

TESE DE MESTRADO

*GENERALIZAÇÃO DOS MÉTODOS
VARIACIONAL, PERTURBATIVO, DAS
FUNÇÕES DE GREEN E DE INTEGRAL DE
TRAJETÓRIA PARA A
MECÂNICA ESTATÍSTICA NÃO
EXTENSIVA*

ERVIN KAMINSKI LENZI

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

RIO DE JANEIRO, 1998

AGRADEÇO

Ao professor Constantino Tsallis pela orientação.

Ao amigo Renio dos Santos Mendes pela confiança e apoio dedicado,
que espero algum dia poder retribuir.

A Vanda pelo apoio e ajuda
que tem dedicado a mim durante este período.

A Lisa Borland, pela ajuda que tem dado a mim em muitas ocasiões.

A Myriam, Almerio e demais funcionários do
CBPF que me ajudaram durante este período.

Aos outros professores, colegas e amigos pela motivação e apoio.

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

Resumo

Nesta Tese apresentamos a extensão de alguns dos mais importantes métodos da física estatística tradicional generalizando-os ao contexto não extensivo com o uso da prescrição proposta por Tsallis, bem como a solução exata para a radiação de corpo negro dentro deste contexto. Dentre os métodos aqui estendidos à formulação proposta por Tsallis, podemos citar os métodos perturbativos, variacionais (ressaltando que a desigualdade de Bogoliubov é harmoniosamente generalizada, preservando sua forma perante o índice q), as técnicas de funções de Green e Integral de Trajetória. Além do mais, no contexto da solução para a radiação de corpo negro generalizada de maneira exata, como consequência obtemos a generalização de alguma das consagradas relações do caso tradicional, como por exemplo, a distribuição de Planck, Wien e outras. Assim, a Tese encontra-se subdividida em seis capítulos. O primeiro capítulo serve como um auxílio quanto à notação empregada no decorrer da Tese, bem como das relações básicas que usaremos no decorrer dos demais capítulos. No capítulo dois desenvolvemos os métodos perturbativos e variacionais no contexto clássico (para $0 < q < 1$ e $q > 1$) e quântico (com $q > 1$ apenas) e apresentamos também um exemplo como ilustração de tais métodos. O capítulo seguinte, o terceiro, prossegue o desenvolvimento do capítulo dois, só que de uma outra forma, usando representações integrais, o que torna possível estender o resultado quântico para o caso $0 < q < 1$. Dedicamos o quarto capítulo a um resultado importante, pois pela primeira vez conseguimos resolver um sistema de muitos corpos no contexto não extensivo proposto por Tsallis. Assim, muitas análises aproximadas existentes na literatura

podem ser convenientemente discutidas reforçando os resultados encontrados. No quinto capítulo, apresentamos as técnicas de integrais de trajetória generalizadas para o contexto não extensivo e, como exemplo, obtemos pela primeira vez a matriz densidade da partícula livre. No último capítulo, o sexto, apresentamos as técnicas de funções de Green generalizadas no contexto não extensivo, onde também propomos algumas possibilidades de verificação do formalismo q em sistemas com poucas partículas, através do cálculo de algumas das funções resposta do sistemas devido a perturbações externas (cálculo da função de espalhamento). Cada capítulo contém uma seção onde discutimos as idéias apresentadas. Por fim, dedicamos um espaço às conclusões e perspectivas.

Índice

1	INTRODUÇÃO À ESTATÍSTICA NÃO EXTENSIVA DE TSALLIS	4
2	MÉTODOS PERTURBATIVOS E VARIACIONAIS - PARTE I	10
2.1	Introdução	10
2.2	Método Perturbativo	11
2.3	Método Variacional	14
2.4	Discussão e Aplicação	15
3	MÉTODOS PERTURBATIVOS E VARIACIONAIS - PARTE II	20
3.1	Introdução	20
3.2	Representações Integrais na Estatística de Tsallis	21
3.3	Expansão Perturbativa	23
3.4	Desigualdade de Bogoliubov	27
3.5	Discussão	29
4	RADIAÇÃO DO CORPO NEGRO: SOLUÇÃO EXATA	30
4.1	Introdução	30

4.2	Análise da Radiação de Corpo Negro	31
4.3	Distribuição Espectral de Energia	34
4.4	Discussão	36
5	INTEGRAL DE TRAJETÓRIA E A EQUAÇÃO DE BLOCH	37
5.1	Introdução	37
5.2	Generalização contendo H_{eff}	38
5.3	Generalização via Representações Integrais	41
5.4	Extensão à Formulação de Campos	43
5.5	Discussão	45
6	MÉTODOS DA FUNÇÃO DE GREEN	47
6.1	Introdução	47
6.2	Teoria das Funções de Green	48
6.2.1	Função de Green de uma Partícula	48
6.2.2	$G_n^{(q)}(123\dots n; 1'2'3'\dots n'; \beta, \mu)$	53
6.2.3	Aproximação de Hartree	56
6.2.4	A Aproximação de Hartree-Fock	57
6.2.5	Função Resposta	59
6.3	Aplicação	61
6.4	Discussão	66
	DISCUSSÕES E PERSPECTIVAS	67

Lista de Figuras

1.1	<i>Acima mostramos, os contornos que nos conduzem as representações integrais conhecidas.</i>	7
2.1	<i>Nesta figura, temos o comportamento da energia livre com a temperatura para determinados valores de q, comparado o valor exato e aproximado obtido através da desigualdade de Bogoliubov apresentada aqui.</i>	18
4.1	<i>Nesta figura temos o comportamento da energia interna com $\frac{V^{1/3}kT}{\hbar c}$ para quatro valores típicos de q considerando $n = 3$.</i>	33
6.1	<i>Nesta figura mostramos o comportamento dos coeficientes da Eq.(6.59) em função de $\beta\omega_0$ para alguns valores representativos de q, $q = 1, 1.3$ e 1.6, considerando $\hbar = 1$.</i>	64
6.2	<i>Nesta figura mostramos o comportamento de $\frac{S^{(q)}(Q,0,\beta)}{S^{(1)}(Q,0,\beta)} \left[\frac{1}{V} \left(\frac{\beta}{2\pi M} \right)^{3/2} \right]^{1-q}$ como uma função de $\frac{\beta Q^2}{M}$ para $q = 0.1, 0.6, 0.8$ e 1.0.</i>	65

Introdução

Os efeitos não extensivos são muito comuns em vários campos da física, por exemplo, difusão anômala[1, 2, 3, 4], astrofísica com interações de longo alcance[5, 6, 7, 8, 9], alguns sistemas magnéticos[10, 11, 12], questões a respeito da tensão superficial[13, 14], turbulência em plasma [15] e outros. Assim, somos levados a propor que a termodinâmica e a mecânica estatística usuais necessitam de algumas extensões, de maneira a incorporar estes efeitos.

Neste sentido, uma ferramenta teórica baseada em uma entropia não extensiva (entropia de Tsallis)[16] tem sido sucessivamente aplicada em muitas situações, por exemplo, superdifusão anômala do tipo Lévy[17], difusão anômala do tipo correlacionado[18], turbulência de Euler [19], sistemas auto-gravitantes[20, 21, 22, 23], radiação cósmica de fundo[24], velocidades peculiares de galáxias espirais[25], teoria da resposta linear[26], interação elétron-fonon[27], sistemas ferrofluidos[28], sistemas dissipativos com dimensão baixa[29] e Hamiltonianos[30] sensitivos as condições iniciais, dentre outros. Este formalismo possibilitou resultados importantes quanto a estas questões, mostrando-se uma alternativa viável para o seu tratamento. Então, somos conduzidos por fortes indícios (ve-

ja também Ref.[31]) como questões relativas a sistemas não extensivos podem e devem ser abordados com um formalismo diferente do tradicional, a fim de obtermos as modificações necessárias, generalizando os resultados usuais. Ademais Lavenda e seus coautores[32] falam da necessidade da propriedade da **concauidade** para uma nova entropia para esta ser **correta**, pois com tal propriedade asseguramos a estabilidade termodinâmica do sistema. Neste sentido, Tsallis[33] e Mendes[34] mostraram que a entropia de Tsallis satisfaz este critério requerido à concauidade. Dentro deste contexto, então, é importante entendermos mais detalhadamente as propriedades de uma mecânica estatística baseada em uma entropia não extensiva, a de Tsallis.

Assim, nesta Tese, propomo-nos estudar alguns dos métodos usuais da física estatística generalizando-os para o contexto não extensivo de Tsallis, e, pela primeira vez, resolvemos um problema quântico de muitos corpos, a radiação de corpo negro, no contexto da estatística generalizada. Alguns dos métodos da mecânica estatística usual já foram generalizados; dentre eles temos o método de aproximação semi-clássica[35], e o método variacional[36]. Prosseguimos então o nosso estudo desenvolvendo métodos perturbativos[37] e variacionais (neste caso a forma da desigualdade de Bogoliubov é preservada, ao contrário do caso anterior[36])[37], integral de trajetória[38] e as funções de Green[39], tendo como referência a mecânica estatística usual. Além do mais, conforme foi mencionado acima, apresentamos aqui a solução exata para um sistema quântico de muitas partículas, a radiação de corpo negro[40]. Com tal resultado é possível fortalecer as discussões correntes[21, 23, 24, 41, 42, 43] e entender melhor o sistema contendo muitos corpos na estatística não extensiva de Tsallis.

A Tese encontra-se subdividida em seis capítulos. No primeiro capítulo fazemos uma revisão dos conceitos e das relações formais necessárias para a discussão que segue nos capítulos seguintes. O segundo capítulo é dedicado ao estudo dos métodos perturbativos e variacionais, sendo que o capítulo três é uma simples extensão do capítulo dois. O quarto capítulo, é dedicado a apresentarmos a solução exata para a radiação de corpo negro na estatística generalizada, obtendo algumas de suas relações formais como a fórmula de Planck generalizada e outras. Seguindo, no capítulo cinco desenvolvemos a formulação de integral de trajetória para a estatística de Tsallis e de maneira semelhante no capítulo seis, desenvolvemos as funções de Green. As conclusões gerais sobre tais capítulos, bem como as perspectivas, são apresentadas a seguir.

Capítulo 1

INTRODUÇÃO À ESTATÍSTICA NÃO EXTENSIVA DE TSALLIS

Neste capítulo abordamos alguns aspectos elementares da estatística não extensiva, com a simples finalidade de fornecer a condição necessária para o leitor familiarizar-se com o assunto e compreender os capítulos que se seguem. Assim, apresentamos aqui algumas relações formais que são baseadas na entropia de Tsallis; dentre elas podemos citar a matriz densidade e função de partição generalizada, a conexão entre função de partição generalizada e a energia livre generalizada, a representação da matriz densidade generalizada em termos de representações integrais, assim bem como da função de partição generalizada, dentre outras coisas.

A entropia de Tsallis[16] e o valor médio q para um observável \hat{A} [16, 44] são definidos

respectivamente como

$$S_q = k \frac{1 - \text{Tr} \hat{\rho}^q}{q - 1} \quad (1.1)$$

e

$$\langle \hat{A} \rangle_q = \text{Tr} \hat{\rho}^q \hat{A} , \quad (1.2)$$

onde $\hat{\rho}$ é a matriz densidade, q nos dá o grau de não extensividade, onde $q \in \mathbf{R}$, e k é uma constante positiva. Para que possamos obter a matriz densidade, por exemplo, para o ensemble Canônico basta maximizarmos a entropia de Tsallis Eq.(1.1) juntamente com os respectivos vínculos,

$$U_q = \langle \hat{H} \rangle_q \quad , \quad \text{Tr} \hat{\rho} = 1 \quad (1.3)$$

através do uso dos multiplicadores de Lagrange (para uma discussão melhor a respeito dos vínculos veja [45]). Neste caso temos a presença de dois multiplicadores de Lagrange, β e α ; β encontra-se associado com o valor médio q da Hamiltoniana e α é associado com o vínculo de normalização da matriz densidade. Então, após aplicarmos o processo de maximização de S_q , obtemos que a matriz densidade fica dada por,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z_q} [1 - (1 - q) \beta \hat{H}]^{1/(1-q)} , \quad (1.4)$$

e tomando a Eq.(1.4) em uma base que a Hamiltoniana é diagonal,

$$p_n = p(E_n) = \langle E_n | \hat{\rho} | E_n \rangle = \frac{1}{Z_q} [1 - (1 - q) \beta E_n]^{1/(1-q)} , \quad (1.5)$$

onde $\{p_n\}$ são as probabilidades, β é proporcional ao inverso da temperatura ($1/kT$),

$\{E_n\}$ é o conjunto de autovalores da Hamiltoniana e

$$Z_q = \sum_n [1 - (1 - q)\beta E_n]^{1/(1-q)} \quad (1.6)$$

é a função de partição generalizada. Nas Eqs.(1.4), (1.5) e (1.6) assumimos que $1 - (1 - q)\beta E_n \geq 0$. Quando esta condição não é satisfeita, pode se ver [46] que aparece um “cut-off” ($p(E_n) = 0$) mantendo assim a interpretação probabilística. Conseqüentemente, devemos ter sempre em mente, ao efetuarmos qualquer cálculo dentro deste contexto, que se a condição acima não for satisfeita, temos a presença de um “cut-off”. Por exemplo, ao calcularmos uma função de partição clássica, os limites de integração no espaço de fase são dados pela condição $1 - (1 - q)\beta H \geq 0$. Das Eqs. (1.5) e (1.6) muitas relações podem ser obtidas como, por exemplo, a energia interna generalizada,

$$U_q = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{Z_q^{1-q} - 1}{1 - q} \right) \quad (1.7)$$

e, por sua vez, podemos fazer a conexão da função de partição com a energia livre generalizada

$$F_q = U_q - TS_q = -\frac{1}{\beta} \frac{Z_q^{1-q} - 1}{1 - q}, \quad (1.8)$$

onde $1/T = \partial S_q / \partial U_q$. As relações termodinâmicas de Maxwell podem ser generalizadas de maneira simples seguindo o desenvolvimento [34, 44]. Em particular, temos que a pressão generalizada fica dada por,

$$P_q = \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{1}{\beta} \frac{Z_q^{1-q} - 1}{1 - q} \right)_{T,N}. \quad (1.9)$$

Algumas vezes é útil representarmos a matriz densidade através de representações integrais a fim de contornarmos certas dificuldades que aparecem durante o processo de

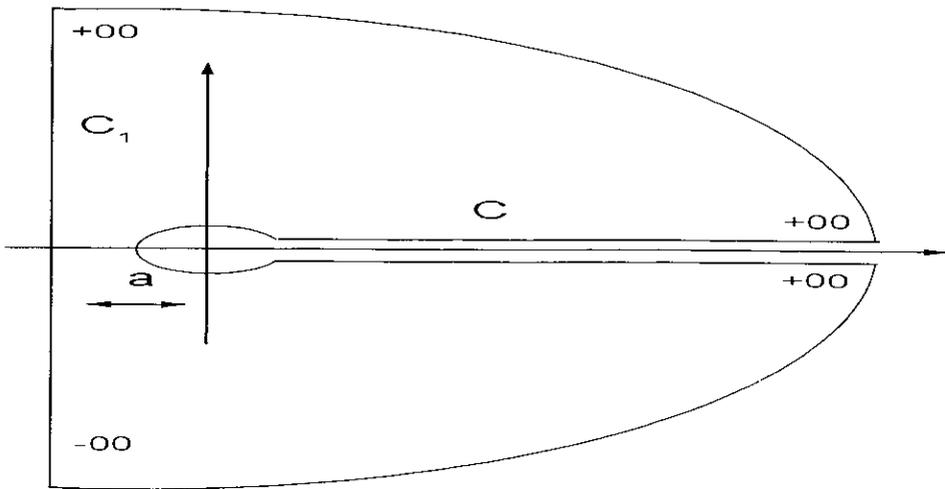


Figura 1.1: *Acima mostramos, os contornos que nos conduzem as representações integrais conhecidas.*

cálculo. Temos então três possíveis representações integrais para o peso estatístico, a de Hilhorst[47], a de Prato[48] e, por fim, a representação integral por nós proposta[49]. Todas estas representações integrais advêm de representações da função Gamma. Assim, podemos unificar todas as três representações integrais acima em uma só, através da seguinte representação para a função Gamma (Ref. [50], pág. 935 ou Ref.[51])

$$b^{1-z} \frac{i}{2\pi} \int_C du \exp(-u b) (-u)^{-z} = \frac{1}{\Gamma(z)} \quad (1.10)$$

com $b > 0$ e $\text{Re } z > 0$, e o contorno, C , começando em $+\infty$ indo em direção a origem, circunda a mesma no sentido anti-horário e retorna a $+\infty$. A partir desta, as três representações acima e outras podem ser obtidas através de deformações do contorno, C , conforme a necessidade. Por exemplo, se quisermos obter uma representação integral

diferente [49] basta modificarmos o contorno, C , para o contorno, C_1 , como mostra a Fig.(1.1) assim temos que,

$$b^{1-z} \frac{i}{2\pi} \int_{C+C_1} du \exp(-u b)(-u)^{-z} = 0 \quad (1.11)$$

e após simples cálculos chegaremos a outra representação integral para o peso estatístico generalizado, o resultado da integral acima encontra-se presente no capítulo três, Eq.(3.6).

Para obtermos as representações comumente usadas basta tomarmos os contornos adequados. Assim, se considerarmos apenas o contorno C , temos a representação proposta por Prato. A representação proposta por Hilhorst pode ser obtida mediante uma modificação no contorno C fazendo com que ele não circunde a origem, mas passe pela origem.

Ademais, como mencionamos acima, através de deformações do contorno C podemos obter outras possíveis representações integrais para o peso estatístico generalizado. Assim tomando, $b = 1 - (1 - q)\beta\hat{H}$, e $z = 1 + 1/(1 - q)$, na Eq.(1.10), obtemos a expressão para a matriz densidade, $\hat{\rho}_q$,

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_q(\beta) &= \int_C du K_q^{(1)}(u) \hat{\rho}(-\beta u(1 - q)) \\ K_q^{(1)} &= i \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{2\pi} (-u)^{\frac{2-q}{1-q}} e^{-u} \end{aligned} \quad (1.12)$$

conseqüentemente, a função de partição generalizada fica,

$$Z_q(\beta) = \int_C du K_q^{(1)}(u) Z_1(-\beta u(1 - q)), \quad (1.13)$$

e para obtermos o valor médio q em termos desta representação integral, basta tomarmos $z = 1/(1 - q)$ e então temos que a Eq.(1.2) fique dada por,

$$(\hat{A})_q = \int_C du K_q^{(2)}(u) \langle \hat{A} \rangle_1 \quad \langle \hat{A} \rangle_1 = \text{Tr} \left(\hat{\rho}(-\beta u(1 - q)) \hat{A} \right)$$

$$K_q^{(2)}(u) = -\frac{(1-q)u}{(Z_q)^q} K_q^{(1)}(u) \quad (1.14)$$

A extensão destes cálculos para o ensemble Grand Canônico é imediata (veja Ref. [31]), assim, não há necessidade de o fazermos aqui, e todas as expressões obtidas aqui reduzem-se ao caso usual no limite $q \rightarrow 1$.

