que torna o problema exatamente solúvel pelo menos para temperaturas nulas ( $T = 0$ ). Modelos semelhantes para elétrons fortemente correlacionados já foram exatamente resolvidos e vamos nos basear no modelo apresentado por Hatsugai e Kohmoto [5] para um sistema eletrônico do tipo:

$$\mathcal{H}_e = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \mathbf{c}_{i\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{j\sigma} + h.c. + \frac{U}{L^d} \sum_{j_1, j_2, j_3, j_4} \delta_{j_1+j_3, j_2+j_4} \mathbf{c}_{j_1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{j_2\uparrow} \mathbf{c}_{j_3\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{j_4\downarrow} \quad (4.1)$$

onde o primeiro termo representa o movimento dos elétrons para sítios primeiros vizinhos de uma rede hipercúbica de dimensão  $d$ . O segundo termo representa a interação repulsiva de alcance infinito indicada pelo fator  $\delta_{j_1+j_3, j_2+j_4}$  que implica uma soma sobre os sítios que satisfazem a condição  $r_{j_1} + r_{j_3} = r_{j_2} + r_{j_4}$ .

A solução deste modelo pode ser obtida exatamente desde que podemos introduzir a representação no espaço de momentos desses operadores e nesta representação cada modo  $k$  é desacoplado. O desacoplamento permite encontrar o estado fundamental e grandezas termodinâmicas a qualquer dimensão  $d$ .

Vamos generalizar este modelo para bósons escrevendo uma hamiltoniana do tipo:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{b}_i^\dagger \mathbf{b}_j + \frac{U}{2L^d} \sum_{j^1, j^2, j^3, j^4} \delta_{j^1+j^3, j^2+j^4} \mathbf{b}_{j^1}^\dagger \mathbf{b}_{j^2} \mathbf{b}_{j^3}^\dagger \mathbf{b}_{j^4}. \quad (4.2)$$

Introduzido as transformadas de Fourier dos operadores e suas inversas

$$\mathbf{b}_j^\dagger = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (4.3)$$

$$\mathbf{b}_j = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} \quad (4.4)$$

$$\mathbf{b}_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \mathbf{b}_j^\dagger \quad (4.5)$$

$$\mathbf{b}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \mathbf{b}_j \quad (4.6)$$

encontramos

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \quad (4.7)$$

onde

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} + \frac{U}{2} n_{\mathbf{k}}^2 \quad (4.8)$$

com

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{l=1}^d \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_l). \quad (4.9)$$

Os vetores  $\mathbf{a}_l$  são vetores de rede ( $a$  é o parâmetro de rede) em cada uma das direções da rede hipercúbica de  $d$  dimensões. Com um deslocamento do potencial químico podemos utilizar uma hamiltoniana mais elegante:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} + \frac{U}{2} n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}} - 1). \quad (4.10)$$

Nesta nova representação observamos uma repulsão entre bósons no mesmo estado  $k$  dada pelo segundo termo. Observamos também que apenas o caso repulsivo ( $U > 0$ ) é interessante pois as partículas tendem a se alojar no estado de menor energia e se houvesse atração essa tendência seria apenas reforçada. No caso  $U > 0$  a repulsão passa a competir com a tendência de condensação no estado de menor energia podendo criar a  $T = 0$  um estado diferente do superfluido.

## 4.2 Simetria partícula-buraco

O sistema é considerado em um estado superfluido se temos partículas livres para transitar pela rede, ou, de forma equivalente, se temos buracos que podem transitar livres pela rede. É preciso então que os modelos descrevam a equivalência entre partículas e buracos, o que pode ser feito escrevendo uma hamiltoniana simétrica em relação a troca

$$\mathbf{b} \leftrightarrow \mathbf{b}^\dagger \quad (4.11)$$

que é equivalente a troca de uma partícula por um buraco. A hamiltoniana (4.10) não é simétrica pois quando efetuamos a troca encontramos:

$$\tilde{\mathcal{H}}_k = \varepsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^\dagger + \frac{U}{2} \mathbf{b}_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^\dagger (\mathbf{b}_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^\dagger - 1)$$

e usando a relação de comutação

$$[\mathbf{b}_{\mathbf{k}}, \mathbf{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (4.12)$$

obtemos

$$\tilde{\mathcal{H}}_k = \mathcal{H}_k - U n_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}. \quad (4.13)$$

Como  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  apenas desloca cada nível  $k$  de um valor constante e não envolve operadores número esse termo não é importante para a hamiltoniana. A hamiltoniana  $\tilde{\mathcal{H}}$  corresponde a “hamiltoniana para buracos” o que indica que simetrizamos a hamiltoniana geral deslocando o potencial químico para buracos de acordo com

$$\mu_b = \mu - U, \quad (4.14)$$

permitindo assim que  $\mathcal{H} = \tilde{\mathcal{H}}$  exceto por termos constantes. Em sistemas eletrônicos é possível escrever uma hamiltoniana simétrica [5] em virtude das relações de anticomutação para férmions. No caso de bósons, no entanto, não conseguimos simetrizar diretamente a hamiltoniana e devemos então, ao tratar buracos, deslocar o potencial químico de acordo com (4.14).

## 4.3 Estado fundamental ( $T = 0$ )

A hamiltoniana (4.7–4.10) envolve apenas operadores número o que torna simples a caracterização de seu estado fundamental. Vamos primeiro estudar os casos em que no sistema há um número de partículas igual ou menor ao número de estados acessíveis na banda. Para fazer este estudo definimos  $U_c$  como a energia do nível  $k$  mais alto quando preenchemos os estados com 1 bóson por nível de acordo com a Figura 4.1-a. Em analogia com o caso eletrônico vamos dizer que se temos o número de partículas

equivalente ao número de estados na banda temos um preenchimento *semi-cheio* (talvez um abuso de linguagem visto que bósons não obedecem o princípio da exclusão que é a razão para o qual esta nomenclatura é utilizada em sistemas fermiônicos). Observamos então que se a repulsão  $U$  for maior que a energia  $U_c$ , o estado fundamental do sistema contém exatamente um bóson por nível para preenchimentos menores (Figura 4.1-a) ou equivalentes (Figura 4.1-b) ao preenchimento semi-cheio. Isso acontece pois dois bósons no mesmo nível teriam repulsão  $U > U_c$  e por isso é sempre energeticamente lucrativo colocar um bóson no próximo estado de energia. No caso  $U < U_c$  o estado fundamental é um tanto mais complicado envolvendo ocupações de vários bósons nos estados de menor energia como na Figura 4.1-c.

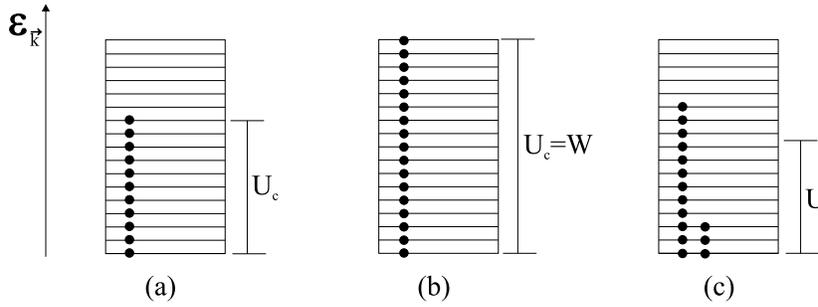


Figura 4.1: Representação de possíveis estados fundamentais do sistema de bósons.

Ainda para o caso em que o preenchimento é menor ou igual ao semi-cheio avaliamos as excitações do estado fundamental e observamos que se  $U > U_c$  e não estamos no preenchimento semi-cheio (exatamente um bóson por nível na banda) ou se  $U < U_c$  para qualquer preenchimento, sempre há estados desocupados na banda permitindo uma excitação partícula-buraco com gap igual a diferença energética entre níveis. Neste caso, como a distância entre os níveis vai a zero no limite termodinâmico (estados contínuos), concluímos que o estado do sistema é sempre superfluido. Entretanto, no caso especial em que temos preenchimento semi-cheio e  $U > U_c = W$  ( $W =$  largura da banda  $= 2t$ ), temos todos os estados ocupados por exatamente um bóson. A primeira excitação a partir desse estado sem mudar o número de partículas do sistema seria retirar uma partícula do nível mais alto e colocá-la no nível mais baixo. Podemos observar que agora temos uma diferença de energia finita caracterizando um gap para esta excitação que de acordo com nossa solução pode ser calculado:

Energia para adicionar uma partícula no nível de energia mais baixo:

$$\Delta E_+ = U \Rightarrow \Delta E_p = U \quad (4.15)$$

Energia para retirar uma partícula (criar um buraco) no nível de energia mais alto:

$$\Delta E_- = -W \Rightarrow \Delta E_b = W \quad (4.16)$$

e portanto

$$\Delta E = \Delta E_p - \Delta E_b = U - W. \quad (4.17)$$

Como  $U > W$  a diferença é não nula!

Podemos ainda encontrar um diagrama de fases similar ao obtido qualitativamente na seção 1.2.3 permitindo variações do potencial químico. Nesses termos a variação de energia pode ser feita pela variação no potencial químico o que torna possível a excitação através da criação de partículas e buracos. A região de fronteira entre a fase isolante e a superfluida deve ser dada por

$$\Delta E = \Delta\mu = U - W \quad (4.18)$$

que corresponde a variação exata no potencial químico para permitir a criação de uma partícula e um buraco. No caso de buracos, no entanto, a hamiltoniana deve ser simetrizada com a troca  $\mu = \mu_b + U$  de maneira que  $\Delta\mu = \mu - \mu_b = U - W$  é possível apenas se

$$\mu = U - \frac{W}{2} \quad (\text{variação para criar uma partícula}) \quad (4.19)$$

$$\mu_b = \frac{W}{2} \quad (\text{variação para criar um buraco}) \quad (4.20)$$

o que fornece o diagrama da Figura 4.2. Observamos que para  $W = U$ , ou seja,

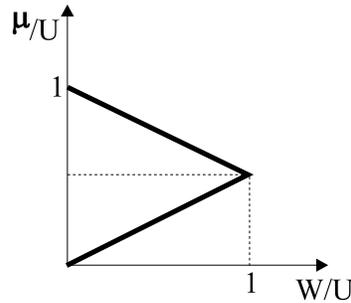


Figura 4.2: Região isolante correspondente ao preenchimento semi-inteiro.

no ponto do diagrama  $W/U = 1$  estamos no ponto máximo da fase isolante. Isso é verdade pois como argumentamos anteriormente esta fase só existe para  $W < U$ , isto é,  $W/U < 1$ . O gap de energia, que pode ser observado no diagrama como a distância horizontal ( $\Delta E$ ) ou vertical ( $\Delta\mu$ ) até a fronteira entre as fases, aumenta quando diminuimos  $W/U$  e, é claro, é nulo em  $W/U = 1$ . Em  $\mu/U = 1/2$  o gap  $\Delta\mu$  é máximo pois nesta linha é tão difícil criar partículas ( $\Delta\mu > 0$ ) quanto buracos ( $\Delta\mu < 0$ ). A região isolante deve conter também exatamente um bóson em cada nível da banda (preenchimento semi-cheio) e por isso é um isolante de Mott com  $n_k = 1$ .

Em um estudo de forma semelhante para preenchimentos maiores que o “semi-cheio” observamos que também temos um gap diferente de zero quando temos um preenchimento de 2, 3 ... “ $n$ ” bósons por nível. Por isso temos regiões isolantes no

diagrama de fases para estes preenchimentos também. O caso de  $n$  bósons em cada nível fornece os seguintes resultados gerais:

- A energia para adicionar uma partícula no nível de mais baixa energia é  $nU$  e para retirar uma partícula no nível de mais alta energia é  $-W - U(n - 1)$ . Portanto a energia de excitação partícula buraco é  $\Delta E = U - W$  (idêntica a do caso  $n = 1$  que estudamos anteriormente).
- As regiões isolantes existem apenas para  $W < U$  como no caso  $n = 1$  pois para  $W > U$  argumentamos que o sistema é sempre superfluido visto que existe sempre na banda de energia um estado acima com  $n - 1$  partículas permitindo uma excitação de energia nula.
- Para permitir preenchimentos maiores o potencial químico do sistema deve ser maior e por isso a região isolante com  $n$  partículas por nível deve estar acima da região com  $n - 1$  partículas por nível como mostra a Figura 4.3. Todas as

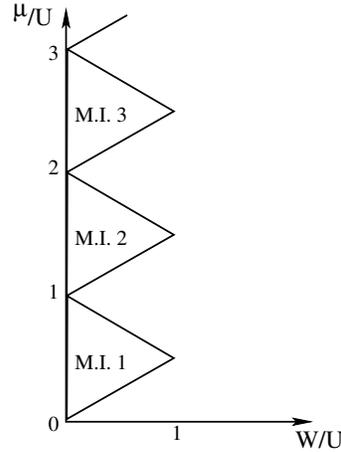


Figura 4.3: Diagrama de fases do modelo de interação de alcance infinito a  $T = 0$  para qualquer dimensão.

regiões são construídas como no caso particular  $n = 1$  mas escrevendo o potencial químico na forma

$$\mu = nU - \frac{W}{2} \quad (\text{variação para criar uma partícula}) \quad (4.21)$$

$$\mu_b = (n - 1)U + \frac{W}{2} \quad (\text{variação para criar um buraco}) \quad (4.22)$$

de maneira que sempre

$$\Delta E = \Delta\mu = U - W. \quad (4.23)$$

e

$$\mu_b = \mu - U. \quad (4.24)$$

Observamos na Figura 4.3 que para este modelo o zênite das regiões isolantes correspondentes a valores fixos de  $n$  não diminui com o aumento de  $n$  como esperado para o modelo de Hubbard para bósons (seção 1.2.3). A princípio isto parece estranho pela semelhança dos modelos. No entanto, lembramos que uma diferença fundamental é que no modelo de interação de alcance infinito os autoestados  $|n\rangle$  são os autoestados exatos do problema. A região correspondente a  $n = 1$ , no entanto, corresponde exatamente a da solução do modelo de Hubbard (repulsão apenas entre partículas do mesmo sítio) quando fazemos  $U \rightarrow \infty$ , ou seja, quando permitimos que haja no máximo uma partícula por sítio<sup>1</sup>. Outra observação interessante é que a forma reta do diagrama fornece para o comportamento do gap de energia, de acordo com a teoria de escala da seção 2.5,  $\nu z = 1$  (discutiremos mais sobre expoentes críticos no capítulo 6).

## 4.4 Termodinâmica

Com o objetivo de estudar as propriedades do modelo para temperaturas finitas escrevemos a função de partição  $\mathcal{Z}$ :

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu) = \text{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu\mathbf{N})}. \quad (4.25)$$

Fazendo o traço nos autoestados  $|n_k\rangle$ , pois desacoplamos a hamiltoniana neste espaço, temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\beta, \mu) &= \sum_{\{n_k\}} \langle n_k | e^{-\beta[\sum_k (\mathcal{H}_k - \mu n_k)]} | n_k \rangle \\ &= \sum_{n_0} \langle n_0 | e^{-\beta(\mathcal{H}_0 - \mu n_0)} | n_0 \rangle \dots \sum_{n_{k'}} \langle n_{k'} | e^{-\beta(\mathcal{H}_{k'} - \mu n_{k'})} | n_{k'} \rangle \dots \\ &= \prod_k \sum_{n_k} \langle n_k | e^{-\beta(\mathcal{H}_k - \mu n_k)} | n_k \rangle \\ \mathcal{Z}(\beta, \mu) &= \prod_k \sum_{n_k} e^{-\beta(E_k - \mu n_k)} \end{aligned} \quad (4.26)$$

onde na última linha usamos a normalização dos autoestados  $\langle n_k | n_k \rangle = 1$ . Como

$$E_k = \langle n_k | \mathcal{H}_k | n_k \rangle = \varepsilon_k n_k + \frac{U}{2} n_k (n_k - 1) \quad (4.27)$$

podemos escrever a função de partição do modelo como

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu) = \prod_k \sum_{n_k} e^{-\beta(\varepsilon_k n_k + \frac{U}{2} n_k (n_k - 1) - \mu n_k)}. \quad (4.28)$$

---

<sup>1</sup>Estudamos a solução do modelo de Hubbard no limite  $U \rightarrow \infty$  no capítulo 5.

Onde a soma se estende de  $n = 0$  até  $n = \infty$  (Para férmions a soma é feita de 0 a 1 e por isso é trivial).

Observamos que para  $U = 0$  temos

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu) = \prod_k \sum_{n_k} e^{-\beta(\varepsilon_k n_k - \mu n_k)} \quad (4.29)$$

e a soma neste caso é simples (soma infinita de uma progressão geométrica):

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu) = \prod_k \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}}. \quad (4.30)$$

Recuperamos neste caso o resultado para bósons livres. Por exemplo, o número médio de partículas em cada estado  $k$  é dado por

$$\langle n_k \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \ln \mathcal{Z} \quad (4.31)$$

e portanto

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1}. \quad (4.32)$$

A soma em (4.29) é finita apenas se o argumento da exponencial é negativo. Isso exige a restrição um tanto estranha  $\mu < \varepsilon_k$  (para bósons livres o potencial químico não pode assumir qualquer valor). Observamos que a inclusão da interação repulsiva elimina essa restrição pois observamos que a soma em (4.28) converge para qualquer valor de  $\mu$  se  $U > 0$  e quanto mais alto o valor de  $U$  mais rápida a convergência. Para um valor “alto” de  $U$  aproximamos muito bem a série por uma soma finita de seus primeiros termos e podemos calcular quantidades físicas interessantes.

De (4.28) temos

$$\ln \mathcal{Z} = \sum_k \ln f_k \quad (4.33)$$

onde  $f_k$  é a soma

$$f_k = \sum_{n_k} e^{-\beta(\varepsilon_k n_k + \frac{U}{2} n_k (n_k - 1) - \mu n_k)}. \quad (4.34)$$

e podemos calcular a densidade de partículas por sítio

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{\beta L^d} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \mathcal{Z} \\ \rho &= \frac{1}{\beta L^d} \sum_k \frac{\partial}{\partial \mu} \ln f_k \\ \rho &= \frac{1}{\beta L^d} \sum_k \frac{1}{f_k} \frac{\partial f_k}{\partial \mu} \\ \rho(\mu, T) &= \frac{1}{L^d} \sum_k \frac{s_k}{f_k}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

onde

$$s_k = \frac{1}{\beta} \frac{\partial f_k}{\partial \mu} = \sum_{n_k} n_k e^{-\beta(\varepsilon_k n_k + \frac{U}{2} n_k(n_k-1) - \mu n_k)}. \quad (4.36)$$

No limite termodinâmico a soma em  $k$  pode ser transformada em uma integral de acordo com

$$\sum_k \rightarrow L^d \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_1}{2\pi} \cdots \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_d}{2\pi} = L^d \int_{[-\pi, \pi]^d} \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d. \quad (4.37)$$

e portanto

$$\rho(\mu, T) = \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \frac{s_k}{f_k} \quad (4.38)$$

com as somas  $f_k$  e  $s_k$  dadas por (4.34) e (4.36) respectivamente<sup>2</sup>. Encontramos numericamente para  $U = 8t$  ( $U > U_c$ ) e  $T = 0.1t$  (baixa temperatura) o comportamento da densidade de partículas em função do potencial químico em  $d = 1$  (Figura 4.4). Reconhecemos as fases isolantes quando aumentamos  $\mu$  e o valor da densidade de

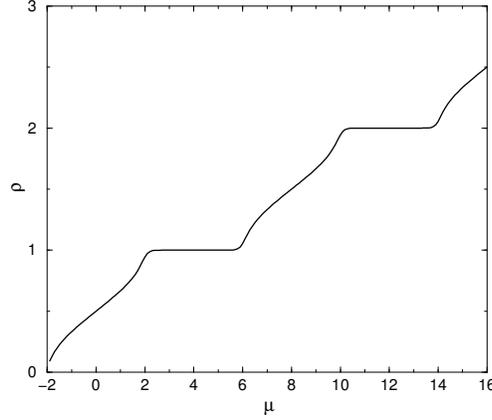
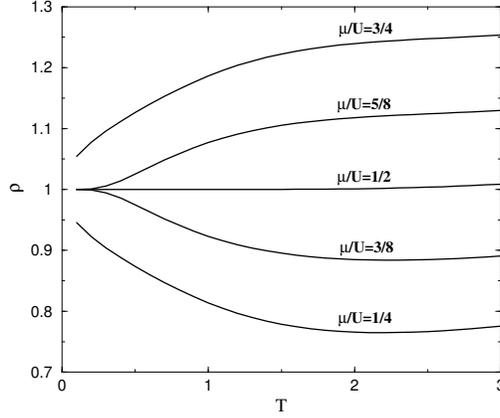


Figura 4.4: Variação da densidade em função do potencial químico em  $d = 1$  para  $U = 8t$  e  $T = 0.1t$ .

partículas permanece constante. Observamos os intervalos de potencial químico correspondentes as fases isolantes com densidade constante  $\rho = 1, \rho = 2 \dots \rho = n$  e notamos que os intervalos não diminuem com o aumento de  $n$  concordando com a solução a temperatura exatamente nula na qual  $U_c = W$  independente do número de ocupação. A seguir, na Figura 4.5, obtivemos em  $d = 1$  a variação da densidade em função da temperatura<sup>3</sup> para alguns valores de  $\mu$ . Para  $\mu/U = 1/2$  estamos no centro da fase isolante de  $\rho = 1$  e observamos que a simetria é respeitada para baixas temperaturas. As integrações não apresentam dificuldades de forma que resultados semelhantes podem ser obtidos para dimensões mais altas.

<sup>2</sup>Para  $U = 8t$  e  $d = 1$  o quinto termo das somas  $s_k$  e  $f_k$  já são praticamente nulos se  $\mu \leq 16$ . Aproximamos neste caso as somas pelos seus quatro primeiros termos.

<sup>3</sup>A temperatura é medida em unidades do “hopping”  $t$ .


 Figura 4.5: Variação da densidade em função da temperatura em  $d = 1$  para  $U = 8t$ .

