

Tese de Doutorado

Termodinâmica de Teorias de Campos
Fermiônicos em $D = 2(1 + 1)$

Márcia Moutinho

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
Rio de Janeiro, 2004

Dedicatória

*Ao meu marido Antonio
e ao amigo Tião.*

Agradecimentos

- * À minha orientadora, Professora Maria Teresa Thomaz, por toda paciência com a minha teimosia, compreensão nas horas difíceis, carinho e zelo combinados com muita seriedade e profissionalismo. Muito obrigada por tudo!
- * Ao Professor Sebastião Alves Dias, co-orientador desse trabalho, pelo exemplo tanto pessoal quanto profissional.
- * Ao meu marido Antonio por tudo o que vivemos juntos. Pelo incentivo nas horas difíceis, pela cumplicidade e carinho e principalmente muito respeito e amor.
- * Aos colegas do CBPF, em particular a todos aqueles que frequentaram o clube Paula Souza.
- * Aos colegas da UFF pelo carinho e amizade.
- * Ao Sérgio Martins de Souza pela colaboração nos primeiros anos desse trabalho e ao Onofre Rojas pelas dicas de *Latex* que contribuíram para a estética dessa tese.
- * Ao Instituto de Física da UFF, em especial ao pessoal da biblioteca, da Coordenação de Pós-Graduação e ao GFT, por todo apoio e infraestrutura.
- * À minha família pelo apoio.
- * À CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Estudamos a termodinâmica do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas. Utilizando o método de Charret *et al.* obtemos os coeficientes analíticos exatos da expansão em altas temperaturas do grande potencial deste modelo, até ordem β^2 . Para estender essa expansão a ordens mais elevadas em β , utilizamos o método de Rojas *et al.*, calculando analiticamente o grande potencial no limite termodinâmico. Como laboratório para a aplicação deste método em sistemas fermiônicos auto-interagentes, calculamos o grande potencial do modelo de Hubbard estendido unidimensional até ordem β^5 . Mostramos que, ao contrário do que é comumente afirmado na literatura, existem funções termodinâmicas desse modelo que não podem ser aproximadas pelas do modelo de *spin*-1 composto, inclusive no limite de fortes interações. Para implementar os métodos de Charret *et al.* e de Rojas *et al.*, escrevemos o modelo de Thirring massivo numa rede de N sítios com espaçamento a , obtendo a expansão em β do grande potencial até ordem β^5 no limite termodinâmico. Mostramos que este modelo com massa nula tem a simetria quiral preservada por este método, e que a duplicação dos graus de liberdade fermiônicos ocasionados pela discretização do modelo é naturalmente removida ao tomarmos o limite do contínuo ($a \rightarrow 0$). Estudamos as propriedades termodinâmicas do modelo (com massa e sem massa) na região de altas temperaturas, onde utilizamos as expansões em β do potencial químico, para diferentes densidades lineares de carga elétrica, a fim de estudar a influência deste potencial na termodinâmica do modelo de Thirring.

Abstract

We study the high-temperature thermodynamics of the massive Thirring model. Using the method of Charret *et al.* we obtain the exact analytical coefficients of the high-temperature expansion of the grand canonical partition function of this model, up to order β^3 . In order to extend such expansion to higher orders in β we apply the method of Rojas *et al.*, analytically calculating the grand potential in the thermodynamic limit. As a test to the application of this method to self-interacting fermionic systems, we calculate the grand potential of the extended unidimensional Hubbard model up to order β^5 . We show that, in opposition to what is commonly stated in the literature, there are thermodynamic functions of this model that cannot be approximately calculated from those of the composite *spin-1* model, even in the strong interactions limit. In order to implement the methods of Charret *et al.* and of Rojas *et al.*, we write the massive Thirring model in a lattice with N sites and spacing a , obtaining the expansion in β of the grand potential up to order β^5 in the thermodynamic limit. We show that the chiral symmetry of this massless model is preserved by this method, and that the duplication of fermionic degrees of freedom caused by discretization of the model is naturally removed as we take the continuum limit ($a \rightarrow 0$). We study the thermodynamic properties of the model (either massive or massless) in the high-temperature region, using the expansions in β of the chemical potential, for several distinct linear charge densities, in order to study the influence of this potential on the thermodynamics of Thirring model.

Índice

1	Introdução	1
2	O modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas	6
2.1	Introdução	6
2.2	Descrição do modelo de Thirring	7
2.3	O modelo de Thirring massivo na rede	9
2.4	O método de Charret <i>et al.</i>	14
2.4.1	Introdução	14
2.4.2	Resumo do método de Charret <i>et al.</i>	15
2.5	Obtenção dos coeficientes da expansão de altas temperaturas via o método de Charret <i>et al.</i>	19
2.5.1	Cálculo do coeficiente de ordem β	20
2.5.2	Cálculo do coeficiente de ordem β^2	22
2.5.3	Cálculo do coeficiente de ordem β^3	24
2.6	Função de partição gran canônica para o modelo de Thirring até ordem β^3	26
2.7	Comparação da expansão de altas temperaturas e o método perturbativo na integral funcional	28
3	O método de Rojas <i>et al.</i>	31
3.1	Introdução	31
3.2	Uma breve descrição do método de Rojas <i>et al.</i>	32
3.3	O limite termodinâmico	38

4	Estudo da termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional	42
4.1	Introdução	42
4.2	Estudo da termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional . . .	44
4.3	A termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional <i>versus</i> a termodinâmica do modelo de <i>spin-1</i> composto	49
4.3.1	Modelo de <i>spin-1</i> composto	49
4.3.2	Termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional <i>versus</i> o modelo de <i>spin-1</i> composto	53
4.4	Discussão dos resultados	56
5	Estudo da termodinâmica do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas	58
5.1	Introdução	58
5.2	A escolha do método de Rojas <i>et al.</i>	59
5.2.1	Obtenção do coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial via o método de Rojas <i>et al.</i>	60
5.3	Estudo da termodinâmica do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas	62
5.3.1	A densidade de carga média	62
5.3.2	O parâmetro de ordem	64
5.3.3	O vértice efetivo da interação	67
5.3.4	O calor específico	69
5.4	Discussão dos resultados	72
6	Conclusões e Perspectivas	74
A	Resultados analíticos para o modelo de Hubbard estendido unidimensional via o método de Rojas <i>et al.</i>	78
B	Renormalização do modelo de Thirring massivo e as identidades de Ward-Takahashi	82
C	Resultados analíticos para o modelo de Thirring massivo via o método de Rojas <i>et al.</i>	88
	Referências Bibliográficas	95

Introdução

A termodinâmica de qualquer sistema físico é obtida de sua função de partição gran canônica, que pode ser escrita como uma integral funcional. Em geral desejamos tratar sistemas quânticos com interação, de maneira que nos integrandos das integrais funcionais temos exponenciais de polinômios nos campos de ordem superior a 2.

Na álgebra comutativa ($\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$), sendo \mathbf{A} e \mathbf{B} os geradores dessa álgebra, não somos capazes de calcular exatamente as integrais funcionais de modelos com interação. Dentre as diversas possibilidades de obtermos alguma informação sobre a termodinâmica do modelo, temos a teoria de perturbação no parâmetro de acoplamento λ que caracteriza a intensidade da interação no sistema. A aplicação do método perturbativo na constante de acoplamento λ não nos permite obter informações do sistema na região de interação forte. O fato de não conhecermos, na álgebra usual, a solução exata de integrais de exponenciais de polinômio de ordem maior que 2 é verdadeiro mesmo quando consideramos integrações em 0-dimensão espacial (integração sobre uma variável ou Mecânica Quântica). Em contrapartida, no caso da álgebra não comutativa ($\mathbf{AB} = -\mathbf{BA}$), sendo \mathbf{A} e \mathbf{B} os geradores da álgebra de Grassmann, as integrais em 0-dimensão espacial de exponenciais de polinômios dos geradores da álgebra de qualquer ordem n podem ser calculadas devido á nilpotência de seus geradores ($\mathbf{A}^2 = \mathbf{B}^2 = 0$). Na referência [1] de Souza e Thomaz mostraram como calcular analiticamente essas integrais para um sistema fermiônico com um número de graus de liberdade finito. Os resultados da referência [1] são exatos e válidos para qualquer valor da razão entre as constantes comutativas que multiplicam produtos de geradores grassmannianos. Apesar da propriedade de nilpotência dos geradores da álgebra de Grassmann, em geral, os físicos não gostam de manipular integrais funcionais que somam sobre funções não comutativas. Em geral no estudo de modelos

fermiônicos com auto-interação, e.g. o modelo de Thirring [2] e o modelo de Gross-Neveu [3], são introduzidos campos auxiliares bosônicos sem cinemática que permitem integrar sobre as funções fermiônicas quadráticas dando um determinante que só depende de campos bosônicos. A partir deste ponto passamos a trabalhar com uma teoria bosônica efetiva. No entanto, de Souza e Thomaz utilizaram os resultados da referência [1], válidos para integrais de polinômios dos geradores da álgebra de Grassmann de ordem $l \geq 2$, para obter os coeficientes dos termos até ordem β^4 da expansão de altas temperaturas (expansão em β , sendo $\beta = \frac{1}{kT}$ com k sendo a constante de Boltzmann e T a temperatura em Kelvin) da função de partição gran canônica do oscilador fermiônico anarmônico [4]. Certamente podemos pensar em modelos em Mecânica Quântica como sendo modelos em Teoria Quântica de Campos em $D = 1(0 + 1)$, ou seja, 0-dimensão espacial.