Capítulo 2

MÉTODOS PERTURBATIVOS E VARIACIONAIS - PARTE I

2.1 Introdução

Neste capítulo apresentamos os métodos perturbativos e variacionais de forma generalizada baseada na entropia de Tsallis. Assim, durante as seções que se seguem, primeiramente tratamos o método perturbativo na seção 2.2, o método variacional na seção 2.3, e, na seção 2.4, discutimos a validade dos resultados. Exemplificamos tais procedimentos mediante o estudo da aproximação do oscilador harmônico unidimensional por uma partícula em um poço quadrado de potencial.

2.2 Método Perturbativo

Os métodos perturbativos são em geral de grande interesse, permitindo a possibilidade de uma solução aproximada, já que muitas vezes a complexidade do problema pode nos impedir a obtenção de soluções exatas. Sendo assim, dedicamos parte deste capítulo ao desenvolvimento do método perturbativo e “a posteriori” analisamos o método variacional. Antes de começarmos a desenvolver o método perturbativo na estatística generalizada, assumimos que a Hamiltoniana do sistema é dada por,

$$H = H_0 + \lambda H_I. \quad (2.1)$$

Nesta expressão, H_0 é a Hamiltoniana cujas soluções são conhecidas e λH_I consideramos como uma quantidade pequena, a qual tratamos como perturbação em H_0 (H_0 e H_I não precisam necessariamente comutarem entre si), e λ é o parâmetro de perturbação. Assim, a expansão perturbativa da energia livre pode ser escrita como sendo

$$F_q(\lambda) = F_q^{(0)} + \lambda F_q^{(1)} + \frac{\lambda^2}{2} F_q^{(2)} + \dots + \frac{\lambda^n}{n!} F_q^{(n)} + \dots \quad (2.2)$$

Onde os $F_q^{(n)}$ são as correções devidas à perturbação λH_I . Então, para entendermos como as correções $F_q^{(n)}$ são calculadas, será suficiente apenas calcularmos os três primeiros termos. O primeiro termo obviamente é a energia livre generalizada sem a presença da perturbação,

$$\begin{aligned} F_q^{(0)} &= F_q(0) \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{Z_q^{(0)} - 1}{q - 1} \end{aligned} \quad (2.3)$$

Sendo que $Z_q^{(0)}$ é a função de partição generalizada calculada com $\lambda = 0$,

$$Z_q^{(0)} = \text{Tr} \left(1 - (1 - q)\beta \hat{H}_0 \right)^{\frac{1}{1-q}} . \quad (2.4)$$

Por sua vez, o segundo termo da expansão é obtido através da primeira derivada de $F_q(\lambda)$ tomando $\lambda = 0$,

$$F_q^{(1)} = \frac{\partial F_q(0)}{\partial \lambda} = -\frac{1}{\beta Z_q^q} \frac{\partial}{\partial \lambda} \sum_n [1 - (1 - q)\beta E_n]^{1/(1-q)} \Big|_{\lambda=0} = \langle H_I \rangle_q^{(0)}, \quad (2.5)$$

onde o índice superescrito (0) indica que o valor médio q é calculado para $\lambda = 0$. Porém, é importante que seja ressaltado aqui que, ao calcularmos a última igualdade, foi necessário considerarmos que a derivada com relação a λ e a soma comutem entre si para todo n . Mais adiante, entretanto, vamos analisar o que tal implicação acarreta. Ademais, no cálculo da Eq.(2.5) usamos o teorema de Hellmann-Feymann,

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \langle n | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | n \rangle , \quad (2.6)$$

ou sua relação equivalente,

$$\frac{\partial | n \rangle}{\partial \lambda} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | H_I | n \rangle}{E_n - E_m} | m \rangle \quad (2.7)$$

obtida da teoria de perturbação considerando apenas a primeira ordem. O cálculo de $F_q^{(2)}$ sendo realizado de maneira similar nos conduz a obtermos,

$$\begin{aligned} F_q^{(2)} &= \frac{\partial^2 F_q(0)}{\partial \lambda^2} \\ &= -\beta q \left(Z_q^{(0)} \right)^{q-1} \sum_n p(E_n^{(0)}) \left[\left(p(E_n^{(0)})^{q-1} \langle n | H_I | n \rangle^{(0)} - \langle H_I \rangle_q^{(0)} \right)^2 \right] \\ &\quad - \sum_n \sum_{m \neq n} \left| \langle n | H_I | m \rangle^{(0)} \right|^2 \frac{p(E_m^{(0)})^q - p(E_n^{(0)})^q}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} . \end{aligned} \quad (2.8)$$

Quando H_0 e H_I comutam (como por exemplo, o caso clássico) a Eq.(2.8) é mais simples, isto é, o segundo termo no lado direito é nulo. Notemos que as Eqs. (2.5) e (2.8) são corretas para um λ qualquer, sendo que durante o processo de cálculo em ambos os casos foi necessário considerarmos a dependência de $|n\rangle$ com λ . Finalmente, a energia livre considerando as correções acima, fica dada por

$$\begin{aligned}
F_q(\lambda) &= F_q(0) + \lambda \langle H_I \rangle_q^{(0)} - \frac{\lambda^2}{2} \beta q \left(Z_q^{(0)} \right)^{q-1} \sum_n p(E_n^{(0)}) \times \\
&\times \left[\left(p(E_n^{(0)})^{q-1} \langle n | H_I | n \rangle^{(0)} - \langle H_I \rangle_q^{(0)} \right)^2 \right] - \\
&- \frac{\lambda}{2} \sum_n \sum_{m \neq n} \left| \langle n | H_I | m \rangle^{(0)} \right|^2 \frac{p(E_m^{(0)})^q - p(E_n^{(0)})^q}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^3), \quad (2.9)
\end{aligned}$$

onde $|n\rangle$ é calculado com $\lambda = 0$. Sendo importante aqui enfatizarmos novamente que os cálculos anteriores foram feitos supondo que a derivada e a soma comutem com respeito a λ . Porém, isto geralmente não é válido uma vez que a somatória pode encontrar-se limitada devido ao “cut-off” e o mesmo depende de λ . Ou seja, quando o fator $1 - (1 - q) \beta E_n$ é negativo a somatória da Eq.(1.6) é truncada, e como E_n depende de λ , consequentemente a mesma tem seu limite superiormente dependente de λ . Sem perda de generalidade podemos considerar $\beta > 0$ nas análises que seguem (para $\beta < 0$ as análises são essencialmente as mesmas). Podemos ainda supor que $E_n \geq 0$ para todo n . Neste caso, $1 - (1 - q) \beta E_n$ não é negativo para $q > 1$, portanto a soma e a derivada podem ser trocadas. Entretanto, no caso em que $q < 1$, a análise é mais complicada, assim deixamos para abordar esta questão mais tarde no contexto clássico, seção 2.4, e futuramente, no capítulo seguinte, com o uso de representações integrais.

2.3 Método Variacional

Assim como o método perturbativo, o método variacional também desempenha um papel importante quando necessitamos obter aproximações de sistemas cujo grau de complexidade é grande. Passemos agora a considerar o método variacional. Neste caso, a Hamiltoniana do sistema é $H = H_0 + H_I$, mas nas análises que seguem é conveniente empregarmos uma Hamiltoniana que interpole continuamente entre H_0 e H . Assim, usamos a Hamiltoniana (2.1) com $\lambda \in [0, 1]$. Agora vamos empregar a identidade geral para a energia livre, dada por,

$$F_q(\lambda) = F_q(0) + \lambda F_q'(0) + \frac{\lambda^2}{2} F_q''(\lambda_0), \quad (2.10)$$

onde cada ' indica a derivada com respeito a λ , e $\lambda_0 \in [0, 1]$. Assim, devemos retomar a Eq.(2.8) para prosseguir com a nossa análise do método variacional. Somos levados então a dizer que a expressão (2.8) não é positiva para $q > 0$, e não é negativa para $q < 0$ e para $\lambda = \lambda_0$. De fato, $\sum_n p(E_n) \left[(p(E_n)^{q-1} \langle n|H_I|n \rangle - \langle H_I \rangle_q)^2 \right] \geq 0$, e $p(E_n) \leq p(E_m)$ para $E_n \geq E_m$. Portanto, considerando (2.5) e (2.8) concluímos que $F_q(\lambda) \geq F_q(0) + \lambda \langle H_I \rangle_q^{(0)}$ para $q < 0$, e $F_q(\lambda) \leq F_q(0) + \lambda \langle H_I \rangle_q^{(0)}$ para $q > 0$. Mas, estas conclusões, como constataremos, nem sempre são válidas para todo q , pois temos a presença do “cut-off”, ao qual ainda não demos a “devida atenção”. Assim, quando nós consideramos $\beta > 0$, $E_n \geq 0$ e o fato de que a última desigualdade é correta para todos os possíveis valores de λ , podemos escolher $\lambda = 1$ e concluir que

$$F_q \leq F_q^{(0)} + \langle H_I \rangle_q^{(0)} \quad (2.11)$$

para $q \geq 1$ e também para $0 < q \leq 1$. Porém, neste último caso, como vamos ver na próxima seção, as correções devidas ao “cut-off” são nulas no caso clássico. No próximo capítulo veremos que elas também serão nulas no caso quântico. Conseqüentemente a desigualdade (2.11) vem a ser uma generalização natural da desigualdade de Bogoliubov usual,

$$F_1 \leq F_1^{(0)} + \langle H_I \rangle_1^{(0)} \quad (2.12)$$

preservando a sua forma funcional.

2.4 Discussão e Aplicação

No desenvolvimento anterior, tanto para o método perturbativo como para o variacional, fizemos uso de algumas propriedades que nem sempre são válidas quando consideramos um q genérico. Sendo assim, nesta seção discutimos sob que condições as relações acima são válidas e mostramos tais métodos aplicados a um exemplo simples, um oscilador harmônico unidimensional aproximado por um poço de potencial infinito.

Para analisarmos a contribuição do “cut-off” nos métodos perturbativos e variacionais é conveniente considerarmos $\beta > 0$ e $E_n \geq 0$, por questão de simplicidade. Entretanto a análise para $\beta < 0$ e $E_n < 0$ pode ser estendida analogamente. Neste caso existe “cut-off” somente para o caso $q < 1$, o qual restringirá a análise puramente a ele. Agora mudamos a \sum_n por $\int d\Gamma$, pois neste capítulo nos restringimos somente a análise do caso clássico, deixando para o capítulo seguinte a análise do caso quântico, onde $d\Gamma = \prod_s (dx_s dp_s / h)$ (h é a constante de Planck), e a integração pelo espaço de fase será a soma da região

definida pela desigualdade $1 - (1 - q)\beta H \geq 0$. Assim, para analisarmos $F_q^{(n)}$ fazemos uso da seguinte identidade

$$\frac{d}{d\lambda} \int d\Gamma f = \int d\Gamma \frac{\partial f}{\partial \lambda} + \int_{\partial V} \sum_u dS_u \left(f \frac{dy_u}{d\lambda} \right). \quad (2.13)$$

Na presente aplicação, f é uma função das variáveis do espaço de fase, y_u , e ∂V é a hipersuperfície definida pela equação $1 - (1 - q)\beta H = 0$. Quando o último termo se anula no lado direito de (2.13), a análise anterior é recuperada. Em geral, isto ocorre quando $f = 0$ e $dy_u/d\lambda$ é finito no ∂V . Pelo uso destas condições e $f = [1 - (1 - q)\beta H]^{1/(1-q)}$ nós concluímos imediatamente que (2.5) permanece a mesma para $q < 1$. Para $F_q^{(2)}$ a função f contém termos proporcionais a $[1 - (1 - q)\beta H]^{q/(1-q)}$. Assim, a condição $f = 0$ no ∂V é satisfeita somente para $q/(1 - q) > 0$, isto é, $q > 0$. Para $F_q^{(n)}$ a função f contém termos proporcionais a $[1 - (1 - q)\beta H]^{[nq - (n-1)]/(1-q)}$. Conseqüentemente seria necessário que $q > 1 - 1/n$ de maneira que $F_q^{(n)}$ não tenha contribuições do último termo da Eq.(2.13). Estas observações indicam que em ordens superiores na expansão perturbativa que desenvolvemos nas seções anteriores podem ser, somente usadas para $q \geq 1$. Por outro lado, o método variacional pode ser usado, em geral, para todo $q > 0$. Quando o último termo de (2.13) é não nulo, não existe garantia de que $F_q^{(2)}$ permaneça negativo, devido ao fato de que o sinal de $dy_u/d\lambda$ não é conhecido. Neste caso, a igualdade (2.11) não pode ser geralmente aplicada.

Para ilustrar os métodos desenvolvidos aqui, nós consideramos um oscilador harmônico unidimensional,

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (2.14)$$

aproximado por uma partícula num poço quadrado.

$$H_0 = \frac{1}{2m}p^2 + V_0 \quad (2.15)$$

com

$$V_0 = \begin{cases} 0, & |x| \leq L/2 \\ \infty & |x| > L/2 \end{cases} \quad (2.16)$$

assumindo que $\beta > 0$. A função de partição do sistema não perturbado e o valor médio q de $H_1 = H - H_0$ podem ser diretamente calculados, isto é,

$$Z_q^{(0)} = \begin{cases} \frac{L}{h} \left[\frac{2m\pi}{(1-q)\beta} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + \frac{1}{2}\right)}, & q < 1 \\ \frac{L}{h} \left[\frac{2m\pi}{(q-1)\beta} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}, & q > 1 \end{cases} \quad (2.17)$$

e

$$\langle H - H_0 \rangle_q^{(0)} = \begin{cases} \frac{m\omega^2 L^3}{24hZ_q^{(0)q}} \left[\frac{2m\pi}{(1-q)\beta} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + \frac{1}{2}\right)}, & q < 1 \\ \frac{m\omega^2 L^3}{24hZ_q^{(0)q}} \left[\frac{2m\pi}{(q-1)\beta} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{q}{q-1} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{q}{q-1}\right)}, & q > 1 \end{cases} \quad (2.18)$$

Assim a energia livre, $F_q(0)$, pode ser diretamente obtida das Eqs. (2.17) e (1.8). Notemos que, $Z_q^{(0)}$ é convergente somente para $q < 3$.

Agora, passemos a considerar o método variacional. Neste caso, a minimização de $F_q^{(0)} + \langle H - H_0 \rangle_q^{(0)}$ conduz a

$$L = \frac{4}{3-q} \left(\frac{3}{m\omega^2\beta} \right)^{1/2} \quad (2.19)$$

para ambos $q < 1$ e $q > 1$. Substituindo este resultado em $F_q^{(0)} + \langle H - H_0 \rangle_q^{(0)}$ conduz a uma otimização na aproximação da energia livre. Finalmente, a comparação desta aproximação para a energia livre com a exata, (válida somente para $q < 2$)

$$F_q = -\frac{1}{(1-q)\beta} \left[\left(\frac{2\pi}{h\omega\beta} \frac{1}{2-q} \right)^{1-q} - 1 \right], \quad (2.20)$$

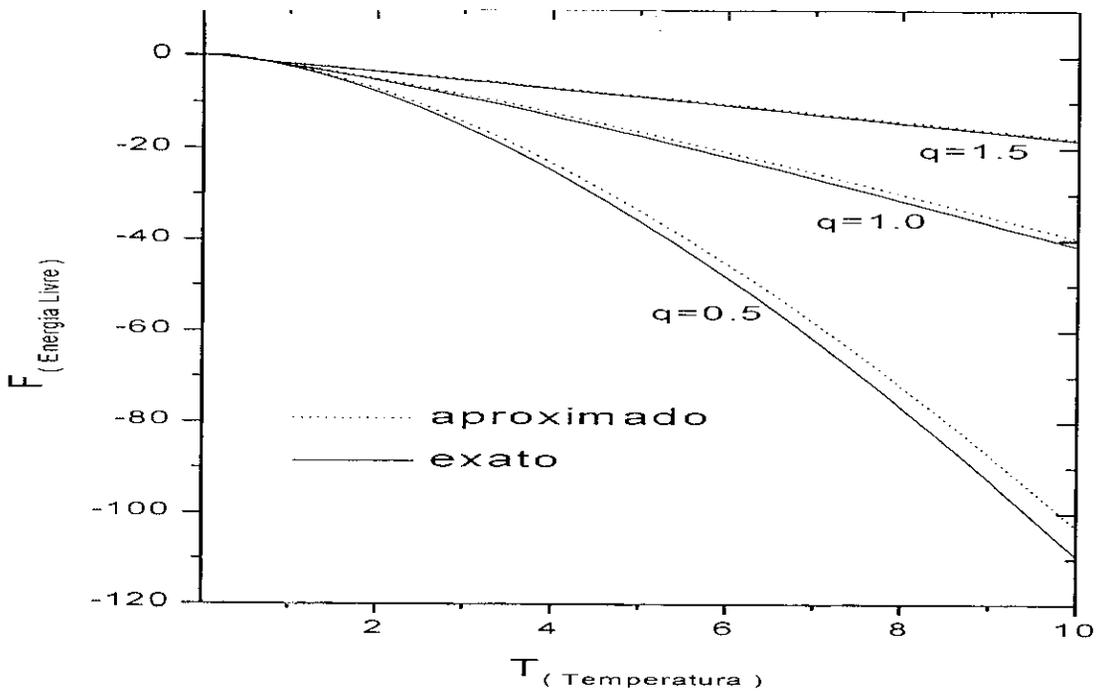


Figura 2.1: Nesta figura, temos o comportamento da energia livre com a temperatura para determinados valores de q , comparado o valor exato e aproximado obtido através da desigualdade de Bogoliubov apresentada aqui.

nos dá uma boa aproximação, como no caso $q \rightarrow 1$ (veja Fig. (2.1)).

Onde todas as expressões reduzem-se ao caso usual no limite de $q \rightarrow 1$. As contribuições perturbativas podem ser obtidas de maneira similar.

Resumindo, nós desenvolvemos aqui o método perturbativo e variacional para contextos não extensivos de uma maneira unificada. Neste contexto, a generalização da desigualdade de Bogoliubov matém sua forma invariante perante o índice entrópico q , podendo ser usada para $q > 0$. Porém, no método perturbativo quando consideramos ordens arbitrárias na expansão perturbativa, devemos ter cuidado com o valor de q , pois para $q \geq 1$ não temos problemas quanto ao “cut-off”, porém, para $q < 1$ temos problemas quanto ao “cut-off”, sendo que o valor de q aproxima-se cada vez mais de 1 à medida que consideramos ordens

cada vez maiores na teoria de perturbação. No próximo capítulo veremos que as análises apresentadas aqui podem ser estendidas para o caso quântico, considerando $q < 1$ com o uso de representações integrais.