Outra quantidade facilmente calculada é a energia por sítio. De (4.28) temos

$$\begin{aligned}
 E &= -\frac{1}{L^d} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{Z} + \frac{\mu}{\beta L^d} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \mathcal{Z} \\
 E &= -\frac{1}{L^d} \sum_k \frac{1}{f_k} \frac{\partial f_k}{\partial \beta} + \mu \cdot \rho \\
 E(\mu, T) &= - \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \frac{s_k^e}{f_k} + \mu \cdot \rho.
 \end{aligned} \tag{4.39}$$

onde  $s_k^e$  é dada por

$$s_k^e = \frac{\partial f_k}{\partial \beta} = \sum_{n_k} \left( \mu n_k - \varepsilon_k n_k - \frac{U}{2} n_k (n_k - 1) \right) e^{-\beta(\varepsilon_k n_k + \frac{U}{2} n_k (n_k - 1) - \mu n_k)} \tag{4.40}$$

É interessante calcular a energia referente às configurações com densidade de partículas constante. Precisamos para tanto obter o potencial químico em função da densidade, ou seja, a função  $\mu(\rho, T)$ , que pode ser calculada através da inversão de (4.38). Com este resultado em (4.39) encontramos a Figura 4.7 que descreve o comportamento da energia por sítio como função da temperatura em  $d = 1$  para  $U = 8t > U_c$  e diversos preenchimentos  $\rho$ . Observe que pela simetria na energia entre partículas e buracos, no estado fundamental ( $T \rightarrow 0$  no gráfico), temos  $E(\rho) = E(1 - \rho)$ . Outras quantidades físicas podem ser calculadas de forma semelhante com a função de partição  $\mathcal{Z}$ .

Repetimos os cálculos para  $U = t$  em uma dimensão. Neste caso  $U < W = 2t$ , ou seja,  $U < U_c$  e não existe fase isolante de acordo com nosso argumento a  $T = 0$ . Apresentamos o resultado para a densidade na Figura 4.8. As somas neste caso devem ser aproximadas por muito mais termos (utilizamos 23 termos e o erro está no quarto algarismo significativo). A inexistência do isolante é confirmada pois não aparecem

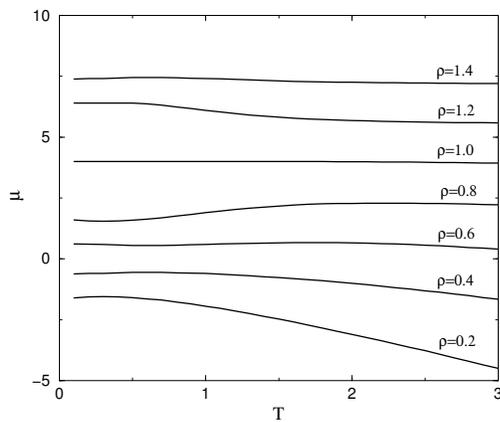


Figura 4.6: Variação do potencial químico em função da temperatura em  $d = 1$  para  $U = 8t$ .

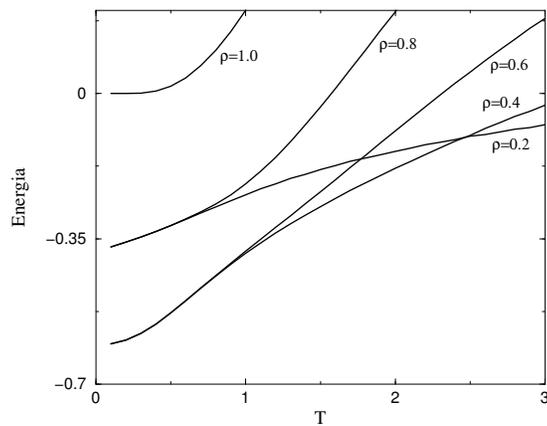


Figura 4.7: Comportamento da energia em função da temperatura em  $d = 1$  para  $U = 8t$ .

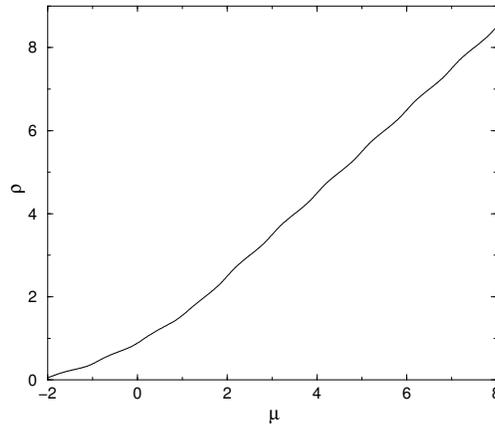


Figura 4.8: Comportamento da densidade em função do potencial químico em  $d = 1$  para  $U = t$  e  $T = 0.1t$ .

regiões na Figura 4.8 em que a densidade de partículas é constante para variações do potencial químico.

Finalmente observamos que, para esse modelo, só garantimos a existência da fase superfluida exatamente a  $T = 0$  pois não investigamos a condensação de Bose a temperaturas não nulas. Para as figuras deste capítulo a  $T \neq 0$  não distinguimos então as fases superfluida ou normal.

# Capítulo 5

## Modelo de Hubbard para bósons em campo médio

### 5.1 Introdução

No primeiro capítulo apresentamos o modelo de Hubbard adaptado para bósons. Este modelo é muito utilizado como ponto de partida para o estudo de sistemas de bósons interagentes e por isso dedicamos a grande parte deste trabalho para o estudo do modelo.

Neste capítulo enfatizamos o estudo através de teorias de campo médio onde apresentamos as aproximações de dimensão infinita [4] e campo médio usual (aproximação de 1 sítio [7]). De forma original introduzimos ainda uma nova aproximação de campo médio para 2 sítios que permite o uso, no capítulo posterior, do Grupo de Renormalização de Campo Médio.

### 5.2 Representação por integrais de trajetória e limite de dimensão infinita

Escrevemos a hamiltoniana do modelo de Hubbard para bósons na forma

$$\mathcal{H}_0 = -\mu \sum_i n_i + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) \quad (5.1)$$

$$\mathcal{H}_1 = - \sum_{i,j} J_{i,j} b_i^\dagger b_j \quad (5.2)$$

onde separamos a parte local ( $\mathcal{H}_0$ ) da parte acoplada ( $\mathcal{H}_1$ ). Nosso objetivo é resolver exatamente a parte local e tratar perturbativamente a parte que acopla os sítios  $i, j$ . Para isso vamos usar a representação de interação dos operadores. Convém ressaltar

que a teoria de perturbação geralmente utilizada é oposta a que fizemos aqui. Usualmente o termo “livre” representado por  $\mathcal{H}_1$  é resolvido exatamente e o termo de interação entre as partículas é tratado perturbativamente. Aqui tratamos o termo de energia cinética pura (termo “livre”) perturbativamente em oposição ao método usual.

Segundo o desenvolvimento apresentado no apêndice C podemos escrever a função de partição na representação de interação como:

$$Z = Tr \left( e^{-\beta \mathcal{H}_0} T_\tau \left[ e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \mathcal{H}_1^{(I)}(\tau) d\tau} \right] \right) \quad (5.3)$$

e

$$\mathcal{H}_1^{(I)} = e^{\tau \mathcal{H}_0} \mathcal{H}_1 e^{-\tau \mathcal{H}_0}. \quad (5.4)$$

Essa expressão equivale a

$$Z = Z_0 \left\langle T_\tau \left[ e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \mathcal{H}_1^{(I)}(\tau) d\tau} \right] \right\rangle_0 \quad (5.5)$$

onde a média  $\langle \dots \rangle_0$  é feita no limite local do modelo ( $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$ ). Utilizando a definição (5.2) temos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1^{(I)}(\tau) &= e^{\tau \mathcal{H}_0} \left( - \sum_{i,j} J_{i,j} b_i^\dagger b_j \right) e^{-\tau \mathcal{H}_0} \\ \mathcal{H}_1^{(I)}(\tau) &= - \sum_{i,j} J_{i,j} b_i^\dagger(\tau) b_j(\tau) \end{aligned} \quad (5.6)$$

onde os operadores de criação e aniquilação estão escritos agora na representação de interação. Escrevemos então para o modelo de Hubbard a função de partição exata na representação de interação como

$$Z = Z_0 \left\langle T_\tau \left[ e^{\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \sum_{i,j} J_{i,j} b_i^\dagger(\tau) b_j(\tau) d\tau} \right] \right\rangle_0. \quad (5.7)$$

Podemos desacoplar a exponencial através da transformação de Hubbard-Stratanovich introduzindo os campos complexos auxiliares  $\phi_i(\tau)$

$$\begin{aligned} &\left\langle T_\tau \left[ e^{\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \sum_{i,j} J_{i,j} b_i^\dagger(\tau) b_j(\tau) d\tau} \right] \right\rangle_0 = \\ &= \frac{1}{\det[J_{i,j}^{-1}]} \int \prod_{i=1}^N \frac{d\phi_i^* d\phi_i}{2\pi i} T_\tau \left\langle e^{\int (-\phi_i^*(\tau)(J_{i,j}^{-1})\phi_j(\tau) + \phi_i(\tau)b_i^\dagger(\tau) + \phi_i^*(\tau)b_i(\tau)) d\tau} \right\rangle_0 \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde as somas estão implícitas pela repetição de índices e fizemos  $\hbar = 1$  por economia de notação.  $J_{i,j}^{-1}$  é a inversa da matriz de hopping. Como as médias são feitas nos operadores podemos escrever

$$\begin{aligned} &\left\langle T_\tau \left[ e^{\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \sum_{i,j} J_{i,j} b_i^\dagger(\tau) b_j(\tau) d\tau} \right] \right\rangle_0 = \\ &= \frac{1}{\det[J_{i,j}^{-1}]} \int \prod_{i=1}^N \frac{d\phi_i^* d\phi_i}{2\pi i} e^{-\sum_{i,j} \int \phi_i^*(\tau)(J_{i,j}^{-1})\phi_j(\tau) d\tau + \sum_i \int \ln \left\langle T_\tau \exp[\int (\phi_i(\tau)b_i^\dagger(\tau) + \phi_i^*(\tau)b_i(\tau)) d\tau] \right\rangle_0}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Tomando o argumento da exponencial como uma ação efetiva:

$$S(\phi) = \sum_{i,j} \int \phi_i^*(\tau) (J_{i,j}^{-1}) \phi_j(\tau) d\tau - \sum_i \ln \left\langle T_\tau \exp \left[ \int (\phi_i(\tau) b_i^\dagger(\tau) + \phi_i^*(\tau) b_i(\tau)) d\tau \right] \right\rangle_0 \quad (5.10)$$

e usando a definição

$$\int \prod_i \mathcal{D}(\phi_i^*(\tau)) \mathcal{D}(\phi_i(\tau)) = \frac{1}{\det[J_{i,j}^{-1}]} \int \prod_i \frac{d\phi_i^* d\phi_i}{2\pi i} \quad (5.11)$$

encontramos para a função de partição do modelo

$$Z = Z_0 \int \prod_i \mathcal{D}(\phi_i^*(\tau)) \mathcal{D}(\phi_i(\tau)) e^{-S(\phi)}. \quad (5.12)$$

Até o momento não utilizamos nenhuma aproximação de forma que a função de partição (5.12) com a ação (5.10) descrevem exatamente o modelo.

Conseguimos extrair resultados interessantes de (5.12) no limite de dimensão infinita. Neste limite  $J_{ij} = J/N$ , ou seja, o hopping tem alcance infinito, e a parte de interação da hamiltoniana é desacoplada<sup>1</sup>

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{J}{N} \left( \sum_i b_i^\dagger(\tau) \right) \left( \sum_i b_i(\tau) \right). \quad (5.13)$$

No apêndice E apresentamos a solução completa e mostramos que a ação pode ser escrita como uma expansão do tipo Landau

$$S_0(\phi) = N\beta\hbar \left\{ \left[ \frac{N}{J} - \frac{1}{N} \sum_i \left( \frac{m_i + 1}{Um_i - \mu} + \frac{m_i}{\mu - U(m_i - 1)} \right) \right] |\phi|^2 + \dots \right\} \quad (5.14)$$

e desta forma a fronteira do diagrama de fases é encontrada fazendo-se

$$\frac{N}{J} - \frac{1}{N} \sum_i \left( \frac{m_i + 1}{Um_i - \mu} + \frac{m_i}{\mu - U(m_i - 1)} \right) = 0. \quad (5.15)$$

Obtemos curvas similares a da Figura 1.1. Observamos a seguir que a solução neste limite equivale a solução de campo médio usual.

## 5.3 Campo médio — aproximação de 1 sítio

### 5.3.1 Desacoplamento

---

<sup>1</sup>No capítulo 4 encontramos a solução exata do modelo por um argumento semelhante mas fazendo, ao contrário, o potencial de interação de muitos corpos ter alcance infinito.

Consideramos a hamiltoniana

$$\mathcal{H}_B = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{b}_i^\dagger \mathbf{b}_j - \mu \sum_i \mathbf{n}_i + \frac{U}{2} \sum_i \mathbf{n}_i (\mathbf{n}_i - 1) \quad (5.16)$$

onde os  $J_{ij}$  são considerados iguais, ou seja, o bóson tem a mesma possibilidade de saltar para qualquer sítio vizinho próximo da rede. Aplicamos a teoria de campo médio desacoplando os operadores  $\mathbf{b}_j$  e  $\mathbf{b}_i^\dagger$  da seguinte forma:

$$\mathbf{b}_i^\dagger \mathbf{b}_j = \frac{1}{2} (\mathbf{b}_i^\dagger \langle \mathbf{b}_j \rangle + \langle \mathbf{b}_i^\dagger \rangle \mathbf{b}_j) - \langle \mathbf{b}_j \rangle \langle \mathbf{b}_i^\dagger \rangle. \quad (5.17)$$

Obtemos para o primeiro termo:

$$= -\frac{ZJ}{2} \left( \langle \mathbf{b}_j \rangle \sum_i \mathbf{b}_i^\dagger + \langle \mathbf{b}_i^\dagger \rangle \sum_i \mathbf{b}_i \right) + ZJ \sum_i \langle \mathbf{b}_j \rangle \langle \mathbf{b}_i^\dagger \rangle$$

e assim escrevemos a hamiltoniana de campo médio como:

$$\mathcal{H}_B \approx \sum_i \left( -\mu \mathbf{n}_i + \frac{U}{2} \mathbf{n}_i (\mathbf{n}_i - 1) - \frac{1}{2} \overbrace{ZJ \langle \mathbf{b}_i^\dagger \rangle}^{\psi^*} \mathbf{b}_i - \frac{1}{2} \overbrace{ZJ \langle \mathbf{b}_j \rangle}^{\psi} \mathbf{b}_i^\dagger + ZJ \langle \mathbf{b}_j \rangle \langle \mathbf{b}_i^\dagger \rangle \right)$$

onde  $Z$  é o número de primeiros vizinhos e definimos  $\psi$  e  $\psi^*$  como na equação acima de forma que:

$$\mathcal{H}_B \approx \sum_i \left( -\mu \mathbf{n}_i + \frac{U}{2} \mathbf{n}_i (\mathbf{n}_i - 1) - \frac{1}{2} \psi^* \mathbf{b}_i - \frac{1}{2} \psi \mathbf{b}_i^\dagger + \frac{\psi^2}{ZJ} \right) \quad (5.18)$$

### 5.3.2 Solução pela matriz da hamiltoniana

#### Construção da matriz

Observamos na seção anterior que podemos desacoplar a hamiltoniana do modelo utilizando uma aproximação de campo médio e obtendo uma hamiltoniana desacoplada do tipo:

$$\mathcal{H}^{cm} = \sum_i \mathcal{H}_i \quad (5.19)$$

onde  $\mathcal{H}_i$  é uma hamiltoniana por sítio:

$$\mathcal{H}_i = \frac{U}{2} \mathbf{n}_i (\mathbf{n}_i - 1) - \mu \mathbf{n}_i - \frac{1}{2} \psi^* \mathbf{b}_i - \frac{1}{2} \psi \mathbf{b}_i^\dagger + \frac{\psi^2}{ZJ} \quad (5.20)$$

Não estamos usando mais a notação em negrito para operadores quando não há risco de confusão. Calculando os elementos de matriz de  $\mathcal{H}_i$  obtemos:

$$\begin{aligned} \langle n | \mathcal{H}_i | m \rangle &= \frac{U}{2} m(m-1) \delta_{n,m} - \mu m \delta_{n,m} + \\ &- \frac{1}{2} \psi \sqrt{m} \cdot \delta_{n,m-1} - \frac{1}{2} \psi^* \sqrt{m+1} \cdot \delta_{n,m+1} + \frac{\psi^2}{ZJ} \delta_{n,m} \end{aligned} \quad (5.21)$$

e escrevemos desta forma a matriz infinita:

$$\begin{pmatrix} -\mu + \frac{\psi^2}{ZJ} & -\frac{1}{2}\sqrt{2}\psi & 0 & \cdots \\ -\frac{1}{2}\sqrt{2}\psi & U - 2\mu + \frac{\psi^2}{ZJ} & -\frac{1}{2}\sqrt{3}\psi & \cdots \\ 0 & -\frac{1}{2}\sqrt{3}\psi & 3U - 3\mu + \frac{\psi^2}{ZJ} & \cdots \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\sqrt{4}\psi & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Para encontrar a energia do estado fundamental temos agora que diagonalizar esta matriz, identificar o menor autovalor e minimizá-lo em relação a  $\psi$ . Identificamos a região minimizada com  $\psi = 0$  como fase isolante e a região minimizada com  $\psi \neq 0$  como fase superfluida. Este procedimento é feito, em geral, numericamente, em virtude da dificuldade do processo de diagonalização de matrizes [11].

### Solução com $U \rightarrow \infty$

A dificuldade reside em diagonalizar a matriz. Podemos observar que a matriz tem dimensão infinita pois o número de ocupação dos bósons pode ir de zero a infinito. Como aproximação podemos então supor a repulsão  $U$  muito grande e assim o número de bósons por sítio é pequeno. Justifica-se portanto um truncamento da matriz em, por exemplo,  $n=2$ ,

$$\begin{pmatrix} -\mu + \frac{\psi^2}{ZJ} & -\frac{1}{2}\sqrt{2}\psi \\ -\frac{1}{2}\sqrt{2}\psi & U - 2\mu + \frac{\psi^2}{ZJ} \end{pmatrix}.$$

Diagonalizando esta matriz obtemos o menor autovalor

$$E = \frac{\psi^2}{ZJ} - \mu + \frac{1}{2}(U - \mu - \sqrt{(U - \mu)^2 + \psi^2}) \quad (5.22)$$

e minimizando este autovalor obtemos:

$$\frac{dE}{d\psi} = 0 \rightarrow \psi^2 = \begin{cases} 0 \\ \frac{1}{4}(ZJ)^2 - (U - \mu)^2. \end{cases} \quad (5.23)$$

Estas duas soluções indicam que podemos minimizar a energia com  $\psi = 0$  (fase isolante) ou  $\psi \neq 0$  (fase superfluida). Para encontrarmos nesta situação as regiões minimizadas com cada valor de  $\psi$  basta calcularmos a derivada segunda e testarmos a concavidade. Para  $\psi = 0$  a região com derivada segunda positiva é:

$$|U - \mu| > \frac{1}{2}ZJ \quad (5.24)$$

e para  $\psi \neq 0$ :

$$|U - \mu| < \frac{1}{2} ZJ \quad (5.25)$$

Na Figura 5.1 mostramos um esboço dessas regiões.

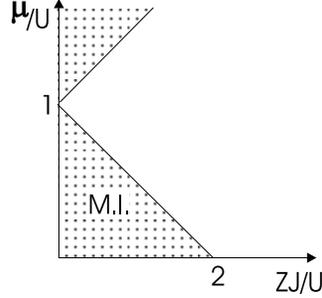


Figura 5.1: Regiões encontradas através do cálculo aproximado (repulsão muito grande).

### Simetria partícula-buraco

Observamos que as regiões encontradas não concordam de maneira nenhuma com o diagrama de fases que esperávamos qualitativamente (descrito no capítulo 1). Podemos apelar novamente (como na seção 4.2) para o falta de simetria partícula buraco na hamiltoniana a fim de explicar esse fato. Avaliando a simetria para a troca

$$\mathbf{b}_i \leftrightarrow \mathbf{b}_i^\dagger \quad (5.26)$$

observamos que não é possível escrever uma hamiltoniana simétrica<sup>2</sup>

$$\tilde{\mathcal{H}}_B = -J \underbrace{\sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{b}_i^\dagger \mathbf{b}_j}_{\text{termo invariante}} - \mu \sum_i (1 + \mathbf{n}_i) + \frac{U}{2} \sum_i \mathbf{n}_{\mathbf{b}_i} (\mathbf{n}_{\mathbf{b}_i} + \mathbf{1})$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_B = \mathcal{H}_B + U n_i + cte. \quad (5.27)$$

Isto sugere que novamente a troca do potencial químico

$$\mu = \mu_b + U \quad (5.28)$$

<sup>2</sup>Na verdade o cálculo abaixo não prova esta afirmação. Para mostrar que a construção de uma hamiltoniana simétrica não é possível neste caso basta presumir que a construção é possível e deixar os parâmetros constantes livres. Transformando a hamiltoniana mostramos então que é impossível ajustar os parâmetros de forma que a simetria seja observada.

simetriza a hamiltoniana. Refazendo agora a conta permitindo a criação de buracos com este potencial químico obtemos para a região superfluida:

$$\mu/U < \frac{1}{2}ZJ/U \text{ e } \mu/U > -\frac{1}{2}ZJ/U \quad (5.29)$$

e fazendo a interseção com o resultado anterior encontramos o diagrama da Figura 5.2 que está em acordo com o diagrama esperado sendo  $J_c = U/Z$ . Repare que obtivemos

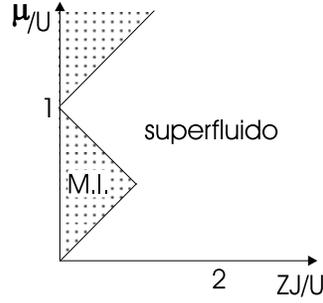


Figura 5.2: Diagrama de fases aproximado com simetria partícula buraco.

apenas o ventre com  $n = 1$  pois consideramos a energia de repulsão muito grande. Essa solução é a correspondente ao limite  $U \rightarrow \infty$  onde só é possível existir um bóson por sítio.