Utilizando as propriedades da álgebra de Grassmann, Charret *et al.* [5] desenvolveram um método para o cálculo analítico dos coeficientes da expansão em altas temperaturas da função de partição gran canônica de sistemas fermiônicos auto-interagentes em d dimensões espaciais ($d \geq 1$) para modelos numa rede onde o espaçamento entre primeiros vizinhos é a e com N sítios espaciais. Com este novo formalismo é possível calcular analiticamente os coeficientes exatos da expansão em β da função de partição de quaisquer modelos fermiônicos auto-interagentes como função de N , e assim obter o resultado para $N \rightarrow \infty$, que corresponde ao limite termodinâmico. Este método foi aplicado a diversos modelos, entre eles o modelo de Hubbard unidimensional [6], onde os coeficientes exatos da expansão em altas temperaturas da função de partição gran canônica, no limite termodinâmico, foram calculados até ordem β^5 . Os resultados obtidos são válidos para todos os regimes da constante de interação U do modelo, responsável pela repulsão entre elétrons no mesmo sítio. Um dos maiores problemas do método de Charret *et al.* está no fato de que calculamos a função de partição gran canônica, que é uma quantidade extensiva, e para ela contribuem todos os possíveis gráficos (sub-redes conexas e desconexas). Além disso, a contagem dos gráficos (determinação do peso de cada configuração na função de partição gran canônica em ordem β^n) não pode ser implementada em linguagens algébricas, de forma que precisa ser obtida manualmente e representa uma grande fonte de erros para o método de Charret *et al.*.

O nosso objetivo último é calcular os coeficientes de ordens β^n para os maiores valores possíveis de n na expansão de altas temperaturas das quantidades termodinâmicas do modelo de interesse. Desta forma, estamos obtendo essas informações para regiões de temperatura cada vez mais baixa. Devido ao grande número de termos que precisamos calcular em cada ordem β^n , para obter o seu respectivo coeficiente exato, necessitamos implementar esses cálculos analíticos em linguagens algébricas, o que não é possível com o método de Charret *et al.* mencionado

anteriormente.

Um método mais eficaz para o cálculo analítico dos coeficientes da expansão em β do grande potencial, no limite termodinâmico, foi apresentado por Rojas *et al.* [7]. Este método pode ser aplicado a qualquer modelo unidimensional quântico (fermiônico e/ou bosônico) ou clássico, desde que a hamiltoniana do sistema possa ser escrita numa rede de espaçamento a , o modelo apresente invariância translacional, condição de contorno periódica na rede e a interação seja apenas entre primeiros vizinhos. Uma grande vantagem na utilização deste método está no fato de podermos calcular diretamente a expansão em altas temperaturas do grande potencial, que é uma quantidade termodinâmica intensiva. No cálculo dos coeficientes da expansão em β do grande potencial no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), apenas as sub-redes conexas são calculadas e a contagem dos gráficos passa a ser intrínseca ao método. Esse é passível de ter suas etapas implementadas em linguagem algébrica. Entre as energias livres de Helmholtz que foram calculadas utilizando o método de Rojas *et al.*, estão o modelo XXZ de Heisenberg com $spin-S$ para $S = \frac{1}{2}, 1, \dots, 4$ até ordem β^6 [7, 8, 9]. Mais recentemente foi obtida a energia livre de Helmholtz até ordem β^6 do modelo de tetraedro de $spin-\frac{1}{2}$ [10], onde em cada sítio da rede temos um $spin-1$ composto que é a soma de dois $spins-\frac{1}{2}$ fundamentais.

O que temos de comum entre os modelos estudados até agora pelos métodos de Charret *et al.* e de Rojas *et al.* é que eles são escritos numa rede de espaçamento a que funciona como um regulador do modelo e não se calcula o limite de $a \rightarrow 0$. No entanto nos modelos em Teoria Quântica de Campos é necessário tomar este limite ($a \rightarrow 0$) e nele o modelo precisa ser renormalizado para dar resultados finitos. De forma que não é óbvio como aplicar esses métodos em modelos de Teoria Quântica de Campos. Como o modelo de Rojas *et al.* só se aplica a modelos unidimensionais, o modelo a ser o centro desta tese é o modelo de Thirring massivo que é um modelo fermiônico com auto-interação. Portanto, um dos objetivos dessa tese é estudar a termodinâmica, na região de altas temperaturas, deste modelo no limite do contínuo ($a \rightarrow 0$).

De forma resumida, podemos dizer que nesta tese estudamos a termodinâmica de dois modelos fermiônicos com auto-interação, na região de altas temperaturas,

1. o modelo de Thirring massivo que não possui solução exata [11]. Originalmente, o modelo de Thirring [2] foi proposto no final da década de 50 e consiste num modelo de campos fermiônicos de Dirac sem massa com interação quártica em $D = 2(1 + 1)$. O grande interesse nesse modelo (com $m = 0$) está no fato dele ser exatamente solúvel no contínuo à temperatura zero ($T = 0$) [12] e ter solução exata também quando T e μ são diferentes de zero [13].

2. o modelo de Hubbard estendido unidimensional que é um modelo muito estudado na Matéria Condensada. Dentre as várias aplicações deste modelo, vale mencionar que ele é um dos candidatos à descrição de supercondutores orgânicos de alta temperatura crítica quando o número de ocupação é igual a $\frac{1}{2}$ (um quarto de banda preenchida).

No capítulo 2 apresentamos o modelo de Thirring massivo no contínuo e o escrevemos numa rede de espaçamento a finito. Discutimos o problema da duplicação dos graus de liberdade fermiônicos originados pela discretização do modelo (se o espaçamento da rede a for não nulo) e mostramos que essa duplicação dos graus de liberdade fermiônicos é removida espontaneamente nos métodos de Charret *et al.* e Rojas *et al.* que permitem calcular o limite do contínuo ($a \rightarrow 0$). Utilizamos o método de Charret *et al.* para obter os coeficientes da expansão em altas temperaturas da função de partição gran canônica até ordem β^3 e calculamos o grande potencial desse modelo até ordem β^2 . Como nossos resultados não apresentam singularidade para $m = 0$ observamos que eles são válidos igualmente para o modelo de Thirring sem massa. Entretanto, diante das dificuldades comentadas anteriormente e que ficarão mais claras ao longo desta tese, não é possível utilizar o método de Charret *et al.* para calcular os coeficientes da expansão em altas temperaturas da função de partição gran canônica em ordens mais altas em β .

Para obter a expansão em altas temperaturas do grande potencial do modelo de Thirring em ordens mais altas em β , utilizamos o método de Rojas *et al.* [7]. No capítulo 3 apresentamos uma breve discussão desse método. Uma das vantagens do método de Rojas *et al.* é o fato dele poder ser quase inteiramente implementado em linguagem de programação algébrica. No entanto, isso não garante que o grande potencial do modelo de Thirring massivo renormalizado, no limite do contínuo, seja obtido facilmente a partir do método de Rojas *et al.*.

Até então o método de Rojas *et al.* só foi aplicado a modelos de cadeias de *spin*. Antes de aplicá-lo ao modelo de Thirring massivo, no qual precisamos obter o limite do contínuo, calculamos a expansão em β das funções termodinâmicas de um modelo fermiônico na rede de espaçamento $a = 1$, qual seja, o modelo de Hubbard estendido unidimensional. Este último modelo possui um número menor de termos em sua hamiltoniana do que o modelo de Thirring massivo. A aplicação do método da referência [7] para obter a termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional serve como um laboratório para obter as quantidades termodinâmicas do modelo de Thirring massivo via Rojas *et al.*.