Capítulo 3

MÉTODOS PERTURBATIVOS E VARIACIONAIS - PARTE II

3.1 Introdução

Este capítulo é dedicado à extensão dos métodos perturbativo e variacional, apresentados no capítulo anterior, com o uso das representações integrais. Assim, podemos estender o caso quântico, apresentado no Cap. 2, para valores de $0 < q < 1$. Em particular, usamos uma representação integral em especial[49], pois aqui estamos interessados apenas no caso $q < 1$. Por fim, como veremos, as conclusões a que chegamos são semelhantes às do capítulo anterior.

Muitas dificuldades têm nos conduzido ao uso de representações integrais. Elas permitem conectarmos a função de partição generalizada com a função de partição usual. A relevância das representações integrais é reforçada pelo fato de que, a formulação de in-

tegral de trajetória[38] e as funções de Green[39] são obtidas com o uso de representações integrais. Consistentemente, a primeira solução analítica do problema de muitos corpos foi obtida usando representações integrais[40].

Aqui empregamos as representações integrais de maneira a completar a análise do capítulo anterior dos métodos perturbativos e variacional. Isto é, aqui desenvolvemos os métodos perturbativos e provamos que a desigualdade de Bogoliubov (Eq.(2.11)) mantém sua forma também para um espectro discreto (caso quântico) no caso $0 < q < 1$

As seções que seguem encontram-se distribuídas da seguinte maneira, primeiramente revisamos a introdução das representações integrais na estatística de Tsallis; na terceira seção desenvolvemos a teoria de perturbação; a quarta seção é dedicada ao desenvolvimento do método variacional onde mostramos que a desigualdade de Bogoliubov mantém sua forma, como no caso anterior. Finalmente, na última seção apresentamos as conclusões.

3.2 Representações Integrais na Estatística de Tsallis

Descreveremos agora a ferramenta básica que usamos nas seções que se seguem. Primeiramente, vamos considerar a definição de Euler para a função gamma,

$$\int_0^{\infty} dx x^{\alpha-1} \exp(-x) = \Gamma(\alpha), \quad (3.1)$$

com $\text{Re } \alpha > 0$. Usando a variável v definida pela igualdade $x = [1 - (1 - q)\beta E_n]v$ ao invés de x , a identidade (3.1) torna-se,

$$[1 - (1 - q)\beta E_n]^{-\alpha} = \int_0^{\infty} dv K_{>}(v; \alpha) \exp(-\tilde{\beta} E_n), \quad (3.2)$$

onde

$$K_{>}(v; \alpha) = \frac{v^{\alpha-1} \exp(-v)}{\Gamma(\alpha)} \quad \text{e} \quad \tilde{\beta} = (q-1)v\beta. \quad (3.3)$$

É claro que devemos notar que, para temperaturas positivas ($\beta > 0$) e $E_n \geq 0$, a representação integral acima só pode ser aplicada para $q > 1$. Em termos desta representação integral e usando a notação operacional, o peso estatístico e a função de partição podem ser escritas como sendo

$$[1 - (1-q)\beta\hat{H}]^{-1/(q-1)} = \int_0^\infty dv K_{>}\left(v; \frac{1}{q-1}\right) \exp(-\tilde{\beta}\hat{H}), \quad (3.4)$$

e

$$Z_q(\beta) = \int_0^\infty dv K_{>}\left(v; \frac{1}{q-1}\right) Z_1(\tilde{\beta}), \quad (3.5)$$

onde Z_1 é a função de partição usual. A presente representação integral foi proposta por Hilhorst [47]. Certamente, a Eq.(3.5) para $Z_q(\beta)$ é válida para $q > 1$.

Para $q < 1$, conhecemos duas espécies de representações integrais: a primeira foi proposta por Prato[48] e não pode ser aplicada para $q = (n-2)/(n-1)$, onde n é um inteiro. A segunda não tem nenhuma restrição prévia e é de nossa autoria[49]. No presente capítulo usamos a segunda representação integral, e a mesma é dada pela seguinte identidade (veja Ref. [50] pág. 935)

$$\begin{aligned} \frac{\exp(ab) b^{1-z}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dv \frac{\exp(ivb)}{(a+iv)^z} &= \frac{1}{\Gamma(z)} \quad \text{para } b > 0, \\ &= 0 \quad \text{para } b < 0, \end{aligned} \quad (3.6)$$

com $a > 0$, $\text{Re } z > 0$, e $-\pi/2 < \arg(a+iv) < \pi/2$. Se considerarmos que $a = 1$, $b = 1 - (1-q)\beta\hat{H}$ e $z = \alpha + 1$ na expressão acima, obtemos a representação integral

desejada, isto é,

$$[1 - (1 - q)\beta\hat{H}]^\alpha = \int_{-\infty}^{\infty} dv K_{<}(v; \alpha) \exp(-\bar{\beta}\hat{H}), \quad (3.7)$$

onde

$$K_{<}(v; \alpha) = \frac{\Gamma(\alpha + 1) \exp(1 + iv)}{2\pi (1 + iv)^{\alpha+1}} \quad \text{e} \quad \bar{\beta} = (1 - q)(1 - iv)\beta. \quad (3.8)$$

Portanto a função de partição Z_q pode ser expressa em termos da usual como,

$$Z_q(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} dv K_{<}\left(v; \frac{1}{1 - q}\right) Z_1(\bar{\beta}). \quad (3.9)$$

Note que a presente representação integral incorpora naturalmente o “cut-off” introduzido de maneira a obtermos a interpretação probabilística consistente. Em outras palavras, a integral (3.6) dará zero para os valores em que $b = [1 - (1 - q)\beta E_n] < 0$, então a soma sobre $[1 - (1 - q)\beta E_n]^\alpha$ por um índice n pode ser aplicada sem problemas para valores arbitrários de E_n e qualquer valor de α .

3.3 Expansão Perturbativa

De maneira a darmos continuidade ao desenvolvimento apresentado no Cap. 2 vamos considerar que a nossa Hamiltoniana é dada pela Eq.(2.1). De forma análoga tratamos H_0 como a Hamiltoniana do sistema sem a perturbação e λH_I consideramos como uma pequena perturbação em H_0 (H_0 e H_I , como no capítulo anterior, não precisam necessariamente comutar) e λ nos dará a intensidade da perturbação. Então, passando agora ao cálculo dos termos da série perturbativa da energia livre (Eq.(2.2)) via o uso de representações

integrais. O primeiro termo $F_q^{(0)}$ é a energia livre sem perturbação, ou seja,

$$F_q^{(0)} = F_q(0). \quad (3.10)$$

Como no caso anterior, tomando a primeira derivada com respeito a λ de $F_q(\lambda)$ em $\lambda = 0$, obtemos a primeira correção para a energia livre em $\lambda = 0$,

$$F_q^{(1)} = \frac{\partial F_q(0)}{\partial \lambda} = - \frac{1}{\beta Z_q^q} \frac{\partial Z_q}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0}. \quad (3.11)$$

O próximo termo da expansão da energia livre $F_q^{(2)}$ é dado por,

$$F_q^{(2)} = \frac{\partial^2 F_q(0)}{\partial \lambda^2} = \left[\frac{q}{\beta Z_q^{q+1}} \left(\frac{\partial Z_q}{\partial \lambda} \right)^2 - \frac{1}{\beta Z_q^q} \frac{\partial^2 Z_q}{\partial \lambda^2} \right] \Big|_{\lambda=0}, \quad (3.12)$$

e assim sucessivamente. Consequentemente, as correções devidas ao n -ésimo termo da expansão reduzem-se ao cálculo de $\partial^n Z_q / \partial \lambda^n$.

Vamos calcular agora as correções de $\partial^n Z_q / \partial \lambda^n$ para o caso $q < 1$. Usando a representação integral (3.7) com $\alpha = 1/(1 - q)$ podemos escrever que

$$\frac{\partial Z_q}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \int_{-\infty}^{\infty} dv K_{<} \left(v; \frac{1}{1 - q} \right) \text{Tr} \exp(-\bar{\beta} \hat{H}). \quad (3.13)$$

Empregando a identidade [52]

$$\frac{\partial \exp(\hat{A})}{\partial \alpha} = \int_0^1 d\gamma \exp(\gamma \hat{A}) \frac{\partial \hat{A}}{\partial \alpha} \exp[(1 - \gamma) \hat{A}] \quad (3.14)$$

para $\hat{A} = -\bar{\beta} \hat{H}$ e $\alpha = \lambda$ temos que

$$\frac{\partial Z_q}{\partial \lambda} = -\beta \text{Tr} \left\{ \hat{H}_I \int_{-\infty}^{\infty} dv K_{<} \left(v; \frac{q}{1 - q} \right) \exp(-\bar{\beta} \hat{H}) \right\} = -\beta Z_q^q \langle \hat{H}_I \rangle_q. \quad (3.15)$$

Para obtermos a última equação supomos que a ordem entre a derivada e a integral devida ao traço pode ser invertida, ou seja, que elas comutem entre si, onde usamos a definição

do valor médio q (1.2), juntamente com a Eq.(3.14), sendo que os cálculos acima podem ser feitos para um valor arbitrário de λ . A primeira correção para F_q torna-se,

$$F_q^{(1)} = (\hat{H}_I)_q^{(0)}, \quad (3.16)$$

onde o superescrito (0) indica que o valor médio q é calculado para $\lambda = 0$.

Agora, calculamos a segunda derivada de Z_q . Para fazermos tal, derivamos Eq.(3.17) em relação a λ

$$\frac{\partial^2 Z_q}{\partial \lambda^2} = -\beta \frac{\partial}{\partial \lambda} \text{Tr} \left\{ \hat{H}_I \int_{-\infty}^{\infty} dv K_{<} \left(v; \frac{q}{1-q} \right) \exp(-\bar{\beta} \hat{H}) \right\}. \quad (3.17)$$

Novamente, comutando a ordem da derivada com respeito a integral presente no traço e usando a identidade (3.14), a Eq. (3.17) fica

$$\frac{\partial^2 Z_q}{\partial \lambda^2} = \beta^2 \int_{-\infty}^{\infty} dv K_{<} \left(v; \frac{q}{1-q} \right) \text{Tr} \left\{ \hat{H}_I \int_0^1 d\gamma \exp(-\gamma \bar{\beta} \hat{H}) \hat{H}_I \exp[-(1-\gamma) \bar{\beta} \hat{H}] \right\}. \quad (3.18)$$

Nesta expressão vamos introduzir uma relação de completeza na base das energias entre $\exp(-\gamma \bar{\beta} \hat{H})$ e \hat{H}_I para calcularmos o traço usando a mesma base. Desta maneira, depois da integração em γ e trocando a ordem entre a integral e a soma sobre todos os estados a Eq. (3.18) pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 Z_q}{\partial \lambda^2} &= -\beta \sum_n \sum_{m \neq n} |\langle m | \hat{H}_I | n \rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dv K_{<} \left(v; \frac{q}{1-q} \right) \frac{\exp(-\bar{\beta} E_m) - \exp(-\bar{\beta} E_n)}{E_m - E_n} \\ &+ \beta^2 \sum_n |\langle n | \hat{H}_I | n \rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dv K_{<} \left(v; \frac{q}{1-q} \right) \exp(-\bar{\beta} E_n). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Para simplificarmos esta expressão, usaremos a (3.7), logo

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 Z_q}{\partial \lambda^2} &= q\beta^2 \sum_n |\langle n | \hat{H}_I | n \rangle|^2 [1 - (1-q)\beta E_n]^{\frac{2q-1}{1-q}} \\ &+ \beta \sum_n \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{H}_I | n \rangle|^2}{E_n - E_m} \left([1 - (1-q)\beta E_m]^{\frac{2q-1}{1-q}} - [1 - (1-q)\beta E_n]^{\frac{2q-1}{1-q}} \right). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Identificando a expressão das probabilidades (1.4) obteremos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 Z_q}{\partial \lambda^2} &= q\beta^2 Z_q^{2q-1} \sum_n |\langle n | \hat{H}_I | n \rangle|^2 [p(E_n)]^{2q-1} \\ &+ Z_q^q \beta \sum_n \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{H}_I | n \rangle|^2}{E_n - E_m} \{ [p(E_m)]^q - [p(E_n)]^q \}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

O procedimento aplicado acima pode também ser aplicado a altas ordens das derivadas em Z_q . Embora, como no caso da derivada segunda, é importante dizermos que a representação integral (3.7) está restrita a um intervalo de valores de q . De fato, as integrais presentes na Eq. (3.19) são bem definidas somente para $q/(1-q) > 0$. Em geral, esta restrição é dada por $q > 1 - 1/(n-1)$ de maneira que possamos calcular $\partial^n Z_q / \partial \lambda^n$. Devemos enfatizar que esta limitação não é uma consequência específica da representação integral, pois esta restrição também ocorre no caso clássico, onde não empregamos a representação integral[37].

Substituindo as derivadas (3.15) e (3.21) com $\lambda = 0$ em (3.12) obtemos a correção de segunda ordem para a energia livre,

$$\begin{aligned} F_q^{(2)} &= \frac{\partial^2 F_q(0)}{\partial \lambda^2} \\ &= -\beta q \left(Z_q^{(0)} \right)^{q-1} \sum_n p(E_n^{(0)}) \left\{ \left[[p(E_n^{(0)})]^{q-1} \langle n | H_I | n \rangle - \langle H_I \rangle_q^{(0)} \right]^2 \right\} \\ &- \sum_n \sum_{m \neq n} \left| \langle n | H_I | m \rangle^{(0)} \right|^2 \frac{[p(E_m^{(0)})]^q - [p(E_n^{(0)})]^q}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Quando H_0 e H_I comutam entre si (por exemplo, como no caso clássico) a expressão (3.22) é mais simples, isto é, o segundo termo do lado direito da expressão acima anula-se. Notemos que as Eqs. (3.11) e (3.22) são corretas para um λ qualquer, mas neste caso é necessário considerarmos a dependência de $|n\rangle$ com λ e substituímos $E_n^{(0)}$ por E_n . As

outras correções para a energia livre podem ser calculadas da mesma maneira, como no caso das duas primeiras correções que calculamos. Entretanto, como discutimos no último parágrafo, o intervalo para os possíveis valores de q fica reduzido com o crescimento de n em $F_q^{(n)}$. Finalmente, a energia livre com suas respectivas correções calculadas acima fica dada por,

$$F_q(\lambda) = F_q(0) + \lambda \langle H_I \rangle_q^{(0)} - \frac{\lambda^2}{2} \beta q \left(Z_q^{(0)} \right)^{q-1} \sum_n p(E_n^{(0)}) \left\{ \left[p(E_n^{(0)}) \right]^{q-1} \langle n | H_I | n \rangle - \langle H_I \rangle_q^{(0)} \right\}^2 \\ - \frac{\lambda^2}{2} \sum_n \sum_{m \neq n} |\langle n | H_I | m \rangle|^2 \frac{[p(E_m^{(0)})]^q - [p(E_n^{(0)})]^q}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^3), \quad (3.23)$$

onde $|n\rangle$ é calculado com $\lambda = 0$. No caso $q > 1$ a expansão perturbativa pode ser analisada com o uso da representação integral (3.2). Por outro lado, tais análises para o caso $q > 1$ podem ser feitas usando a Eq.(3.5) e, como esperado, os resultados são os mesmos do capítulo anterior.

3.4 Desigualdade de Bogoliubov

Para estudarmos a desigualdade de Bogoliubov, consideramos a Hamiltoniana decomposta em duas partes como no capítulo anterior, onde

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I. \quad (3.24)$$

Sendo \hat{H}_0 a Hamiltoniana cujos autovalores são conhecidos e \hat{H}_I a Hamiltoniana de interação. Assim, de maneira análoga ao capítulo anterior, usamos uma Hamiltoniana que interpola continuamente \hat{H}_0 e \hat{H} . Esta Hamiltoniana é $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_I$ com λ pertencente ao intervalo $[0, 1]$. Alguns resultados obtidos nas seções anteriores podem ser empregados

aqui, conduzindo ao uso da identidade

$$F_q(\lambda) = F_q(0) + \lambda F'_q(0) + \frac{\lambda^2}{2} F''_q(\lambda_0) , \quad (3.25)$$

da qual podemos tirar todas as informações necessárias para obtermos a desigualdade de Bogoliubov no contexto da estatística de Tsallis. Os índices ' na Eq.(3.25) indicam as derivadas com respeito a λ , e λ_0 é escolhido de maneira a satisfazer a igualdade (3.25).

Se $F''_q(\lambda_0) \leq 0$ temos conseqüentemente a seguinte desigualdade

$$F_q \leq F_q(0) + \lambda F'_q(0) . \quad (3.26)$$

Substituindo nesta desigualdade as Eqs. (3.10) e (3.16), e escolhendo $\lambda = 1$ de maneira a recuperarmos o sistema descrito pela Hamiltoniana (3.24), obteremos que

$$F_q \leq F_q^{(0)} + \langle H_I \rangle_q^{(0)} . \quad (3.27)$$

Este é precisamente o resultado que desejamos, isto é, a desigualdade de Bogoliubov para a estatística de Tsallis. Como podemos ver imediatamente, esta desigualdade é uma generalização natural da desigualdade de Bogoliubov (2.12).

Esta desigualdade não coincide com a desigualdade proposta por Plastino e Tsallis em [36]. Tal fato é devido a termos usado diferentes desigualdades matemáticas para derivarmos os nossos resultados finais. É oportuno mencionar que seria interessante comparar, de modo geral ou ao menos em alguns exemplos, as duas desigualdades, isto é a proposta por Plastino e Tsallis [36] e a por nós obtida[37] a fim de observarmos qual se aproxima melhor do valor exato.

A derivação da desigualdade de Bogoliubov obtida nesta seção, assim como a presente no capítulo dois ambas estão baseadas na prova de Feynman [53]. Para completarmos a

demonstração de (3.27) é necessário verificarmos que $F_q''(\lambda_0) \leq 0$. Esta condição ocorre independentemente de λ_0 . De fato, cada termo de (3.22) é negativo porque o primeiro termo é sempre negativo e o segundo nós temos que: $[p(E_n)]^q \leq [p(E_m)]^q$ para $E_n > E_m$ e $[p(E_n)]^q \geq [p(E_m)]^q$ para $E_n < E_m$.

3.5 Discussão

Neste capítulo desenvolvemos de maneira unificada a generalização dos métodos perturbativos e variacionais no contexto não extensivo de Tsallis, usando as representações integrais. Neste contexto, obtemos uma generalização da desigualdade de Boguliobov que mantém sua forma invariante para todo $q > 0$. Esta forma invariante foi apresentada na Ref.[37], mas em uma versão mais restrita. As análises apresentadas aqui estendem tal formulação a um importante caso, o caso onde o espectro é discreto, no intervalo para o qual $0 < q < 1$. No contexto clássico com $q < 1$, como foi apresentado no capítulo anterior, as altas ordens das derivadas de Z_q em relação a λ conduzem a uma diminuição dos possíveis valores de q . Tal redução nos valores de q é governada pela desigualdade $q > 1 - 1/(n - 1)$, onde n é a ordem do termo da expansão perturbativa, $F_q^{(n)}$. A aplicação da representação integral para valores de $q < 1$ conduz também a uma diminuição consistente dos valores de q de acordo com a relação expressa acima. Portanto, esta restrição nos possíveis valores de q não é uma consequência do uso da representação integral empregada aqui, mas um fato da teoria. Resumindo, os resultados obtidos aqui unificam os métodos perturbativos e variacionais no caso clássico e quântico.