### Generalização do diagrama $U \rightarrow \infty$

Para tentar generalizar o diagrama encontrado na seção anterior podemos supor que os demais ventres superfluidos tenham formato similar ao do ventre correspondente a  $n = 1$ . Já sabemos que eles são simétricos em relação ao ponto médio  $\mu/U =$  semi-inteiro e precisamos portanto encontrar apenas o valor de  $J$  crítico correspondente. Isso é equivalente a calcular o valor de  $J$  para o qual a energia cinética se iguala a energia necessária para criar uma partícula ou um buraco neste ponto. Esta energia foi calculada na seção 1.2.2 e vale  $U/2$ . Devemos estimar então a energia cinética. Vamos fazer uma construção do tipo

$$E_c = \int_0^J D(\epsilon)\epsilon d\epsilon \text{ (energia cinética)} \quad (5.30)$$

e a densidade de estados  $D(\epsilon)$  em um sítio com  $n$  bósons deve satisfazer a relação

$$\int_0^J D(\epsilon)d\epsilon = n. \quad (5.31)$$

É razoável supor que a densidade de estados é simétrica em relação ao  $J/2$  como por

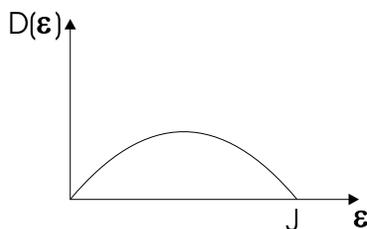


Figura 5.3: Possível densidade de estados simétrica.

exemplo a que observamos na Figura 5.3. Com esta hipótese a energia cinética vale

$$E_c = \frac{nJ}{2} \quad (5.32)$$

e então  $J$  crítico é encontrado igualando esta energia a energia necessária para criar uma partícula ou um buraco neste sítio com  $n$  bósons:

$$\frac{nJ_c}{2} = \frac{U}{2}$$

$$J_c \sim \frac{U}{n} \quad (5.33)$$

Podemos agora generalizar o diagrama para outros ventres isolantes observando que nosso resultado indica que o valor de  $J_c$  decresce com  $n$  segundo a relação (5.33) de tal forma que quanto maior o número de bósons por sítio mais fácil será deslocalizar estas quasi-partículas e produzir o estado superfluido. Podemos observar um diagrama deste tipo na Figura 5.4.

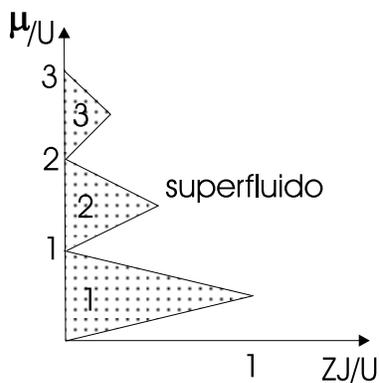


Figura 5.4: Diagrama de fases generalizado para a aproximação de repulsão muito grande.

### 5.3.3 Solução por funções de Green

#### Campo externo

Na seção anterior mostramos como encontrar o diagrama de campo médio através da diagonalização de uma matriz infinita. Apesar do algoritmo ser simples o cálculo e a minimização do menor autovalor de matrizes relativamente grandes não é trivial. Por isso efetuamos apenas este cálculo na aproximação  $U \rightarrow \infty$  o que representa uma grande limitação. Outro método aplicável é o uso de funções de Green. Este método oferece de maneira mais simples e direta uma boa aproximação para o diagrama como veremos a seguir.

Nossa hamiltoniana de campo médio pode ser escrita na forma:

$$\mathcal{H}^{cm} = \sum_i \left( \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) - \mu n_i \right) + \mathcal{H}^{ext} \quad (5.34)$$

onde  $\mathcal{H}^{ext}$  é

$$\mathcal{H}^{ext} = \sum_i \left( -\frac{1}{2} \psi^* b_i - \frac{1}{2} \psi b_i^\dagger + \frac{\psi^2}{ZJ} \right) \quad (5.35)$$

Se considerarmos agora na hamiltoniana acima  $\psi$  como um campo e  $b = \chi\psi$ ; onde  $\chi$  é uma susceptibilidade generalizada, escrevemos o valor esperado da energia por sítio como:

$$\begin{aligned} E &= E_{local}(n) + \frac{\psi^2}{ZJ} - \chi\psi^2 \\ E &= E_{local}(n) + \left( \frac{1}{ZJ} - \chi \right) \psi^2 \end{aligned} \quad (5.36)$$

que pode ser comparada a uma expansão usual de Landau em potências do parâmetro de ordem  $\psi$ . Anulando o segundo termo conseguimos encontrar a fronteira da transição de fase. Encontramos essa fronteira então através da relação:

$$\frac{1}{ZJ} - \chi = 0. \quad (5.37)$$

Para tanto, precisamos calcular a susceptibilidade  $\chi$ .

#### Cálculo da função de Green

No apêndice F deduzimos a relação para a susceptibilidade generalizada dependente da frequência na presença de um campo externo dependente do tempo. Nesta seção estamos interessados nas propriedades estáticas e por isso utilizamos (F.17) e (F.18) que se referem ao limite em que  $\omega = 0$ . Temos então:

$$\chi_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_j \chi^{ij}(t - t') \quad (5.38)$$

onde a função de Green  $\chi_{ij}$  é

$$\chi_{ij}(t-t') = i\theta(t-t')\langle [b_i(t), b_j^\dagger(t')] \rangle. \quad (5.39)$$

Para calcular a susceptibilidade precisamos encontrar a função de Green dos operadores  $\mathbf{b}$  e  $\mathbf{b}^\dagger$  no limite atômico. Neste limite ( $J=0$ ) já encontramos os autoestados soluções do problema e assim calculamos esta função de Green diretamente de sua definição

$$\chi_{ij}(t-t') = i\theta(t-t')\langle n|[b(x,t), b_j^\dagger(t')] |n \rangle. \quad (5.40)$$

Onde os  $|n\rangle$  são os autoestados com  $n$  bósons por sítio que são soluções no limite atômico. Já conhecemos como atuam os operadores  $b$  e  $b^\dagger$  nestes autoestados:

$$b|n\rangle = \sqrt{n} \cdot |n-1\rangle \quad (5.41)$$

$$b^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1} \cdot |n+1\rangle. \quad (5.42)$$

e assim calculamos a função de Green

$$\chi_{ij}(t-t') = i\theta(t-t')(\langle n|b_i(t)b_j^\dagger(t')|n\rangle - \langle n|b_j^\dagger(t')b_i(t)|n\rangle)$$

e retornando a representação de Schroedinger  $b(t) = e^{i\mathcal{H}t} b e^{-i\mathcal{H}t}$  reescrevemos a função de Green como

$$\begin{aligned} \chi_{ij}(t-t') = i\theta(t-t')(\langle n|e^{i\mathcal{H}t} b_i e^{-i\mathcal{H}(t-t')} b_j^\dagger e^{-i\mathcal{H}t'} |n\rangle + \\ - \langle n|e^{i\mathcal{H}t'} b_j^\dagger e^{i\mathcal{H}(t-t')} b_i e^{-i\mathcal{H}t} |n\rangle) \end{aligned} \quad (5.43)$$

como  $\mathcal{H}$  agora é a hamiltoniana local ( $J=0$ ), aplicando os operadores em  $|n\rangle$  encontramos:

$$\chi_{ij}(t-t') = i\theta(t-t')((n+1)e^{-i(t-t')(E_{n+1}-E_n)} - ne^{-i(t-t')(E_n-E_{n-1})})\delta_{i,j} \quad (5.44)$$

e podemos então calcular a susceptibilidade  $\chi_0$ :

$$\chi_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_j \chi_{ij}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt' i\theta(t-t')((n+1)e^{-i(t-t')\Omega_{n+1}} - ne^{-i(t-t')\Omega_{n-1}}) \quad (5.45)$$

onde definimos  $\Omega_{n+1} = E_{n+1} - E_n$  e  $\Omega_{n-1} = E_n - E_{n-1}$ . Usando a representação de integral complexa da função degrau

$$\theta(t-t') = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega + i\epsilon} \quad (5.46)$$

e substituindo em (5.45) obtemos:

$$\chi_0 = i \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega + i\epsilon} \right) \left( (n+1)e^{-i\Omega_{n+1}(t-t')} - ne^{-i\Omega_{n-1}(t-t')} \right) dt'. \quad (5.47)$$

Finalmente, via uma integração em  $d\omega$  (utilizando o plano complexo) encontramos

$$\chi_0 = i \int_{-\infty}^{\infty} \left( (n+1)e^{-i(\Omega_{n+1}-i\epsilon)(t-t')} - ne^{-i(\Omega_{n-1}-i\epsilon)(t-t')} \right) dt'$$

$$\chi_0 = \frac{n+1}{\Omega_{n+1}-i\epsilon} + \frac{n}{-\Omega_{n-1}+i\epsilon} \quad (5.48)$$

mas

$$\Omega_{n+1} = E_{n+1} - E_n = -\mu + Un \quad (5.49)$$

$$\Omega_{n-1} = E_n - E_{n-1} = -\mu + U(n-1) \quad (5.50)$$

e assim escrevemos a susceptibilidade como

$$\chi_0 = \frac{n+1}{-\mu + Un - i\epsilon} + \frac{n}{\mu - U(n-1) + i\epsilon}. \quad (5.51)$$

Para encontrar as fronteiras da Figura 1.1 temos então que resolver a equação (5.37) para um número de bósons por sítio dado pela solução 1.10 para  $n(\mu/U)$ . Para  $n(\mu/U) = N$  encontramos:

$$Y = \frac{N[X - (N-1)] - X[X - (N-1)]}{X+1} \quad (5.52)$$

onde  $Y = ZJ/U$  e  $X = \mu/U$ . Fazendo o gráfico desta equação para os vários valores de  $N$  encontramos as fronteiras da Figura 5.5. Podemos observar que não temos uma simetria perfeita visto que os máximos de  $Y$  não são exatamente os pontos  $\mu/U =$  semi-inteiro. Na verdade estes máximos se comportam como

$$X_{max} = \sqrt{N(N+1)} - 1 \quad (5.53)$$

o que sempre subestima o valor esperado  $X_{max} = N - 1/2$ . Observamos no entanto que para  $N \rightarrow \infty$  este valor tende para o valor correto, isto é, melhora para os sucessivos ventres quando aumentamos  $N$ . Isso pode ser atribuído a teoria de campo médio utilizada que tem melhores resultados quanto maior o número de bósons no sistema.

Para o valor máximo de  $Y$ , ou seja, o valor de  $J$  crítico, obtemos

$$Y_{max} = 2N + 1 - 2\sqrt{N(N+1)} \quad (5.54)$$

e podemos observar que para  $N$  muito grande temos a dependência em  $1/N$ :

$$Y_{max}(N \rightarrow \infty) = \frac{1}{4N}. \quad (5.55)$$

Essa dependência em  $1/N$  era esperada de acordo com a análise qualitativa do diagrama feita na seção 5.3.2 onde generalizamos o diagrama para  $U \rightarrow \infty$  permitindo que cada sítio contenha mais que um bóson. Os resultados obtidos aqui tratando o termo de hopping como um campo externo depois da aplicação de campo médio são equivalentes aos obtidos por Sachdev [7]. O resultado também pouco difere do obtido no limite de dimensão infinita [4] onde o formato parabólico das regiões isolantes é idêntico<sup>3</sup>.

<sup>3</sup>No capítulo posterior discutimos o formato do diagrama e a caracterização de expoentes críticos de acordo com a teoria de escala produzida no capítulo 2.

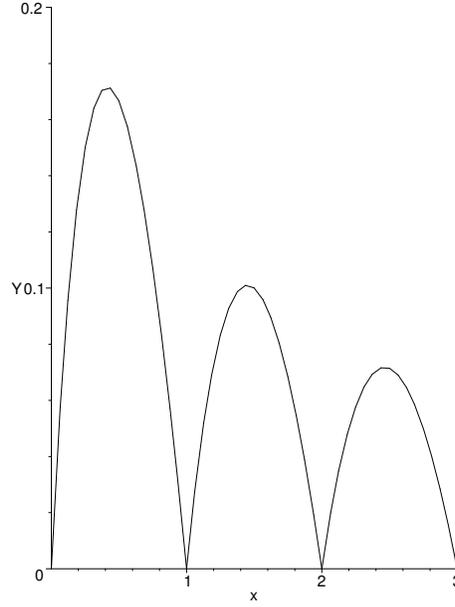


Figura 5.5: Diagrama de fases de campo médio obtido por funções de Green.

## 5.4 Campo médio — aproximação de 2 sítios

### 5.4.1 Introdução

Nas seções anteriores utilizamos a aproximação de campo médio na sua versão mais simples onde consideramos que cada sítio da rede sofre em média o mesmo efeito do campo generalizado  $\psi$ . Conseguimos, através de uma técnica um pouco diferente das até então utilizadas, reproduzir resultados conhecidos. Procuramos a seguir, neste trabalho, uma melhor aproximação que consiste em calcular o modelo para um par de sítios e supor que este par interage com os outros através de uma média que simula o restante da rede. Esta nova aproximação pode levar a resultados melhores para o diagrama de fases (por exemplo resultados que dependem da dimensão espacial representada pelo número de coordenação da rede) assim como permitir um estudo através de Grupo de Renormalização de Campo Médio que será introduzido no próximo capítulo.

Vamos então considerar um conjunto de 2 sítios. A hamiltoniana para essa configuração é:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{1,2} = & -\frac{J}{2} \sum_{j,j \neq 2}^{Z-1} (\mathbf{b}_1^\dagger \mathbf{b}_j + \mathbf{b}_j^\dagger \mathbf{b}_1) - \frac{J}{2} \sum_{j,j \neq 1}^{Z-1} (\mathbf{b}_2^\dagger \mathbf{b}_j + \mathbf{b}_j^\dagger \mathbf{b}_2) + \\ & -\frac{J}{2} (\mathbf{b}_1^\dagger \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_2^\dagger \mathbf{b}_1) - \mu(\mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2) + \frac{U}{2} [\mathbf{n}_1(\mathbf{n}_1 - 1) + \mathbf{n}_2(\mathbf{n}_2 - 1)] \end{aligned} \quad (5.56)$$

e em campo médio temos o seguinte desacoplamento:

$$-\frac{J}{2} \sum_{j,j \neq l}^{Z-1} (\mathbf{b}_i^\dagger \mathbf{b}_j + \mathbf{b}_j^\dagger \mathbf{b}_i) \approx -\frac{J}{2} (Z-1) [\mathbf{b}_i^\dagger \langle \mathbf{b}_j \rangle + \mathbf{b}_j^\dagger \langle \mathbf{b}_i \rangle - 2 \langle \mathbf{b}_i^\dagger \rangle \langle \mathbf{b}_j \rangle] \quad (5.57)$$

Novamente definimos o parâmetro  $\psi$  como

$$\psi = \frac{J}{2} (Z-1) \langle \mathbf{b}_j \rangle \quad (5.58)$$

e encontramos substituindo em (5.56)

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_l + \mathcal{H}_{ext} \quad (5.59)$$

onde a “hamiltoniana local”  $\mathcal{H}_l$  e a “hamiltoniana externa”  $\mathcal{H}_{ext}$  agora são definidas como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_l = & -\frac{J}{2} (\mathbf{b}_1^\dagger \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_2^\dagger \mathbf{b}_1) - \mu(\mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2) + \\ & + \frac{U}{2} [\mathbf{n}_1(\mathbf{n}_1 - 1) + \mathbf{n}_2(\mathbf{n}_2 - 1)] \end{aligned} \quad (5.60)$$

$$\text{e } \mathcal{H}_{ext} = -\psi(\mathbf{b}_1^\dagger + \mathbf{b}_2^\dagger) - \psi(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) + \frac{8\psi^2}{(Z-1)J}. \quad (5.61)$$

Para efetuar os cálculos como procedemos no caso de 1 sítio devemos conhecer uma base  $|\phi_n\rangle$  de autoestados para a hamiltoniana local. Poderíamos assim usar uma relação semelhante as (F.17–F.18) para a susceptibilidade. No caso de 1 sítio não era difícil observar que os autoestados  $|\phi_n\rangle$  que diagonalizavam a hamiltoniana local eram os estados  $|n\rangle$  que definem um número  $n$  de bósons por sítio. Como conhecemos como atuam os operadores  $\mathbf{b}^\dagger$  e  $\mathbf{b}$  nestes estados o cálculo da susceptibilidade através de (F.17–F.18) se tornava trivial. Entretanto agora observamos que a hamiltoniana local não envolve apenas operadores número e por isso verificamos que estados da forma  $|n_1, n_2\rangle$  que definem o número de bósons nos dois sítios não são os autoestados desta nova hamiltoniana. A diagonalização desta parte local não é simples como no caso em que estudamos sistemas de spins [19]. Isso acontece principalmente porque os operadores de spin em geral assumem poucos valores distintos contrastando, em nosso caso de bósons, com o operador número, que assume valores de zero a infinito. Por outro lado, se a parte local envolvesse apenas operadores número, os autoestados seriam mais uma vez os estados  $|n\rangle$  e os valores de  $n$  dados pelos valores que minimizam a energia. Logo, vamos supor que todo nosso problema reside em encontrar autoestados para o primeiro termo da hamiltoniana local onde encontramos os operadores

$$\mathcal{O} = \mathbf{b}_1^\dagger \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_2^\dagger \mathbf{b}_1. \quad (5.62)$$

### 5.4.2 Autoestados da hamiltonina local $\mathcal{H}_l$

O problema de autovalor para o operador  $\mathcal{O}$  pode ser resolvido quando observamos que este operador não altera o número total de bósons nos sítios 1 e 2:

$$\mathcal{O}|(n_1 + n_2)\rangle^{(i)} = \sum_j \lambda_j |(n_1 + n_2)\rangle^{(j)}, \quad (5.63)$$

isto é, aplicando  $\mathcal{O}$  em um estado com um número total de bósons nos dois sítios  $n_t = n_1 + n_2$ , encontramos uma combinação de estados com o mesmo número total  $n_t$  de bósons por sítio. Por isso é possível montar uma base para este operador com os autoestados  $|(n_1 + n_2)\rangle^{(j)}$ .

Para  $n_t = 0$  o único estado possível é o  $|0, 0\rangle$  que é autoestado com autovalor zero.

Para  $n_t = 1$  há dois estados que podemos combinar:  $|1, 0\rangle$  e  $|0, 1\rangle$ . Observamos que

$$\mathcal{O}(|1, 0\rangle + |0, 1\rangle) = |1, 0\rangle + |0, 1\rangle, \quad (5.64)$$

logo  $|\phi_1\rangle = |1, 0\rangle + |0, 1\rangle$  é outro autoestado com autovalor 1. E assim por diante

$$|\phi_2\rangle = |2, 0\rangle + \sqrt{2}|1, 1\rangle + |0, 2\rangle \quad (5.65)$$

$$\mathcal{O}|\phi_2\rangle = 2|\phi_2\rangle \quad (5.66)$$

⋮

$$\mathcal{O}|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle. \quad (5.67)$$

Podemos também verificar a atuação dos operadores da hamiltoniana externa nestes estados definindo  $B = (\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)$  e  $B^\dagger = (\mathbf{b}_1^\dagger + \mathbf{b}_2^\dagger)$ :

$$\begin{aligned} B|\phi_0\rangle &= 0 \\ B|\phi_1\rangle &= 2|\phi_0\rangle \\ B|\phi_2\rangle &= 2\sqrt{2}|\phi_1\rangle \\ &\vdots \\ B|\phi_n\rangle &= 2\sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle \end{aligned} \quad (5.68)$$

e

$$\begin{aligned} B^\dagger|\phi_0\rangle &= |\phi_1\rangle \\ B^\dagger|\phi_1\rangle &= \sqrt{2}|\phi_2\rangle \\ B^\dagger|\phi_2\rangle &= \sqrt{3}|\phi_3\rangle \\ &\vdots \\ B^\dagger|\phi_n\rangle &= \sqrt{n+1}|\phi_{n+1}\rangle. \end{aligned} \quad (5.69)$$

Finalmente podemos calcular o efeito da hamiltoniana local nestes autoestados do operador  $\mathcal{O}$ . Observamos que a aplicação do último termo (termo de repulsão entre

bósons do mesmo sítio) em um desses estados não fornece o mesmo estado. Isso acontece pois esse termo não pode ser escrito como uma função de  $\mathbf{n}_t$ . Vamos então utilizar aproximação do tipo

$$[\mathbf{n}_1(\mathbf{n}_1 - 1) + \mathbf{n}_2(\mathbf{n}_2 - 1)] \approx (\mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2)^2 - (\mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2) - 2\langle \mathbf{n}_1 \rangle \langle \mathbf{n}_2 \rangle \quad (5.70)$$

que permite escrever este termo em função do operador  $\mathbf{n}_t$ . Obtemos assim

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_l |\phi_n\rangle = & \left\{ -\frac{J}{2}(\mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2) - \mu(\mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2) + \right. \\ & \left. + \frac{U}{2} [\mathbf{n}_1(\mathbf{n}_1 - 1) + \mathbf{n}_2(\mathbf{n}_2 - 1)] \right\} |\phi_n\rangle \end{aligned} \quad (5.71)$$

Podemos agora prosseguir como fizemos na aproximação de 1 sítio: Calculamos os valores de  $n_1$  e  $n_2$  tal que minimizem a energia  $E_{1,2} = \langle \phi_n | \mathcal{H}_l | \phi_n \rangle$  e depois estamos prontos para calcular a nova susceptibilidade com a equação (F.17–F.18), substituindo os  $\mathbf{b}$  e  $\mathbf{b}^\dagger$  pelos novos operadores  $B$  e  $B^\dagger$ .

### 5.4.3 Cálculo da susceptibilidade para a aproximação de 2 sítios

A susceptibilidade relevante a ser calculada é:

$$\chi_{ij}(t - t') = i\theta(t - t') \langle [B_i(t), B_j^\dagger(t')] \rangle. \quad (5.72)$$

Os índices  $i$  e  $j$  se referem agora a um determinado conjunto de sítios  $i, j$  e os operadores  $B$  e  $B^\dagger$  estão definidos como

$$B = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 \quad (5.73)$$

$$B^\dagger = \mathbf{b}_1^\dagger + \mathbf{b}_2^\dagger. \quad (5.74)$$

Conhecemos os estados  $|\phi_n\rangle$  e também a forma como  $B$  e  $B^\dagger$  operam nestes estados de maneira que podemos encontrar  $\chi_{ij}(t - t')$  pela definição acima. Calculamos então

$$\chi_{ij}(t - t') = i \frac{\theta(t - t')}{\langle \phi_n | \phi_n \rangle} \langle \phi_n | [B_i(t), B_j^\dagger(t')] | \phi_n \rangle$$

$$\begin{aligned} \chi_{ij}(t - t') = 2i\delta_{i,j}\theta(t - t') & \left[ (n_t + 1)e^{-i(t-t')(E_{n+1}-E_n)} + \right. \\ & \left. - n_t e^{-i(t-t')(E_n-E_{n-1})} \right] \end{aligned} \quad (5.75)$$

e assim

$$\chi_0^{(2)} = 2 \left( \frac{n_t + 1}{E_{n+1} - E_n - i\epsilon} + \frac{n_t}{E_{n-1} - E_n + i\epsilon} \right). \quad (5.76)$$

E como a minimização da hamiltoniana local fornece  $n_1 = n_2 = n$  e

$$E_{n+1} - E_n = -\frac{J}{2} - \mu + Un \quad (5.77)$$

$$E_{n-1} - E_n = \frac{J}{2} + \mu + U(1 - n) \quad (5.78)$$

obtemos para a susceptibilidade

$$\chi_0^{(2)} = 4 \left( \frac{2n + 1}{-J - 2\mu + 2Un} + \frac{2n}{J + 2\mu - 2U(n - 1)} \right) \quad (5.79)$$

que comparada com a obtida na aproximação de um sítio, equação (5.51), apresenta agora o termo cinético  $J$  no denominador.