No capítulo 4 aplicamos o método de Rojas *et al.* ao modelo de Hubbard estendido unidimensional e obtemos o seu grande potencial até ordem β^5 . Neste capítulo apresentamos um estudo detalhado das quantidades termodinâmicas do modelo de Hubbard estendido uni-

dimensional com um quarto de banda preenchida e comentamos o caso da banda semi-cheia [14]. Nas referências [15] e [16], Sólyom e Timonen escrevem a hamiltoniana de $spin-1$ como a soma de dois $spins-\frac{1}{2}$ e mostram que, à temperatura zero, essa hamiltoniana é equivalente à hamiltoniana do modelo de Hubbard estendido unidimensional a menos de uma corda de correlação infinita que pode ser desprezada à temperatura zero na região de interação forte. Mostramos que mesmo na região de interação forte existem quantidades termodinâmicas, e.g. o calor específico, que são distintas nos dois modelos [14].

No capítulo 5 o método de Rojas *et al.* é finalmente aplicado ao modelo de Thirring massivo e obtemos os coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial até ordem β^5 . Obtemos a expansão analítica e aproximada para o potencial químico para diferentes valores da densidade linear de carga média. Estudamos quantidades físicas do modelo massivo e não massivo na região de altas temperaturas como o parâmetro de ordem, o vértice efetivo da interação e o calor específico para diversos valores da densidade linear de carga média e do parâmetro de massa. No capítulo 6 apresentamos nossas conclusões gerais dos problemas tratados nesta tese e perspectivas futuras. No apêndice A apresentamos os resultados analíticos para o modelo de Hubbard estendido unidimensional via o método de Rojas *et al.*, incluindo o grande potencial até ordem β^5 e a expressão do potencial químico com um quarto de banda preenchida como um polinômio de ordem β^4 . No apêndice B apresentamos a renormalização do modelo de Thirring massivo. As expressões do grande potencial do modelo de Thirring massivo e do potencial químico para diversos valores da densidade linear de carga média são apresentadas no apêndice C.

O modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas

2.1 Introdução

No final da década de 50, W. Thirring [2] propôs um modelo para campos de férmions de Dirac sem massa com interação quártica em duas dimensões espaço-temporal. O grande interesse nesse modelo bidimensional está na fato dele ser exatamente solúvel, permitindo assim verificar conjecturas gerais sobre o comportamento de campos relativísticos locais. Em particular, para este modelo podemos construir os autoestados da hamiltoniana.

O modelo de Thirring não massivo foi largamente estudado nos anos seguintes à sua apresentação [2]. Glaser [17] resolveu as equações dos campos fermiônicos em termos dos campos de Dirac livres sem massa. Johnson [12] reviu o modelo e, utilizando a conservação das simetrias de calibre e quirais, calculou as funções de Green de dois e quatro pontos do modelo sem massa. Klaiber [18] obteve a solução completa da teoria, incluindo o estudo de propriedades como transformações de Lorentz e o seu comportamento infravermelho.

No final da década de 80, Yokota [19] utilizou o formalismo de integral funcional para obter o potencial termodinâmico do modelo de Thirring sem massa com T e μ diferentes de zero. A densidade de número de férmions encontrada por Yokota neste formalismo depende do potencial químico μ mas independe da temperatura T e da constante de acoplamento g . O modelo de Thirring sem massa nessas mesmas condições foi revisto por Alvarez-Estrada e Nicola

[13] no final da década de 90. Foi utilizado o formalismo de tempo imaginário para calcular o grande potencial do modelo de Thirring sem massa, para qualquer valor de temperatura, e foi encontrada uma correção à densidade de número de férmions de Yokota. Neste formalismo, essa densidade depende do potencial químico μ e da constante de acoplamento g .

As funções de correlação do modelo de Thirring massivo no contínuo foram estudadas na referência [20], onde a integral de *2-loops* é calculada usando teoria de perturbação e a constante de renormalização nesta ordem é apresentada. Este modelo também foi tratado por Luscher [11] que o estudou na rede e mostrou que, nos processos de espalhamento de *sólitons* e *anti-sólitons*, não há produção de partículas na rede ou mesmo no contínuo.

Este capítulo é organizado da seguinte forma, na seção 2.2 apresentamos uma breve descrição do modelo de Thirring massivo no contínuo. Na seção 2.3 escrevemos a hamiltoniana desse modelo na rede e comentamos a inexistência do problema da duplicação dos graus de liberdade fermiônicos, que existe quando o espaçamento de rede é finito, uma vez que o nosso resultado é válido para $a = 0$. Na seção 2.4 apresentamos o método de Charret *et al.* utilizado para calcular os coeficientes da expansão em altas temperaturas da função de partição gran canônica de modelos fermiônicos auto-interagentes. Na seção 2.5 apresentamos os resultados da aplicação do método descrito na seção 2.4 ao modelo de Thirring massivo. Na seção 2.6 apresentamos a função de partição gran canônica até ordem β^3 e o grande potencial até ordem β^2 para o modelo de Thirring massivo. Finalmente na seção 2.7 comparamos os resultados para função de partição gran canônica obtidos via expansão de altas temperaturas e através da integral funcional.

2.2 Descrição do modelo de Thirring

Façamos um resumo do modelo de Thirring massivo em $D = 2(1+1)$ no contínuo. A densidade de lagrangeana deste modelo é

$$\mathcal{L} = i\bar{\Psi}(x,t)\gamma^\mu\partial_\mu\Psi(x,t) + m\bar{\Psi}(x,t)\Psi(x,t) + g\mathbf{j}^\mu(x,t)\mathbf{j}_\mu(x,t), \quad (2.1)$$

onde m é a massa da partícula fermiônica, $\mathbf{j}_\mu(x,t) \equiv i\bar{\Psi}(x,t)\gamma_\mu\Psi(x,t)$ e g é a constante de acoplamento das correntes fermiônicas. Utilizamos a seguinte representação para as matrizes γ^μ :

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Utilizamos na tese unidades naturais nas quais $\hbar = c = e = 1$. O espinor $\Psi(x, t)$ possui duas componentes e $\bar{\Psi}(x, t) \equiv \Psi^\dagger \gamma^0(x, t)$. As relações de anticomutação satisfeitas pelos operadores fermiônicos são

$$\{\Psi_\alpha(x, t), \Psi_\beta^\dagger(x', t)\} = \delta(x - x')\delta_{\alpha\beta} \quad \text{e} \quad \{\Psi_\alpha(x, t), \Psi_\beta(x', t)\} = 0, \quad (2.3)$$

com $\alpha, \beta = 1, 2$.

A densidade de lagrangeana (2.1) possui simetria global $U(1)$ sob as transformações

$$\Psi \rightarrow e^{-i\lambda} \Psi \quad \text{e} \quad \bar{\Psi} \rightarrow \bar{\Psi} e^{i\lambda}, \quad (2.4)$$

onde λ é uma constante $\in \mathfrak{R}$. De acordo com o teorema de Noether existe uma densidade de corrente conservada associada a esta simetria [21]. Para a densidade de lagrangeana (2.1) é conservada a densidade de corrente.

$$\mathbf{j}_\mu(x, t) = i\bar{\Psi}(x, t)\gamma_\mu\Psi(x, t) \quad (2.5)$$

A hamiltoniana do modelo de Thirring massivo escrita em termos das componentes do espinor fica

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[i\Psi_1^\dagger(x, t)\partial_1\Psi_1(x, t) - i\Psi_2^\dagger(x, t)\partial_1\Psi_2(x, t) - m\left(\Psi_1^\dagger(x, t)\Psi_2(x, t) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \Psi_2^\dagger(x, t)\Psi_1(x, t)\right) - 4g\Psi_1^\dagger(x, t)\Psi_1(x, t)\Psi_2^\dagger(x, t)\Psi_2(x, t) \right]. \end{aligned} \quad (2.6)$$

No *ensemble* gran canônico a função de partição gran canônica $\mathcal{Z}(\beta; \mu)$ é calculada a partir da hamiltoniana do sistema \mathbf{H} e de uma constante do movimento \mathbf{N} , $\mathcal{Z}(\beta, \mu) = \text{Tr}[e^{-\beta\mathbf{K}}]$, com $\mathbf{K} = \mathbf{H} - \mu\mathbf{N}$, sendo μ o potencial químico, $\beta = \frac{1}{kT}$ com k sendo a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta (Kelvin) e o traço sobre todos os graus de liberdade do sistema, inclusive os graus de liberdade de *spin*. No nosso caso, como há possibilidade de criação e aniquilação de pares de férmions, a grandeza que se conserva é a carga elétrica total \mathbf{Q} .