Capítulo 4

RADIAÇÃO DO CORPO NEGRO: SOLUÇÃO EXATA

4.1 Introdução

Neste capítulo fazemos a análise da radiação de corpo negro, considerando n dimensões na estatística de Tsallis, de maneira *exata*. Ao fazermos este estudo, usamos uma nova representação integral para o peso estatístico de Tsallis, que foi introduzida nos capítulos anteriores. Como consequência deste estudo, obtemos a generalização, para a estatística de Tsallis, de muitas das relações da radiação de corpo negro conhecidas no caso usual ($q=1$). Mais precisamente, obteremos expressões não aproximadas para as funções termodinâmicas da radiação de corpo negro no contexto não extensivo de Tsallis através do uso de uma nova representação integral para o peso estatístico de Tsallis obtida aqui. O estudo deste problema é muito importante por muitas razões, mas, duas delas me-

recem atenção especial em nossa discussão. Primeiramente, soluções aproximadas da radiação de corpo negro têm sido empregadas na discussão deste tema [24, 42] e de assuntos correlacionados[23, 43]. Os resultados exatos obtidos aqui devem servir para fortalecer e proporcionar uma melhor análise, dando uma base firme à discussão corrente. Segundo, é a primeira vez que um sistema quântico de muitas partículas é analisado exatamente no contexto da estatística generalizada de Tsallis. Assim, podemos, pela primeira vez, entender um exemplo concreto de um sistema quântico de muitos graus de liberdade onde temos a presença do grau de não extensividade induzida pelo parâmetro q . Ademais, obtemos a generalização das contempladas relações da lei de Stefan-Boltzmann, das fórmulas de Rayleigh-Jeans, Wien, e Planck. Verificamos também que a relação entre pressão, volume, e energia interna é invariante em forma com respeito ao índice entrópico de Tsallis, q . Os estudos que se seguem são realizados considerando um espaço n -dimensional, como falamos inicialmente, e as expressões finais são expressas em termos de séries convergentes. Sendo que, para o caso unidimensional, se considerarmos formalmente o número de polarizações, $\tau_1 \neq 0$, então podemos expressar tais séries em termos da função de Bessel $I_\alpha(x)$.

4.2 Análise da Radiação de Corpo Negro

Para analisarmos a radiação do corpo negro na estatística generalizada, vamos considerar primeiro a função de partição usual para a radiação de corpo negro[54],

$$Z_1 = \sum_{\{n_{\vec{k},\epsilon}\}} \exp\left(-\beta \sum_{\vec{k},\epsilon} n_{\vec{k},\epsilon} \hbar\omega\right) \quad (4.1)$$

que para um volume grande, podemos escrevê-la como sendo

$$\begin{aligned} Z_1 &= \exp \left\{ - \int_0^\infty d\omega g_n(\omega) \ln[1 - \exp(-\beta\hbar\omega)] \right\} \\ &= \exp \left[\frac{I_n A_n}{(\hbar\beta)^n} \right], \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde $g_n(\omega) = A_n \omega^{n-1}$ é a densidade de estados no espaço n -dimensional,

$$A_n = \frac{2\tau_n V}{(4\pi c^2)^{n/2} \Gamma(n/2)} \quad (4.3)$$

(τ_n é o número de polarizações linearmente independentes), c é a velocidade da luz, e V é o volume), e

$$I_n = - \int_0^\infty x^{n-1} \ln(1 - e^{-x}) = \Gamma(n)\zeta(n+1). \quad (4.4)$$

Assim, a função de partição generalizada, Eq.(1.6), expressa em termos da representação integral[49] fica,

$$Z_q = \int_{-\infty}^\infty dt K_q(t) \exp \left\{ \frac{\Gamma(n)\zeta(n+1)A_n}{[(1+it)(1-q)\hbar\beta]^n} \right\} \quad \text{com} \quad K_q(t) = \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) e^{1+it}}{2\pi(1+it)^{\frac{2-q}{1-q}}}. \quad (4.5)$$

Para calcularmos esta integral expandiremos a exponencial, assim

$$Z_q = \sum_{m=0}^\infty \frac{\xi_n^m}{m!} \int_{-\infty}^\infty dt K_q(t) \frac{1}{(1+it)^{nm}} \quad (4.6)$$

onde

$$\xi_n = \frac{2\tau_n \Gamma(n)\zeta(n+1)V(kT)^n}{[2\pi^{1/2}(1-q)\hbar c]^n \Gamma(n/2)}. \quad (4.7)$$

Usando agora a Eq.(3.6) obtemos a expressão final para a função de partição generalizada,

$$Z_q = \sum_{m=0}^\infty \frac{\xi_n^m}{m!} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + nm\right)}, \quad (4.8)$$

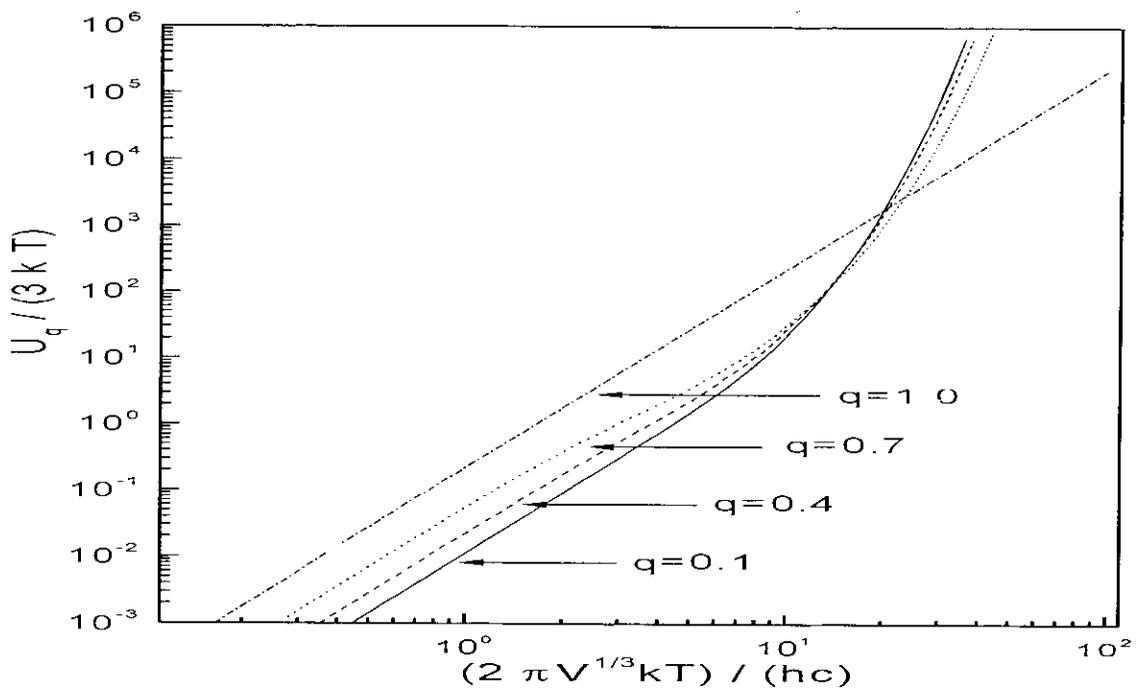


Figura 4.1: Nesta figura temos o comportamento da energia interna com $\frac{V^{1/3}kT}{hc}$ para quatro valores típicas de q considerando $n = 3$.

A substituição da Eq.(4.8) na Eq.(1.7) nos conduz à expressão para a energia interna generalizada

$$U_q = \frac{nkT\xi_n}{Z_q^q} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\xi_n^m}{m!} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + n(m+1)\right)}. \quad (4.9)$$

Sendo interessante ressaltarmos aqui que, se assumirmos formalmente que o número de polarizações no caso unidimensional não são nulas, $\tau_1 \neq 0$, as expressões obtidas acima podem ser expressas em termos da função de Bessel modificada de primeira espécie, $I_\alpha(x)$,

$$U_q = \frac{kT\xi_1^{\frac{4-3q}{2-2q}}}{Z_q^q} \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) I_{\frac{2-q}{1-q}}\left(2\xi_1^{1/2}\right) \quad (4.10)$$

onde

$$Z_q = \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) \xi_1^{-\frac{1}{2-2q}} I_{\frac{1}{1-q}}\left(2\xi_1^{1/2}\right). \quad (4.11)$$

O calor específico generalizado pode ser obtido diretamente do emprego de sua definição $C_q = \partial U_q / \partial T$. A fórmula (4.9) constitui a generalização da lei de Stefan-Boltzmann[54] (veja fig.(4.1)), e torna-se proporcional ao produto VT^{n+1} para $\xi_n \ll 1$, ou no limite $q \rightarrow 1$ (caso de Boltzmann-Gibbs). De maneira análoga, a pressão generalizada é obtida das Eqs.(1.7), (1.9) e (4.9). Em particular, verificamos que

$$P_q V = \frac{1}{n} U_q . \quad (4.12)$$

Note que a relação entre a pressão e a energia interna é *invariante* em sua forma na estatística não extensiva de Tsallis, isto é, a Eq. (4.12) é verificada para valores genéricos de q .

4.3 Distribuição Espectral de Energia

Para obtermos a distribuição espectral de energia da radiação de corpo negro generalizada (a generalização da fórmula de Planck) não calculamos a integral sobre ω na expressão para U_q . Desta maneira substituindo a Eq.(4.5) na Eq.(1.7) obtemos a relação desejada,

$$U_q = \int_0^\infty d\omega u_q , \quad (4.13)$$

onde

$$u_q = \frac{\hbar A_n \omega^n}{Z_q^q} \int_{-\infty}^\infty dt G_q(t) \frac{Z_1(\tilde{\beta}) \exp(-\tilde{\beta} \hbar \omega)}{1 - \exp(-\tilde{\beta} \hbar \omega)} , \quad (4.14)$$

e

$$G_q(t) = \frac{\Gamma(\frac{1}{1-q})}{2\pi} \frac{\exp(1 + it)}{(1 + it)^{1/(1-q)}} . \quad (4.15)$$

Após a expansão de $Z_1(\beta)$ em termos de β e empregando a identidade $1/(1-x) = \sum_{s=0}^{\infty} x^s$,

com $x = \exp(-\beta\hbar\omega)$, obtemos que

$$u_q = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right) \hbar A_n \omega^n}{2\pi Z_q^q} \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \left\{ \frac{I_n A_n}{[(1-q)\hbar\beta]^n} \right\}^s \times \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\exp([1 - (1-q)\beta\hbar\omega m](1+it))}{(1+it)^{1/(1-q)+ns}}. \quad (4.16)$$

Usando a Eq.(3.6), a integral na expressão anterior pode ser facilmente calculada; verificamos que

$$u_q = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right) \hbar A_n \omega^n}{Z_q^q} \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{m_{max}} \frac{1}{s!} \left\{ \frac{I_n A_n}{[(1-q)\hbar\beta]^n} \right\}^s \frac{[1 - (1-q)\beta\hbar\omega m]^{q/(1-q)+ns}}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + ns\right)}, \quad (4.17)$$

onde m_{max} é o maior número inteiro que satisfaz a desigualdade, $1 - (1-q)\beta\hbar\omega m > 0$.

A Eq. (4.17) é a generalização da fórmula de Planck.

A baixas frequências ($\beta\hbar\omega \ll 1$, isto é, $1 - \exp(-\tilde{\beta}\hbar\omega) \sim \tilde{\beta}\hbar\omega$), a Eq. (4.14) torna-se a fórmula de Rayleigh-Jeans generalizada,

$$u_q(\omega, \beta, V) = \frac{A_n \omega^{n-1}}{\beta Z_q^{q-1}}. \quad (4.18)$$

Como no caso usual ($q = 1$), esta expressão cresce com ω^{n-1} e conseqüentemente apresenta a catástrofe do ultravioleta. Por outro lado, para frequências altas ($\beta\hbar\omega \gg 1$, isto é $1 - \exp(-\tilde{\beta}\hbar\omega) \sim 1$) a fórmula generalizada de Wien é obtida,

$$u_q(\omega, \beta, V) = \frac{\hbar A_n \omega^n}{Z_q^q} [1 - (1-q)\beta\hbar\omega]^{q/(1-q)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left\{ \frac{I_n A_n}{[(1-q)\beta\hbar]^n} \right\}^m \times [1 - (1-q)\beta\omega\hbar]^{nm} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + nm\right)}. \quad (4.19)$$

Assim, a fórmula generalizada de Wien torna-se nula para $\beta\hbar\omega > 1/(1-q)$. Este fato nos informa que a lei de decaimento exponencial presente na usual fórmula de Wien é

trocada por outro comportamento muito mais rápido que pode ser interpretado como a assinatura da estatística de Tsallis para $q < 1$.

4.4 Discussão

Resumindo, obtemos aqui as expressões exatas para as funções termodinâmicas para a radiação de corpo negro na estatística não extensiva de Tsallis com o uso das representações integrais. Assim, o resultado obtido aqui é útil para consolidar as análises de muitas das situações nas quais a radiação de corpo negro[24] e seus sistemas correlacionados[21, 23, 41, 42, 43] têm um importante lugar. Observamos que o caso $q > 1$ não foi abordado aqui, devido ao fato de que a função de partição Z_q , neste caso, não possui sentido físico, pois não se encontra definida no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, a menos, que $q \rightarrow 1$. Porém, isto significaria que estamos no caso tradicional e não no contexto da estatística generalizada de Tsallis.

Capítulo 5

INTEGRAL DE TRAJETÓRIA E A EQUAÇÃO DE BLOCH

5.1 Introdução

As técnicas de integral de trajetória permeiam a análise de muitas situações dentro da física. Como exemplo podemos ressaltar a sua grande amplitude na mecânica estatística usual. Entretanto, a existência de comportamentos não extensivos é muito comum em muitas áreas da física, dentre eles os sistemas estatísticos, o que nos leva à necessidade de reformular a integral de trajetória, de maneira a incorporar estes efeitos.

Neste capítulo apresentamos duas possíveis generalizações da equação de Bloch para sistemas não extensivos baseados na entropia de Tsallis. A primeira forma de generalização da equação de Bloch é linear, mas com uma Hamiltoniana efetiva que tem uma dependência na temperatura; a outra equação relembra uma equação de difusão anômala. A *integral*

de trajetória formulada por nós é a solução dessas duas equações diferentes, porém, equivalentes *equações generalizadas de Bloch* obtidas aqui. Para ilustrar o método, analisamos uma partícula livre para $q > 1$ e $q < 1$, obtendo sua matriz densidade. E a extensão para a teoria de campos baseada nesta prescrição será evidente; tratamos dela na seção 5.1.

5.2 Generalização contendo H_{eff}

Nesta seção apresentamos as possíveis generalizações para a equação de Bloch. Porém damos aqui maior atenção à formulação de integral de trajetória que será obtida a partir da equação de Bloch, onde temos a presença de um Hamiltoniano efetivo. E deixamos para a seção seguinte a formulação de integral de trajetória via representações integrais.

Da estatística usual é conhecido que matriz densidade tem a seguinte forma,

$$\hat{p}_1(\beta) = e^{-\beta\hat{H}}/Z_1 \quad (\text{Tr } \hat{p}_1(\beta) = 1) \quad (5.1)$$

($Z_1 = \text{Tr } e^{-\beta\hat{H}}$ é a função de partição usual) e a matriz densidade não normalizada é dada por

$$\tilde{\rho}_1(\beta) = \exp(-\beta\hat{H}) \quad (5.2)$$

obedece a equação de Bloch[55]

$$-\frac{\partial\tilde{\rho}_1}{\partial\beta} = \hat{H}\tilde{\rho}_1, \quad (5.3)$$

com a condição inicial $\tilde{\rho}_1(\beta = 0) = \mathbf{1}$. Assim, como no caso da mecânica estatística usual, a matriz densidade não normalizada $\tilde{\rho}_q$ é

$$\tilde{\rho}_q(\beta) = [1 - (1 - q)\beta\hat{H}]^{1/(1-q)}, \quad (5.4)$$

que satisfaz à equação

$$-\frac{\partial \tilde{\rho}_q}{\partial \beta} = \frac{\hat{H}}{1 - (1 - q)\beta \hat{H}} \tilde{\rho}_q, \quad (5.5)$$

e, alternativamente

$$-\frac{\partial \tilde{\rho}_q}{\partial \beta} = \hat{H} \tilde{\rho}_q^q \quad (5.6)$$

com a condição inicial de que $\tilde{\rho}_q(\beta = 0) = 1$. Como podemos ver, estas equações generalizam a equação de Bloch no contexto não extensivo de Tsallis. A equação generalizada de Bloch, Eq.(5.5), é linear em $\tilde{\rho}_q$ e tem a mesma forma da (5.3), se empregarmos a Hamiltoniana efetiva $\hat{H}_{eff} = \hat{H}[1 - (1 - q)\beta \hat{H}]^{-1}$. Por outro lado, a equação de Bloch generalizada (5.6) tem formalmente a mesma forma da equação de difusão anômala [18]. No desenvolvimento que segue a integral de trajetória será solução de ambas equações de Bloch generalizadas.

As Eqs. (5.3) e (5.5) têm a mesma forma; a integral de trajetória deve então preservar a mesma estrutura que a integral de trajetória usual, exceto pelo fato de termos o Hamiltoniano efetivo. Assim, a integral de trajetória para $\tilde{\rho}_q$ neste contexto pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \langle x | \tilde{\rho}_q(\beta) | x' \rangle &= \rho_q(x, x'; \beta) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \cdots \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} dx_n \right] \left[\prod_{n=1}^N \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \sum_{n=1}^N [i p_n (x_n - x_{n-1}) - \epsilon H_{eff}(p_n, \bar{x}_n, n\epsilon)] \right\} \\ &= \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^\beta (ip\dot{x} - H_{eff}) d\tau \right], \end{aligned} \quad (5.7)$$

onde $\bar{x}_n = (x_{n+1} - x_n)/2$. Nesta formulação de integral de trajetória estamos considerando que a Hamiltoniana \hat{H} assim como \hat{H}_{eff} estejam Weyl ordenadas, e conseqüentemente

usamos a prescrição empregada por Schuman[56]. Em geral esta integral de trajetória não é fácil de calcular devido ao fato de que a Hamiltoniana \hat{H}_{eff} tem uma dependência não usual nas coordenadas e nos momentos. Entretanto, como veremos, é possível calcularmos $\tilde{\rho}_q$ para o caso de uma partícula livre. Neste caso, devemos fazer primciramente a integral nas coordenadas e depois nos momentos,

$$\begin{aligned} \rho_q(x, x'; \beta) &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{ip}{\hbar}(x - x') \right] \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} dp_n \delta(p_n - p_{n-1}) \right] \times \\ &\times \exp \left\{ -\epsilon \sum_{n=1}^N \left[\frac{p_n^2/2m}{1 - \epsilon n(1-q)p_n^2/2m} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Pelo uso da identidade (inêdita, no nosso conhecimento)

$$\ln(1+x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \left(\frac{x}{N} \right) \frac{1}{1 + \frac{nx}{N}}, \quad (5.9)$$

e considerando o caso $q > 1$ com $\beta > 0$ obtemos, após a integração sobre os momentos, a expressão (5.4) baseada na representação dos momentos:

$$\begin{aligned} \rho_q(x, x'; \beta) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{ip}{\hbar}(x - x') \right] \left[1 - (1-q)\beta \frac{p^2}{2m} \right]^{1/(1-q)} \\ &= \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{q-1})} \left[\frac{2m}{\pi(q-1)\beta\hbar^2} \right]^{1/2} \left[\left(\frac{m(x-x')^2}{2(q-1)\beta\hbar^2} \right)^{1/2} \right]^{1/(q-1)-1/2} \times \\ &\times K_{1/(q-1)-1/2} \left[\left(\frac{2m(x-x')^2}{(q-1)\beta\hbar^2} \right)^{1/2} \right]. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Na última passagem usamos a conhecida integral (veja [50] pág. 321) e a relação entre a função de Witteraker ($W_{0,\nu}$) e a função modificada de Bessel de segunda espécie K_ν .