#### 5.4.4 Diagrama de fases na aproximação de 2 sítios

Ainda podemos encontrar, da mesma forma que fizemos na aproximação simples de campo médio, o diagrama de fases para esta aproximação de 2 sítios. Escrevemos  $B = \chi^{(2)}\psi$  e  $B^\dagger = \chi^{(2)}\psi^\dagger$  encontrando a hamiltoniana total

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_l - 2\chi^{(2)}\psi^2 + \frac{8\psi^2}{(Z - 1)J} \quad (5.80)$$

e a equação de fronteira para as fases é

$$\chi^{(2)} = \frac{4}{(Z - 1)J}. \quad (5.81)$$

Observamos que o resultado do diagrama de fases agora é dependente da dimensão visto que não podemos normalizá-lo pelo número  $Z$  de primeiros vizinhos como no caso anterior. A Figura 5.6 mostra uma comparação entre o diagrama anterior e o obtido na aproximação de dois sítios para três dimensões ( $Z = 6$ ).

Podemos extrair resultados interessantes desta nova equação para a fronteira das fases:

- O valor de  $(\mu/U)_{max}$  é mais simétrico que o anterior a partir de  $d=2$  e melhora para dimensões maiores.
- O valor de  $J/U$  crítico —  $(J/U)_c$ , diminui com o aumento da dimensão. Já esperávamos este resultado qualitativamente pois o aumento da dimensão aumenta a quantidade de sítios vizinhos para os quais os bósons podem saltar tornando a fase isolante mais instável para dimensões maiores.

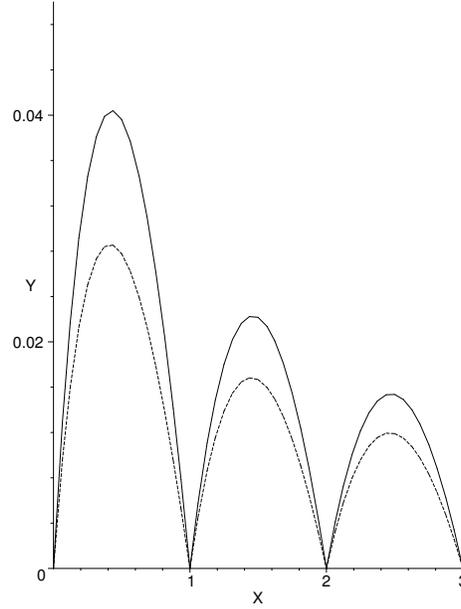


Figura 5.6: Comparativo entre o diagrama de fases obtido nesta segunda aproximação (linha cheia) com o diagrama obtido na aproximação simples de campo médio (linha pontilhada).

- Obtemos o mesmo comportamento anterior para  $(\mu/U)_{max}$  e  $(J/U)_c$  quando  $n \rightarrow \infty$ :

$$(\mu/U)_{max} \sim n - 1/2 \quad (5.82)$$

$$(J/U)_c \propto \frac{1}{4n} \quad (5.83)$$

concordando mais uma vez com resultados qualitativos anteriores das seções 5.3.2 e 1.2.3.

Os resultados obtidos nesta nova aproximação de campo médio de 2 sítios são melhores que os anteriores na medida que são mais simétricos (refletindo melhor a simetria partícula-buraco) e os valores críticos  $(J/U)_c$  estão mais próximos de resultados obtidos por métodos mais sofisticados como Monte Carlo Quântico ([17] [18]) e técnicas de perturbação [16] (veja conclusão, Tabela 7.1). Os expoentes críticos, no entanto, são os mesmos de campo médio como observaremos no capítulo seguinte. Essa nova aproximação permite ainda, como faremos no próximo capítulo, estudar o sistema com o Grupo de Renormalização de Campo Médio que pode fornecer estimativas melhores dos expoentes críticos.

# Capítulo 6

## Grupo de Renormalização de Campo Médio

### 6.1 Visão geral de Hipótese de Escala e Grupo de Renormalização

No estudo de transições de fases estamos interessados não apenas no comportamento geral de um sistema mas especialmente em seu comportamento próximo a criticalidade, ou seja, próximo a ocorrência da transição. Esse comportamento é observado através de leis de potências para algumas grandezas físicas como enfatizado na seção 2.1. Logo a caracterização de um sistema próximo a criticalidade é feita pelos valores dos expoentes dessas leis de potência (expoentes críticos). Com o aparecimento de algumas soluções exatas e novas técnicas experimentais observou-se que teorias clássicas como a Teoria de Landau forneciam expoentes críticos distintos dos expoentes exatos. Iniciou-se então uma série de estudos teóricos sobre o assunto. Em 1965, B. Widom [12] formulou de forma fenomenológica uma hipótese que se mostrou bem eficiente. Basicamente ele percebeu que era possível obter as leis de escala supondo que a energia livre era uma função homogênea generalizada em suas variáveis:

$$g_s(t, H) = \lambda g_s(\lambda^x t, \lambda^y H). \quad (6.1)$$

Essa hipótese conhecida como Hipótese de Escala se mostrou eficiente tanto com os resultados experimentais como nos modelos exatamente solúveis. A generalidade da hipótese mostrou também que diversas classes de sistemas físicos apresentavam conjuntos semelhantes de expoentes críticos e por isso podiam ser agrupados em diferentes *Classes de Universalidade*.

Finalmente em 1966 L. P. Kadanoff forneceu justificativa para a Hipótese de Escala e as Classes de Universalidade [13] lançando as bases físicas para o posterior desenvolvimento da teoria do Grupo de Renormalização [14]. Essa justificativa baseou-se no fato de que existe apenas um comprimento característico próximo à transição, o

comprimento de correlação, que diverge no ponto crítico. A forte correlação do sistema próximo à criticalidade permite então fazer transformações de escala como a da Figura 6.1.

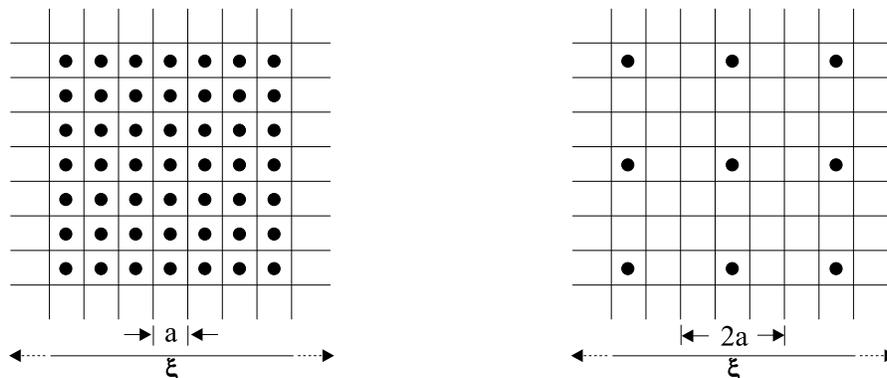


Figura 6.1: Mudança de escala em um sistema próximo da criticalidade.

Vamos observar por exemplo o modelo de Ising com campo externo descrito pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i. \quad (6.2)$$

Próximo do ponto crítico os spins devem estar fortemente correlacionados pois o comprimento de correlação  $\xi$  é muito maior que o parâmetro de rede  $b$ . Vamos redefinir cada célula como na Figura 6.2. Neste caso em cada célula temos  $b^d$  spins fortemente

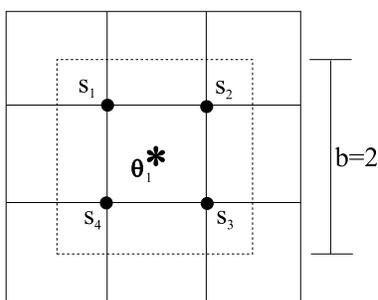


Figura 6.2: Grupo de spins fortemente correlacionados  $s_i$  representados pelo spin  $\theta_1$  após a transformação do Grupo de Renormalização.

correlacionados ( $d$  é a dimensão da rede). Esta forte correlação permite supor que o spin resultante em cada célula assume os mesmos valores dos spins individuais:

$$\begin{aligned} \theta_\alpha &= \pm 1; \\ \alpha &= 1, 2, 3, \dots, N/b^d \end{aligned}$$

e que nova hamiltoniana tenha a mesma forma que a original

$$\mathcal{H} = -J' \sum_{\langle \alpha\beta \rangle} \theta_\alpha \theta_\beta - H' \sum_{\alpha} s_\alpha. \quad (6.3)$$

Logo deve haver relações entre  $J', H' \leftrightarrow J, H$  e  $t', H' \leftrightarrow t, H$ . Para que esta renormalização seja válida esperamos que a energia livre não mude com a transformação, de forma que

$$\begin{aligned} G(t, H, N) = G(t', H', N') &\Rightarrow \frac{G(t, H, N)}{N} = \frac{G(t', H', N')}{N'} \frac{N'}{N} \\ &\Rightarrow g(t, H) = g(t', H') b^{-d} \Rightarrow g(t', H') = b^d g(t, H) \end{aligned}$$

e se as variáveis se transformam de acordo com  $t' = b^{\lambda_1} t$  e  $H' = b^{\lambda_2} H$  (o que é conhecido como hipótese da similaridade), encontramos a relação:

$$g(b^{\lambda_1} t, b^{\lambda_2} H) = b^d g(t, H) \quad (6.4)$$

Para encontrar a forma de Widom da equação (6.1) fazemos  $b^{-d} = \lambda$ ,  $x = -\lambda_1/d$  e  $y = -\lambda_2/d$  para obter finalmente

$$\begin{aligned} g(t, H) &= \lambda g(\lambda^{-\lambda_1/d} t, b^{-\lambda_2/d} H) \\ g(t, H) &= \lambda g(\lambda^x t, \lambda^y H). \end{aligned} \quad (6.5)$$

## 6.2 Grupo de Renormalização de Campo Médio

O Grupo de Renormalização, de uma forma bastante simplificada, consiste em encontrar relações entre os parâmetros relevantes da hamiltoniana do sistema sob uma transformação de escala. Foram desenvolvidas diversas maneiras de implementar o esquema de renormalização tanto no espaço dos momentos como no espaço real. Em 1982, Indekeu [15] formulou um método simples que ficou conhecido como Grupo de Renormalização de Campo Médio (GRCM). Este esquema é semelhante a chamada renormalização fenomenológica e se baseia na comparação entre sistemas de tamanhos diferentes e finitos. Consideramos dois blocos de tamanho  $N$  e  $N'$  (para o modelo de Ising por exemplo  $N$  é o número de spins em um bloco — Figura 6.3), calculamos para cada bloco o parâmetro de ordem relativo a transição que desejamos estudar. Para isso colocamos o bloco sujeito a condições de contorno que contenham a simetria do modelo, simulando assim o efeito de um sistema infinito (exatamente como fazemos na abordagem de campo médio). Para o modelo de Ising consideramos por exemplo que os spins vizinhos ao sistema finito têm um valor fixo  $b = \langle s \rangle$ . Calculamos então a magnetização correspondente. A hipótese principal é considerar que o parâmetro de ordem  $\psi$  (magnetização) e o valor médio do campo  $b$  se reescalam da mesma forma:

$$\psi_{N'}(K', b') = \xi \psi_N(K, b) \quad (6.6)$$

$$b' = \xi b \quad (6.7)$$

Figura 6.3: Aproximações de 1 e 2 sítios. Os valores  $b$  (campo médio) simulam o restante do sistema.

Com esta hipótese podemos chegar a relação

$$\frac{\partial \psi_{N'}}{\partial b'}(K', 0) = \frac{\partial \psi_N}{\partial b}(K, 0) \quad (6.8)$$

que é independente do fator de escala  $\xi$  e por isso pode ser entendida como uma relação direta entre as constantes de acoplamento  $K$  para cada sistema. Desta relação podemos extrair os pontos fixos  $K^*$ . De acordo ainda com o procedimento usual podemos calcular os expoentes relacionados com o escalamento dos parâmetros da hamiltoniana

$$\left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K=K^*} = \left( \frac{N}{N'} \right)^{y_k}, \quad (6.9)$$

que por sua vez se relacionam com os expoentes críticos. O cálculo de expoentes e do ponto crítico fornecem valores em geral melhores que os métodos de campo médio simples, existindo ainda a possibilidade de melhorar os valores obtidos estudando-se blocos cada vez maiores.

### 6.3 Susceptibilidade dinâmica

Como observaremos em seções posteriores a relação de recorrência do GRCM envolve as susceptibilidades dinâmicas de 1 e 2 sítios. Por isso nesta seção calculamos tais susceptibilidades utilizando as relações deduzidas no apêndice F e tomando agora o caso dinâmico ( $\omega \neq 0$ ):

$$\chi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_j \chi_{ij}(t - t', \omega) \quad (6.10)$$

onde a função de Green  $\chi_{ij}(t - t', \omega)$  é

$$\chi_{ij}(t - t', \omega) = i\theta(t - t') \langle [b_i(t), b_j^\dagger(t')] \rangle e^{-i\omega(t-t')}. \quad (6.11)$$

Observamos que esta definição para susceptibilidade dinâmica (6.10) difere da estática apenas do fator  $e^{-i\omega(t-t')}$  pois agora utilizamos  $\omega \neq 0$ . O cálculo da função de Green  $\chi_{ij}(t-t', \omega)$  para o modelo de Hubbard é então equivalente ao efetuado nas seções 5.3.3 e 5.4.3 onde encontramos

$$\chi_{ij}(t-t') = i\theta(t-t') \left[ (n+1)e^{-i(t-t')(E_{n+1}-E_n)} - ne^{-i(t-t')(E_n-E_{n-1})} \right] \delta_{i,j} \quad (6.12)$$

para 1 sítio, e

$$\chi_{ij}(t-t') = 2i\theta(t-t') \left[ (n_t+1)e^{-i(t-t')(\tilde{E}_{n+1}-\tilde{E}_n)} + \right. \\ \left. - n_t e^{-i(t-t')(\tilde{E}_n-\tilde{E}_{n-1})} \right] \delta_{i,j} \quad (6.13)$$

para 2 sítios (colocamos os sinais de til nas energias da susceptibilidade de 2 sítios –  $\tilde{E}$  – para enfatizar que as energias de remoção e adição de partículas nesse caso não são iguais as da susceptibilidade de 1 sítio). Por isso as funções de Green dinâmicas são:

$$\chi_{ij}(t-t', \omega) = i\theta(t-t') \left[ (n+1)e^{-i(t-t')(E_{n+1}-E_n+\omega)} + \right. \\ \left. - ne^{-i(t-t')(E_n-E_{n-1}+\omega)} \right] \delta_{i,j} \quad (6.14)$$

para 1 sítio, e

$$\chi_{ij}(t-t', \omega) = 2i\theta(t-t') \left[ (n_t+1)e^{-i(t-t')(\tilde{E}_{n+1}-\tilde{E}_n+\omega)} + \right. \\ \left. - n_t e^{-i(t-t')(\tilde{E}_n-\tilde{E}_{n-1}+\omega)} \right] \delta_{i,j} \quad (6.15)$$

para 2 sítios. E com a integração no tempo  $dt'$  encontramos

- Susceptibilidade dinâmica na aproximação de 1 sítio

$$\chi^{(1)}(\omega) = \frac{n+1}{-\mu + Un + \omega} + \frac{n}{\mu - U(n-1) - \omega} \quad (6.16)$$

- Susceptibilidade dinâmica na aproximação de 2 sítios

$$\chi^{(2)}(\omega) = 4 \left( \frac{2n+1}{-J - 2\mu + 2Un + 2\omega} + \frac{2n}{J + 2\mu - 2U(n-1) - 2\omega} \right). \quad (6.17)$$

## 6.4 Grupo de Renormalização de Campo Médio no modelo de Hubbard para bósons

### 6.4.1 Relação de recorrência

Neste capítulo aplicaremos o Grupo de Renormalização de Campo Médio ao problema de bósons na rede utilizando os cálculos que efetuamos no capítulo 5 para 1 e 2 sítios. Para isso fazemos algumas analogias com as grandezas discutidas na seção 6.2. Observamos que o parâmetro de ordem fundamental em nossos cálculos é  $\langle b \rangle$  ou  $\langle b^\dagger \rangle$  e supomos que esse parâmetro se escala como

$$b' = \xi b \quad (6.18)$$

Para o campo externo  $\psi$  havíamos definido

$$\psi = ZJ\langle b \rangle \quad (6.19)$$

para um sítio e

$$\psi = \frac{J}{2}(Z - 1)\langle b \rangle \quad (6.20)$$

para dois sítios. Precisamos de um parâmetro que escale como em (6.18) para que possamos encontrar a relação de Grupo de Renormalização independente do fator de escala. Na tentativa de usar  $\psi$  surgem dois problemas:

- A definição de  $\psi$  não permite um reescalamiento idêntico a (6.18) visto que o parâmetro não tem o mesmo significado físico que  $b$  (a definição envolve o parâmetro de energia  $J$  que impõe uma forma de escala diferente para  $\psi$ ).
- Definimos  $\psi$  de forma diferente para um e dois sítios por comodidade nos cálculos dos diagramas de fase. Para comparar parâmetros entre os dois casos precisamos de uma definição única.

Resolvemos estes problemas através da redefinição deste “campo externo” (que agora chamamos de  $\phi$ ):

$$\phi = Z\langle b \rangle. \quad (6.21)$$

Esta definição permite encontrar as mesmas equações para os diagramas de fase através de cálculos de susceptibilidades, que agora são adimensionais, em contraste com as anteriores que tinham unidade de inverso de energia. A seguir mostramos como isso é possível:

*aproximação de 1 sítio*

O desacoplamento permite escrever a hamiltoniana externa

$$\mathcal{H}^{ext} = \sum_i \left( -\frac{1}{2}ZJ\langle b_j^\dagger \rangle b_i - \frac{1}{2}ZJ\langle b_j \rangle b_i^\dagger + ZJ\langle b_j \rangle \langle b_j^\dagger \rangle \right) \quad (6.22)$$

Com a definição para  $\phi$  temos

$$\mathcal{H}^{ext} = J \sum_i \left( -\frac{1}{2} \phi^* b_i - \frac{1}{2} \phi b_i^\dagger + \frac{\phi^2}{Z} \right). \quad (6.23)$$

A susceptibilidade agora relaciona  $b$  e  $\phi$

$$b = \tilde{\chi} \phi \quad (6.24)$$

de forma que obtemos

$$\mathcal{H}^{ext} = J \sum_i \left( -\tilde{\chi} \phi^2 + \frac{\phi^2}{Z} \right) \quad (6.25)$$

e para o diagrama de fases a equação

$$\tilde{\chi} = \frac{1}{Z}. \quad (6.26)$$

Esta equação é equivalente a anterior porque, como  $\psi(x, t) = J\phi$ , a nova susceptibilidade adimensional é obtida pela adição do parâmetro  $J$  na definição anterior:

$$\tilde{\chi} = J \left( \frac{n+1}{-\mu + Un} + \frac{n}{\mu - U(n-1)} \right). \quad (6.27)$$

Ou seja

$$\tilde{\chi} = J\chi \quad (6.28)$$

onde  $\chi$  é a susceptibilidade anterior. Substituindo em (6.26) encontramos a equação (5.37) que fornece a fronteira da Figura 5.5.

#### *aproximação de 2 sítios*

O desacoplamento permite escrever a hamiltoniana externa para cada conjunto de 2 sítios como

$$\mathcal{H}^{ext} = \left\{ -\frac{J}{2}(Z-1) \left[ b_1^\dagger \langle b_j \rangle + b_1 \langle b_j^\dagger \rangle - 2 \langle b^\dagger \rangle \langle b \rangle \right] + \right. \\ \left. - \frac{J}{2}(Z-1) \left[ b_2^\dagger \langle b_j \rangle + b_2 \langle b_j^\dagger \rangle - 2 \langle b^\dagger \rangle \langle b \rangle \right] \right\} \quad (6.29)$$

Com a definição para  $\phi$  temos

$$\mathcal{H}^{ext} = J \frac{(Z-1)}{Z} \left( -\frac{1}{2} \phi^* B_i - \frac{1}{2} \phi B_i^\dagger + 2 \frac{\phi^2}{Z} \right). \quad (6.30)$$

A susceptibilidade agora relaciona  $B$  e  $\phi$

$$B = \tilde{\chi}^{(2)} \phi \quad (6.31)$$

de forma que obtemos

$$\mathcal{H}^{ext} = J \frac{(Z-1)}{Z} \left( -\chi^{(2)} \phi^2 + 2 \frac{\phi^2}{Z} \right) \quad (6.32)$$

e para o diagrama de fases a equação

$$\tilde{\chi}^{(2)} = \frac{2}{Z}. \quad (6.33)$$

Esta equação também é equivalente a equação anterior para a fronteira do diagrama na aproximação de 2 sítios porque a nova definição se relaciona com a anterior por

$$\psi(x, t) = \frac{(Z-1)}{2Z} J \phi \quad (6.34)$$

e na dedução da susceptibilidade encontramos o mesmo resultado vezes esse novo fator

$$\tilde{\chi}^{(2)} = \frac{(Z-1)}{2Z} J \chi^{(2)} \quad (6.35)$$

onde  $\chi^{(2)}$  é a susceptibilidade anterior. Substituindo em (6.33) encontramos a equação (5.81).

Finalmente podemos supor agora que  $\phi$  escala como em (6.18)

$$\phi' = \xi \phi. \quad (6.36)$$

Escrevemos  $b' = \tilde{\chi}^{(1)} \phi'$  para um sítio e para dois sítios consideramos  $B = \tilde{\chi}^{(2)} \phi$ . Como o operador  $B$  é definido como  $B = b_1 + b_2$  e  $\langle b_1 \rangle = \langle b_2 \rangle$  podemos tomar  $B = 2b$  e assim

$$b = \frac{\tilde{\chi}^{(2)}}{2} \phi, \quad (6.37)$$

encontrando, de acordo com (6.18),

$$\tilde{\chi}^{(1)} \phi' = \xi \frac{\tilde{\chi}^{(2)}}{2} \phi. \quad (6.38)$$

Então, dividindo (6.38) por (6.36) obtemos finalmente:

$$\tilde{\chi}^{(1)}(n, J', U', \mu', \omega') = \frac{\tilde{\chi}^{(2)}(n, J, U, \mu, \omega)}{2} \quad (6.39)$$

que pode ser considerada como uma relação de recorrência de Grupo de Renormalização. Como possuímos apenas essa relação não determinamos completamente o fluxo dos parâmetros, entretanto, é interessante observar as superfícies críticas de onde podemos extrair estimativas de pontos e expoentes críticos.