O operador carga elétrica total é dado por

$$\mathbf{Q}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx j^0(x, t), \quad (2.7)$$

de forma que $\mathbf{K} = \mathbf{H} - \mu\mathbf{Q}$. Em termos das componentes do espinor,

$$\mathbf{Q}(t) = \sum_{\alpha=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_{\alpha}^{\dagger} \Psi_{\alpha}. \quad (2.8)$$

No contínuo, a expressão do operador \mathbf{K} para o modelo de Thirring massivo em termos das componentes dos campos fermiônicos é

$$\begin{aligned} \mathbf{K}(t) = & \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[i\Psi_1^{\dagger}(x, t)\partial_1\Psi_1(x, t) - i\Psi_2^{\dagger}(x, t)\partial_1\Psi_2(x, t) - m\left(\Psi_1^{\dagger}(x, t)\Psi_2(x, t) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \Psi_2^{\dagger}(x, t)\Psi_1(x, t)\right) - 4g\Psi_1^{\dagger}(x, t)\Psi_1(x, t)\Psi_2^{\dagger}(x, t)\Psi_2(x, t) \right] + \\ & - \mu \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\Psi_1^{\dagger}\Psi_1 + \Psi_2^{\dagger}\Psi_2 \right). \end{aligned} \quad (2.9)$$

2.3 O modelo de Thirring massivo na rede

Desejamos obter a termodinâmica do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas. Utilizaremos o método de Charret *et al.* [5] que foi aplicado ao modelo de Hubbard unidimensional [6], no qual temos férmions numa rede de espaçamento a finito. Como o método de Charret *et al.* é analítico e válido para qualquer valor N , sendo N o número de pontos na rede, podemos obter os resultados para o modelo de interesse no limite termodinâmico no qual $N \rightarrow \infty$. Para aplicarmos o método de Charret *et al.* ao modelo de Thirring massivo devemos escrever este último numa rede unidimensional cujo espaçamento entre dois pontos consecutivos na rede tende a zero, o que corresponde ao limite termodinâmico do modelo.

Vamos estudar a termodinâmica do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas. Se, no limite de $m \rightarrow 0$, as funções termodinâmicas obtidas não apresentarem singularidade, então estaremos obtendo também as propriedades termodinâmicas do modelo de Thirring sem massa na região de altas temperaturas. Escrevemos o operador \mathbf{K} para o modelo de Thirring massivo numa rede unidimensional de espaçamento a com N sítios, onde supomos

uma condição de contorno espacial periódica. Na rede, fazemos uma mudança de escala em cada componente dos operadores fermiônicos que passa a ser escrita como

$$\bar{\Psi}_\alpha(x, t) \rightarrow \hat{\bar{\Psi}}_\alpha(n, t) \equiv a^{\frac{1}{2}} \bar{\Psi}_\alpha(n, t), \quad (2.10)$$

$$\Psi_\alpha(x, t) \rightarrow \hat{\Psi}_\alpha(n, t) \equiv a^{\frac{1}{2}} \Psi_\alpha(n, t). \quad (2.11)$$

As relações de anticomutação (2.3) no contínuo, quando escritas em termos dos campos $\hat{\Psi}$ e $\hat{\Psi}^\dagger$ na rede, passam a ser

$$\{\hat{\Psi}_\alpha(n, t), \hat{\Psi}_\beta^\dagger(m, t)\} = \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta} \quad \text{e} \quad \{\hat{\Psi}_\alpha(n, t), \hat{\Psi}_\beta(m, t)\} = 0, \quad (2.12)$$

onde $\alpha, \beta = 1, 2$, e $n, m = 1, 2, \dots, N$. Devemos notar que essas relações de anticomutação são análogas às utilizadas usualmente para fazer o mapeamento entre os operadores fermiônicos e os geradores da álgebra de Grassmann [22].

Definimos o operador diferencial na rede $\hat{\partial}_\mu$ como

$$\partial_\mu \Psi_\alpha(x, t) \rightarrow \hat{\partial}_\mu \hat{\Psi}_\alpha(n, t) \equiv a^{\frac{3}{2}} \partial_\mu \Psi_\alpha(n, t), \quad (2.13)$$

e

$$\hat{\partial}_1 \hat{\Psi}_\alpha(n, t) \rightarrow \frac{1}{2} \left[\hat{\Psi}_\alpha(n+1, t) - \hat{\Psi}_\alpha(n-1, t) \right], \quad (2.14)$$

onde n representa o n -ésimo ponto da cadeia unidimensional. Os campos $\hat{\Psi}_\alpha(n, t)$ e $\hat{\bar{\Psi}}_\alpha(n, t)$ têm dimensão 1. A condição de contorno periódica no espaço dos operadores fermiônicos é implementada pela relação

$$\hat{\Psi}_\alpha(N+1, t) = \hat{\Psi}_\alpha(1, t). \quad (2.15)$$

Utilizando as igualdades (2.10), (2.11), (2.13) e (2.14) escrevemos o operador \mathbf{K} (veja a equação (2.9)) na rede com N sítios

$$\begin{aligned}
\mathbf{K} &= \sum_{n=1}^N \left[\frac{i}{2a} \sum_{\alpha=1}^2 (-1)^{(\alpha+1)} \left(\hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(n, t) \hat{\Psi}_{\alpha}(n+1, t) - \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(n+1, t) \hat{\Psi}_{\alpha}(n, t) \right) + \right. \\
&\quad - m \left(\hat{\Psi}_1^{\dagger}(n, t) \hat{\Psi}_2(n, t) + \hat{\Psi}_2^{\dagger}(n, t) \hat{\Psi}_1(n, t) \right) + \\
&\quad \left. - \mu \sum_{\alpha=1}^2 \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(n, t) \hat{\Psi}_{\alpha}(n, t) - \frac{4g}{a} \hat{\Psi}_1^{\dagger}(n, t) \hat{\Psi}_1(n, t) \hat{\Psi}_2^{\dagger}(n, t) \hat{\Psi}_2(n, t) \right]. \quad (2.16)
\end{aligned}$$

A quantização *ingênua* desta versão discretizada do modelo para a pequeno, mas não nulo, leva à duplicação dos graus de liberdade dos férmions [23]. A origem da duplicação desses graus de liberdade está no comportamento da relação de dispersão nas bordas da primeira zona de Brillouin. Para mostrar essa duplicação dos graus de liberdade fermiônicos, faremos uma breve discussão do caso de férmions livres em $D = 2(1 + 1)$.

Considere uma cadeia com N sítios espaciais, comprimento L e espaçamento a , tal que $Na = L$, com condição de contorno periódica na rede,

$$\hat{\Psi}(x = a, t) = \hat{\Psi}(x = L + a, t). \quad (2.17)$$

Como o comprimento L é finito, com condição periódica de contorno, escrevemos a parte espacial do campo fermiônico em termos de sua série de Fourier

$$\hat{\Psi}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(k_n, t) e^{ik_n x}. \quad (2.18)$$

Ao impormos a condição (2.17), obtemos

$$e^{ik_n L} = 1, \quad (2.19)$$

logo, $k_n = \frac{2\pi n}{L}$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N$ onde $\pm \frac{2\pi N}{L} = \pm \frac{\pi}{a}$ que corresponde às extremidades da primeira zona de Brillouin.

Para simplificar as expressões escolhemos N par, de forma que a série de Fourier (2.18) é reescrita como

$$\hat{\Psi}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} \tilde{\Psi}(k_n, t) e^{ik_n x}. \quad (2.20)$$

O tempo é um parâmetro que varia continuamente no campo $\tilde{\Psi}(k_n, t)$,

$$\hat{\Psi}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} \tilde{\Psi}(k_n, \omega) e^{i(k_n x + \omega t)}. \quad (2.21)$$

A equação de movimento na rede para o campo $\hat{\Psi}$ sem massa é [24]

$$i \frac{\partial \hat{\Psi}(n, t)}{\partial t} = \frac{i\alpha}{2a} \left[\hat{\Psi}(n+1, t) - \hat{\Psi}(n-1, t) \right], \quad (2.22)$$

onde $x = na$.