No caso $q < 1$ com $\beta > 0$, temos a presença de um “cut-off”, com isso a região de integração fica limitada nos momentos e a integral de trajetória (5.8) se reduz à primeira parte da Eq. (5.10) com p satisfazendo a condição de que $1 - (1-q)\beta p^2/2m \geq 0$. Assim,

quando a última integração é feita (veja [50] pág. 321), obtemos

$$\begin{aligned}
 \rho_q(x, x'; \beta) &= \int_{-\left[\frac{2m}{(1-q)\beta}\right]^{1/2}}^{\left[\frac{2m}{(1-q)\beta}\right]^{1/2}} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{ip}{\hbar}(x-x')\right] \left[1 - (1-q)\beta\frac{p^2}{2m}\right]^{1/(1-q)} \\
 &= \Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right) \left[\frac{m}{2\pi(1-q)\beta\hbar^2}\right]^{1/2} \left[\left(\frac{2(1-q)\beta\hbar^2}{m(x-x')^2}\right)^{1/2}\right]^{1/(1-q)+1/2} \times \\
 &\times J_{1/(1-q)+1/2} \left[\left(\frac{2m(x-x')^2}{(1-q)\beta\hbar^2}\right)^{1/2}\right]. \tag{5.11}
 \end{aligned}$$

A função de partição pode ser obtida para $q > 1$ e $q < 1$ tomando o traço de $\rho_q(x, x'; \beta)$, onde estamos considerando V grande para obtermos a função de partição no contexto clássico. De fato, para $q > 1$, obtemos

$$\begin{aligned}
 Z_q &= \int_{-L/2}^{L/2} dx \rho_q(x, x; \beta) \\
 &= L \left[\frac{m}{2\pi(q-1)\beta\hbar^2}\right]^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}, \tag{5.12}
 \end{aligned}$$

e para $q < 1$ temos que

$$Z_q = L \left[\frac{m}{2\pi(1-q)\beta\hbar^2}\right]^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + \frac{3}{2}\right)}, \tag{5.13}$$

onde L é o comprimento da região de integração (comprimento da caixa).

5.3 Generalização via Representações Integrais

Vamos considerar a identidade[47]

$$[1 - (1-q)\beta\hat{H}]^{1/(1-q)} = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty dv v^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-v} \exp(-v(q-1)\beta\hat{H}). \tag{5.14}$$

Esta identidade é essencialmente uma aplicação da função Gamma. Em ambos os lados de (5.14) temos a presença de um autoestado de \hat{H} com $q > 1$, $\beta > 0$ e $E_n > 0$ (onde

os $\{E_n\}$ são os autovalores de \hat{H}). Desta forma, a representação de integral de trajetória para a Eq.(5.14), é obtida para $\tilde{\rho}_q(\beta)$ expressando $\tilde{\rho}_1(v(q-1)\beta)$ em termos de integral de trajetória. Assim, obtemos,

$$\begin{aligned} \rho_q(x, x'; \beta) &= \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty dv v^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-v} \rho_1(x, x'; v(q-1)\beta) \\ &= \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty dv v^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-v} \int \dots \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p e^{\int^{\beta^*} (p\dot{q} - H(p, q)) d\tau}, \end{aligned} \quad (5.15)$$

com $\beta^* = v(q-1)\beta$, desta forma podemos trocar $\tilde{\rho}_1(v(q-1)\beta)$ de representação usando a holomórfica se for conveniente. Para obtermos a função de partição a partir de (5.15), basta simplesmente tomar o traço [47].

Aplicaremos a Eq. (5.14) para obter a matriz densidade generalizada para uma partícula considerando que a mesma esteja contida em um espaço unidimensional. Neste contexto temos que a matriz densidade usual, na representação das coordenadas, é dada por[53]

$$\rho_1(x, x'; \beta) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} \exp\left[-\left(\frac{m}{2\hbar^2\beta}\right)(x-x')^2\right]. \quad (5.16)$$

Quando esta expressão é colocada em Eq. (5.15) e sua expressão calculada (veja [50] pág. 340), obtemos, como esperado, a expressão (5.10).

A transformação integral (5.14) não pode ser aplicada para $q < 1$. No entanto, para $q < 1$, a identidade

$$[1 - (1-q)\beta\hat{H}]^{1/(1-q)} = \frac{i}{2\pi} \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) \int_C dv (-v)^{-\frac{2-q}{1-q}} e^{-v} \exp(v(1-q)\beta\hat{H}) \quad (5.17)$$

pode ser empregada[48], exceto para alguns valores particulares de q ($(2-q)/(1-q) \neq \text{inteiro}$). Como no caso $q > 1$, esta representação integral é uma consequência direta de outra representação da função Gamma. Assim, como no caso anterior podemos formular

a integral de trajetória para $q < 1$. É suficiente que coloquemos $\exp(v(1-q)\beta\hat{H})$ em uma representação de integral de trajetória e a substituamos na Eq. (5.17) para obtermos a integral de trajetória descjada para $\rho_q(x, x'; \beta)$ com $q < 1$.

5.4 Extensão à Formulação de Campos

A extensão à teoria de campos com a prescrição descrita acima, considerando o tempo imaginário, ou seja $t \rightarrow -i\hbar\beta$, pode ser facilmente obtida, considerando o fato de podermos usar a representação integral para poder obtê-la. Assim, considerando a matriz densidade não normalizada, Eq. (5.4), e a representação integral Eq.(1.10), teremos,

$$\begin{aligned}
[1 - (1 - q)\beta\hat{H}]^{1/(1-q)} &= \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{2\pi} \int_C du \frac{e^{-u}}{(-u)^{\frac{2-q}{1-q}}} \exp((1-q)\beta(-u)\hat{H}) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} du K_q^{(1)}(u) \exp((1-q)\beta(-u)\hat{H}) \\
K_q^{(1)}(u) &= \frac{i\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{2\pi} e^{-u} (-u)^{\frac{2-q}{1-q}}
\end{aligned} \tag{5.18}$$

Com a ajuda da Eq.(5.18) podemos definir o gerador funcional, a partir do qual podemos obter os valores médios q , ou seja, a função de correlação entre os campos, devido à distribuição de Tsallis, Eq.(1.4). Logo, o gerador funcional fica dado por,

$$\mathcal{Z}(J) = \int_C dv K_q^{(2)}(v) \int \dots \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi e^{\int_0^{\beta^*} d\tau \int d^3x (\pi \cdot \dot{\phi} - H(\phi, \pi))} e^{\int_0^{\beta} d\tau \int d^3x J \cdot \phi} \tag{5.19}$$

onde $\beta^* = (1-q)(-u)\beta$ e $K_q^{(2)}(u) = K_q^{(1)}(u)/[(1-q)(\mathcal{Z}(0))^q]$, sendo que ϕ e π são os campos associados à dinâmica do sistema em consideração. O termo de fonte foi colocado propositalmente a fim de podermos gerar as funções de correlação entre os i -ésimo e o j -ésimo campo (veja Ref.[57]). Providos da Eq.(5.19) e das derivações funcionais com

relação ao termo de fonte, podemos obter a função de Green de $2n$ pontos generalizada,

$$G_q^{(2n)}(x_1, x_2, \dots, x_{2n}) = \frac{\delta^{2n} \mathcal{Z}(J)}{\delta J_1 \delta J_2 \dots \delta J_{2n}} = \langle \phi_1 \phi_2 \dots \phi_{2n} \rangle_q. \quad (5.20)$$

Ressaltando aqui que a integral de trajetória é muito importante, uma vez que podemos obter toda a informação do sistema apenas analisando o aspecto dinâmico dos campos neste contexto. Assim, como uma aplicação simples, vamos obter a pressão devida ao estado fundamental de energia, para um campo escalar neutro não interagente no contexto não extensivo de Tsallis. A densidade Lagrangiana é,

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{1}{2} m^2 \phi^2 \quad (5.21)$$

onde estamos considerando, por simplicidade, que $c = 1$ e $\hbar = 1$, e conseqüentemente, a densidade Hamiltoniana fica dada por

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \pi^2 + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 \quad (5.22)$$

Para prosseguirmos com os demais cálculos é necessário que encontremos a função de partição e para tal temos,

$$Z_q = \int_C dv K_q^{(1)}(v) \int \dots \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi e^{\int d\tau \int d^3x (\pi \cdot \dot{\phi} - \mathcal{H}(\phi, \pi))} \quad (5.23)$$

e, após a integração nos momentos, teremos

$$Z_q = \int_C dv K_q^{(1)}(v) \int \dots \int \mathcal{D}\phi e^{\int_0^{\beta^*} d\tau \int d^3x \mathcal{L}} \quad (5.24)$$

substituindo a densidade Lagrangiana e efetuando as contas de maneira similar ao caso usual, temos que a função de partição fica dada por,

$$Z_q = \int_C dv K_q^{(1)}(v) \exp \left(-\frac{1}{2} (\beta^*)^2 \sum_n \sum_p (\omega_n^2 + \omega^2) \right) \quad (5.25)$$

onde $\omega = (\vec{p}^2 + m^2)^{1/2}$ e $\omega_n = 2\pi n/\beta^*$. Agora, usando algumas identidades matemáticas para reduzir a expressão acima, vemos que a mesma pode ser reescrita como,

$$Z_q = \int_C dv K_q^{(1)}(v) \exp \left\{ -V \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{2} \beta (1-q)(-u)\omega + \ln \left(1 - e^{-\beta(1-q)(-u)\omega} \right) \right] \right\}. \quad (5.26)$$

Esta equação é idêntica à função de partição bosônica do capítulo anterior, a não ser por alguns detalhes, dentre eles a presença da energia de ponto zero. Assim, para calcularmos a pressão devida ao estado fundamental devemos usar a Eq.(1.9) juntamente com o limite de $\beta \rightarrow \infty$ para obtermos a pressão, devido ao estado fundamental,

$$\begin{aligned} P_q &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{Z_q^{1-q} - 1}{q - 1} \right) \\ &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{Z_q^q} \int_C dv K_q^{(2)}(u) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{2} \omega + \frac{1}{\beta} \ln \left(1 - e^{\beta(1-q)(-u)\omega} \right) \right] \times \\ &\times \exp \left\{ -V \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{2} \beta (1-q)(-u)\omega + \ln \left(1 - e^{-\beta(1-q)(-u)\omega} \right) \right] \right\} \\ &= \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \omega. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Tal resultado para a pressão generalizada, apresentado acima no estado fundamental, já era esperado, pois é devido a uma propriedade dinâmica do sistema e não estatística, tanto é que obtivemos o mesmo resultado que o caso usual.

5.5 Discussão

Neste capítulo, desenvolvemos de uma maneira unificada, duas diferentes, mas equivalentes generalizações da integral de trajetória, bem como, suas equações de Bloch e também estendemos estas generalizações ao formalismo da teoria de campo com t imaginário. No primeiro caso, a equação de Bloch tem o mérito de preservar a forma quando comparada

com a equação de Bloch usual. Entretanto, possui uma dependência da temperatura na sua Hamiltoniana efetiva e esta dependência na temperatura dificulta muito os cálculos. A outra generalização da equação de Bloch tem uma forma não usual, lembrando muito uma equação de difusão anômala; sendo assim, ela não tem uma explícita dependência na temperatura, mas, por outro lado é uma equação não linear. A correspondente integral de trajetória é obtida das representações integrais da função Gama. Ademais, a integral de trajetória é diretamente usada para realizar tais generalizações. Este fato conduz a uma maneira natural de generalizarmos a integral de trajetória de maneira a manter as propriedades da integral de trajetória usual no contexto não extensivo de Tsallis. Neste sentido, a segunda formulação de integral de trajetória é mais interessante que a primeira. E por fim mostramos que a extensão à teoria de campo formulada em termos de integral de trajetória com tempo imaginário segue naturalmente através do uso das representações integrais.

Capítulo 6

MÉTODOS DA FUNÇÃO DE GREEN

6.1 Introdução

Neste capítulo desenvolvemos a generalização das funções de Green pertinentes ao caso usual para os sistemas não extensivos, empregando o formalismo q de Tsallis. Esta generalização nos conduzirá à um desenvolvimento formal de muitas das propriedades da função de Green, o que facilitará em muito o cálculo de algumas das quantidades que na prática poderão ser mensuráveis, tais como a generalização da função de distribuição para os elétrons numa aniquilação de pósitrons em experimentos de espalhamento Compton com raio-X[58]; condensação bôsonica para um pequeno número de átomos confinados[59]; e seções de choque para o espalhamento devido a perturbações externas tais como neutrons, fótons, etc[60], todos generalizados em termos dos valores médios q . Assim na seção 6.2,

que segue, fazemos o desenvolvimento da teoria das funções de Green, com a subseção 6.2.1 contendo o desenvolvimento da função de Green para o caso de uma partícula, a subseção 6.2.2 e uma simples extensão ao caso das funções de Green que contem várias partículas no qual enfocamos, por exemplo, a função de Green relativa a duas partículas. Na subseção seguinte, a 6.2.3 desenvolvemos a aproximação de Hartree e na subseção 6.2.4 aproximação de Hartree-Fock, e por fim, na última subseção desta seção desenvolvemos o formalismo para a função resposta. Na seção 6.3, mostramos expressões de algumas quantidades relevantes, no caso em que temos processo de espalhamento. E por fim, na seção 6.4, apresentamos uma discussão dos resultados obtidos.

6.2 Teoria das Funções de Green

Nesta seção, desenvolvemos a teoria das funções de Green térmicas, descrevendo algumas das propriedades dos sistemas não extensivos contendo muitas partículas. Entretanto, não introduzimos aqui uma dificuldade maior que a existente na teoria usual de funções de Green. Podemos aplicar tal método a partículas obedecendo uma situação de equilíbrio ou não. E como dissemos na introdução, faremos o desenvolvimento em cinco subseções.

6.2.1 Função de Green de uma Partícula

Adotamos o método de segunda quantização dos operadores de criação e aniquilação na representação de Heisenberg como no livro do Kadanoff and Baym[61] (daqui por

diante citaremos o mesmo como KB) para descrever um sistema de muitas partículas cujo operador Hamiltoniano \hat{H} sem interação entre as partículas é dado por

$$\hat{H} = \int d^D x \Psi^\dagger(\vec{r}_1, t_1) \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(\vec{r}_{1'}, t_{1'}) \quad (6.1)$$

onde temos que o operador número \hat{N} é dado por ,

$$\hat{N} = \int d^D x \Psi^\dagger(\vec{r}_{1'}, t_{1'}) \Psi(\vec{r}_1, t_1) \quad (6.2)$$

Desta maneira podemos descrever sistemas não extensivos a temperatura arbitrárias, e para sistemas bosônicos ou fermiônicos em equilíbrio pela maximização da entropia de Tsallis(Eq. (1.1)), sujeita aos seus respectivos vínculos, obteremos a matrix densidade do sistema, através da qual poderemos definir a função de Green generalizada da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} G^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu) &= \frac{1}{i} \frac{\langle T(\Psi(1)\Psi^\dagger(1')) \rangle_q}{\langle 1 \rangle_q} \\ &\equiv \frac{1}{i \langle 1 \rangle_q} \text{Tr} \hat{P}(\hat{H}, \hat{N}; q, \beta, \mu) T(\Psi(1)\Psi^\dagger(1')), \end{aligned} \quad (6.3)$$

onde

$$\begin{aligned} \hat{P}(\hat{H}, \hat{N}; q, \beta, \mu) &= [1 - \beta(1 - q)(\hat{H} - \mu\hat{N})]^{q/(1-q)} / (Z_q)^q, \\ Z_q &= \text{Tr} [1 - \beta(1 - q)(\hat{H} - \mu\hat{N})]^{1/(1-q)} \\ \text{Tr} \hat{P}(\hat{H}, \hat{N}; q, \beta, \mu) &= \frac{\tilde{Z}_q}{Z_q^q}, \text{ com} \\ \tilde{Z}_q &= \text{Tr} (1 - \beta(1 - q)(\hat{H} - \mu\hat{N}))^{q/(1-q)} \end{aligned} \quad (6.4)$$

Eq. (6.4) é uma consequência da maximização da entropia de Tsallis. Aqui β e μ são os multiplicadores de Lagrange associados aos seus respectivos vínculos e têm o mesmo

significado de inverso da temperatura e potencial químico na descrição usual. Aqui, T refere-se ao espaço-tempo da partícula em (\vec{r}_1, t_1) e T é o ordenamento temporal usual de Wick.

$$\begin{aligned} T(\Psi(1)\Psi^\dagger(1')) &= \Psi(1)\Psi^\dagger(1') \quad \text{para } t_1 > t_1' \\ &= \pm\Psi^\dagger(1')\Psi(1) \quad \text{para } t_1 < t_1', \end{aligned} \quad (6.5)$$

Os operadores de criação $\Psi^\dagger(\vec{r}, t)$ e de aniquilação $\Psi(\vec{r}, t)$ obedecem às regras de comutação canônicas (CCR) em tempos iguais:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}', t) \mp \Psi(\vec{r}', t)\Psi(\vec{r}, t) &= 0 \quad \text{e seu hermitiano conjugado,} \\ \Psi(\vec{r}, t)\Psi^\dagger(\vec{r}', t) \mp \Psi^\dagger(\vec{r}', t)\Psi(\vec{r}, t) &= \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \end{aligned} \quad (6.6)$$