### 6.4.2 Superfícies críticas

As superfícies críticas são encontradas através da relação de recorrência (6.39) fazendo

$$\begin{aligned} J &= J' \\ U &= U' \\ \mu &= \mu', \end{aligned} \tag{6.40}$$

ou seja,

$$\tilde{\chi}^{(1)}(n, J, U, \mu, \omega') = \frac{\tilde{\chi}^{(2)}(n, J, U, \mu, \omega)}{2}. \tag{6.41}$$

Para encontrar as propriedades estáticas fazemos  $\omega \rightarrow 0$  e encontramos a relação

$$\begin{aligned} &J \left( \frac{(n+1)}{-\mu + Un} + \frac{n}{\mu - U(n-1)} \right) = \\ &= \frac{J(Z-1)}{Z} \left( \frac{2n+1}{-J - 2\mu + 2Un} + \frac{2n}{J + 2\mu - 2U(n-1)} \right). \end{aligned} \tag{6.42}$$

Como fizemos nos outros casos é possível normalizar toda a equação por  $U$  definindo

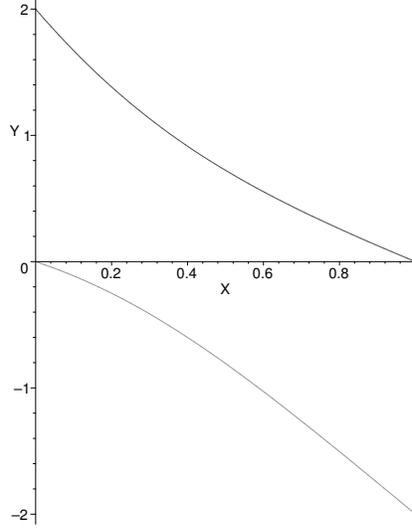
$$Y = \frac{J}{U} \tag{6.43}$$

$$X = \frac{\mu}{U} \tag{6.44}$$

e encontrando uma equação para superfícies críticas em função de  $X$  e  $Y$  da forma

$$\begin{aligned} &Y \left( \frac{(n+1)}{-X + n} + \frac{n}{X - (n-1)} \right) = \\ &= \frac{Y(Z-1)}{Z} \left( \frac{2n+1}{-Y - 2X + 2n} + \frac{2n}{Y + 2X - 2(n-1)} \right) \end{aligned} \tag{6.45}$$

para cada dimensão (especificada pelo número de primeiros vizinhos  $Z$  da rede hipercúbica) e para cada ventre isolante (especificado pelo número inteiro de ocupação  $n$ ). Para  $n = 1$ , caso mais interessante visto que foi estudado por vários outros métodos, observamos para qualquer dimensão duas soluções como as da Figura 6.4. Notamos a falta de simetria partícula-buraco nesta solução. Notamos também que a curva superior parece se referir a “criação de partículas” que permite a transição para o estado superfluido pois decai com o aumento do potencial químico e em  $\mu/U = 1$  se anula (como esperávamos de acordo com os argumentos da seção 1.2.3). De forma análoga a curva inferior parece se referir a “criação de buracos” que permite a transição (decai quando diminuimos o potencial químico e se anula em  $\mu/U = 0$ ). Essa hipótese sobre as curvas é bastante reforçada quando procuramos as soluções para os demais


 Figura 6.4: Superfícies críticas para  $n = 1$  e  $d = 2$ .

ventres isolantes e obtemos curvas semelhantes deslocadas e se anulando em  $X = n$  e  $X = n - 1$ . Construindo as soluções por esse argumento obtemos a Figura 6.5 para a região isolante com  $n = 1$  e duas dimensões (obtemos figuras semelhantes para as demais regiões com um número  $n$  de bósons por sítio). Podemos observar, como nas aproximações de campo médio anteriores, a falta de simetria em relação ao ponto  $X = 1/2$  (ou  $X = n - 1/2$  para os demais ventres). Entretanto, os valores de  $X$  para os quais temos  $Y_c$  são melhorados, ou seja, mais próximos do valor simétrico  $n - 1/2$  do que nas aproximações anteriores. Os valores de  $Y_c$  encontrados são bem mais altos que os encontrados para as aproximações de campo médio<sup>1</sup>. Em geral o campo médio superestima a fase ordenada pois despreza as flutuações. Neste caso lembramos que isso ainda pode ter sido agravado quando utilizamos a aproximação (5.70).

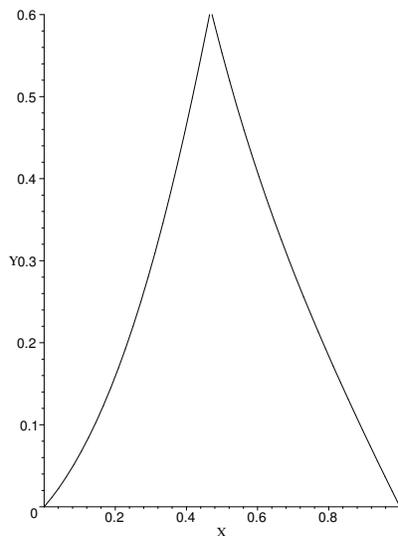
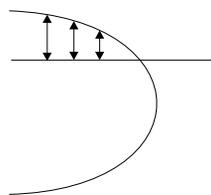
### 6.4.3 Comportamento do gap de energia e expoente $\nu z$

De acordo com a teoria de escala desenvolvida no capítulo 2 o gap de energia no estado isolante deve se anular assintoticamente na criticalidade como

$$E_g \sim (\tilde{J}_c - J)^{\nu z}. \quad (6.46)$$

onde  $\tilde{J}_c$  é o valor de fronteira de  $J$  para um valor fixo de  $\mu/U$  ( $\tilde{J}_c = J_c$  se  $\mu/U =$  semi-inteiro, ou seja, a transição ocorre pelo topo do ventre). Em adição, argumentamos na seção 1.2.3 que o gap para criar uma partícula (buraco) é exatamente a diferença entre uma reta que passa pelo ponto  $\mu/U =$  constante e o ponto imediatamente acima (abaixo) no limite da fase isolante (Figura 6.6). Como obtivemos analiticamente as

<sup>1</sup>Veja a Tabela 7.1 para uma síntese dos principais valores encontrados.


 Figura 6.5: Diagrama para  $n = 1$  e  $d = 2$  obtido pelo GRCM

 Figura 6.6: Redução do gap com o aumento de  $J$ 

curvas de fronteira do diagrama possuímos um método direto de cálculo do produto de expoentes críticos  $\nu z$ . Esse cálculo pode ser feito para as duas aproximações de campo médio (onde esperamos que  $z$  e  $\nu$  assumam seus valores de campo médio) e para as superfícies obtidas com o Grupo de Renormalização de Campo Médio<sup>2</sup>.

Começamos calculando  $\nu z$  para a aproximação de campo médio de um sítio. Definimos as variáveis críticas

$$x = X - X_c \quad (6.47)$$

$$y = Y_c - Y \quad (6.48)$$

onde lembramos que  $X$  e  $Y$  são definidos como em (6.43) e (6.44) respectivamente<sup>3</sup>.

<sup>2</sup>A forma analítica do diagrama permite encontrar o expoente do gap para os dois tipos de transição. Lembre que estamos utilizando a nomenclatura  $\tilde{\nu}\tilde{z}$  para transição genérica e  $\nu z$  para a transição especial.

<sup>3</sup>Note também que definimos a variável  $y$  de maneira diferente. Isso foi feito pois dessa forma  $y > 0$  o que evita escrever formas assintóticas em função de  $(-y)$ .

A equação do diagrama dada por

$$Y = \frac{n[X - (n - 1)] - X[X - (n - 1)]}{X + 1} \quad (6.49)$$

se altera:

$$Y_c - y = \frac{n[(x + X_c) - (n - 1)] - (x + X_c)[(x + X_c) - (n - 1)]}{(x + X_c) + 1}. \quad (6.50)$$

e de acordo com nosso argumento  $x$  corresponde ao próprio gap. Resolvemos então a equação anterior para  $x$  e obtemos para a variação do gap como na Figura 6.7. O

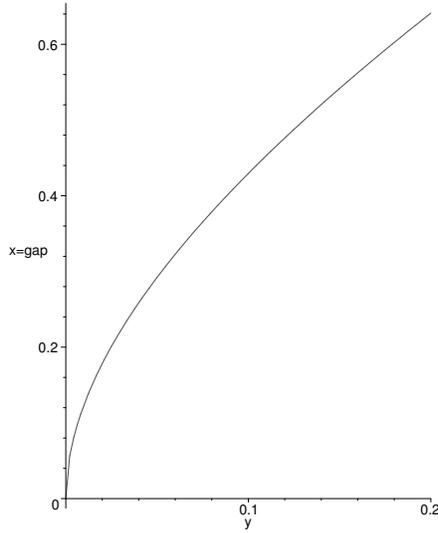


Figura 6.7: Comportamento de campo médio do gap de energia da fase isolante.

expoente crítico associado a esse gap é calculado através da relação (2.13):

$$\nu z = \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\ln|x(y)|}{\ln|y|} \quad (6.51)$$

fornecendo

$$\nu z = 1/2 \quad (6.52)$$

como esperávamos pois os valores de campo médio [4] para  $z$  e  $\nu$  são

$$z = 1 \quad (6.53)$$

$$\nu = 1/2. \quad (6.54)$$

Para a aproximação de campo médio de 2 sítios procedemos de maneira análoga encontrando o mesmo valor para o produto  $\nu z$  da transição especial. Enfatizamos que para qualquer aproximação do tipo campo médio os expoentes críticos assumem

os mesmos valores, não importando quantos sítios da rede tomamos ou quanto mais sofisticada é a aproximação. Podemos observar isso pelo formato do diagrama obtido na aproximação de campo médio. Para qualquer solução de campo médio obtemos ventres isolantes parabólicos caracterizando o expoente  $\nu z = 1/2$ . Mas observando o formato do diagrama de fases obtido com o Grupo de Renormalização de Campo Médio (Figura 6.5) temos expectativa diferente. Isso porque o diagrama claramente não é parabólico e neste caso  $\nu z \neq 1/2$ .

A equação da fronteira encontrada com o GRCM é:

$$Y \left( \frac{(n+1)}{-X+n} + \frac{n}{X-(n-1)} \right) = \frac{Y(Z-1)}{Z} \left( \frac{2n+1}{-Y-2X+2n} + \frac{2n}{Y+2X-2(n-1)} \right). \quad (6.55)$$

e definimos novamente as variáveis críticas  $x$  e  $y$ . Encontramos neste caso para a transição especial em qualquer dimensão  $d$

$$\nu z = 1 \quad (6.56)$$

resultado que coincide com o esperado para uma transição genérica a qualquer dimensão<sup>4</sup>. Não encontramos expoentes diferentes para os dois tipos de transição o que supostamente engloba as duas transições na mesma classe de universalidade diferindo do que esperávamos com a previsão anterior (capítulo 2). Nas seções posteriores calculamos  $z$  e  $\nu$  separadamente próximo ao ponto especial no cume do ventre pelo método usual de Grupo de Renormalização de Campo Médio.

#### 6.4.4 Expoente crítico $\nu$

Prosseguimos estudando as propriedades estáticas do sistema de onde podemos extrair separadamente uma estimativa para o expoente de escala do comprimento de correlação  $\nu$ . No modelo de Hubbard para bósons o parâmetro crítico  $\delta$  escala como

$$\delta' = L^{1/\nu} \delta \quad (6.57)$$

de acordo com (2.22) e (2.27) com  $L$  representando o fator de escala. Para as transições especiais  $\delta = (J_c - J)/U = Y_c - Y$  por isso para encontrar o expoente crítico  $\nu$  usamos a relação de Grupo de Renormalização de Campo Médio (6.9) para o parâmetro  $J$

$$\left. \frac{dY'}{dY} \right|_{Y=Y^*} = \left( \frac{N}{N'} \right)^{1/\nu}. \quad (6.58)$$

Temos formas analíticas para  $J$  e  $J'$  obtidas com os resultados de campo médio para 1 e 2 sítios que permitem estimativas do expoente  $\nu$  para uma transição por qualquer

<sup>4</sup>Para a transição genérica o GRCM também fornece  $\tilde{\nu}\tilde{z} = 1$ .

ventre isolante e a qualquer dimensão. O cálculo é simples. Utilizamos a relação de recorrência encontrada

$$\begin{aligned} Y' & \left( \frac{(n+1)}{-X' + n} + \frac{n}{X' - (n-1)} \right) = \\ & = \frac{Y(Z-1)}{Z} \left( \frac{2n+1}{-Y-2X+2n} + \frac{2n}{Y+2X-2(n-1)} \right) \end{aligned} \quad (6.59)$$

e resolvemos para  $Y'$  para um determinado ventre (especificado por  $n$ ), para uma determinada dimensão (especificada por  $Z$ ) e em  $X = X'$ . Para  $d = 1$  ( $Z = 2$ ) e  $n = 1$  temos por exemplo

$$Y' = \frac{3}{4} \frac{Y(Y+2X+4)(X-1)X}{(Y+2X-2)(Y+2X)(X+1)} \quad (6.60)$$

e usando a relação (6.58) encontramos para  $\nu$  no ponto crítico calculado pelo Grupo de Renormalização

$$\nu \approx 0.566. \quad (6.61)$$

Na Tabela (7.2) estão compilados os resultados mais importantes.

### 6.4.5 Expoente crítico dinâmico $z$

Usando a relação de recorrência dinâmica calculamos também separadamente o expoente  $z$ . Fazemos

$$\tilde{\chi}^{(1)}(n, \mu', U', J', 2^{z/d}\omega) = \frac{1}{2} \cdot \tilde{\chi}^{(2)}(n, \mu, U, J, \omega). \quad (6.62)$$

A equação deve ser resolvida para  $z$ . A maneira mais fácil de fazer isso é utilizar que próximo a transição  $\omega \rightarrow 0$  e expandir as susceptibilidades:

$$\tilde{\chi}^{(1)}(2^{z/d}\omega) = \tilde{\chi}^{(1)}(\omega = 0) + \left. \frac{d\tilde{\chi}^{(1)}}{d\omega} \right|_{\omega=0} \cdot \omega' + \dots \quad (6.63)$$

$$\tilde{\chi}^{(2)}(\omega) = \tilde{\chi}^{(2)}(\omega = 0) + \left. \frac{d\tilde{\chi}^{(2)}}{d\omega} \right|_{\omega=0} \cdot \omega + \dots \quad (6.64)$$

Substituindo em (6.62) temos em primeira ordem em  $\omega$

$$2^{(z/d)} \left. \frac{d\tilde{\chi}^{(1)}}{d\omega} \right|_{\omega=0} = \frac{1}{2} \left. \frac{d\tilde{\chi}^{(2)}}{d\omega} \right|_{\omega=0} \quad (6.65)$$

pois para os primeiros termos (parte estática) já garantimos

$$\tilde{\chi}^{(1)}(\omega = 0) = \frac{1}{2} \tilde{\chi}^{(2)}(\omega = 0). \quad (6.66)$$

Com os valores calculados das susceptibilidades (6.65) fica

$$\begin{aligned}
 & 2^{(2z/d)} \left\{ \frac{n}{[\mu + U(n-1)]^2} - \frac{n+1}{[-\mu + Un]^2} \right\} = \\
 & = \frac{Z-1}{Z} \left\{ \frac{4n}{[J + 2\mu - 2U(n-1)]^2} - \frac{2(2n+1)}{[-J - 2\mu + 2Un]^2} \right\}. \quad (6.67)
 \end{aligned}$$

Mais uma vez é possível normalizar por  $U$  de maneira que obtemos, multiplicando os dois lado por  $U^2$ ,

$$\begin{aligned}
 & 2^{(2z/d)} \left\{ \frac{n}{[X + (n-1)]^2} - \frac{n+1}{[-X + n]^2} \right\} = \\
 & = \frac{Z-1}{Z} \left\{ \frac{4n}{[Y + 2X - 2(n-1)]^2} - \frac{2(2n+1)}{[-Y - 2X + 2n]^2} \right\}. \quad (6.68)
 \end{aligned}$$

Encontramos o expoente  $z$  então colocando  $X = X^*$  e  $Y = Y^*$ . Por exemplo, para  $d = 1$  e  $n = 1$  encontramos  $z \approx 1.82$ . O método parece ser muito mais eficaz na análise de propriedades estáticas (foi desenvolvido com a intenção de estudar transições térmicas) pois o expoente  $z$  difere muito do esperado para a transição especial ( $z = 1$ ) mas se aproxima do valor para a transição genérica  $z = 2$  (o GRCM parece colocar as duas transições na mesma classe de universalidade). Notamos ainda que o valor de  $z$  encontrado aqui e o valor de  $\nu$  da seção anterior fornecem  $\nu z \approx 1.03$  concordando com o resultado do produto  $\nu z = 1$ . Para duas dimensões não há concordância tão boa e estimamos o melhor valor de  $z$  baseado no produto  $\nu z = 1$  e o valor de  $\nu$ . Na conclusão deste trabalho resultados para  $z$  também se encontram compilados (Tabela 7.2).

# Capítulo 7

## Resultados e conclusão

Neste trabalho obtivemos diversos resultados para sistemas de bósons interagentes a  $T = 0$  descritos pelo modelo de Hubbard. Nesta seção tabelamos esses resultados, comparamos com valores calculados por outros métodos e também observamos se eles se encontram dentro do esperado de acordo com a análise dos capítulos 1 e 2.

A seguir tabelamos os resultados gerais para o ponto crítico associado com a transição superfluido-isolante especial para o caso  $n = 1$  (Tabela 7.1) assim como seus expoentes  $\nu$  e  $z$  (Tabela 7.2).

método	ponto crítico ( $Y_{max} = J_c/U$ )	
CM (1 sítio)	$\approx 0.086$ (d=1)	$\approx 0.043$ (d=2)
CM (2 sítios)	$\approx 0.202$ (d=1)	$\approx 0.068$ (d=2)
GRCM	$\approx 0.761$ (d=1)	$\approx 0.606$ (d=2)
Cálculo perturbativo [6]	$\approx 0.215$ (d=1)	$\approx 0.136$ (d=2)
Monte Carlo Quântico [7] [8]	$\approx 0.215$ (d=1)	$\approx 0.122$ (d=2)

Tabela 7.1: Resultados de ponto crítico para a fase isolante de  $n = 1$ .

A comparação foi feita com os resultados obtidos por cálculo perturbativo da energia cinética [16] e Monte Carlo Quântico em  $d = 1$  [17] e  $d = 2$  [18]. Observe que o Grupo de Renormalização de Campo Médio superestima o valor de  $J_c$  de acordo com o comentário da seção 6.4.2. O mais interessante da utilização do GRCM é portanto poder calcular os expoentes críticos associados a transição. Observamos que para a transição genérica argumentamos na seção 2.7 que  $\tilde{\nu}z = 1$  para qualquer dimensão. Encontramos este resultado para os dois tipos de transição embora esperássemos  $\nu z \neq 1$  para a transição especial (o GRCM parece colocar as duas transições na mesma classe de universalidade). O GRCM permite calcular também os expoentes  $\nu$  e  $z$  separadamente para a transição especial. Os valores encontrados desta maneira para o expoente  $z$  são muito altos e de acordo com cálculos em outros modelos quânticos (veja, por

exemplo, em sistemas de spins [19]) o método se aplica melhor no estudo das propriedades estáticas<sup>1</sup>. Os valores obtidos para o expoente  $\nu$  são portanto mais confiáveis assim como o produto  $\nu z$  obtido pelo formato do diagrama. A melhor estimativa de  $z$  é então encontrada utilizando o resultado  $\nu z = 1$  (que segundo os cálculos com o GRCM vale também para a transição especial) e o valor do expoente  $\nu$  calculado separadamente. Estes são os valores da Tabela 7.2. Lembramos que o cálculo do expoente

	produto $\nu z$ qualquer $d$	expoente $\nu$		expoente $z$	
		$d=1$	$d=2$	$d=1$	$d=2$
Trans. genérica	1	—	—	—	—
Trans. especial	1	$\approx 0.566$	$\approx 0.485$	$\approx 1.767$	$\approx 2.062$

Tabela 7.2: Resultados do GRCM para os expoentes críticos da fase isolante de  $n = 1$ .

$\alpha$  é possível através do uso da relação de hiperescala (2.36)

$$2 - \alpha = \nu(d + z)$$

e, por exemplo, para  $d = 1$  temos  $\alpha \approx 0.43$  e para  $d = 2$  temos  $\alpha \approx 0.03$ .

Entre os resultados de campo médio podemos comparar também os comportamentos de  $X_{max} = (\mu/U)_{max}$  (Valor de  $X$  para qual temos o topo dos ventres) e  $Y_{max}$  (Valor crítico  $J_c/U$ ) em função do número de partículas por sítio  $n$  em  $d = 3$  (Tabela 7.3). Os resultados para dimensões mais baixas são semelhantes. É interessante

—	CM (1 sítio)	CM (2 sítios)
$X_{max}(n)$	$\sqrt{n(n+1)} - 1$	$-(9/5)n - (6/5) + (7/5) \cdot \sqrt{2n(2n+1)}$
$X_{max}(n \rightarrow \infty)$	$n - 1/2$	$n - 1/2$
$Y_{max}(n)$	$2n + 1 - 2\sqrt{n(n+1)}$	$(8/5)n + (2/5) - (4/5) \cdot \sqrt{2n(2n+1)}$
$Y_{max}(n \rightarrow \infty)$	$\sim 1/n$	$\sim 1/n$

Tabela 7.3: Comparação entre os resultados de ponto crítico em campo médio a  $d = 3$ .

notar que os resultados para  $X_{max}$  estão sempre abaixo do simétrico  $(n - 1/2)$ , mas tendem para este valor quando  $n \rightarrow \infty$ . A dependência em  $1/n$  de  $Y_{max}$  para  $n$  grande também parece ser uma característica de campo médio. Lembramos que mais do que valores críticos, obtivemos para cada aproximação formas analíticas para o diagrama de fases. As aproximações de campo médio fornecem formas parabólicas (Figura 5.6) que de acordo com a seção 2.7 devem ser os formatos reais a partir da dimensão crítica superior  $d_c = 3$ . Os expoentes para as duas transições (para a transição genérica estimamos  $\tilde{d}_c = 2$ ) assumem neste caso os valores de campo médio. Para dimensões

<sup>1</sup>De fato os valores de  $\nu$  estão em melhor acordo com os esperados. Por exemplo, para  $d = 2$ , temos  $\nu \approx 0.49$  em melhor acordo com o valor do modelo XY em  $d = 3$  no qual  $\nu \approx 0.66$ .

abaixo da dimensão crítica a forma do diagrama de fases não deve mais ser parabólica. A forma da linha crítica encontrada com o Grupo de Renormalização de Campo Médio (Figura 6.5) está em concordância com [16] e [17].