Substituindo a equação (2.21) na equação (2.22), obtemos,

$$\sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} \tilde{\Psi}(k_m, \omega) e^{ik_m n a} \left[i\omega - \frac{\alpha}{2a} (e^{ik_m a} - e^{-ik_m a}) \right] = 0. \quad (2.23)$$

Logo,

$$\omega = \frac{\alpha}{a} \text{sen}(k_m a), \quad (2.24)$$

com $k_m = \frac{2\pi m}{L}$, e $-\frac{\pi}{2} \leq k_m \leq \frac{\pi}{a}$, pertencente à primeira zona de Brillouin. A relação (2.24) representa a relação de dispersão para férmions de Dirac livres na rede.

No contínuo, a relação de dispersão para férmions de Dirac livres é dada por

$$\omega = \alpha k, \quad \text{com} \quad -\infty < k < \infty. \quad (2.25)$$

Para $a \sim 0$ (para a com valor finito mas não nulo) três regiões de momento ($k_m \sim 0$ e $k_m \sim \pm \frac{\pi}{a}$) da relação de dispersão (2.24) dão contribuição finita, conforme vemos na Fig. 2.1.

Para remover os graus de liberdade que vêm das extremidades da primeira zona de Brillouin para a finito e que não têm significado físico há diversas técnicas disponíveis, entre elas, a inclusão do termo de Wilson [25] na hamiltoniana do sistema que retira a contribuição para a

relação de dispersão em torno das regiões $k = \pm \frac{\pi}{a}$ mas quebra a simetria quiral de modelos sem massa. Um outro procedimento é escrever os campos fermiônicos Ψ com duas componentes em termos de um campo ϕ com apenas uma componente (férmions de Susskind) [24]; as derivadas de SLAC onde a derivada do campo fermiônico na rede é definida de forma a manter a invariância quiral do modelo [26]. Finalmente temos o programa de melhoramento de Symanzik [27] que reobtem algumas simetrias do contínuo do modelo para o espaçamento finito da rede.

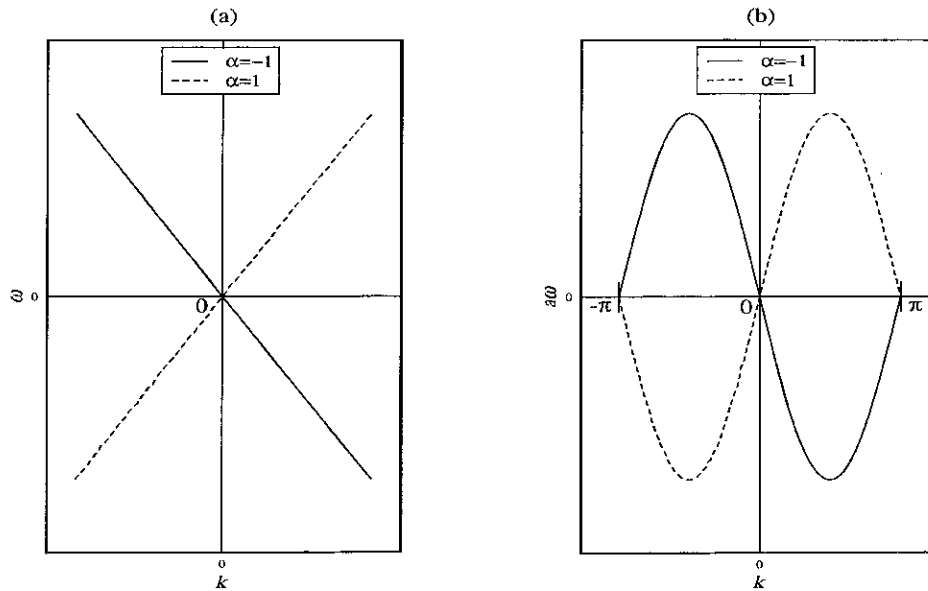


Figura 2.1: A figura (a) representa a relação de dispersão para a equação de Dirac no contínuo, a figura (b) representa a relação de dispersão na rede.

Entretanto, no método de Charret *et al.* não há necessidade de introduzirmos novos termos para evitar a duplicação de graus de liberdade de férmions pois os resultados são obtidos no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty \implies a \rightarrow 0$).

2.4 O método de Charret *et al.*

2.4.1 Introdução

Charret *et al.* [5] desenvolveram uma técnica que permite obter os coeficientes de expansões de altas temperaturas de funções termodinâmicas de sistemas fermiônicos auto-interagentes em d dimensões espaciais com $d \geq 1$. A técnica se aplica exclusivamente a campos fermiônicos e está baseada nas propriedades da álgebra de Grassmann [28].

Consideremos uma cadeia unidimensional com N sítios cuja dinâmica do sistema é governada pela hamiltoniana \mathbf{H} . A função de partição gran canônica do sistema é dada por

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu) = \text{Tr}[e^{-\beta\mathbf{K}}], \quad (2.26)$$

com $\mathbf{K} = \mathbf{H} - \mu\mathbf{N}$, onde μ é o potencial químico e \mathbf{N} é um operador que comuta com \mathbf{H} .

Uma forma de obter informações sobre a termodinâmica do sistema, é calcular $\mathcal{Z}(\beta, \mu)$ na região de altas temperaturas, o que corresponde a fazer a expansão em série de Taylor de $\mathcal{Z}(\beta, \mu)$ em torno de $\beta = 0$,

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu) = \text{Tr}[\mathbf{1}] - \beta\text{Tr}[\mathbf{K}] + \frac{\beta^2}{2!}\text{Tr}[\mathbf{K}^2] - \frac{\beta^3}{3!}\text{Tr}[\mathbf{K}^3] + \dots \quad (2.27)$$

sendo $\mathbf{1}$ o operador identidade. A expansão (2.27) é denominada expansão em altas temperaturas ou expansão em β .

A técnica desenvolvida por Charret *et al.* permite calcular exatamente os coeficientes $\text{Tr}[\mathbf{K}^n]$ da expansão em β da função de partição gran canônica, $\mathcal{Z}(\beta, \mu)$, para qualquer modelo fermiônico auto-interagente [5].

Este método foi aplicado a diversos modelos: férmions de Dirac livres em $D = 4(3+1)$ [29], oscilador fermiônico anarmônico [30] e o modelo de Hubbard em $D = 2(1+1)$ [6].

Nosso objetivo é calcular a função de partição gran canônica do modelo de Thirring massivo em $D = 2(1+1)$ numa rede de espaçamento a , com N sítios no limite de altas temperaturas, e obter o resultado no limite termodinâmico ($a \rightarrow 0$). O espaçamento a finito entre pontos espaciais consecutivos na rede é o regularizador para o modelo de Thirring massivo.

2.4.2 Resumo do método de Charret et al.

De acordo com a referência [5], no caso particular de cadeias ($D = 2(1 + 1)$) os coeficientes $\text{Tr}[\mathbf{K}^n]$ da expansão em β da função de partição gran canônica, equação (2.27), podem ser escritos em termos de integrais múltiplas de Grassmann

$$\begin{aligned}
\text{Tr}[\mathbf{K}^n] &= \int \prod_{l=1}^N \prod_{\alpha=1}^2 \prod_{\nu=0}^{n-1} d\eta_{\alpha}(x_l, \nu) d\bar{\eta}_{\alpha}(x_l, \nu) \times \\
&\times \exp \left[\sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\nu=0}^{n-1} \bar{\eta}_{\alpha}(x_l, \nu) \left(\eta_{\alpha}(x_l, \nu) - \eta_{\alpha}(x_l, \nu + 1) \right) \right] \times \\
&\times \mathcal{K}^{\textcircled{R}}(\bar{\eta}_{\alpha}(x_l, \nu = 0), \eta_{\alpha}(x_l, \nu = 0)) \times \dots \times \\
&\times \mathcal{K}^{\textcircled{R}}(\bar{\eta}_{\alpha}(x_l, \nu = n - 1), \eta_{\alpha}(x_l, \nu = n - 1)), \tag{2.28}
\end{aligned}$$

onde $\eta_{\alpha}(x_l, \nu)$ e $\bar{\eta}_{\alpha}(x_l, \nu)$ são os geradores da álgebra Grassmann não comutativa e que satisfazem às relações de anti-comutação

$$\{\eta_{\alpha}(x_l, \nu), \bar{\eta}_{\alpha'}(x_{l'}, \nu')\} = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{ll'} \delta_{\nu\nu'}, \tag{2.29}$$

$$\{\eta_{\alpha}(x_l, \nu), \eta_{\alpha'}(x_{l'}, \nu')\} = \{\bar{\eta}_{\alpha}(x_l, \nu), \bar{\eta}_{\alpha'}(x_{l'}, \nu')\} = 0. \tag{2.30}$$