Nas análises subseqüentes, o sinal de cima se referirá a bosons e o sinal inferior se referirá a fermions. As definições para outras funções de Green generalizadas para mais de uma partícula seguem a mesma análise acima. Podemos também ver que o ensemble Grand Canonical convencional dado no KB é obtido aqui quando tomamos o limite de $q \rightarrow 1$. Aqui vamos fazer uso constante das representações integrais para o peso estatístico, a fim de que possamos contornar as dificuldades e facilitar o nosso caminho durante os demais cálculos que envolvem as funções de Green generalizadas. Assim, expressando as funções de Green generalizadas com o uso da Eq.(1.10), temos,

$$\begin{aligned} G^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu) &= \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) G^{(1)}(1, 1'; -\beta u(1-q), \mu) \\ \tilde{K}_q^{(2)}(u) &= \frac{K_q^{(2)}(u)}{\langle 1 \rangle_q}, \end{aligned} \quad (6.7)$$

onde

$$\begin{aligned}
K_q^{(2)}(u) &= -\frac{(1-q)u}{(Z_q)^q} K_q^{(1)}(u) \\
&= i \frac{\Gamma(1/(1-q))}{2\pi (Z_q)^q} \exp(-u)(-u)^{-1/(1-q)}. \quad (6.8)
\end{aligned}$$

onde $G^{(1)}(1, 1'; \beta, \mu)$ é a função de Green Grand Canônica usual dada pelo KB. De maneira similar podemos discutir a função de Green de muitas partículas. Também, a dinâmica linear da função resposta derivada no [26] poderá ser generalizada em termos de uma integral paramétrica relacionando a mesma em termos da usual função resposta dependente do tempo[61]. Para as análises subsequentes devemos escolher o contorno de integração, no qual a integral sobre u é tal que resulta em integrais convergentes, e a mesma nos deve conduzir as condições relativas ao valor de q . Seguindo o KB, introduziremos as funções de correlação

$$\begin{aligned}
G_{>}^{(q)}(11'; \beta, \mu) &= \frac{1}{i \langle 1 \rangle_q} \langle \Psi(1) \Psi^\dagger(1') \rangle_q \\
G_{<}^{(q)}(11'; \beta, \mu) &= \frac{\pm}{i \langle 1 \rangle_q} \langle \Psi^\dagger(1') \Psi(1) \rangle_q \quad (6.9)
\end{aligned}$$

Onde a notação $>$ e $<$ é feita para exibir o fato de que $G^{(q)}(1, 1'; \beta, t_1) = G_{>}^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu)$ para $t_1 > t_1'$ and $G^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu) = G_{<}^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu)$ para $t_1 < t_1'$. Usando a Eq.(6.7), poderemos similarmente expressar $G_{>}^{(q)}$ e $G_{<}^{(q)}$ em termos das correspondentes funções de correlação no ensemble Grand Canônico. A função do peso espectral no espaço das frequências é dada através da transformada de Fourier com respeito a tempos diferentes, $A(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega)$ introduzindo em KB refletindo somente as propriedades da Hamiltoniana \hat{H} . O número de ocupação média no ensemble Grand Canônico de um modo com energia

ω , $f(\omega, \beta) = (\exp(\beta(\omega - \mu)) \mp 1)^{-1}$ contendo as relações básicas de simetria do sistema.

Então, podemos expressar $G_{>}^{(q)}$ e $G_{<}^{(q)}$ em termos destes da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} G_{>}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_{1'}; \omega; \beta, \mu) &= \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) G_{>}^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{r}_{1'}; \omega; -\beta u(1-q), \mu) \\ &= \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) (1 \pm f(\omega, -\beta u(1-q), \mu)) A(\vec{r}_1, \vec{r}_{1'}; \omega) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) , \end{aligned} \quad (6.10)$$

$$\begin{aligned} G_{<}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_{1'}; \omega; \beta, \mu) &= \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) G_{<}^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{r}_{1'}; \omega; -\beta u(1-q), \mu) \\ &= \pm \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) f(\omega, -\beta u(1-q)) A(\vec{r}_1, \vec{r}_{1'}; \omega) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) . \end{aligned} \quad (6.11)$$

Assim

$$\begin{aligned} G_{>}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_{1'}; \omega; \beta, \mu) - G_{<}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_{1'}; \omega; \beta, \mu) , &= \\ \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) A(\vec{r}_1, \vec{r}_{1'}; \omega) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) , & \end{aligned} \quad (6.12)$$

do qual deduzimos uma importante regra:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left(G_{>}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_{1'}; \omega; \beta, \mu) - G_{<}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_{1'}; \omega; \beta, \mu) \right) &= \\ \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_{1'}) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) &= \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_{1'}) . \end{aligned} \quad (6.13)$$

Esta expressão é justamente a expressão em tempos iguais do CCR dos campos das partículas. Para um sistema uniforme, podemos tomar a transformada com respeito a $\vec{r}_1 - \vec{r}_{1'}$ na Eq. (6.11) e expressar a função de Green de uma partícula em termos da distribuição dos momentos $\langle \hat{N}(\vec{p}) \rangle_q$ onde temos a presença da função espectral de um sistema de N-partículas.

$$\langle \hat{N}(\vec{p}) \rangle_q = \pm \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A(\vec{p}; \omega) Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{(e^{-\beta(1-q)u(\omega-\mu)} \mp 1)} . \quad (6.14)$$

Similarmente, a distribuição da frequência $\langle \hat{N}(\omega) \rangle_q$ é dada por,

$$\langle \hat{N}(\omega) \rangle_q = \pm V \int_C du K_q^{(2)}(u) \frac{Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{(e^{-\beta(1-q)u(\omega-\mu)} \mp 1)} \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} A(\vec{p}; \omega). \quad (6.15)$$

Aqui V é o volume de dimensão D , no qual as partículas residem. O potencial químico é determinado pela expressão do valor médio q do operador do número total de partículas \hat{N} ,

$$\frac{\langle \hat{N} \rangle_q}{V} = \pm \int_C du K_q^{(2)}(u) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \frac{Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{(e^{-\beta(1-q)u(\omega-\mu)} \mp 1)} A(\vec{p}; \omega) \quad (6.16)$$

6.2.2 $G_n^{(q)}(123\dots n; 1'2'3'\dots n'; \beta, \mu)$

Assim, como discutimos no caso da função de Green para uma partícula, podemos estender esta generalização a funções de Green com muitas partículas. Usando a mesma notação que o KB, teremos ,

$$\begin{aligned} G_n^{(q)}(12\dots n, 1'2'\dots n'; \beta, \mu) &= \frac{1}{i^n \langle 1 \rangle_q} \langle T(\Psi(1)\Psi(2)\dots\Psi(n)\Psi^\dagger(1')\Psi^\dagger(2')\dots\Psi^\dagger(n')) \rangle_q \\ &= \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) G_n^{(1)}(12\dots n, 1'2'\dots n'; -\beta(1-q)u, \mu). \end{aligned} \quad (6.17)$$

Para ilustrar como estas funções de Green de alta ordem comportam-se, consideremos, por exemplo, um sistema de muitas partículas com a Hamiltoniana contendo o potencial de um corpo $V_1(\vec{r}_1)$ e interações instantâneas de dois corpos $V_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, os quais são simétricos perante a troca dos índices 1 e 2:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hbar^2 \int d\vec{r} \frac{\vec{\nabla} \Psi^\dagger(\vec{r}, t) \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t)}{2m} + \int d\vec{r} V_1(\vec{r}) \Psi^\dagger(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \\ &+ \frac{1}{2} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \Psi^\dagger(\vec{r}, t) \Psi^\dagger(\vec{r}', t) V_2(\vec{r}, \vec{r}') \Psi(\vec{r}', t) \Psi(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (6.18)$$

A equação de movimento para um operador $\hat{X}(t)$ na representação de Heisenberg é,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{X}(t) = [\hat{X}(t), \hat{H}(t)] \quad (6.19)$$

e a função de Green de uma partícula obedece a seguinte equação de movimento

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \hbar^2 \frac{\vec{\nabla}^2}{2m} - V_1(\vec{r}_1) \right) G^{(q)}(1, 1') = \delta(1 - 1') \pm i \int d\vec{r}_2 V_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) G_2^{(q)}(12, 1'2^+) \Big|_{t_2=t_1} \quad (6.20)$$

De uma maneira similar, podemos escrever a equação de movimento para $G_2^{(q)}$ envolvendo $G_3^{(q)}$ e assim por diante, obtendo, assim, uma hierarquia das equações para todas as funções de Green. Isto nos conduz a problemas similares àqueles do formalismo convencional, mas aqui usamos aproximações considerando o número de partículas pequeno no sistema.

Em adição ao detalhe da informação dinâmica, $G^{(q)}$ contém toda possível informação física a respeito da mecânica estatística do sistema. Já tínhamos dado o valor médio q da densidade de partículas em termos de $G_{<}^{(q)}$ de Eq.(6.11). Seguindo KB podemos expressar o valor médio q da Hamiltoniana (6.18)

$$\langle \hat{H} \rangle_q = \frac{\pm i\hbar}{4} \int d\vec{r} \left[i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t'} \right) + \hbar^2 \frac{\nabla \cdot \nabla'}{m} - V_1(r) - V_1(r') \right] G_{<}^{(q)}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') \Big|_{\vec{r}'=\vec{r}, t=t'} \quad (6.21)$$

Para partículas livres temos $V_1(r) = 0$, e com o uso das Eqs.(6.14).(6.15) temos,

$$\frac{\langle \hat{H} \rangle_q}{V} = \int_C du K_q^{(2)}(u) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \left(\frac{\omega + p^2/2m}{2} \right) \frac{Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{(e^{-\beta(1-q)u(\omega-\mu)} \mp 1)} A(\vec{p}; \omega) \quad (6.22)$$

Seguindo o desenvolvimento de Curado e Tsallis[44], temos o Potencial Grand Canônico dado por

$$\Xi_q = -\frac{1}{\beta} \frac{Z_q^{1-q} - 1}{1-q} = \langle \hat{H} \rangle_q - \frac{1}{\beta} S_q - \mu \langle \hat{N} \rangle_q. \quad (6.23)$$

onde as quantidades termodinâmicas da termodinâmica generalizada P_q , $\langle \hat{N} \rangle_q$, S_q são dadas por,

$$P_q = - \left(\frac{\partial \Xi_q}{\partial V} \right)_{T, \mu} \quad \langle \hat{N} \rangle_q = - \left(\frac{\partial \Xi_q}{\partial \mu} \right)_{T, V} \quad S_q = - \left(\frac{\partial \Xi_q}{\partial T} \right)_{V, \mu} \quad (6.24)$$

Escrevendo a constante de acoplamento λ na frente da energia de interação teremos,

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$ onde

$$\hat{H}_0 = \int d\vec{r} \left(\frac{\hbar^2 \vec{\nabla} \Psi^\dagger(\vec{r}, t) \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t)}{2m} + V_1(\vec{r}) \Psi^\dagger(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \right) \quad (6.25)$$

e

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \Psi^\dagger(\vec{r}, t) \Psi^\dagger(\vec{r}', t) V_2(\vec{r}, \vec{r}') \Psi(\vec{r}', t) \Psi(\vec{r}, t) . \quad (6.26)$$

obtemos, para β , μ e V fixos,

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \frac{Z_q^{1-q} - 1}{1 - q} = -\beta \langle \hat{V} \rangle_q \quad (6.27)$$

da qual obtemos

$$\left(\frac{Z_q^{1-q} - 1}{1 - q} \right)_{\lambda=1} - \left(\frac{Z_q^{1-q} - 1}{1 - q} \right)_{\lambda=0} = -\beta \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \lambda \hat{V} \rangle_{q, \lambda} \quad (6.28)$$

Agora $\langle \lambda \hat{V} \rangle_{q, \lambda}$ é o valor médio q da energia de interação, para o comprimento de acoplamento λ , podendo ser expresso em termos da função espectral

$$\langle \lambda \hat{V} \rangle_{q, \lambda} = V \int_C du K_q^{(2)}(u) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \left(\frac{\omega - p^2/2m}{2} \right) \frac{Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{(e^{-\beta(1-q)u(\omega-\mu)} \mp 1)} A_\lambda(\vec{p}; \omega) \quad (6.29)$$

logo

$$\begin{aligned} \Xi_q &= -\frac{1}{\beta} \left(\frac{Z_q^{1-q} - 1}{1 - q} \right)_{\lambda=1} \\ &= -\frac{1}{\beta} \left(\frac{Z_q^{1-q} - 1}{1 - q} \right)_{\lambda=0} + V \int_C du K_q^{(2)}(u) \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^D p}{(2\pi)^D} \left(\frac{\omega - p^2/2m}{2} \right) \times \\ &\times \frac{Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{(e^{-\beta(1-q)u(\omega-\mu)} \mp 1)} A_\lambda(\vec{p}; \omega) \end{aligned} \quad (6.30)$$

Assim, temos

$$\begin{aligned}
P_q &= \frac{1}{\beta Z_q^q} \left(\frac{\partial Z_q}{\partial V} \right)_{\lambda=0} - \int_C du K_q^{(2)}(u) \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \left(\frac{\omega - p^2/2m}{2} \right) \\
&\times \frac{Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{(e^{-\beta(1-q)u(\omega-\mu)} \mp 1)} A_\lambda(\vec{p}; \omega) - V \frac{\partial}{\partial V} \left\{ \int_C du K_q^{(2)}(u) \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \right. \\
&\times \left. \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \left(\frac{\omega - p^2/2m}{2} \right) \frac{Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{(e^{-\beta(1-q)u(\omega-\mu)} \mp 1)} A_\lambda(\vec{p}; \omega) \right\} \quad (6.31)
\end{aligned}$$

da qual obtemos, usando a equação (6.24), o termo constante, $(1/(\beta Z_q^q))(\partial Z_q/\partial V)_{\lambda=0}$, que é justamente a pressão generalizada P_q para a partícula livre. Podemos notar também que a compressibilidade, que é relacionada com a velocidade do som no sistema, é dada por,

$$\begin{aligned}
\kappa_{T,q} &= -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P_q} \right)_T \\
&= \frac{1}{V\beta} \left\{ \left(\frac{\partial \mu}{\partial P_q} \right)_T \right\}^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \frac{Z_q^{1-q} - 1}{1-q} \right)_{T,V} \\
&= q \frac{\beta}{V} \left\{ \left(\frac{\partial \mu}{\partial P_q} \right)_T \right\}^2 \left(\langle \hat{N} \frac{1}{1 - \beta(1-q)(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{N} \rangle_q - Z_q^{q-1} \langle \hat{N} \rangle_q^2 \right)_{T,V}. \quad (6.32)
\end{aligned}$$

A função de Green é freqüentemente usada no exame de certas funções de correlação quais são justamente relacionadas a funções parecidas com a de uma partícula, porque os operadores físicos são contrações apropriadas dos operadores físicos. Como um exemplo, consideramos as funções densidades; aqui o operador densidade $\hat{n}(\vec{r}, t)$ é dado por $\hat{n}(\vec{r}, t) = \Psi^\dagger(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)$. Assim, a função de correlação densidade-densidade é dada por $\langle T(\hat{n}(\vec{r}_1, t_1)\hat{n}(\vec{r}_2, t_2)) \rangle_q = \langle T(\Psi^\dagger(1)\Psi(1)\Psi^\dagger(2)\Psi(2)) \rangle_q$.

6.2.3 Aproximação de Hartree

A aproximação de Hartree é uma das mais simples aproximações feitas em muitos campos

da física. Sendo assim é de grande interesse encontrarmos tal resultado no formalismo de Tsallis. Neste contexto, nós determinamos $G^{(q)}(1, 1')$, quando $V(\vec{r}_1) = 0$ e $v \neq 0$, com uma aproximação apropriada em $G_2^{(q)}$. A motivação para tal aproximação é semelhante ao caso usual. Assim, como uma primeira aproximação temos que

$$G_2^{(q)}(12; 1'2') = G^{(q)}(1, 1')G^{(q)}(2, 2') \quad (6.33)$$

e, substituindo-a na Eq.(6.20), obtemos o resultado de Hartree. Se considerarmos um sistema translacionalmente invariante, a Eq. (6.20) fica muito simples. Sendo $\langle \hat{N}(\vec{r}_2) \rangle_q$ independente da posição \vec{r}_2 , o potencial médio torna-se uma constante também. Então, $\int d\vec{r}_2 V_2(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \frac{\langle \hat{N} \rangle_q}{V} = \frac{\langle \hat{N} \rangle_q}{V} v$ onde $v = \int d\vec{r} V_2(\vec{r})$. Assim, nós obtemos a função espectral $A(\vec{p}, \omega) = 2\pi\delta(\omega - p^2/2m - (\langle N \rangle_q/V)v)$. Para encontrar a solução referente à aproximação de Hartree, nós resolveremos a densidade de partículas, Eq. (6.16), usando a função espectral, obtida acima,

$$\frac{\langle \hat{N} \rangle_q}{V} = \int_C du K_q^{(2)}(u) \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \frac{Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{e^{-\beta(1-q)u((\langle N \rangle_q/2V)v + p^2/2m - \mu)} \mp 1}. \quad (6.34)$$

A energia por unidade de volume Eq.(6.22) é então dada como sendo

$$\frac{\langle \hat{H} \rangle_q}{V} = \int_C du K_q^{(2)}(u) \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \left(\frac{\langle N \rangle_q}{2V} v + \frac{p^2}{2m} \right) \frac{Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{e^{-\beta(1-q)u((\langle N \rangle_q/2V)v + p^2/2m - \mu)} \mp 1} \quad (6.35)$$

$$\frac{\langle \hat{H} \rangle_q}{V} = \left(\frac{\langle N \rangle_q}{V} \right)^2 \frac{v}{2} + \int_C du K_q^{(2)}(u) \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \left(\frac{p^2}{2m} \right) \frac{Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{e^{-\beta(1-q)u((\langle N \rangle_q/2V)v + p^2/2m - \mu)} \mp 1}. \quad (6.36)$$

6.2.4 A Aproximação de Hartree-Fock

Na aproximação de Hartree discutida acima, o termo de exclusão não aparece. Este vem

junto com a aproximação de Hartree-Fock para $G_2^{(q)}$, onde

$$G_2^{(q)}(12; 1'2') = G^{(q)}(1, 1')G^{(q)}(2, 2') \pm G^{(q)}(1, 2')G^{(q)}(2, 1'). \quad (6.37)$$

Assim se substituirmos a Eq.(6.37) na Eq.(6.20), depois de alguns cálculos, obtemos que

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \hbar^2 \frac{\vec{\nabla}_1^2}{2m} \right) G^{(q)}(1, 1') - i \int d\vec{r}_2 \langle r_1 | U | r_2 \rangle G^{(q)}(2, 1') \Big|_{t_2=t_1} = \delta(1 - 1'), \quad (6.38)$$

onde

$$\langle r_1 | U | r_2 \rangle = \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \int d\vec{r}_3 V_2(\vec{r}_1 - \vec{r}_3) \frac{\langle \hat{N}(\vec{r}_3) \rangle_q}{V} + iV_2(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) G_{<}^{(q)}(1, 2) \Big|_{t_2=t_1}. \quad (6.39)$$

Considerando um sistema que seja translacionalmente invariante, podemos expressar a Eq.(6.38) em termos de uma transformada de Fourier obtendo

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - E(p) \right] G(p, t_1 - t_1') = \delta(t_1 - t_1'), \quad (6.40)$$

com

$$E(p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{\langle \hat{N} \rangle_q}{V} v \pm \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3} v(\vec{p} - \vec{p}') \frac{\langle N(\vec{p}') \rangle_q}{V}, \quad (6.41)$$

onde $v(\vec{p}) = \int d\vec{r} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} V_2(\vec{r})$ é a transformada de Fourier do potencial, $V_2(\vec{r})$, e a função espectral é, da mesma forma que antes, $A(\vec{p}, \omega) = 2\pi\delta(\omega - E(\vec{p}))$. Substituindo a função espectral na Eq.(6.14), nós temos que

$$\frac{\langle \hat{N}(\vec{p}) \rangle_q}{V} = \int_C du K_q^{(2)}(u) \frac{Z_1(-\beta(1-q)u, \mu)}{e^{-\beta(1-q)u(E(p)-\mu)} \mp 1}. \quad (6.42)$$

A energia, $E(p)$, no contexto acima deve ser obtida como uma solução auto-consistente das Eqs.(6.41) e (6.42).