Além de estudar o sistema de bósons correlacionados através do modelo de Hubbard, com o qual obtivemos os principais resultados, apresentamos a solução exata de um modelo (capítulo 4), que apesar de idealizado, demonstra as principais características das outras soluções (comparare por exemplo os diagramas das Figuras 1.1 e 4.3). Neste caso foi possível ainda avaliar o comportamento do sistema para temperaturas diferentes de zero, oportunidade esta que não tivemos para o modelo de Hubbard pois torna os cálculos muito mais complicados.

Apresentamos também a Teoria de Bogoliubov para a fase superfluida. O modelo, em lugar do truque original de Bogoliubov, foi resolvido pela técnica das funções de Green para Estado Sólido que também está brevemente resumida neste trabalho (apêndice A). A solução da aproximação de Bogoliubov, além de um bom exemplo do poder da técnica das funções de Green, permite explicar algumas propriedades interessantes da fase superfluida como por exemplo a viscosidade nula (capítulo 3).

Há ainda muitas possibilidades de estudo para esse sistema. A continuação natural seria, ainda a  $T = 0$ , a inclusão de desordem [4] que permite o aparecimento de uma nova fase (Bose Glass). O estudo a temperaturas finitas do modelo de Hubbard para bósons também seria muito interessante pois não há como saber a princípio se existe, para este modelo, condensação em  $T \neq 0$ . Caso exista superfluido a  $T \neq 0$  o estudo da transição térmica entre a fase superfluida e a normal também entra em foco.

# Apêndice A

## Método das Funções de Green para Estado Sólido

### A.1 Definição para as funções de Green em estado sólido

Em problemas de estado sólido encontramos diversos modelos que envolvem operadores quânticos e, por isso, muitas vezes as grandezas que desejamos derivar desses modelos envolvem valores médios desses operadores. Um poderoso método de cálculo de algumas dessas médias é o Método das Funções de Green. O Método das Funções de Green não só permite o cálculo de diversos valores médios como também permite “compactar” outras informações sobre o sistema na função obtida.

Vamos considerar os operadores  $A(t)$  e  $B(t')$  na representação de Heisenberg. Podemos escrever a equação do movimento de Heisenberg como:

$$i \frac{dA(t)}{dt} = [A(t), \mathcal{H}]. \quad (\text{A.1})$$

Visto que estamos interessados em valores médios relativos a esses operadores definimos a função de correlação temporal como:

$$F_{A,B}(t, t') = \langle A(t)B(t') \rangle. \quad (\text{A.2})$$

Podemos reparar que essa função de correlação temporal depende apenas da diferença  $t - t'$  da seguinte forma:

$$F_{A,B}(t, t') = \text{Tr}\{A(t)B(t')e^{-\beta\mathcal{H}}\} = \text{Tr}\{e^{i\mathcal{H}t}A(0)e^{-i\mathcal{H}t}e^{i\mathcal{H}t'}B(0)e^{-i\mathcal{H}t'}e^{-\beta\mathcal{H}}\}$$

e uma vez que permutações cíclicas dos fatores do traço não alteram seu valor:

$$F_{A,B}(t, t') = \text{Tr}\{A(0)e^{-i\mathcal{H}(t-t')}B(0)e^{i\mathcal{H}(t-t')}e^{-\beta\mathcal{H}}\} = F_{A,B}(t - t'). \quad (\text{A.3})$$

Diferenciando esta função de correlação e utilizando a equação do movimento de Heisenberg obtemos a seguinte cadeia infinita de equações diferenciais:

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \langle A(t)B(t') \rangle &= \langle [A(t), \mathcal{H}]B(t') \rangle; \\ i \frac{d}{dt} \langle [A(t), \mathcal{H}]B(t') \rangle &= \langle [[A(t), \mathcal{H}], \mathcal{H}]B(t') \rangle; \\ &\vdots \end{aligned} \tag{A.4}$$

Essa cadeia de equações não é necessariamente infinita. Em alguns modelos mais simples a cadeia se fecha com um determinado número de relações revelando-se um sistema finito de equações diferenciais. No entanto, na maioria dos casos a cadeia de equações é de fato infinita e as relações envolvem cada vez mais operadores. Nesses casos costuma-se finalizar a cadeia utilizando-se alguma aproximação.

Definimos de forma semelhante às funções de correlação as funções de Green:

- Função de Green retardada:

$$G_{A,B}^{(r)}(t, t') = \langle \langle A(t)|B(t') \rangle \rangle^{(r)} = \theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle \tag{A.5}$$

- Função de Green avançada:

$$G_{A,B}^{(a)}(t, t') = \langle \langle A(t)|B(t') \rangle \rangle^{(a)} = -\theta(t' - t) \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle \tag{A.6}$$

- Função de Green causal:

$$G_{A,B}^{(c)}(t, t') = \langle \langle A(t)|B(t') \rangle \rangle^{(c)} = \langle T_{\eta} A(t)B(t') \rangle \tag{A.7}$$

onde

$$[A(t), B(t')]_{\eta} = A(t)B(t') - \eta B(t')A(t); \tag{A.8}$$

$$T_{\eta} A(t)B(t') = \theta(t - t')A(t)B(t') + \eta \theta(t' - t)B(t')A(t); \tag{A.9}$$

$$\eta = 1 \text{ operadores bosônicos}$$

$$\eta = -1 \text{ operadores fermiônicos}$$

e  $\theta(x)$  é a função degrau que assume o valor nulo se  $x < 0$  e um se  $x > 0$ . As funções de Green, assim como as funções de correlação temporal, são funções de  $t - t'$  e têm a definição linear:

$$G_{A+B,C}(t - t') = G_{A,C}(t - t') + G_{B,C}(t - t') \tag{A.10}$$

Como no caso das funções de correlação podemos calcular seu valor diretamente pela definição se conhecermos os autoestados do sistema ou apelar para a equação de movimento, ou melhor, para a cadeia de equações envolvendo os valores médios dos operadores. Observamos que qualquer uma das funções de Green definidas possui a

mesma cadeia infinita de equações de movimento que é semelhante a das funções de correlação:

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} \langle \langle A(t) | B(t') \rangle \rangle &= i\delta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle + \langle \langle [A(t), \mathcal{H}] | B(t') \rangle \rangle; \\
 i \frac{d}{dt} \langle \langle [A(t), \mathcal{H}] | B(t') \rangle \rangle &= i\delta(t-t') \langle \langle [[A(t), \mathcal{H}], B(t')]_{\eta} \rangle \rangle + \langle \langle [[A(t), \mathcal{H}], \mathcal{H}] | B(t') \rangle \rangle; \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{A.11}$$

Como no caso da cadeia de equações para as funções de correlação temporal esta cadeia poderá terminar com um número finito de equações ou será necessária a utilização de alguma aproximação.

Neste trabalho vamos calcular soluções em funções de Green por esses dois meios. No cálculo da susceptibilidade do modelo de Hubbard para bósons local utilizamos diretamente a definição das funções de Green e para caracterizar o estado superfluido resolvemos um modelo de bósons interagentes na aproximação de Bogoliubov para esta fase utilizando a cadeia de equações do movimento. Neste caso a cadeia se fecha na segunda equação permitindo uma solução simples.

## A.2 Representação espectral das funções de Green

Podemos escrever o valor médio dos operadores  $A(t)$  e  $B(t')$  da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
 \langle B(t')A(t) \rangle &= Q^{-1} Tr (B(t')A(t)e^{-\beta\mathcal{H}}) \\
 &= Q^{-1} \sum_{\nu} \langle \phi_{\nu} | B(t')A(t) | \phi_{\nu} \rangle e^{-\beta\epsilon_{\nu}}
 \end{aligned} \tag{A.12}$$

onde os  $|\phi_{\nu}\rangle$  são os autoestados de energia  $\mathcal{H}|\phi_{\nu}\rangle = \epsilon_{\nu}|\phi_{\nu}\rangle$  e  $Q$  é a função de partição do sistema. Inserindo a relação de fechamento nesta base podemos escrever esse valor médio como

$$\langle B(t')A(t) \rangle = Q^{-1} \sum_{\nu, \mu} \langle \phi_{\nu} | B(t') | \phi_{\mu} \rangle \langle \phi_{\mu} | A(t) | \phi_{\nu} \rangle e^{-\beta\epsilon_{\nu}}, \tag{A.13}$$

com os operadores na representação de Heisenberg  $\mathcal{O}(t) = e^{i\mathcal{H}t}\mathcal{O}e^{-i\mathcal{H}t}$ . Explicitando as dependências temporais temos

$$\langle B(t')A(t) \rangle = Q^{-1} \sum_{\nu, \mu} \langle \phi_{\nu} | B | \phi_{\mu} \rangle \langle \phi_{\mu} | A | \phi_{\nu} \rangle e^{-\beta\epsilon_{\nu}} e^{-i(t-t')(\epsilon_{\nu}-\epsilon_{\mu})}. \tag{A.14}$$

De forma semelhante, para  $\langle A(t)B(t') \rangle$ , encontramos

$$\langle A(t)B(t') \rangle = Q^{-1} \sum_{\nu, \mu} \langle \phi_{\nu} | B | \phi_{\mu} \rangle \langle \phi_{\mu} | A | \phi_{\nu} \rangle e^{-\beta\epsilon_{\mu}} e^{-i(t-t')(\epsilon_{\nu}-\epsilon_{\mu})}. \tag{A.15}$$

A representação espectral dessas funções de correlação é

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(E') e^{-iE'(t-t')} dE' \quad (\text{A.16})$$

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(E') e^{\beta E'} e^{-iE'(t-t')} dE' \quad (\text{A.17})$$

onde  $I_{AB}(E)$  é a função de densidade espectral

$$I_{AB}(E) = Q^{-1} \sum_{\nu, \mu} \langle \phi_{\nu} | B | \phi_{\mu} \rangle \langle \phi_{\mu} | A | \phi_{\nu} \rangle e^{-\beta \epsilon_{\nu}} \delta(\epsilon_{\nu} - \epsilon_{\mu} - E). \quad (\text{A.18})$$

Usando a representação espectral podemos demonstrar um importante resultado para as funções de Green conhecido como “teorema do salto”. Por exemplo, da definição da função de Green retardada, vamos escrever a transformada de Fourier

$$G_{AB}^{(r)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iE(t-t')} \theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle dt \quad (\text{A.19})$$

e com a representação espectral das funções de correlação temos

$$G_{AB}^{(r)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int e^{iE(t-t')} \theta(t-t') \left[ \int I_{AB}(E') (e^{\beta E'} - \eta) e^{-iE'(t-t')} dE' \right] dt \quad (\text{A.20})$$

onde as integrais têm o limite  $-\infty$  a  $\infty$  que será omitido por economia de notação. Para escrever essa representação espectral de forma mais adequada vamos utilizar a representação de integral de contorno para a função degrau

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int dE \frac{e^{-iEt}}{E + i\varepsilon}. \quad (\text{A.21})$$

Podemos calcular a integral em  $dt$  utilizando o caminho no plano complexo da Figura A.1 e em seguida fazendo o raio do semicírculo ir a infinito. Como resultado encontramos

$$G_{AB}^{(r)}(E) = \frac{i}{2\pi} \int I_{AB}(E') (e^{\beta E'} - \eta) \frac{dE'}{E - E' + i\varepsilon}. \quad (\text{A.22})$$

Refazendo esses cálculos para a função de Green avançada (a integral no plano complexo é efetuada desta vez no semiplano inferior), obtemos:

$$G_{AB}^{(a)}(E) = \frac{i}{2\pi} \int I_{AB}(E') (e^{\beta E'} - \eta) \frac{dE'}{E - E' - i\varepsilon}. \quad (\text{A.23})$$

Reparamos que a função de Green retardada é analítica em todo semiplano superior e a função de Green avançada é analítica em todo semiplano inferior de forma que, com a combinação destes resultados,

$$G_{AB}(E) = \begin{cases} G_{AB}^{(r)}(E) & \text{se } \text{Im}(E) > 0 \\ G_{AB}^{(a)}(E) & \text{se } \text{Im}(E) < 0 \end{cases}, \quad (\text{A.24})$$

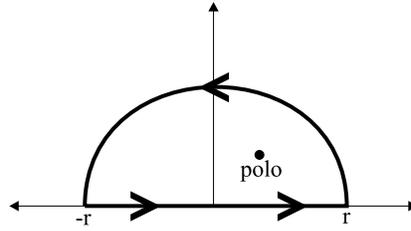


Figura A.1: Caminho de integração para o cálculo da Transformada de Fourier da função de Green retardada.

ou seja,  $G_{AB}(E)$  apresenta polos apenas no eixo real. Dessa forma  $G_{AB}(E)$  pode ser escrita como:

$$G_{AB}(E) = \frac{i}{2\pi} \int I_{AB}(E') \left( e^{\beta E'} - \eta \right) \frac{dE'}{E - E'}. \quad (\text{A.25})$$

Finalmente podemos calcular  $G_{AB}(E + i\varepsilon) - G_{AB}(E - i\varepsilon)$ :

$$G_{AB}(E + i\varepsilon) - G_{AB}(E - i\varepsilon) = \int I_{AB}(E') \left( e^{\beta E'} - \eta \right) \left[ \frac{dE'}{E - E' + i\varepsilon} - \frac{dE'}{E - E' - i\varepsilon} \right]$$

e usando relação conhecida para a “função” Delta

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \left( \frac{1}{x} \right) \mp i\pi\delta(x) \quad (\text{A.26})$$

encontramos

$$I_{AB}(E) = \frac{G_{AB}(E + i\varepsilon) - G_{AB}(E - i\varepsilon)}{(e^{\beta E} - \eta)}. \quad (\text{A.27})$$

A densidade espectral pode ser calculada então através das funções de Green. Este resultado é conhecido como “teorema do salto” e é útil para o cálculo de valores médios por meio das funções de Green correspondentes pois substituindo (A.27) em (A.16) encontramos:

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{e^{-iE'(t-t')}}{e^{\beta E'} - \eta} (G_{AB}(E' + i\varepsilon) - G_{AB}(E' - i\varepsilon)). \quad (\text{A.28})$$

Podemos observar ainda que como consequência direta de (A.27) a densidade espectral está relacionada com os polos da transformada de Fourier das funções de Green, fato que utilizaremos a seguir para caracterizar as excitações fundamentais do oscilador harmônico.

### A.3 Função de Green do oscilador harmônico

Como um exemplo interessante vamos aplicar o método para encontrar a função de Green de um oscilador harmônico. Começamos com a hamiltoniana

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i \left( \frac{p_i^2}{2M} + \frac{1}{2} M \Omega_0^2 u_i^2 \right). \quad (\text{A.29})$$

A função de Green que queremos calcular desta vez seria, por exemplo, a função causal

$$\langle \langle u_i(t) | u_i(0) \rangle \rangle^{(c)} = \langle T_\eta [u_i(t) u_i(0)] \rangle \quad (\text{A.30})$$

onde podemos fazer  $t' = 0$  sem perda de generalidade. Introduzimos como de costume operadores adimensionais

$$\begin{aligned} \xi_i &= u_i \sqrt{M \Omega_0} \\ p_{\xi,i} &= \frac{p_i}{\sqrt{M \Omega_0}} \end{aligned}$$

onde fizemos as unidades tal que  $\hbar = 1$ . Definimos também de forma padrão os operadores de criação e aniquilação de partículas

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi_i + i p_{\xi,i}) \quad (\text{A.31})$$

$$b_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi_i - i p_{\xi,i}) \quad (\text{A.32})$$

e obtemos a hamiltoniana na forma:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i \Omega_0 \left( b_i^\dagger b_i + 1/2 \right). \quad (\text{A.33})$$

A função de Green para o estado fundamental é:

$$\langle \langle u_i(t) | u_i(0) \rangle \rangle^{(c)} = \frac{1}{2M\Omega_0} \langle 0 | T [(b_i(t) + b_i^\dagger(t))(b_i + b_i^\dagger)] | 0 \rangle, \quad (\text{A.34})$$

e pode ser calculada utilizando que

$$\begin{aligned} b(t) &= e^{i\mathcal{H}_0 t} b e^{-i\mathcal{H}_0 t} ; \\ b|0\rangle &= 0 ; \\ \langle 0|b^\dagger &= 0 . \end{aligned}$$

Assim encontramos

$$G_0(t) = \langle \langle u_i(t) | u_i(0) \rangle \rangle^{(c)} = \frac{1}{2M\Omega_0} e^{-i\Omega_0 |t|} \quad (\text{A.35})$$

para  $t > 0$  ou  $t < 0$ .

As transformadas de Fourier das funções de Green apresentam propriedades interessantes portanto vamos calcular a transformada da função de Green para o oscilador harmônico obtida em (A.35):

$$G_0(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_0(t) e^{iEt} dt . \quad (\text{A.36})$$

Tomando o devido cuidado de usar variáveis complexas visto que essa transformada não existe para um número  $E$  real (devemos adicionar uma parte complexa infinitesimal), obtemos

$$\begin{aligned} G_0(E) &= \frac{1}{4\pi M\Omega_0} \int_{-\infty}^0 e^{i(E+\Omega_0-i\eta)t} dt + \frac{1}{4\pi M\Omega_0} \int_0^{\infty} e^{i(E-\Omega_0+i\eta)t} dt = \\ &= \frac{i}{2\pi M(E^2 - \Omega_0^2 + i\eta)}. \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

Observamos que a adição da parte infinitesimal simplesmente desloca os polos de  $G_0(E)$  do eixo real permitindo que as integrais convirjam. É interessante observar que desta forma a transformada de Fourier da função de Green apresenta como polos as energias de excitação para o sistema, neste caso  $E = \Omega_0$  (fizemos  $\hbar = 1$ ). Em casos mais gerais esses polos podem estar a uma distância finita no plano complexo o que representaria um amortecimento na função de Green  $G_0(t)$ , ou seja, um tempo de vida finito do estado.

Esta apresentação da solução simples para o oscilador harmônico, além de ter caráter ilustrativo do método, será útil como forma de comparação quando analisarmos neste trabalho a teoria de Bogoliubov para o estado superfluido utilizando funções de Green.

# Apêndice B

## Função de partição entre estados coerentes do sistema

### B.1 Estados coerentes do sistema

Para uma hamiltoniana geral de muitas partículas escrita em um formato de segunda quantização a relação para a função de partição no formalismo de integrais de trajetória também pode ser obtida. Na representação usual, com a hamiltoniana escrita em função dos operadores de momento e posição, o traço seria feito entre os autoestados destes operadores, resultando na integral conhecida

$$Z = \int \mathcal{D}[x(\tau)] \mathcal{D}[p(\tau)] e^{\frac{1}{\hbar} \int d\tau [\sum_i p_i(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} x_i(\tau) + \mathcal{H}(p, x)]}. \quad (\text{B.1})$$

A expressão acima só é útil, no entanto, quando trabalhamos com uma hamiltoniana escrita em função dos operadores de momento e posição. Quando trabalhamos com expressões em segunda quantização os operadores que guardam a física do problema não são mais os operadores de posição ou momento mas os operadores de criação e aniquilação de partículas nos estados do sistema. Fazemos portanto, para expressões em segunda quantização, o traço entre os autoestados dos operadores de aniquilação que são conhecidos como estados coerentes do sistema<sup>1</sup>. Sem detalhar mais a definição de estados coerentes usamos aqui os resultados conhecidos para a relação de fechamento

$$\frac{1}{\mathcal{N}} \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} |\phi_{\alpha}\rangle \langle \phi_{\alpha}| = 1 \quad (\text{B.2})$$

para a média de operadores escritos em segunda quantização

$$\langle \phi | A(b_{\alpha}^{\dagger}, b_{\alpha}) | \phi' \rangle = A(\phi_{\alpha}^*, \phi'_{\alpha}) e^{\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi'_{\alpha}} \quad (\text{B.3})$$

---

<sup>1</sup>Veja por exemplo Negele J. W. e Orland H., *Quantum Many-Particle Systems*, Addison-Wesley Publishing Company, capítulo 1; para introdução completa sobre segunda quantização e estados coerentes do sistema.

e para o traço de um operador entre os estados coerentes

$$\text{Tr}(A) = \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} \langle \phi_{\alpha} | A | \phi_{\alpha} \rangle. \quad (\text{B.4})$$

## B.2 Operador de evolução temporal

Para encontrarmos a expressão da função de partição no formalismo de integrais de trajetória é preciso calcular a evolução temporal nos estados coerentes entre os tempos inicial ( $t_i$ ) e final ( $t_f$ )

$$\mathcal{U}(\phi_f^*, t_f; \phi_i, t_i) = \langle \phi_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot (t_f - t_i)} | \phi_i \rangle. \quad (\text{B.5})$$

Observamos que para o traço precisamos calcular expressão similar fazendo iguais os estados final e inicial e a evolução em um tempo imaginário

$$\tau = it = \hbar\beta. \quad (\text{B.6})$$

A matriz dos elementos do operador de evolução temporal (B.5) não pode ser calculada exatamente entre tempos finitos. A idéia desenvolvida por Feynman foi então dividir o intervalo em tempos infinitesimais de forma que em cada intervalo a evolução possa ser calculada exatamente. Dividimos a evolução (B.5) em  $M$  intervalos

$$\mathcal{U}(\phi_f^*, t_f; \phi_i, t_i) = \lim_{M \rightarrow \infty} \langle \phi_f | \left( e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathcal{H}} \right)^M | \phi_i \rangle \quad (\text{B.7})$$

onde  $\epsilon = (t_f - t_i)/M$ . A expressão equivale a um produto entre exponenciais de evolução entre tempos infinitesimais  $\epsilon = t_N - t_{N-1}$

$$\mathcal{U} = \lim_{M \rightarrow \infty} \langle \phi_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot (t_f - t_{M-1})} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot (t_{M-1} - t_{M-2})} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot (t_1 - t_i)} | \phi_i \rangle \quad (\text{B.8})$$