A partir da igualdade (2.30) temos a nilpotência dos geradores da álgebra não comutativa,

$$\bar{\eta}_{\alpha}^2(x_l, \nu) = \eta_{\alpha}^2(x_l, \nu) = 0. \tag{2.31}$$

O índice ν está associado à temperatura, o índice α corresponde ao índice espinorial, l à posição na cadeia espacial, N é o número de sítios da rede e $\mathcal{K}^{\textcircled{R}}(\bar{\eta}, \eta; \nu)$ é o núcleo do operador \mathbf{K} ordenado normalmente [22]. Ressaltamos que o índice de temperatura ν corresponde, na integral funcional, a tomar a extensão de tempos imaginários e trabalhar no espaço Euclideano. Para obtermos as funções $\mathcal{K}^{\textcircled{R}}(\bar{\eta}, \eta; \nu)$ associadas ao operador \mathbf{K} devemos mapear as componentes dos campos fermiônicos em geradores grassmannianos

$$\hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(n, t) \rightarrow \bar{\eta}_{\alpha}(x_l, \nu) \tag{2.32}$$

e

$$\hat{\Psi}_\alpha(n, t) \rightarrow \eta_\alpha(x_l, \nu). \quad (2.33)$$

Os geradores da álgebra de Grassmann satisfazem às condições de contorno espaciais periódicas: $\eta_\alpha(0, \nu) = \eta_\alpha(N, \nu)$ e $\eta_\alpha(N+1, \nu) = \eta_\alpha(1, \nu)$. Esses geradores também satisfazem à condição de contorno antiperiódica no índice associado à temperatura,

$$\eta_\alpha(x_l, \nu = n) = -\eta_\alpha(x_l, \nu = 0), \quad (2.34)$$

com $\eta_\alpha(x_l, \nu) = 0$ para $\nu > n$. As funções $\bar{\eta}_\alpha(x_l, \nu)$ satisfazem às mesmas condições de contorno espaciais e de temperatura.

Um procedimento conveniente para calcular o $\text{Tr}[\mathbf{K}^n]$ é escrever os três índices dos geradores da álgebra de Grassmann como um único índice. Dentre os vários mapeamentos possíveis, escolhamos o seguinte

$$\eta_\alpha(x_l, \nu) \rightarrow \eta_{((\alpha-1)n+\nu)N+l}. \quad (2.35)$$

Com o mapeamento anterior a exponencial na integral múltipla de Grassmann, equação (2.28), é reescrita como

$$\exp \sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\nu=0}^{n-1} \bar{\eta}_\alpha(x_l, \nu) [\eta_\alpha(x_l, \nu) - \eta_\alpha(x_l, \nu + 1)] = \exp \sum_{i,j=1}^{2nN} \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j, \quad (2.36)$$

onde A_{ij} são os elementos da matriz \mathbf{A} de dimensão $2nN \times 2nN$ dada por

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}^{22} \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

As matrizes $\mathbf{A}^{\alpha\alpha}$, $\alpha = 1$ e 2 , têm dimensão $nN \times nN$ e são idênticas. Elas possuem uma estrutura de blocos

$$\mathbf{A}^{11} = \mathbf{A}^{22} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{N \times N} & -\mathbf{1}_{N \times N} & \mathbf{0}_{N \times N} & \cdots & \mathbf{0}_{N \times N} \\ \mathbf{0}_{N \times N} & \mathbf{1}_{N \times N} & -\mathbf{1}_{N \times N} & \cdots & \mathbf{0}_{N \times N} \\ \mathbf{0}_{N \times N} & \mathbf{0}_{N \times N} & \mathbf{1}_{N \times N} & \cdots & \mathbf{0}_{N \times N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{1}_{N \times N} & \mathbf{0}_{N \times N} & \mathbf{0}_{N \times N} & \cdots & \mathbf{1}_{N \times N} \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

As matrizes $\mathbb{0}_{N \times N}$ e $\mathbb{1}_{N \times N}$ representam respectivamente as matrizes nula e identidade de dimensão $N \times N$.

Utilizando a definição da matriz \mathbf{A} e o mapeamento (2.35) podemos reescrever os coeficientes $\text{Tr}[\mathbf{K}^n]$ da expansão (2.27) para qualquer modelo fermiônico auto-interagente

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\mathbf{K}^n] &= \int \prod_{i=1}^{2nN} d\eta_i d\bar{\eta}_i e^{\sum_{i,j=1}^{2nN} \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j} \mathcal{K}^{\textcircled{0}}(\bar{\eta}_i, \eta_i, \nu = 0) \times \\ &\times \mathcal{K}^{\textcircled{0}}(\bar{\eta}_i, \eta_i, \nu = 1) \times \cdots \times \mathcal{K}^{\textcircled{0}}(\bar{\eta}_i, \eta_i, \nu = n - 1). \end{aligned} \quad (2.39)$$

A matriz \mathbf{A} é independente do modelo fermiônico estudado. Na expressão (2.39) a caracterização do modelo está presente na função grassmanniana $\mathcal{K}^{\textcircled{0}}(\bar{\eta}_i, \eta_i, \nu)$ que é escrita como polinômios dos geradores da álgebra de Grassmann, assim no l.d. da equação (2.39) temos momentos de integrais múltiplas de Grassmann gaussianas. Estas integrais podem ser escritas como cofatores da matriz \mathbf{A} . Como as sub-matrizes \mathbf{A}^{12} e \mathbf{A}^{21} são nulas, a integral (2.39) é igual ao produto das contribuições apenas das matrizes \mathbf{A}^{11} e \mathbf{A}^{22} . Como as matrizes \mathbf{A}^{11} e \mathbf{A}^{22} são idênticas, podemos nos restringir ao estudo do setor $\alpha\alpha = 11$.

Como calculamos os coeficientes da equação (2.27) em cada ordem em β separadamente, podemos estudar a equação (2.39) para valores de n fixos. Em cada setor $\alpha\alpha$, as integrais presentes na expressão (2.39) para um dado n fixo, são

$$M(L, K) = \int \prod_{i=1+(\alpha-1)nN}^{nN+(\alpha-1)nN} d\eta_i d\bar{\eta}_i \bar{\eta}_{l_1} \eta_{k_1} \cdots \bar{\eta}_{l_m} \eta_{k_m} \exp \left(\sum_{i,j=1+(\alpha-1)nN}^{nN+(\alpha-1)nN} \bar{\eta}_i A_{ij}^{\alpha\alpha} \eta_j \right),$$

com $L = \{l_1, \dots, l_m\}$ e $K = \{k_1, \dots, k_m\}$. Da referência [31] temos que

$$M(L, K) = (-1)^{(l_1+l_2+\dots+l_m)+(k_1+k_2+\dots+k_m)} A(L, K), \quad (2.40)$$

onde $A(L, K)$ é o determinante da matriz obtida de \mathbf{A} após o corte das linhas $\{l_1, \dots, l_m\}$ e das colunas $\{k_1, \dots, k_m\}$. Reconhecemos $M(L, K)$ como um cofator da matriz $\mathbf{A}^{\alpha\alpha}$.