6.2.5 Função Resposta

Nós agora voltamos nossa atenção ao fato de podermos reescrever a dinâmica linear da função resposta e a seção de espalhamento no formalismo q em termos de integrais sobre as usuais que já foram feitas. De [26], a dinâmica linear da função resposta de uma quantidade \hat{B} a uma perturbação externa que gera \hat{A} no formalismo q é

$$\chi_{BA}^{(q)}(\omega, \beta, \mu) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\infty} dt e^{-i\omega t - \epsilon t} \frac{1}{i\hbar} \phi_{BA}^{(q)}(t, \beta, \mu) \quad (6.43)$$

onde

$$\phi_{BA}^{(q)}(t, \beta, \mu) = \text{Tr} \left[\hat{P}(\hat{H}, \hat{N}; q, \beta, \mu) [\hat{A}(0), \hat{B}(t)] \right] \quad (6.44)$$

Esta, em termos das representações integrais, fica:

$$\chi_{BA}^{(q)}(\omega, \beta, \mu) = \int_C du K_2^q(u) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) \chi_{BA}^{(1)}(\omega, -\beta(1-q)u, \mu) \quad (6.45)$$

onde $\chi_{BA}^{(1)}(\omega, -\beta(1-q)u, \mu)$ é a função resposta dinâmica usual do Kubo calculada agora na temperatura $-\beta u(1-q)$. Em [26], o teorema geral da flutuação-dissipação foi derivado no formalismo q . Aqui nós obteremos um resultado equivalente porém diferente daquele apresentado em [26], apenas pelo fato de reescrevermos tais resultados em termos das representações integrais. Reescrevendo a média q do anticomutador e do comutador, nós temos que,

$$\begin{aligned} \Psi_{BA}^{(q)}(t, \beta, \mu) &= \frac{1}{2} \text{Tr} \hat{P}(\hat{H}, \hat{N}; q, \beta, \mu) [\hat{A}(0)\hat{B}(t) + \hat{B}(t)\hat{A}(0)] \\ &= \frac{1}{2} \int_C du K_q^{(2)}(u) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) \Psi_{BA}^{(1)}(t, -\beta u(1-q), \mu) \end{aligned} \quad (6.46)$$

$$\begin{aligned}
\Phi_{BA}^{(q)}(t, \beta) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_t^\infty dt' e^{-\epsilon t'} \text{Tr}[\hat{P}(\hat{H}, \hat{N}; q, \beta, \mu)[\hat{A}(0), \hat{B}(t)]] \\
&= \int_C du K_{(q)}^{(2)}(u) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) \Phi_{BA}^{(q=1)}(t', -\beta u(1-q), \mu). \quad (6.47)
\end{aligned}$$

O teorema de flutuação dissipação do Kubo [62] para o caso extensivo, ($q = 1$) é

$$\Psi_{BA}^{(1)}(\omega, \beta, \mu) = E_\beta(\omega) \Phi_{BA}^{(1)}(\omega, \beta, \mu) \quad (6.48)$$

com

$$E_\beta(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right). \quad (6.49)$$

Portanto obtemos que

$$\begin{aligned}
\Psi_{BA}^{(q)}(\omega, \beta, \mu) &= \frac{\hbar\omega}{4} \int_C du K_{(2)}^{(q)}(u) Z_1(-\beta u(1-q), \mu) \coth\left(\frac{-\beta u(1-q)\hbar\omega}{2}\right) \\
&\quad \Phi_{BA}^{(1)}(\omega, -\beta u(1-q), \mu). \quad (6.50)
\end{aligned}$$

Relacionemos agora a função de espalhamento definida, por exemplo, no Lovesey[60], para o formalismo q como sendo

$$S^{(q)}(\vec{k}, \omega, \beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \langle \hat{A}^\dagger(0) \hat{A}(t) \rangle_q^{(c)}, \quad (6.51)$$

onde \hat{A} é um operador que afeta a mudança do estado de um sistema no processo de espalhamento. Aqui o superíndice (c) denota o ensemble Canônico ao invés do Grand Canônico usado anteriormente. Isto seria equivalente a tomarmos formalmente o conjunto $\mu = 0$ no desenvolvimento anterior. Então, usando a nossa transformação, podemos expressar a função de espalhamento generalizada em termos da usual $q = 1$

$$S^{(q)}(\vec{k}, \omega, \beta) = \int_C du K_q^{(2)}(u) Z_1(-\beta u(1-q)) S^{(1)}(\vec{k}, \omega, -\beta u(1-q)). \quad (6.52)$$

De [26], tomando $\hat{B} = \hat{A}^\dagger$, temos que a parte imaginária da susceptibilidade- q , $\chi_{\hat{A}^\dagger \hat{A}}^{(q)}(\omega, \beta)$ pode ser expressa em termos da função de espalhamento de $q = 1$

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_{\hat{A}^\dagger \hat{A}}^{(q)}(\vec{k}, \omega, \beta) &= \pi \int_C du K_q^{(2)}(u) Z_1(-\beta u(1-q))(1 - \exp(-\beta u(1-q)\omega)) \\ &S^{(1)}(\vec{k}, \omega, -\beta u(1-q)). \end{aligned} \quad (6.53)$$

Assim, expressamos a função q de espalhamento, assim como a parte imaginária associada à susceptibilidade- q , em termos de integrais paramétricas onde o núcleo é multiplicado pela função de espalhamento que agora depende deste parâmetro como foi mostrado acima. Agora na seção 6.3, discutiremos sugestões para uma possível investigação experimental(em experimentos de espalhamentos) do sistema- q para sistemas não extensivos baseados nos resultados obtidos aqui.

6.3 Aplicação

Nesta seção fazemos o cálculo da função de espalhamento de alguns sistemas simples dentro do contexto generalizado, com a finalidade de obtermos expressões que poderão vir a ser usadas em experimentos de espalhamento assim como as usuais. Pois se seguirmos o desenvolvimento da Ref.[58], vemos que podemos relacionar a função de espalhamento com a seção de choque por ângulo sólido da seguinte maneira,

$$d\sigma = \frac{\text{fluxo através da área } r^2 d\Omega}{\text{fluxo incidente}} \quad (6.54)$$

assim temos que

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{i,f} (p_q^g)_i |\langle \vec{k}_f' | A | \vec{k}_i \rangle|^2 \delta(\omega + E_f - E_i) \quad (6.55)$$

Para chegarmos à tal relação acima fizemos uso também da primeira aproximação de Born.

Agora, na Eq.(6.55) acima, vemos a presença da função de espalhamento generalizada,

$$S^{(q)}(\vec{k}, \omega, \beta) = \sum_{i,f} (p_q^g)_i |\langle \vec{k}_f' | A | \vec{k}_i \rangle|^2 \delta(\omega + E_f - E_i) \quad (6.56)$$

definida anteriormente, Eq.(6.51) ou equivalentemente Eq.(6.52).

A fabricação de super-redes quase-periódicas foi sucessivamente realizada no começo de 1985 [63] e investigações experimentais por raios-X e difração de neutrons, etc., veja [64].

Estes sistemas constituem outra classe de possíveis testes para o contexto não extensivo

de Tsallis. Usando algumas das conhecidas formas para o fator de estrutura $S^{(1)}$ na

Eq.(6.52) podemos calcular para $q < 1$, $q > 1$ e $\beta > 0$, como foi feito anteriormente nas

outras duas situações. Nós proporemos usar o nosso sistema para o cálculo da seção de

choque de forma que possamos investigar tais estruturas através de alguns modelos. Como

primeira possibilidade de investigação para o sistema proposto, consideraremos as funções

de autocorrelações de uma partícula confinada a um potencial harmônico. Considerando o

deslocamento do cristal ao longo da direção \hat{x} e que, numa teoria harmônica, teremos que

o Hamiltoniano do sistema é $\hat{H} = \hbar\omega_0 \hat{a}^\dagger \hat{a}$ onde \hat{a} e \hat{a}^\dagger são os operadores bosônicos usuais

de criação e aniquilação de partículas, ω_0 é a frequência de vibração, e o deslocamento da

partícula de massa m é $x(t) = (1/\hbar\omega_0)^{1/2} (\hat{a}^\dagger(t) + \hat{a}(t))$. Usando a Eq.(6.19) para $\hat{a}(t)$ nós

temos que $\hat{a}(t) = \hat{a} e^{-i\hbar\omega_0 t}$. Substituir $\hat{x}(t)$ na Eq.(6.51), conduz a

$$S^{(q)}(\omega, \beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \langle \hat{x}^\dagger(0) \hat{x}(t) \rangle_q^{(c)}$$

(6.57)

$$\langle \hat{x}^\dagger(0)\hat{x}(t) \rangle_q^{(c)} = \frac{1}{2\omega_0} \left(\langle \hat{a}\hat{a}^\dagger \rangle_q^{(c)} e^{i\omega_0 t} + \langle \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_q^{(c)} e^{-i\omega_0 t} \right)$$

(6.58)

e, após alguns cálculos, temos que

$$S^{(q)}(\omega, \beta) = \frac{1}{2\omega_0} \left\{ \left(\langle 1 \rangle_q^{(c)} + \langle \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_q^{(c)} \right) \delta(\omega - \omega_0) + \langle \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_q^{(c)} \delta(\omega + \omega_0) \right\}, \quad (6.59)$$

com

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_q^{(c)} &= \frac{1}{\left[\zeta \left(\frac{1}{q-1}; \frac{1}{(q-1)\beta\hbar\omega_0} \right) \right]^q} \left[\zeta \left(\frac{1}{q-1}; \frac{1}{(q-1)\beta\hbar\omega_0} \right) \right. \\ &- \left. \left(\frac{1}{(q-1)\beta\hbar\omega_0} \right) \zeta \left(\frac{q}{q-1}; \frac{1}{(q-1)\beta\hbar\omega_0} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.60)$$

e

$$\langle 1 \rangle_q^{(c)} = \frac{\zeta \left(\frac{q}{q-1}; \frac{1}{(q-1)\beta\hbar\omega_0} \right)}{\left[\zeta \left(\frac{1}{q-1}; \frac{1}{(q-1)\beta\hbar\omega_0} \right) \right]^q} \quad (6.61)$$

para o caso $2 > q > 1$. Sendo que os coeficientes da Eq.(6.59) encontram-se diretamente relacionados com a Eq.(6.14), assim na Fig.(6.1) mostrada anteriormente, temos o comportamento da Eq.(6.14) com e sem o acrescimento de $\langle 1 \rangle_q$ para este caso. Uma outra situação por exemplo é o espalhamento de um neutron ou raio-X por uma partícula de massa M vibrando. Para tal, \hat{A} é o operado densidade da partícula colocado na forma de transformada de Fourier,

$$\hat{A} = \int d\vec{r} \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{R}(t)) = \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{R}(t)) \quad (6.62)$$

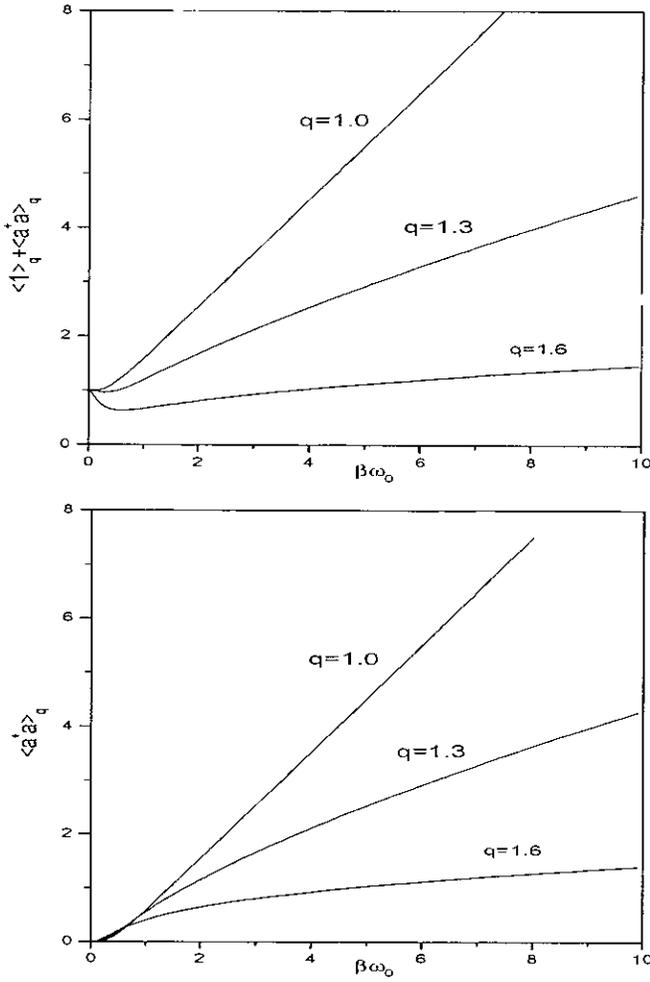


Figura 6.1: Nesta figura mostramos o comportamento dos coeficientes da Eq.(6.59) em função de $\beta\omega_0$ para alguns valores representativos de q , $q = 1, 1.3$ e 1.6 , considerando $\hbar = 1$.

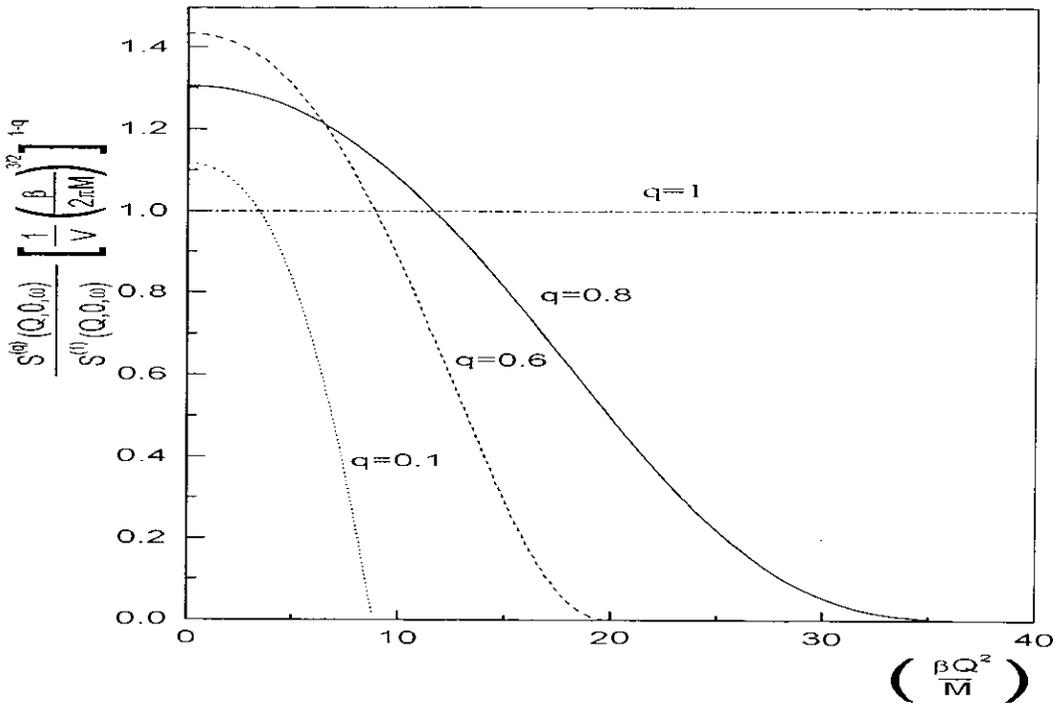


Figura 6.2: Nesta figura mostramos a comportamento de $\frac{S^{(q)}(Q,0,\beta)}{S^{(1)}(Q,0,\beta)} \left[\frac{1}{V} \left(\frac{\beta}{2\pi M} \right)^{3/2} \right]^{1-q}$ como uma função de $\frac{\beta Q^2}{M}$ para $q = 0.1, 0.6, 0.8$ e 1.0 .

onde denotamos \vec{R} a posição do átomo, e \vec{Q} é a mudança do vetor de onda para o raio-X.

A expressão para $\hat{A}(t)$ pode ser obtida da equação de movimento, com $\hat{H} = \vec{p}^2/(2M)$

onde \vec{p} é o momento conjugado a \vec{R} . Obtemos que

$$\hat{A}(t) = \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{R}) \exp\left(\frac{it}{2M}(2\vec{Q} \cdot \vec{p} + Q^2)\right) \quad (6.63)$$

e, após alguma algebra, teremos que

$$S^{(c)}(Q, \omega, \beta) = \left(\frac{2\pi M^2 V}{\beta h^3 Q Z_q} \right) \left(1 - (1-q) \frac{M\beta}{2Q^2} \left(\omega \hbar - \frac{\hbar^2 Q^2}{2M} \right)^2 \right)^{1/(1-q)} \quad (6.64)$$

onde Z_q é dado por,

$$Z_q = \frac{V}{h^3} \left(\frac{2M\pi}{(1-q)\beta} \right)^{3/2} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + \frac{3}{2}\right)} \quad (6.65)$$

para o caso $q < 1$. Na Fig.(6.2), temos o gráfico de $\frac{S^{(q)}(Q,0,\beta)}{S^{(1)}(Q,0,\beta)} \left[\frac{1}{V} \left(\frac{\beta}{2\pi M} \right)^{3/2} \right]^{1-q}$ versus $\frac{\beta Q^2}{M}$ para alguns valores significativos de q , com $\hbar = 1$.