Inserimos uma relação de fechamento (B.2) entre cada intervalo obtendo

$$\begin{aligned} \mathcal{U} = & \lim_{M \rightarrow \infty} \langle \phi_f | e^{-\frac{i}{\hbar} (t_f - t_{M-1}) \mathcal{H}} \frac{1}{\mathcal{N}} \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha, M-1}^* d\phi_{\alpha, M-1} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha, M-1}^* \phi_{\alpha, M-1}} | \phi_{\alpha, M-1} \rangle \langle \phi_{\alpha, M-1} | \times \\ & \times e^{-\frac{i}{\hbar} (t_{M-1} - t_{M-2}) \mathcal{H}} \frac{1}{\mathcal{N}} \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha, M-2}^* d\phi_{\alpha, M-2} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha, M-2}^* \phi_{\alpha, M-2}} | \phi_{\alpha, M-2} \rangle \langle \phi_{\alpha, M-2} | \dots \\ & \dots \times \frac{1}{\mathcal{N}} \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha, 1}^* d\phi_{\alpha, 1} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha, 1}^* \phi_{\alpha, 1}} | \phi_{\alpha, 1} \rangle \langle \phi_{\alpha, 1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} (t_1 - t_i)} | \phi_i \rangle \end{aligned}$$

ou como todos intervalos são iguais a  $\epsilon$  temos

$$\mathcal{U} = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{M-1} \prod_{\alpha} \frac{1}{\mathcal{N}} d\phi_{\alpha,j}^* d\phi_{\alpha,j} e^{-\sum_{j=1}^{M-1} \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,j}^* \phi_{\alpha,j}} \prod_{j=1}^M \langle \phi_j | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathcal{H}(b_{\alpha}^{\dagger}, b_{\alpha})} | \phi_{j-1} \rangle$$

Para uma hamiltonina na ordem normal fazemos uso de (B.3)

$$\begin{aligned} &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{M-1} \prod_{\alpha} \frac{1}{\mathcal{N}} d\phi_{\alpha,j}^* d\phi_{\alpha,j} e^{-\sum_{j=1}^{M-1} \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,j}^* \phi_{\alpha,j}} \prod_{j=1}^M e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathcal{H}(\phi_{\alpha,j}^*, \phi_{\alpha,j-1})} e^{\sum_{\alpha} \phi_{\alpha,j}^* \phi_{\alpha,j-1}} \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{M-1} \prod_{\alpha} \frac{1}{\mathcal{N}} d\phi_{\alpha,j}^* d\phi_{\alpha,j} e^{-\sum_{j=1}^{M-1} \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,j}^* \phi_{\alpha,j}} e^{\sum_{j=1}^M (\sum_{\alpha} \phi_{\alpha,j}^* \phi_{\alpha,j-1} - \frac{i\epsilon}{\hbar} \mathcal{H}(\phi_{\alpha,j}^*, \phi_{\alpha,j-1}))}. \end{aligned}$$

Separando o último termo da segunda soma o expoente pode ser escrito como

$$\begin{aligned} &\sum_{\alpha} \phi_{\alpha,M}^* \phi_{\alpha,M-1} - \frac{i\epsilon}{\hbar} \mathcal{H}(\phi_{\alpha,M}^*, \phi_{\alpha,M-1}) + \\ &+ i\epsilon \sum_{j=1}^{M-1} \left[ i \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,j}^* \left( \frac{\phi_{\alpha,j} - \phi_{\alpha,j-1}}{\epsilon} \right) - \frac{1}{\hbar} \mathcal{H}(\phi_{\alpha,j}^*, \phi_{\alpha,j-1}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Fazendo  $\epsilon \rightarrow 0$  e introduzindo a notação

$$\left( \frac{\phi_{\alpha,j} - \phi_{\alpha,j-1}}{\epsilon} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\alpha}(t) \quad (\text{B.10})$$

$$\mathcal{H}(\phi_{\alpha,j}^*, \phi_{\alpha,j-1}) = \mathcal{H}(\phi_{\alpha}^*(t), \phi_{\alpha}(t)) \quad (\text{B.11})$$

encontramos para o expoente

$$\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^*(t_f) \phi_{\alpha}(t_f) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[ \sum_{\alpha} i\hbar \phi_{\alpha}^*(t) \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\alpha}(t) - \mathcal{H}(\phi_{\alpha}^*(t), \phi_{\alpha}(t)) \right]. \quad (\text{B.12})$$

Finalmente a expressão geral para os elementos de matriz do operador de evolução temporal é

$$\mathcal{U} = \int \mathcal{D}(\phi_{\alpha}^*(t)) \mathcal{D}(\phi_{\alpha}(t)) e^{\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^*(t_f) \phi_{\alpha}(t_f) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt [\sum_{\alpha} i\hbar \phi_{\alpha}^*(t) \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\alpha}(t) - \mathcal{H}(\phi_{\alpha}^*(t), \phi_{\alpha}(t))]} \quad (\text{B.13})$$

onde

$$\int \mathcal{D}(\phi_{\alpha}^*(t)) \mathcal{D}(\phi_{\alpha}(t)) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{M-1} \prod_{\alpha} \frac{1}{\mathcal{N}} d\phi_{\alpha,j}^* d\phi_{\alpha,j}. \quad (\text{B.14})$$

### B.3 Função de partição

Utilizando os resultados anteriores derivamos facilmente a relação para a função de partição entre os estados coerentes. Para calcular a função de partição nosso primeiro passo é substituir a evolução temporal real (B.13) por uma evolução em um tempo imaginário como em (B.6). Com esta troca escrevemos  $\mathcal{U}$  como:

$$\mathcal{U} = \int \mathcal{D}(\phi_\alpha^*(\tau)) \mathcal{D}(\phi_\alpha(\tau)) e^{\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha - \frac{1}{\hbar} \int d\tau [\sum_\alpha \hbar \phi_\alpha^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_\alpha(\tau) + \mathcal{H}(\phi_\alpha^*(\tau), \phi_\alpha(\tau))]} \quad (\text{B.15})$$

que representa a evolução do operador  $e^{-\beta \mathcal{H}}$  onde  $\beta$  foi dividido em intervalos infinitesimais. Como

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta \mathcal{H}}) \quad (\text{B.16})$$

devemos calcular o traço deste operador. A expressão (B.4) para o traço entre os estados coerentes é semelhante a evolução temporal calculada entre os mesmos estados final e inicial. Na forma de integral isto é feito pela imposição de condições de contorno periódicas nos limites de integração<sup>2</sup>. Há equivalência entre as integrais e o primeiro termo do expoente se cancela com o expoente do traço fornecendo:

$$Z = \int \mathcal{D}(\phi_\alpha^*(\tau)) \mathcal{D}(\phi_\alpha(\tau)) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau [\sum_\alpha \hbar \phi_\alpha^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_\alpha(\tau) + \mathcal{H}(\phi_\alpha^*(\tau), \phi_\alpha(\tau))]} \quad (\text{B.17})$$

Finalmente  $\tau$  corre de 0 a  $\beta \hbar$  e encontramos a expressão final para a função de partição entre os estados coerentes do sistema

$$Z = \int \mathcal{D}(\phi_\alpha^*(\tau)) \mathcal{D}(\phi_\alpha(\tau)) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} d\tau [\sum_\alpha \hbar \phi_\alpha^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_\alpha(\tau) + \mathcal{H}(\phi_\alpha^*(\tau), \phi_\alpha(\tau))]} \quad (\text{B.18})$$

Observamos que esta expressão transforma o problema de cálculo da função de partição quântica, que usualmente é um complicado problema de autovalor, em uma também complicada integral. Existem, entretanto, diversas técnicas para resolver esse tipo de integral e além disso uma observação do problema em uma representação diferente sempre pode fornecer uma nova aproximação ou com mais sorte um novo método exato.

---

<sup>2</sup>Para férmions as condições de contorno e outros passos da demonstração feita aqui são diferentes. Não estamos, no entanto, interessados no caso fermiônico.

# Apêndice C

## Função de partição na representação de interação

### C.1 Representação de interação

Em muitas ocasiões encontramos hamiltonianas que podem ser expressas como a soma de dois termos

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I \quad (\text{C.1})$$

e sabemos resolver  $\mathcal{H}_0$  exatamente. Para tratar o problema com o novo “termo de interação” é útil usar uma nova representação tal que

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\psi_S(t)\rangle \quad (\text{C.2})$$

onde  $|\psi_S(t)\rangle$  é o estado na representação de Schrödinger e  $|\psi_I(t)\rangle$  é o estado na *representação de interação*. Nesta representação derivamos a equação do movimento como se segue:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle &= -\mathcal{H}_0 e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\psi_S(t)\rangle + e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_S(t)\rangle \right) \\ &= e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} (-\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}) |\psi_S(t)\rangle \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle &= \mathcal{H}_I(t) |\psi_I(t)\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Em uma linguagem de operadores podemos escrever a equação anterior para o operador de evolução temporal do estado de interação  $|\psi_I(t)\rangle = U(t) |\psi_I(0)\rangle$  como:

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = \mathcal{H}_I(t) U(t). \quad (\text{C.4})$$

Essa equação é importante para a determinação da função de partição como fazemos a seguir. Para encontrar mais detalhes sobre a representação de interação nos referimos à [21] e [22].

## C.2 Função de partição na representação de interação

A função de partição canônica é definida por

$$Z = Tr(e^{-\beta\mathcal{H}}) \quad (\text{C.5})$$

e se tratamos um sistema em que o número de partículas não é fixo usamos a hamiltoniana em um formato grande canônico  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} - \mu\mathbf{N}_p$ , onde  $\mathbf{N}_p$  é o operador que fornece o número total de partículas no sistema. Na representação de interação procuramos uma forma para o operador  $e^{-\beta\mathcal{H}}$  do tipo

$$e^{-\beta\mathcal{H}} = e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I)} = e^{-\beta\mathcal{H}_0}U(\beta\hbar). \quad (\text{C.6})$$

O operador  $e^{-\beta\mathcal{H}}$  é equivalente ao operador de evolução temporal que tratamos na seção anterior desde que utilizemos um “tempo imaginário”

$$\beta\hbar = \Delta\tau = it \quad (\text{C.7})$$

e por isso deve obedecer a uma equação da forma de (C.4) onde efetuamos esta troca. Podemos derivar novamente (C.4) com o tempo imaginário encontrando a equação obedecida por  $U(\tau)$

$$\frac{dU}{d\tau} = -\frac{1}{\hbar}\mathcal{H}_I(\tau)U(\tau). \quad (\text{C.8})$$

Para encontrar  $U(\tau)$  temos então que resolver a equação integral

$$U(\tau_f) - U(\tau_0) = -\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau_f} \mathcal{H}_I(\tau)U(\tau)d\tau \quad (\text{C.9})$$

e as condições de contorno requerem  $\tau_0 = 0$ ,  $\tau_f = \beta\hbar$  e  $U(0) = 1$ , fornecendo

$$U(\beta\hbar) = 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{H}_I(\tau)U(\tau)d\tau. \quad (\text{C.10})$$

De acordo com o procedimento geral resolvemos a equação integral iterativamente

$$\begin{aligned} U(\beta\hbar) = & 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{H}_I(\tau_1)d\tau_1 + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{H}_I(\tau_1)d\tau_1 \int_0^{\tau_1} \mathcal{H}_I(\tau_2)d\tau_2 + \\ & - \frac{1}{\hbar^3} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{H}_I(\tau_1)d\tau_1 \int_0^{\tau_1} \mathcal{H}_I(\tau_2)d\tau_2 \int_0^{\tau_2} \mathcal{H}_I(\tau_3)d\tau_3 + \dots \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

e em geral o n-ésimo termo pode ser escrito como

$$U^{(n)} = \left(\frac{-1}{\hbar}\right)^n \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n [\mathcal{H}_I(\tau_1)\mathcal{H}_I(\tau_2)\dots\mathcal{H}_I(\tau_n)]. \quad (\text{C.12})$$

Observe que se as hamiltonianas em tempos diferentes (que são operadores) comutam (como funções comuns), podemos permutar as integrações de  $n!$  maneiras de forma que é possível escrever

$$U^{(n)} = \frac{1}{n!} \left( \frac{-1}{\hbar} \right)^n \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_2 \dots \int_0^{\beta\hbar} d\tau_n [\mathcal{H}_I(\tau_1)\mathcal{H}_I(\tau_2)\dots\mathcal{H}_I(\tau_n)] \quad (\text{C.13})$$

onde fazemos todas integrações até  $\beta\hbar$  o que é compensado pelo fator  $1/n!$ . Entretanto em geral essas hamiltonianas não comutam. Neste caso o ordenamento temporal é importante e só é permitido escrever uma expressão como (C.13) com o auxílio do operador de ordenamento cronológico de Wick<sup>1</sup>. Isto é:

$$U^{(n)} = \frac{1}{n!} \left( \frac{-1}{\hbar} \right)^n \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_2 \dots \int_0^{\beta\hbar} d\tau_n T_\tau [\mathcal{H}_I(\tau_1)\mathcal{H}_I(\tau_2)\dots\mathcal{H}_I(\tau_n)]. \quad (\text{C.14})$$

Escrevemos a solução formalmente como

$$U(\beta\hbar) = \sum_n U^{(n)}$$

$$U(\beta\hbar) = T_\tau \left\{ \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{H}_I(\tau) d\tau \right] \right\} \quad (\text{C.15})$$

onde utilizamos que a série de termo geral (C.14) corresponde exatamente a função exponencial. Finalmente, com esta solução e as relações (C.5) e (C.6), podemos escrever a função de partição na representação de interação:

$$Z = Tr \left( e^{-\beta\mathcal{H}_0} T_\tau \left\{ \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{H}_I(\tau) d\tau \right] \right\} \right). \quad (\text{C.16})$$

---

<sup>1</sup>Veja [21] ou [20].

# Apêndice D

## Parâmetro de ordem complexo

### D.1 Parâmetro de ordem em um sistema isotrópico

O estudo de diversos problemas de estado sólido indica que a simetria dos modelos é responsável por características importantes dos sistemas que descrevem. Por exemplo, um sistema de Ising bidimensional (simetria discreta) possui transição de fase a temperatura finita, enquanto que um sistema descrito pelo modelo de Heisenberg (simetria contínua) não apresenta ordem a temperaturas finitas em duas dimensões não possuindo transição. No primeiro caso o parâmetro de ordem é um escalar mas no segundo o parâmetro de ordem deve ser um vetor (em geral complexo). O caráter vetorial do parâmetro de ordem normalmente reflete a simetria contínua de um sistema isotrópico e por isso, como a hamiltoniana de Heisenberg é invariante sob rotação dos spins, o parâmetro de ordem também deve ser invariante sob uma rotação do tipo  $\phi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\varphi}\phi(\mathbf{r})$ . O objetivo deste apêndice não é detalhar a definição de parâmetros de ordem para sistemas isotrópicos mas observar que a densidade do superfluido e a compressibilidade estão ligadas a “rigidez” de rotação deste parâmetro, ou seja, a mudança da fase  $\varphi$ .

Começamos a discussão definindo o módulo de helicidade [10] e como ligamos esta definição com a densidade do superfluido.

### D.2 Módulo de helicidade

Para estudar a variação da fase do parâmetro de ordem complexo consideramos um sistema finito (na região espacial  $\Omega$ ) onde as condições de contorno podem requerer uma rotação do parâmetro de ordem. Para condições de contorno que estabelecem fases iguais em duas paredes, por exemplo  $(\varphi^+, \varphi^+)$  ou  $(\varphi^-, \varphi^-)$ , as energias livres totais são equivalentes

$$F^{++}(\Omega) = F^{--}(\Omega). \quad (\text{D.1})$$

Mas se as condições impõem fases ( $\varphi^+$ ,  $\varphi^-$ ) uma “rotação” do parâmetro de ordem é de alguma forma induzida. Consideramos esta configuração diferente, ou seja, há uma diferença na energia livre

$$\Delta F(\Omega) = F^{+-}(\Omega) - F^{++}(\Omega). \quad (\text{D.2})$$

O modulo de helicidade  $\mathcal{M}$  é definido tal que

$$\Delta F(\Omega) = \frac{1}{2} \mathcal{M} \langle \langle \nabla \varphi \rangle \rangle^2 V(\Omega) \quad (\text{D.3})$$

onde argumentamos que a energia livre é proporcional ao volume da região e ao quadrado da média da variação da fase. De fato é fácil entender que a variação da energia livre deve ser de alguma forma proporcional a variação da fase. A dependência do quadrado é justificada pois  $\Delta F$  deve ser uma função par de  $\nabla \varphi$ . Para uma definição detalhada nos referimos à [10].

Observamos que a helicidade é uma medida da “rigidez” de rotação espacial do parâmetro de ordem complexo. Para um superfluido mostramos abaixo que sua densidade está ligada com a helicidade e por isso também é uma medida dessa rigidez.

### D.3 Densidade superfluida

Para um superfluido, se  $\phi_0(\mathbf{r})$  é a função de onda normalizada de uma partícula, podemos efetuar uma mudança de fase

$$\phi_0(\mathbf{r}) \rightarrow \phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \phi_0(\mathbf{r}) \quad (\text{D.4})$$

e temos

$$\nabla \varphi = \mathbf{q}. \quad (\text{D.5})$$

Mas observe que a velocidade de grupo é

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \langle \phi | p/m | \phi \rangle = -\frac{i\hbar}{m} \int \phi^*(\mathbf{r}) \nabla \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ \mathbf{v} &= -\frac{i\hbar}{m} \int \phi^*(\mathbf{r}) (i\mathbf{q}\phi(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \nabla \phi_0(\mathbf{r})) d\mathbf{r} \\ \mathbf{v} &= \frac{\hbar\mathbf{q}}{m} + \int \phi_0^*(\mathbf{r}) \nabla \phi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ \mathbf{v} &= \frac{\hbar\mathbf{q}}{m} + \mathbf{v}_0 \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

e portanto, se a velocidade associada a  $\phi_0$  ( $\mathbf{v}_0$ ) é nula, a fase carrega toda velocidade da partícula

$$\mathbf{v}_s = \frac{\hbar\mathbf{q}}{m} = \frac{\hbar\nabla\varphi}{m}. \quad (\text{D.7})$$

Finalmente a energia de um superfluido é escrita como uma energia cinética

$$\Delta F \approx \frac{1}{2}M \cdot (v_s)^2 = \frac{1}{2}\rho V \cdot (v_s)^2 = \frac{1}{2}\rho V \cdot \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 (\nabla\varphi)^2 \quad (\text{D.8})$$

onde definimos a densidade como  $\rho = M/V$ . Por comparação com (D.3) encontramos:

$$\rho = (m/\hbar)^2 \mathcal{M} \quad (\text{D.9})$$

que indica que a densidade do superfluido é também uma medida da “rigidez” do parâmetro de ordem complexo em relação a um deslocamento de fase.

No sistema estudado neste trabalho é mais útil definir a densidade como  $\rho_s = N_p/V$  onde  $N_p$  é o número total de partículas no sistema. Neste caso temos

$$\Delta F \approx \frac{1}{2}M \cdot (v_s)^2 = \frac{1}{2}\rho_s m V \cdot (v_s)^2 = \frac{1}{2}\rho_s V \cdot \left(\frac{\hbar^2}{m}\right) (\nabla\varphi)^2, \quad (\text{D.10})$$

ou seja, a densidade de energia pode ser escrita como

$$\Delta f \approx \frac{1}{2m}\rho_s \hbar^2 (\nabla\varphi)^2, \quad (\text{D.11})$$

resultado que usaremos neste trabalho.

## D.4 Compressibilidade e deslocamento de fase na direção “temporal”

Vamos utilizar uma abordagem similar a anterior para mostrar que a variação temporal da fase do parâmetro de ordem complexo também está ligada a observáveis físicos. De acordo com o resultado do apêndice B, a função de partição pode ser escrita como

$$Z = \int \mathcal{D}(\phi_\alpha^*(\tau)) \mathcal{D}(\phi_\alpha(\tau)) e^{-\frac{S}{\hbar}} \quad (\text{D.12})$$

onde a ação efetiva  $S$  é dada por

$$S = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[ \sum_\alpha \hbar \phi_\alpha^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_\alpha(\tau) + \mathcal{H}(\phi_\alpha^*(\tau), \phi_\alpha(\tau)) \right]. \quad (\text{D.13})$$

Observamos que para que a ação seja invariante sob uma mudança de fase no parâmetro de ordem complexo do tipo

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi e^{i\varphi} \quad (\text{D.14})$$

devemos efetuar um deslocamento no potencial químico

$$\mu \rightarrow \mu' = \mu + i\hbar \left( \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} \right) \quad (\text{D.15})$$

pois

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{ef} &= \sum_i \hbar \phi_i^* \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_i + \mathcal{H}(\phi_i^*, \phi_i) \\ \rightarrow \mathcal{H}'_{ef} &= \sum_i \hbar \phi_i'^* \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_i' + \mathcal{H}(\phi_i'^*, \phi_i').\end{aligned}$$

O primeiro termo se reduz a

$$\begin{aligned}\sum_i \hbar \phi_i'^* \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_i' &= \sum_i \hbar \phi_i^* e^{-i\varphi} \frac{\partial}{\partial \tau} (\phi_i e^{i\varphi}) \\ &= \sum_i \hbar \phi_i^* e^{-i\varphi} \left( \phi_i \frac{\partial}{\partial \tau} e^{i\varphi} + e^{i\varphi} \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_i \right) \\ &= \sum_i \hbar \phi_i^* e^{-i\varphi} e^{i\varphi} \left( i \left( \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} \right) \phi_i + \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_i \right) \\ &= \sum_i \hbar \phi_i^* \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_i + i\hbar \left( \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} \right) \sum_i \phi_i^* \phi_i\end{aligned}\tag{D.16}$$

e por isso o potencial químico na hamiltoniana deve sofrer a variação (D.15) para que a ação seja invariante. Isso mostra que a imposição de condições de contorno que levam a “rotação” do parâmetro de ordem (mudança da fase  $\varphi$ ) entre  $\tau = 0$  e  $\tau = \beta\hbar$  é equivalente a um deslocamento do potencial químico da forma  $\mu \rightarrow \mu' = \mu - i\hbar\Delta\varphi/\Delta\tau$ . Isto é,

$$\begin{aligned}\mu &\rightarrow \mu' = \mu - i\hbar\dot{\varphi} \\ \delta\mu &= -i\hbar\dot{\varphi}.\end{aligned}\tag{D.17}$$

Este resultado permite o cálculo da variação da densidade de energia livre em função da mudança de fase do parâmetro de ordem complexo:

$$\delta f = \underbrace{\frac{\partial f}{\partial \mu}}_{-\rho} \delta\mu + \frac{1}{2} \underbrace{\frac{\partial^2 f}{\partial \mu^2}}_{-\kappa} \delta\mu^2 + \dots\tag{D.18}$$

e de acordo com (D.17) encontramos

$$\delta f = i\hbar\rho\dot{\varphi} + \frac{1}{2}\kappa(\hbar\dot{\varphi})^2 + \dots\tag{D.19}$$

Observamos que o primeiro termo é imaginário e portanto a variação real da energia livre é proporcional a  $\dot{\varphi}^2$  com a “rigidez” temporal dada pela compressibilidade  $\kappa$ .