Mesmo nos restringindo apenas a um único setor $\alpha\alpha$ fixo, a solução da equação (2.39) envolve o cálculo de determinantes de matrizes não diagonais de dimensão $nN \times nN$. Lembramos que nosso objetivo é obter os resultados no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Nossos resultados

dependem de linguagens algébricas de programação e dos recursos computacionais disponíveis. Se pudermos encontrar uma transformação de similaridade que diagonalize as matrizes $\mathbf{A}^{\alpha\alpha}$, então, a solução da equação (2.39) envolverá o cálculo de determinantes de matrizes diagonais e poderemos explorar melhor nossos recursos computacionais. Uma transformação que explora a estrutura de blocos das matrizes $\mathbf{A}^{\alpha\alpha}$ é

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^{\alpha\alpha}\mathbf{P} = \mathbf{D}, \quad (2.41)$$

onde a matriz \mathbf{D} é dada por

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \mathbb{1}_{N \times N} & \mathbb{O}_{N \times N} & \mathbb{O}_{N \times N} & \cdots & \mathbb{O}_{N \times N} \\ \mathbb{O}_{N \times N} & \lambda_2 \mathbb{1}_{N \times N} & \mathbb{O}_{N \times N} & \cdots & \mathbb{O}_{N \times N} \\ \mathbb{O}_{N \times N} & \mathbb{O}_{N \times N} & \lambda_3 \mathbb{1}_{N \times N} & \cdots & \mathbb{O}_{N \times N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbb{O}_{N \times N} & \mathbb{O}_{N \times N} & \mathbb{O}_{N \times N} & \cdots & \lambda_n \mathbb{1}_{N \times N} \end{pmatrix}. \quad (2.42)$$

A expressão dos auto-valores da matriz \mathbf{D} é $\lambda_\nu^{(n)} = 1 - e^{\frac{i\pi}{n}(2\nu+1)}$, $\nu = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Esses autovalores das matrizes $\mathbf{A}^{\alpha\alpha}$ são degenerados de ordem N . As matrizes \mathbf{P} e \mathbf{P}^{-1} são

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_{00}^{(n)} \mathbb{1}_{N \times N} & \cdots & p_{0,n-1}^{(n)} \mathbb{1}_{N \times N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n-1,0}^{(n)} \mathbb{1}_{N \times N} & \cdots & p_{n-1,n-1}^{(n)} \mathbb{1}_{N \times N} \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

e

$$\mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} q_{00}^{(n)} \mathbb{1}_{N \times N} & \cdots & q_{0,n-1}^{(n)} \mathbb{1}_{N \times N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n-1,0}^{(n)} \mathbb{1}_{N \times N} & \cdots & q_{n-1,n-1}^{(n)} \mathbb{1}_{N \times N} \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

onde

$$p_{\nu\nu'}^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{\frac{i\pi}{n}(2\nu'+1)(\nu+1)} \quad \text{e} \quad q_{\nu\nu'}^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{-\frac{i\pi}{n}(2\nu'+1)(\nu+1)}. \quad (2.45)$$

Para reescrevermos a expressão (2.39) substituindo a matriz \mathbf{A} pela matriz diagonal \mathbf{D} , precisamos aplicar a mesma transformação aos geradores da álgebra

$$\eta \rightarrow \mathbf{P}\eta' \quad \text{e} \quad \bar{\eta} \rightarrow \bar{\eta}'\mathbf{P}^{-1}, \quad (2.46)$$

onde $\eta' \equiv \{\eta'_1, \dots, \eta'_{nN}\}$ e $\bar{\eta}' \equiv \{\bar{\eta}'_1, \dots, \bar{\eta}'_{nN}\}$. As transformações (2.46) têm jacobiano unitário.

Os termos que contribuem para $\text{Tr}[\mathbf{K}^n]$ (veja a equação (2.39)) possuem a forma da expressão (2.40). Assim, aplicando as transformações (2.41) e (2.46) nas integrais (2.40), obtemos, de forma esquemática,

$$M(L, K) = \int \prod_{i=1}^{nN} d\eta_i d\bar{\eta}_i (\bar{\eta}'\mathbf{P}^{-1})_{l_1} (\mathbf{P}\eta)_{k_1} \cdots (\bar{\eta}'\mathbf{P}^{-1})_{l_m} (\mathbf{P}\eta)_{k_m} \exp\left(\sum_{i,j=1}^{nN} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j\right). \quad (2.47)$$

Dessa forma, passamos a calcular os cofatores da matriz diagonal \mathbf{D} e reduzimos significativamente o esforço computacional para calcular os coeficientes da expansão de altas temperaturas da função de partição gran canônica de modelos fermiônicos auto-interagentes. Ressaltamos que, se o operador \mathbf{K} do modelo em estudo tem M operadores, então para cada ordem n (β^n) temos que $(M)^n$ termos podem contribuir para $\text{Tr}[\mathbf{K}^n]$ e que precisamos calculá-los.

Note que, com este método, para qualquer modelo fermiônico auto-interagente, o cálculo das integrais que contribuem para a função de partição gran canônica fica reduzido ao cálculo de cofatores da matriz diagonal \mathbf{D} .

2.5 Obtenção dos coeficientes da expansão de altas temperaturas via o método de Charret *et al.*

Nesta seção apresentamos os coeficientes analíticos e exatos da expansão de altas temperaturas (2.27) da função de partição gran canônica do modelo de Thirring massivo obtidos via o método de Charret *et al.* até ordem β^3 . Nas subseções 2.5.1, 2.5.2 e 2.5.3 apresentamos os coeficientes da expansão (2.27) de ordem β , β^2 e β^3 , respectivamente.

Para aplicarmos o método de Charret *et al.* ao modelo de Thirring massivo, reescrevemos o operador \mathbf{K} associado ao modelo numa cadeia de espaçamento a (veja equação (2.16)). Para este modelo, o *kernel* $\mathcal{K}^{\textcircled{a}}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu)$ do operador \mathbf{K} é obtido da expressão (2.16) através dos mapeamentos (2.32) e (2.33). Para valores arbitrários de temperatura, temos

$$\begin{aligned}
 \mathcal{K}^{\textcircled{R}}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu) &= \sum_{l=1}^N \left\{ \sum_{\alpha=1}^2 (-1)^{\alpha+1} \left(t \bar{\eta}_{((\alpha-1)n+\nu)N+l} \eta_{((\alpha-1)n+\nu)N+l+1} + \right. \right. \\
 &+ t^* \bar{\eta}_{((\alpha-1)n+\nu)N+l+1} \eta_{((\alpha-1)n+\nu)N+l} \left. \right) + \\
 &- \mu \sum_{\alpha=1}^2 \bar{\eta}_{((\alpha-1)n+\nu)N+l} \eta_{((\alpha-1)n+\nu)N+l} + \\
 &- u \bar{\eta}_{\nu N+l} \eta_{\nu N+l} \bar{\eta}_{(n+\nu)N+l} \eta_{(n+\nu)N+l} + \\
 &+ m \sum_{\alpha, \beta=1, \alpha \neq \beta}^2 \bar{\eta}_{((\alpha-1)n+\nu)N+l} \eta_{((\beta-1)n+\nu)N+l} \left. \right\}, \tag{2.48}
 \end{aligned}$$

com α e $\beta = 1, 2$ e $\alpha \neq \beta$, e definimos

$$t \rightarrow \frac{i}{2a} \quad \text{e} \quad u \rightarrow \frac{4g}{a}. \tag{2.49}$$

O operador \mathbf{K} é a soma de 9 (nove) operadores escritos como produtos de operadores fermiônicos. Em cada ordem β^n , $(9)^n$ termos contribuem para $\text{Tr}[\mathbf{K}^n]$ e precisam ser analisados.

2.5.1 Cálculo do coeficiente de ordem β

Em ordem β apenas o segundo termo do l.d. da expansão (2.27) contribui. Este termo corresponde a tomarmos $n = 1$ e $\nu = 0$ na expressão (2.39),

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}[\mathbf{K}] &= \int \prod_{l=1}^N \prod_{\alpha=1}^2 d\eta_{\alpha}(x_l, \nu = 0) d\bar{\eta}_{\alpha}(x_l, \nu = 0) \times \\
 &\times \exp \left[\sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^2 \bar{\eta}_{\alpha}(x_l, 0) \left(\eta_{\alpha}(x_l, 0) - \eta_{\alpha}(x_l, 1) \right) \right] \times \\
 &\times \mathcal{K}^{\textcircled{R}}(\bar{\eta}_{\alpha}(x_l, \nu = 0), \eta_{\alpha}(x_l, \nu = 0)). \tag{2.50}
 \end{aligned}$$

O kernel $\mathcal{K}^{\textcircled{R}}(\bar{\eta}_{\alpha}(x_l, \nu = 0), \eta_{\alpha}(x_l, \nu = 0))$ do operador \mathbf{K} , após a transformação (2.35), é dado por

$$\begin{aligned}
 \mathcal{K}^{\textcircled{2}}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0) &= \sum_{l=1}^N \left\{ t \left(\bar{\eta}_l \eta_{l+1} - \bar{\eta}_{N+l} \eta_{N+l+1} \right) + t^* \left(\bar{\eta}_{l+1} \eta_l - \bar{\eta}_{N+l+1} \eta_{N+l} \right) + \right. \\
 &\quad \left. - \mu \left(\bar{\eta}_l \eta_l + \bar{\eta}_{N+l} \eta_{N+l} \right) - u \bar{\eta}_l \eta_l \bar{\eta}_{N+l} \eta_{N+l} + m \left(\bar{\eta}_l \eta_{N+l} + \bar{\eta}_{N+l} \eta_l \right) \right\}. \tag{2.51}
 \end{aligned}$$