6.4 Discussão

Por fim, desenvolvemos aqui o formalismo q de Tsallis para a descrição de sistemas não extensivos de muitas partículas através da generalização da função de Green e de algumas técnicas de função de Green que são comumente apresentadas para os sistemas extensivos. Isto nos possibilitou a obtenção de algumas quantidades que podem ser mensuráveis como, por exemplo, o número médio q de partículas tanto para sistemas bosônicos como fermiônicos, além de obtermos a formulação da função resposta do sistema em termos de representações integrais expressando-as em termos das tradicionais. Ademais, fizemos alguns cálculos do função de espalhamento para dois exemplos; primeiramente consideramos a função de autocorrelação de uma partícula confinada a um potencial harmônico e, em segundo lugar, fizemos o cálculo da função de espalhamento gerada pelo espelhamento de neutrons ou raio-X. Pois, como mostramos, a função de espalhamento encontra-se relacionada com a seção de choque que é uma grandeza que pode ser obtida experimentalmente podendo nos levar a uma confirmação ou não da prescrição de Tsallis para sistemas não extensivos.

DISCUSSÕES E PERSPECTIVAS

Fizemos a extensão de vários métodos da mecânica estatística usual à mecânica estatística generalizada proposta por Tsallis. Obtivemos, assim, a generalização de alguns dos consagrados métodos empregados na mecânica estatística usual, dentre eles a formulação de Integral de Trajetória[38], apresentada no capítulo cinco, métodos perturbativos e variacionais[37], no capítulo dois e três, e as funções de Green[39], no último capítulo, o sexto. Além do mais, desenvolvemos a solução exata para a radiação de corpo negro[40], consolidando a discussão existente na literatura com tais resultados apresentados no capítulo quatro. Assim, no capítulo dois, desenvolvemos os métodos perturbativos e variacionais chegando a uma desigualdade de Bogoliubov que mantém a sua forma original perante o índice entrópico q . Aplicamos tal formalismo a um exemplo simples, a aproximação de um potencial harmônico por um poço quadrado de potencial. O terceiro capítulo, como foi visto, é uma simples extensão do capítulo dois ao caso onde temos um espectro discreto. A solução para a radiação de corpo negro generalizada foi apresentada no capítulo quatro, onde obtivemos as relações termodinâmicas de maneira exata em termos de séries convergentes. No quinto capítulo, foi desenvolvida a formulação de

integral de trajetória para o contexto não extensivo de Tsallis. O capítulo seis, o último, foi dedicado à formulação do método da função de Green. É oportuno mencionar que os desenvolvimentos formais feitos aqui poderiam ser realizados de acordo com a Ref.[45]. Esperamos que os resultados e desenvolvimentos formais obtidos aqui possam ampliar o campo de atuação da estatística generalizada dando a possibilidade de se explorar melhor as questões não extensivas, além da possibilidade de exibir que tais idéias e métodos são úteis (e mais eficientes) em outros contextos, como por exemplo, no contexto da Mecânica Quântica, no tratamento variacional de sistemas de muitos corpos com estados que não sejam gaussianos[65] e a generalização das integrais funcionais com o uso de Lorentzianas[66].

Uma prolongação natural desta Tese poderia incluir:

- 1) A adaptação dos métodos desenvolvidos aqui à Ref.[45], reformulando assim a estatística não extensiva, o que possibilitaria resolver certas dificuldades da formulação atual.
- 2) A aplicação do formalismo desenvolvido aqui a situações não acadêmicas, onde de modo transparente aparece, no sistema físico, a necessidade de levar em conta a não extensividade (por exemplo, sistemas Hamiltonianos com interações de longo alcance).

Outrossim, outras extensões seriam possíveis como, por exemplo, a generalização, para q arbitrário, do método variacional estendido [67].

Bibliografia

- [1] M. F. Shlesinger, B. J. West and J. Klafter, *Lévy Dynamics of Enhanced Diffusion: Application to Turbulence*, Phys. Rev. Lett. **58**, 1100 (1987).
- [2] J. P. Bouchaud and A. Georges, *Anomalous Diffusion in Disordered Media: Statistical Mechanics, Model and Physical Applications*, Phys. Rep. **195**, 127 (1991).
- [3] M. F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky and J. Klafter, *Strange Kinetics*, Nature **363**, 31 (1993).
- [4] J. Klafter, G. Zumofen and A. Blumen, *Non-Brownian Transport in Complex Systems*, Chem. Phys. **177**, 821 (1993).
- [5] A. M. Salzberg, *Exact Statistical Thermodynamic of Gravitational Interactions in One and Two Dimensions*, J. Math. Phys. **6**, 158 (1965).
- [6] L. Tisza, *Generalized Thermodynamics*, (MIT Press, Cambridge, 1966) p. 123.
- [7] P. T. Landsberg, *Equilibrium Always a Entropy Maximum ?*, J. Stat. Phys. **35**, 159 (1984).

- [8] J. Binney and S. Tremaine, *Galactic Dynamics*, (Princeton University Press, Princeton, 1987) p. 267.
- [9] H. S. Robertson, *Statistical Thermophysics*, (P. T. R. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey 1993) p. 96.
- [10] B. J. Hiley and G. S. Joyce, *The Ising Model with Long-Range Interactions*, Proc. Phys. Soc. **85**, 493 (1965).
- [11] S. K. Ma, *Statistical Mechanics*, (World Scientific, New York, 1993) p. 116.
- [12] S. A. Camas, *One-Dimensional Ising Model with Long-Range Interactions: A Renormalization-Group Treatment*, Phys. Rev. B **52**, 3034 (1995).
- [13] J. O. Indekeu, *Line Tension near the wetting Transition: Results from an Interface Displacement Model*, Physica A **183**, 439 (1992).
- [14] J. O. Indekeu and A. Robledo, *Hyperscaling and Nonclassical exponents for the Line Tension at wetting*, Phys. Rev. E **47**, 4607 (1993).
- [15] X. -P. Huang and C. F. Driscoll, *Relaxation of 2D Turbulence to a Metaequilibrium near the Minimum Enstrophy State*, Phys. Rev. Lett. **72**, 2187 (1994); F. Anderegg, X. -P. Huang, C. F. Driscoll, E. M. Hollmann, T. M. O'Neil, and D. H. E. Dubin, *Test Particle Transport due to Long Range Interactions*, Phys. Rev. Lett. **78**, 2128 (1997); X. -P. Huang, F. Anderegg, E. M. Hollmann, C. F. Driscoll, and T. M. O'Neil, *Steady-State Confinement of Non-neutral Plasmas by Rotating Electric Fields*, Phys. Rev. Lett. **78**, 875 (1997).

- [16] C. Tsallis, *Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics*, J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988); Veja também, <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm> para uma bibliografia atualizada.
- [17] C. Tsallis, S. V. F. Levy, A. M. C. Souza and R. Maynard, *Statistical-mechanical foundation of the ubiquity of Levy distributions in nature*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3589 (1995); Erratum: **77**, 5442 (1996); D. H. Zanette and P. A. Alemany, *Thermodynamics of anomalous diffusion*, Phys. Rev. Lett. **75**, 366 (1995); M. O. Caceres and C. E. Budde, *Comment on Thermodynamics of anomalous diffusion*, Phys. Rev. Lett. **77**, 2589 (1996); D. H. Zanette and P. A. Alemany, *Reply to Comment on Thermodynamics of anomalous diffusion*, Phys. Rev. Lett. **77**, 2590 (1996).
- [18] A. R. Plastino and A. Plastino, *Non-extensive statistical mechanics and generalized Fokker-Planck equation*, Phys. Lett. A **222** 347 (1995); C. Tsallis and D.J. Bukman, *Anomalous diffusion in the presence of external forces: exact time-dependent solutions and their thermostistical basis*, Phys. Rev. E **54** R2197 (1996); L. Borland, *Microscopic dynamics of the nonlinear Fokker-Planck equation: A phenomenological model*, Phys. Rev. E **57**, 6634 (1998).
- [19] B. M. Boghosian, *Thermodynamic description of the relaxation of two-dimensional turbulence using Tsallis statistics*, Phys. Rev. E **53**, 4754 (1996); C. Tsallis, A. M. C. de Souza, *Nonlinear inverse bremsstrahlung absorption and nonextensive thermostistics*, Phys. Lett. A **235**, 444 (1997).

- [20] A. R. Plastino and A. Plastino, *Stellar polytropes and Tsallis' entropy*, Phys. Lett. A **174**, 384 (1993); J. J. Aly, *Proceedings of N-Body Problems and Gravitational Dynamics, Aussois, France* ed F. Combes and E. Athanassoula (Publications de l'Observatoire de Paris, Paris, 1993) p. 19.
- [21] V. H. Hamity and D. E. Barraco, *Generalized nonextensive thermodynamics applied to the cosmic background radiation in a Robertson-Walker universe*, Phys. Rev. Lett. **76**, 4664 (1996).
- [22] L. P. Chimento, J. Math. Phys., *Form invariance of differential equations in general relativity*, **38**, 2565 (1997).
- [23] D. F. Torres, H. Vucetich and A. Plastino, *Early universe test of nonextensive statistics*, Phys. Rev. Lett. **79**, 1588 (1997); [Erratum: 80, 3889 (1998)].
- [24] C. Tsallis, F. C. Sá Barreto and E. D. Loh, *Generalization of the Planck radiation law and application to the microwave background radiation*, Phys. Rev. E **52**, 1447 (1995).
- [25] A. Lavagno, G. Kaniadakis, M. Rego-Monteiro, P. Quarati and C. Tsallis, *Nonextensive thermostistical approach of the peculiar velocity function of galaxy clusters*, Astro. Lett. and Comm. **35**, 449 (1998).
- [26] A. K. Rajagopal, *Dynamic linear response theory for a nonextensive system based on the Tsallis prescription*, Phys. Rev. Lett. **76**, 3469 (1996).

- [27] I. Koponen, *Thermalization of electron-phonon system in nonequilibrium state characterized by fractal distribution of phonon excitations*, Phys. Rev. E **55**, 7759 (1997).
- [28] P. Jund, S. G. Kim and C. Tsallis, *Crossover from extensive to nonextensive behavior driven by long-range interactions*, Phys. Rev. B **52**, 50 (1995).
- [29] M. L. Lyra and C. Tsallis, *Nonextensivity and multifractality in low-dimensional dissipative systems*, Phys. Rev. Lett. **80**, 53 (1998).
- [30] C. Anteneodo and C. Tsallis, *Breakdown of Exponential Sensitivity to Initial Conditions: Role of the Range of interactions*, Phys. Rev. Lett. **80**, 5313 (1998).
- [31] S. Curilef, *Alguns Aspéctos Fundamentais da Mecânica Estatística Não Extensiva*, Tese de Doutorado do CBPF (1997).
- [32] B. H. Lavenda and J. Dunning-Davies, *The Essence of the Second Law is Concavity*, Found. Phys. Lett. **3**, 435 (1990); B. H. Lavenda, *Limitations of Boltzmann's Principle*, Inter. J. of Theor. Phys. **34**, 605 (1998); B. H. Lavenda and J. Dunning-Davies, *Elementary erros about entropy*, Nature **368**, 284 (1994); B. H. Lavenda, J. Dunning-Davies and M. Compiani, *What is Entropy?*, Nuovo Cimento B **110**, 433 (1995); see also B. H. Lavenda, *Statistical Physics: A Probabilistic Approach*, (Wiley-Interscience, New York, 1991) ; B. H. Lavenda, *Thermodynamics of Extremes*, (Albion, Chichester, England, 1995).

- [33] C. Tsallis, *Comment on "Thermodynamic stability conditions for the Tsallis and Rényi entropies" by J. D. Ramshaw*, Phys. Lett. A **206**, 389 (1995).
- [34] R. S. Mendes, *Some general relations in arbitrary thermostatics*, Physica A **242**, 299 (1997); A. Plastino and A. R. Plastino, *On the universality of Thermodynamics' Legendre transform structure*, Phys. Lett. A **226**, 257 (1997).
- [35] L. R. Evangelista, L. C. Malacarne and R. S. Mendes, *Quantum Corrections for General Partition Functions*, Physica A (1998), in press.
- [36] A. Plastino and C. Tsallis, *Variational method in generalized statistical mechanics*, J. Phys. A **26**, L893 (1993).
- [37] E. K. Lenzi L. C. Malacarne and R. S. Mendes, *Perturbation and variational methods in nonextensive Tsallis statistics*, Phys. Rev. Lett. **80**, 218 (1998); R. S. Mendes, Kwok Sau Fa, E. K. Lenzi and J. N.Maki, *Perturbation Expansion, Bogoliubov Inequality and Integral Representations in Nonextensive Tsallis Statistics*, preprint.
- [38] E. K. Lenzi, L. C. Malacarne and R. S. Mendes, *Path integral and Bloch equation in nonextensive Tsallis statistics*, preprint.
- [39] A. K. Rajagopal, R. S. Mendes and E. K. Lenzi, *Quantum statistical mechanics for nonextensive systems - Prediction for possible experimental tests*, Phys. Rev. Lett. **80**, 3907 (1998); E. K. Lenzi, R. S. Mendes, and A. K. Rajagopal, *Quantum Statistical Mechanics for Nonextensive Systems*, preprint.

- [40] E. K. Lenzi and R. S. Mendes, *Blackbody Radiation in Nonextensive Tsallis Statistics: The Exact solution*, preprint.
- [41] S. Curilef, *On the generalized Bose-Einstein condensation*, Physics Letters A **218** 11 (1996); see also S. Curilef, *Generalized statistical mechanics for the N-body quantum problem - Ideal gases*, Z. Phys. B **100** 433 (1996).
- [42] A. R. Plastino, A. Plastino and H. Vucetich, *A quantitative test of Gibbs' statistical mechanics*, Phys. Lett. A **207** 42 (1995); U. Tirnakli, F. Büyükkilç and D. Demirhan, *Generalized distribution functions and an alternative approach to generalized Planck radiation law*, Physica A **240** 657 (1997); Q.A. Wang, A. L. Méhauté, *On the generalized blackbody distribution*, Phys. Lett. A **237** 28 (1997); A.B. Pinheiro and I. Roditi, *Nonextensive thermostatics and deformed structures*, Phys. Lett. A **242**, 296 (1998); Q.A. Wang and A. Le Mehaute, *Nonextensive black-body distribution function and Einstein's coefficients A and B*, Phys. Lett. A **242**, 301 (1998).
- [43] F. Büyükkilç and D. Demirhan, *A fractal approach to entropy and distribution functions*, Phys. Lett. A **181** 24 (1993); F. Büyükkilç and D. Demirhan, *A statistical mechanical approach to generalized statistics of quantum and classical gases* Phys. Lett. A **197** 209 (1995); Q.-A. Wang and Le Mehaute, *On the generalized distribution functions of quantum gases*, Phys. Lett. A **235**, 222 (1997).
- [44] E. M. F. Curado and C. Tsallis, *Generalized statistical mechanics: connection with thermodynamics*, J. Phys. A **24**, L69 (1991); Errata: **24**, 3187 (1991); **25**, 1019 (1992).

- [45] C. Tsallis, R. S. Mendes and A. R. Plastino, *Role of the constraints within generalized nonextensive statistics*, preprint (1998).
- [46] G. R. Guerberoff and G. A. Raggio, *Standard thermal statistics with q -entropies*, J. Math. Phys. **37**, 1776 (1996); G. R. Guerberoff, P. A. Pury and G. A. Raggio, *Non-standard thermal statistic with q -entropies*, J. Math. Phys. **37**, 1790 (1996).
- [47] C. Tsallis in *New Trends in Magnetism, Magnetic Materials, and Their Applications* ed. J. L. Morán-López and J. M. Sanchez, (Plenum Press, New York, 1994) p. 451.
- [48] D. Prato, *Generalized statistical mechanics: Extension of the Hillhorst formula and applications to the classical ideal gas*, Physics Letters A **203**, 165 (1995)
- [49] E. K. Lenzi, não publicado (1997).
- [50] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals Series and Products*, (Academic Press, New York, 1980).
- [51] E. T. Whittaker and G. N. Watson, *A Course in Modern Analysis*, (Cambridge University Press, New York, 1943) ch. XII .
- [52] R. M. Wilcox, *Exponential Operators and Parameter Differentiation in Quantum Physics*, J. Math. Phys. **8**, 962 (1967).
- [53] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics: A Set of Lectures*, (W. A. Benjamin Inc, Massachusetts, 1972) p. 67-71.
- [54] K. Huang, *Statistical Mechanics*, (John Wiley & Sons, New York, 1987), p. 278-283.

- [55] J. G. Kirkwood, *Quantum Statistics of Almost Classical Assembles*, Phys. Rev. **44**, 31 (1933) e as referências contidas nele.
- [56] L. S. Schuman, *Techniques and Applications of Path Integration* (John Wiley & Sons, New York, 1981).
- [57] M. Le Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory*, (Oxford University Press, New York, 1995) pag. 152-5.
- [58] R. N. West, *Positron Studies of Condensed Matter*, (Taylor and Francis Ltd. London, 1974) see also W. Jones and N. H. March, *Theoretical Solid State Physics*, Vol I, chapter 5.
- [59] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Mattherws, C. E. Wieman, E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science **269**,198 (1995).
- [60] S.W.Lovesey, *Condensaded Matter Physics*, (The Benjamin/Cummings Plublishing Company, Massachusetts, 1980).
- [61] L. P. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics*, (W. A. Benjamin, Inc., New York, 1962).
- [62] R. Kubo, *Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes*, J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 570 (1957).

- [63] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, K. M. Mohanty and J. D. Axe, *Synchrotron X-Ray study of a Fibonacci Superlattice*, Phys. Rev. Lett. **57**, 1157 (1986); H. Terauchi, S. Sekimoto, K. Kamigaki, H. Sakashit, N. Sano, H. Kato, and M. Nakayama, *X-Ray Studies of Semiconductor Superlattices Grown by Molecular Beam Epitaxy*, J. Phys. Soc. Jpn. **54**, 4576 (1985).
- [64] F. Axel and H. Terauchi, *Hight-Resolution X-Ray-Diffraction of Thue-Morse GaAs-AlAs Heterostructures: Towards a Novel Description of Disorder*, Phys. Rev. Lett. **66**, 223 (1991) e as referências contidas nele.
- [65] R.S. Mendes, K.S. Fa and E.K. Lenzi, *Variational method and non-Gaussian states based on Tsallis statistics*, preprint; para um tratamento simples da propagação e alargamento de pacotes veja E. K. Lenzi, L. C. Malacarne e R. S. Mendes, *Propagação e Alargamento de Pacotes de Onda*, Rev. Bras. Fís. **19**, 201 (1997).
- [66] R.A. Treumann, *Generalized-Lorentziann path integrals*, Phys. Rev. E **57**, 5150 (1998).
- [67] C. Tsallis and L. R. da Silva, *Extented Variational Method in Statistical Mechanics*, Phys. Rev. A **26**, 1095 (1982).

**“GENERALIZAÇÃO DOS MÉTODOS VARIACIONAL,
PERTURBATIVO, DAS FUNÇÕES DE GREEN E DE
INTEGRAL DE TRAJETÓRIA PARA A MECÂNICA
ESTATÍSTICA NÃO EXTENSIVA”**

Ervin Kaminski Lenzi

Tese de Mestrado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:



Constantino Tsallis - Presidente



Raimundo Rocha dos Santos



Itzhak Roditi



Lisa Borland - Suplente

Rio de Janeiro, 28 de setembro de 1998