Utilizando este resultado e o resultado da seção anterior observamos que a densidade de energia livre pode ser expandida em termos da variação da fase do parâmetro de ordem complexo como:

$$\delta f = i\hbar\rho\dot{\varphi} + \frac{1}{2}\kappa(\hbar\dot{\varphi})^2 + \frac{1}{2m}\rho_s\hbar^2(\nabla\varphi)^2 + \dots\tag{D.20}$$

relação utilizada no capítulo 2.

# Apêndice E

## Solução do modelo de Hubbard para bósons no limite de dimensão infinita

Apresentamos neste apêndice a solução do modelo de Hubbard no limite de dimensão infinita. A partir de (5.12), o limite de dimensão infinita sugere fazer  $J_{ij} = J/N$ , e a parte de interação da hamiltoniana é desacoplada

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{J}{N} \left( \sum_i b_i^\dagger(\tau) \right) \left( \sum_i b_i(\tau) \right). \quad (\text{E.1})$$

Com isso apenas um campo complexo é necessário na transformação de Hubbard-Stratanovich tal que

$$S(\phi) = \frac{N}{J} \sum_i \int \phi_i^*(\tau) \phi_j(\tau) d\tau - \sum_i \ln \left\langle T_\tau \exp \left[ \int (\phi_i(\tau) b_i^\dagger(\tau) + \phi_i^*(\tau) b_i(\tau)) d\tau \right] \right\rangle_0. \quad (\text{E.2})$$

O segundo termo pode ser calculado como uma expansão de cumulantes de maneira que para um campo independente do tempo  $\phi(\tau) = \phi$  e  $T \rightarrow 0$  encontramos para a ação uma expansão do tipo Landau.

Nosso objetivo é expandir o segundo termo da ação

$$y = \ln \left\langle T_\tau \exp \left[ \int (\phi_i(\tau) b_i^\dagger(\tau) + \phi_i^*(\tau) b_i(\tau)) d\tau \right] \right\rangle_0. \quad (\text{E.3})$$

Para isso escrevemos formalmente a exponencial ordenada temporalmente como

$$\begin{aligned} & \left\langle T_\tau \exp \left[ \int d\tau V(b_i^\dagger(\tau), b_i(\tau)) \right] \right\rangle_0 = \\ & = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \dots d\tau_n \langle T_\tau V(b_i^\dagger(\tau_1), b_i(\tau_1)) \dots V(b_i^\dagger(\tau_n), b_i(\tau_n)) \rangle \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

com

$$V(b_i^\dagger(\tau_l), b_i(\tau_l)) = \phi_i(\tau_l)b_i^\dagger(\tau_l) + \phi_i^*(\tau_l)b_i(\tau_l). \quad (\text{E.5})$$

Isto é, em (E.3) temos

$$y = \ln \left[ 1 + \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \langle V(\tau_1) \rangle + \frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \langle T_\tau V(\tau_1)V(\tau_2) \rangle + \dots \right] \quad (\text{E.6})$$

onde simplificamos a notação de  $V(b_i^\dagger(\tau), b_i(\tau))$ . As médias são feitas nos autoestados de  $\mathcal{H}_0$ . Não é difícil notar então que os termos ímpares se anulam por envolver um número ímpar de operadores de criação e aniquilação. Por exemplo, a média do termo de ordem 1 pode ser escrita como

$$\langle V(\tau) \rangle = \frac{\sum \langle N | e^{-\beta\mathcal{H}_0} (\phi_i(\tau)b_i^\dagger(\tau) + \phi_i^*(\tau)b_i(\tau)) | N \rangle}{\sum \langle N | e^{-\beta\mathcal{H}_0} | N \rangle} \quad (\text{E.7})$$

e o número ímpar de operadores fornece sempre no numerador um produto entre estados ortogonais, portanto  $\langle V(\tau) \rangle = 0$ . O mesmo argumento se aplica aos demais termos de ordem ímpar.

A seguir calculamos o termo de segunda ordem

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 d\tau_2 \langle T_\tau V(\tau_1)V(\tau_2) \rangle = \\ & = \frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 d\tau_2 \langle T_\tau [\phi_i(\tau_1)b_i^\dagger(\tau_1) + \phi_i^*(\tau_1)b_i(\tau_1)] [\phi_i(\tau_2)b_i^\dagger(\tau_2) + \phi_i^*(\tau_2)b_i(\tau_2)] \rangle \\ & = \frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 d\tau_2 [\langle T_\tau b_i^\dagger(\tau_1)b_i(\tau_2) \rangle + \langle T_\tau b_i(\tau_1)b_i^\dagger(\tau_2) \rangle] |\phi|^2. \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

Na última linha tomamos o campo independente do tempo e mantivemos apenas as médias não nulas. Este termo é então proporcional a  $|\phi|^2$  e pode ser calculado a partir das funções de Green causais

$$\langle T_\tau b_i^\dagger(\tau_1)b_i(\tau_2) \rangle = \langle \langle b_i^\dagger(\tau_1)b_i(\tau_2) \rangle \rangle^{(c)} \quad (\text{E.9})$$

$$\langle T_\tau b_i(\tau_1)b_i^\dagger(\tau_2) \rangle = \langle \langle b_i(\tau_1)b_i^\dagger(\tau_2) \rangle \rangle^{(c)} \quad (\text{E.10})$$

definidas no apêndice A. Observamos também, que trocando  $\tau_1$  por  $\tau_2$  (variáveis mudas na integração), as duas funções são equivalentes e por isso basta calcular uma delas. Escrevemos, por essa razão, o termo de segunda ordem como

$$X_2 |\phi|^2 = \left( \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 d\tau_2 \langle \langle b_i(\tau_1)b_i^\dagger(\tau_2) \rangle \rangle \right) |\phi|^2. \quad (\text{E.11})$$

E a expansão, separando os termos de mesma ordem em  $|\phi|$ ,

$$\ln [1 + X_2 |\phi|^2 + X_4 |\phi|^4 + \dots] = X_2 |\phi|^2 + \left( X_4 - \frac{1}{2} X_2^2 \right) |\phi|^4 + \mathcal{O}(|\phi|^6). \quad (\text{E.12})$$

Calculando a função de Green (E.9) em unidades com  $\hbar = 1$  temos

$$\begin{aligned} \langle \langle b_i^\dagger(\tau_1) b_i(\tau_2) \rangle \rangle^{(c)} &= \\ &= \frac{1}{Z_0} \sum_{n_j} \left[ \theta(\tau_1 - \tau_2) \langle n_j | e^{-\beta \mathcal{H}_0} b_i^\dagger(\tau_1) b_i(\tau_2) | n_j \rangle + \theta(\tau_2 - \tau_1) \langle n_j | e^{-\beta \mathcal{H}_0} b_i(\tau_2) b_i^\dagger(\tau_1) | n_j \rangle \right] \\ &= \frac{1}{Z_0} \sum_{n_j} \left[ \theta(\tau_1 - \tau_2) (n_j + 1) e^{-\beta E_{n_j}} e^{-\Omega_+(\tau_1 - \tau_2)} + \theta(\tau_2 - \tau_1) n_j e^{-\beta E_{n_j}} e^{-\Omega_-(\tau_2 - \tau_1)} \right] \end{aligned}$$

onde  $\Omega_+ = E_{n_j+1} - E_{n_j}$  e  $\Omega_- = E_{n_j-1} - E_{n_j}$ . Para calcular  $X_2$  devemos integrar esta equação obtendo

$$\begin{aligned} X_2 &= \frac{1}{\sum_{n_j} e^{-\beta E_{n_j}}} \left\{ \sum_{n_j} \frac{n_j + 1}{\Omega_+} e^{-\beta E_{n_j}} \left[ \beta + \frac{e^{-\beta \Omega_+} - 1}{\Omega_+} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{n_j} \frac{n_j}{\Omega_-} e^{-\beta E_{n_j}} \left[ \beta + \frac{e^{-\beta \Omega_-} - 1}{\Omega_-} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

No limite  $T \rightarrow 0$  apenas os termos com a ocupação  $m_i$  que minimiza a energia (estado fundamental) são relevantes

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow \infty} X_2 &= \frac{1}{e^{-\beta E_{m_i}}} \left\{ \frac{m_i + 1}{\Omega_+^0} e^{-\beta E_{m_i}} \left[ \beta + \frac{e^{-\beta \Omega_+^0} - 1}{\Omega_+^0} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{m_i}{\Omega_-^0} e^{-\beta E_{m_i}} \left[ \beta + \frac{e^{-\beta \Omega_-^0} - 1}{\Omega_-^0} \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{E.14})$$

e encontramos

$$\begin{aligned} \rightarrow \frac{1}{e^{-\beta E_{m_i}}} \left\{ \frac{m_i + 1}{\Omega_+^0} \left[ \beta e^{-\beta E_{m_i}} + \frac{e^{-\beta E_{m_i+1}} - e^{-\beta E_{m_i}}}{\Omega_+^0} \right] + \right. \\ \left. + \frac{m_i}{\Omega_-^0} \left[ \beta e^{-\beta E_{m_i}} + \frac{e^{-\beta E_{m_i-1}} - e^{-\beta E_{m_i}}}{\Omega_-^0} \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

onde observamos facilmente que quando  $\beta \rightarrow \infty$  os termos relevantes são apenas

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} X_2 = \beta \left( \frac{m_i + 1}{\Omega_+^0} + \frac{m_i}{\Omega_-^0} \right). \quad (\text{E.16})$$

Usamos ainda que

$$\Omega_+ = E_{n_j+1} - E_{n_j} = U m_i - \mu, \quad (\text{E.17})$$

$$\Omega_- = E_{n_j-1} - E_{n_j} = \mu - U(m_i - 1) \quad (\text{E.18})$$

o que permite escrever (E.12) em  $T \rightarrow 0$  como

$$\begin{aligned} \ln [1 + X_2 |\phi|^2 + X_4 |\phi|^4 + \dots] &= \\ &= \beta \left( \frac{m_i + 1}{U m_i - \mu} + \frac{m_i}{\mu - U(m_i - 1)} \right) |\phi|^2 + \mathcal{O}(|\phi|^4). \end{aligned} \quad (\text{E.19})$$

Finalmente a substituição direta deste resultado em (E.2) com os campos  $\phi$  independentes do tempo fornecem a expansão

$$S_0(\phi) = N\beta\hbar \left\{ \left[ \frac{N}{J} - \frac{1}{N} \sum_i \left( \frac{m_i + 1}{Um_i - \mu} + \frac{m_i}{\mu - U(m_i - 1)} \right) \right] |\phi|^2 + \dots \right\} \quad (\text{E.20})$$

que é uma expansão do tipo Landau em potências do novo parâmetro de ordem  $\phi$ . Encontramos então a fronteira entre as fases procurando os valores de  $J_{ij}/U$  e  $\mu/U$  que anulam o termo de segunda ordem da expansão para um determinado valor de  $m_i$  dado pela solução (1.10). O resultado fornece um diagrama de fases como o da Figura 1.1.

# Apêndice F

## Dedução da susceptibilidade

Queremos encontrar a susceptibilidade em relação a um campo  $\psi$ . Vamos escrever o termo com o campo externo de uma maneira bem geral:

$$\mathcal{H}^{ext} = - \int (\psi^*(x, t)b(x) + \psi(x, t)b^\dagger(x))d^3x \quad (\text{F.1})$$

onde

$$b(x) = \sum_i \delta(x - x_i)b_i \quad (\text{F.2})$$

e da mesma forma para  $b^\dagger$ . Temos que calcular o valor esperado deste operador para ligá-lo com o campo  $\psi$ , assim

$$\langle b(x, t) \rangle = \langle \Psi(t) | b(x) | \Psi(t) \rangle. \quad (\text{F.3})$$

Como a hamiltoniana  $\mathcal{H}$  é a soma  $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{local} + \mathcal{H}^{ext}$  podemos escrever

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\mathcal{H}^{local}t}U_{ext}(t)|\Psi\rangle \quad (\text{F.4})$$

e o valor esperado é

$$\begin{aligned} \langle b(x, t) \rangle &= \langle \Psi | U_{ext}^\dagger(t) e^{i\mathcal{H}^{local}t} b(x) e^{-i\mathcal{H}^{local}t} U_{ext}(t) | \Psi \rangle \\ \langle b(x, t) \rangle &= \langle \Psi | U_{ext}^\dagger(t) b(x, t) U_{ext}(t) | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (\text{F.5})$$

Substituindo (F.4) na equação de evolução temporal

$$i \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = \mathcal{H}|\Psi(t)\rangle$$

encontramos a equação para  $U_{ext}(t)$

$$i \frac{dU_{ext}(t)}{dt} = \mathcal{H}^{ext}U_{ext}(t). \quad (\text{F.6})$$

Equivalentemente a equação integral obedecida por  $U_{ext}(t)$  é:

$$U_{ext}(t) = 1 - i \int_{-\infty}^t \mathcal{H}^{ext}(t') U_{ext}(t') dt'. \quad (\text{F.7})$$

Note que  $U_{ext} \rightarrow 1$  se  $\mathcal{H}^{ext} \rightarrow 0$  o que é consistente com as condições da equação diferencial. Resolvemos a equação integral iterativamente:

$$U_{ext} = 1 - i \int_{-\infty}^t \mathcal{H}^{ext}(t') \left( 1 - i \int_{-\infty}^{t'} \mathcal{H}^{ext}(t'') (1 - \dots) \right) dt' \quad (\text{F.8})$$

e tomando a solução em primeira ordem temos:

$$U_{ext} = 1 - i \int_{-\infty}^t \mathcal{H}^{ext}(t') dt'. \quad (\text{F.9})$$

O valor esperado (F.5) fica então:

$$\langle b(x, t) \rangle = \langle \Psi | \left( 1 + i \int_{-\infty}^t \mathcal{H}^{ext}(t') dt' \right) b(x, t) \left( 1 - i \int_{-\infty}^t \mathcal{H}^{ext}(t') dt' \right) | \Psi \rangle \quad (\text{F.10})$$

e retendo apenas termos até primeira ordem em  $\mathcal{H}^{ext}$  obtemos:

$$\langle b(x, t) \rangle = \langle b(x, t) \rangle_{\mathcal{H}^{ext}=0} + i \int_{-\infty}^t dt' \langle [\mathcal{H}^{ext}(t'), b(x, t)] \rangle. \quad (\text{F.11})$$

É possível ainda calcular o comutador

$$[\mathcal{H}^{ext}(t'), b(x, t)] = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 x' [b(x, t), b^\dagger(x', t')] \psi(x', t'). \quad (\text{F.12})$$

Substituindo no valor esperado obtemos a equação geral que fornece a resposta de  $\langle b(x, t) \rangle$  ao campo externo  $\psi(x, t)$ :

$$\langle b(x, t) \rangle = \langle b(x, t) \rangle_{\mathcal{H}^{ext}=0} + i \int_{-\infty}^t dt' \int d^3 x' \langle [b(x, t), b^\dagger(x', t')] \rangle \psi(x', t'). \quad (\text{F.13})$$

Os casos estudados neste trabalho envolvem operadores localizados nos sítios da rede tais que

$$b^\dagger(x', t') = \sum_j \delta(x' - x_j) b_j^\dagger(t')$$

e escrevemos então

$$\langle b(x, t) \rangle = \langle b(x, t) \rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_j i \theta(t - t') \langle [b(x, t), b_j^\dagger(t')] \rangle \psi(x', t') \quad (\text{F.14})$$

onde trocamos o limite de integração superior incluindo a função degrau  $\theta(t - t')$ . A equação (F.14) fornece a variação do valor médio do operador  $b(x, t)$  em função do campo  $\psi(x, t)$  em primeira ordem. Para o estudo das propriedades estáticas, vamos tomar o campo externo como uma constante  $\psi(x', t') = \psi$  e podemos escrever, a partir de (F.14), a resposta linear

$$\langle b_i(t) \rangle = \langle b_i(t) \rangle_0 + \left( \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_j i\theta(t - t') \langle [b_i(t), b_j^\dagger(t')] \rangle \right) \psi. \quad (\text{F.15})$$

Em comparação com

$$\langle b_i(t) \rangle = \chi_0 \psi \quad (\text{F.16})$$

definimos a susceptibilidade  $\chi_0$ :

$$\chi_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_j \chi_{ij}(t - t') \quad (\text{F.17})$$

onde  $\chi_{ij}$  é

$$\chi_{ij}(t - t') = i\theta(t - t') \langle [b_i(t), b_j^\dagger(t')] \rangle. \quad (\text{F.18})$$

A função  $\chi_{ij}$  é a função de Green dos operadores  $b$  e  $b^\dagger$  calculada no limite atômico ( $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{local}$ ) e  $\chi_0$  é a susceptibilidade do modelo local sujeito ao campo externo  $\psi$  que permite o hopping entre os sítios da rede.

Para um tratamento mais geral lembramos que nas transições de fase quânticas não podemos desvincular as propriedades termodinâmicas da dinâmica do sistema. Entretanto, quando efetuamos cálculos de susceptibilidade a campo médio para as configurações de 1 e 2 sítios no capítulo 5, desprezamos esse fato, pois calculamos a *susceptibilidade estática*. Vamos então agora generalizar a dedução para permitir o cálculo das *susceptibilidades dinâmicas* para 1 e 2 sítios o que no esquema de Grupo de Renormalização será indispensável para a estimativa do expoente  $z$ .

Considerando que o campo externo tem uma oscilação  $\omega$  escrevemos:

$$\mathcal{H}^{ext} = - \int (\psi^*(x, t)b(x) + \psi(x, t)b^\dagger(x))d^3x \quad (\text{F.19})$$

onde

$$\psi(x, t) = \psi e^{i\omega t} \quad (\text{F.20})$$

$$\psi^*(x, t) = \psi^* e^{-i\omega t}. \quad (\text{F.21})$$

E agora utilizamos este campo no valor esperado da equação (F.14)

$$\langle b(x, t) \rangle = \langle b(x, t) \rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_j i\theta(t - t') \langle [b(x, t), b_j^\dagger(t')] \rangle \psi(x', t'), \quad (\text{F.22})$$

que com a substituição  $\psi(x, t) = \psi e^{i\omega t}$  pode ser escrita como

$$\langle b(x, t) \rangle = \langle b(x, t) \rangle_0 + \left( \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_j i\theta(t-t') \langle [b(x, t), b_j^\dagger(t')] \rangle e^{-i\omega(t-t')} \right) \psi(x, t). \quad (\text{F.23})$$

Desta equação podemos definir a susceptibilidade dinâmica

$$\chi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_j \chi_{ij}(t-t', \omega) \quad (\text{F.24})$$

onde a função de Green  $\chi_{ij}^{(d)}(t-t', \omega)$  é

$$\chi_{ij}(t-t', \omega) = i\theta(t-t') \langle [b_i(t), b_j^\dagger(t')] \rangle e^{-i\omega(t-t')}. \quad (\text{F.25})$$

A susceptibilidade dinâmica difere da susceptibilidade estática apenas pelo fator extra  $e^{-i\omega(t-t')}$  que fornece a dependência temporal do campo.

# Bibliografia

- [1] Chan M. H. W., Blum K. I., Murphy S. Q., Wong G. K. S. e Repay J. D., *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1950 (1988)
- [2] Jaeger H. M., Haviland D. B., Orr B. G. e Goldman A. M., *Phys. Rev. B* **40**, 182 (1989)
- [3] Randeria M., Duan J. M. e Shieh L. Y., *Phys. Rev. Lett.* **62**, 981 (1989)
- [4] Fisher M. P. A., Weichmann P.B., Grinstein G. e Fisher D. S., *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989)
- [5] Hatsugai Y. e Kohmoto M., *Exactly Solvable Model of Correlated Lattice Electrons in Any Dimensions*, The Institute for Solid State Physics, University of Tokyo (1991)
- [6] Hubbard J., *Proc. Roy. Soc. (London)* **A276**, 238 (1963)
- [7] Sachdev S., *Quantum Phase Transitions*, cap 10, Cambridge University Press (1999)
- [8] Sachdev S., *Proceedings of the 19th IUPAP International Conference on Statistical Physics*, Xiamen, China 1995, editado por Hao Bailin (World Scientific, Singapura) p. 289 (1996)
- [9] Continentino M. A., *Quantum Scaling in Many-Body Systems*, Ed. World Scientific (2001)
- [10] Fisher M., Barber M. N. e Jasnow D., *Phys. Rev. A* **8**, 1111 (1973)
- [11] Sheshadri K., Krishnamurthy H. R., Pandit R. e Ramakrishnan T. V., *Europhys. Lett.* **22**, 257-263 (1993)
- [12] Widom B., *J. Chem. Phys.* **43**, L291 e 3898 (1965)
- [13] Kadanoff L. P., *Physics* **2**, 263 (1966)
- [14] Wilson K. G., *Phys. Rev. Lett.* **28**, 548 (1972)

- [15] Indekeu J. O., Maritan A. e Stella A. L., *J. Phys. A: Math. Gen.* **15**, L291-L297 (1982)
- [16] Freericks J. K. e Monien H., *Phase Diagram of the Bose Hubbard Model*, Institute for Theoretical Physics, University of California (1993)
- [17] Scalettar R. T., Batrouni G. G. e Zimanyi G. T., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 3144 (1991)  
Niyaz P., Scalettar R. T., Fong C. Y. e Batrouni G. G., *Phys. Rev. B* **44**, 7143 (1991)  
Batrouni G. G. e Scalettar R. T., *Phys. Rev. B* **46**, 9051 (1992)
- [18] Krauth W. e Trivedi N., *Europhys. Lett.* **14**, 627 (1991)  
Krauth W., Trivedi N. e Ceperley D., *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2307 (1991)
- [19] Plascak J. A., *J. Phys. A: Math. Gen.* **84**, L697-L702 (1984)
- [20] Negele J. W. e Orland H., *Quantum Many Particle Systems*, Ed. Addison-Wesley Publishing Company (1988)
- [21] Fetter A. L. e Walecka J. D., *Quantum Theory of Many Particle Systems*, Ed. McGraw-Hill (1971)
- [22] Ziman, J. M.; *Elements of Advanced Quantum Theory*, Cambridge University Press (1969)
- [23] dos Santos R. R., *J. Phys. C: Solid State* **15**, 3141 (1981)
- [24] Taylor P. L., *A Quantum Approach to the Solid State*, Ed. Prentice-Hall (1970)
- [25] Doniach S. e Sondheimer E. H., *Green's Function for Solid State Physicists*, Frontiers in Physics, Ed. Benjamin/Cummings Publishing (1982)