O elemento de integração nesta ordem é (veja a equação (2.50) e o mapeamento (2.35))

$$\prod_{l=1}^N \prod_{\alpha=1}^2 d\eta_{(\alpha-1)N+l} d\bar{\eta}_{(\alpha-1)N+l} = \prod_{l=1}^N d\eta_l d\bar{\eta}_l d\eta_{N+l} d\bar{\eta}_{N+l}. \tag{2.52}$$

Devido às propriedades básicas de integração sobre os geradores da álgebra de Grassmann, os únicos termos da equação (2.51) que contribuem para a expressão (2.50) são

$$-\mu \left(\bar{\eta}_l \eta_l + \bar{\eta}_{N+l} \eta_{N+l} \right) \quad \text{e} \quad -u \bar{\eta}_l \eta_l \bar{\eta}_{N+l} \eta_{N+l}, \quad \text{com} \quad l = 1, \dots, N. \tag{2.53}$$

Portanto, em ordem β ($n = 1$), obtemos

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}[\mathbf{K}] &= \sum_{l=1}^N \int \prod_{l=1}^{2N} d\eta_l d\bar{\eta}_l d\eta_{N+l} d\bar{\eta}_{N+l} e^{2(\bar{\eta}_l \eta_l + \bar{\eta}_{N+l} \eta_{N+l})} \times \\
 &\quad \times \left\{ -\mu \left(\bar{\eta}_l \eta_l + \bar{\eta}_{N+l} \eta_{N+l} \right) - u \bar{\eta}_l \eta_l \bar{\eta}_{N+l} \eta_{N+l} \right\}, \tag{2.54}
 \end{aligned}$$

que aplicando as propriedades da álgebra de Grassmann e a invariância do integrando sob translações espaciais nos dão

$$\text{Tr}[\mathbf{K}] = -N2^{2N} \left(\mu + \frac{u}{4} \right), \tag{2.55}$$

sendo N o número de vezes que os integrandos (2.53) contribuem para o $\text{Tr}[\mathbf{K}]$.

Note que nessa ordem em β não precisamos utilizar o formalismo da matriz \mathbf{A} uma vez que o cálculo da expressão (2.54) é trivial. O coeficiente (2.55) não possui correção vinda de termos de ordem superior a $n = 1$.

2.5.2 Cálculo do coeficiente de ordem β^2

O coeficiente de ordem β^2 na expansão (2.27) pode ser escrito, segundo a expressão (2.28), através da integral múltipla de Grassmann

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\mathbf{K}^2] &= \int \prod_{i=1}^{4N} d\eta_i d\bar{\eta}_i e^{\sum_{i,j=1}^{4N} \eta_i A_{ij} \eta_j} \times \\ &\times \mathcal{K}^{\textcircled{a}}(\bar{\eta}_{(\alpha-1)nN+l_1}, \eta_{(\alpha-1)nN+l_1}) \mathcal{K}^{\textcircled{a}}(\bar{\eta}_{((\alpha-1)n+1)N+l_2}, \eta_{((\alpha-1)n+1)N+l_2}), \end{aligned} \quad (2.56)$$

onde as expressões de $\mathcal{K}^{\textcircled{a}}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu)$ são obtidas do operador \mathbf{K} , equação (2.16), através dos mapeamentos (2.32) e (2.33).

Para estudar os termos não nulos que contribuem nesta ordem para a expressão (2.27) e em ordens mais altas escrevemos o *kernel* do operador \mathbf{K} , como

$$\mathcal{K}^{\textcircled{a}}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu) = \mathcal{T}^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu) + \mathcal{T}^-(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu) + \mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu) + \mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu) + \mathcal{M}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu). \quad (2.57)$$

Cada função presente na equação (2.57) é definida como

$$\mathcal{T}^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu, \alpha) \equiv t^*(-1)^{\alpha+1} \bar{\eta}_{((\alpha-1)n+\nu)N+l+1} \eta_{((\alpha-1)n+\nu)N+l}, \quad (2.58)$$

$$\mathcal{T}^-(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu, \alpha) \equiv t(-1)^{\alpha+1} \bar{\eta}_{((\alpha-1)n+\nu)N+l} \eta_{((\alpha-1)n+\nu)N+l+1}, \quad (2.59)$$

$$\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu, \alpha) \equiv -\mu \bar{\eta}_{((\alpha-1)n+\nu)N+l} \eta_{((\alpha-1)n+\nu)N+l}, \quad (2.60)$$

$$\mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu) \equiv -u \bar{\eta}_{\nu N+l} \eta_{\nu N+l} \bar{\eta}_{(n+\nu)N+l} \eta_{(n+\nu)N+l}, \quad (2.61)$$

$$\mathcal{M}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu, \alpha) \equiv m \bar{\eta}_{((\alpha-1)n+\nu)N+l} \eta_{((\beta-1)n+\nu)N+l}, \quad (2.62)$$

com α e $\beta = 1, 2$ e $\alpha \neq \beta$ e $i = ((\alpha-1)n+\nu)N+l$. As quantidades μ e m são não renormalizadas. Renormalizaremos o modelo de Thirring massivo no capítulo 5.

O produto $\mathcal{K}^{\otimes}(\bar{\eta}_{(\alpha-1)nN+l_1}, \eta_{(\alpha-1)nN+l_1})\mathcal{K}^{\otimes}(\bar{\eta}_{((\alpha-1)n+1)N+l_2}, \eta_{((\alpha-1)n+1)N+l_2})$ presente no integrando da expressão (2.56) passa a ser escrito como produtos das funções definidas através das expressões (2.58)-(2.62).

Ao substituírmos as expressões (2.58)-(2.62) na integral de Grassmann (2.56) cada termo escrito como produto de funções grassmannianas representa cortes em linhas e colunas na matriz **A**. Ao aplicarmos as transformações de similaridade (2.41) e (2.46) estes produtos passam a representar cortes em linhas e colunas na matriz diagonal **D**. Portanto, para que uma dada integral seja não nula os cortes devem ser feitos em linhas e colunas associadas aos mesmos índices. Caso contrário a nova matriz (após os cortes) terá linhas e/ou colunas nulas e o seu determinante será igual a zero.

Considerando que estamos calculando traços, podemos utilizar suas propriedades cíclicas para escrever os produtos de funções grassmannianas cujas integrais são não nulas. Além disso, devemos considerar que as matrizes \mathbf{A}^{11} e \mathbf{A}^{22} não misturam índices espinoriais. Assim, a equação (2.56) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\mathbf{K}^2] &= \sum_{l_1=1}^N \sum_{l_2=1}^N \int \prod_{i=1}^{4N} d\eta_i d\bar{\eta}_i e^{\sum_{i,j=1}^{4N} \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j} \times \\ &\times \left\{ 4\mathcal{T}^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1)\mathcal{T}^-(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 1) + \right. \\ &+ 2\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1)\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 1) + \\ &+ 2\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1)\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 2) + \\ &+ 4\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1)\mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1) + \\ &+ 2\mathcal{M}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1)\mathcal{M}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 2) + \\ &\left. + \mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0)\mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1) \right\}. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Note que na equação (2.63) reduzimos significativamente o número de integrais que devemos calcular apenas utilizando as propriedades do cálculo de traços (como a permutação cíclica dos operadores, $\text{Tr}[\mathbf{AB}] = \text{Tr}[\mathbf{BA}]$), e as simetrias que aparecem no cálculo de cofatores de matrizes.

Estas são fundamentais para determinarmos antecipadamente as integrais nulas. No cálculo dos cofatores da matriz \mathbf{D} precisamos cortar colunas e linhas correspondentes para que o resultado seja não nulo. Nas nossas integrais isso representa a necessidade de termos produtos com mesmo número de operadores de criação e aniquilação de férmions no mesmo sítio i e com mesmo índice espinorial α .

Alguns exemplos de traços nulos são $\langle \mathcal{T}^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu, \alpha = 1) \mathcal{T}^-(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu, \alpha = 2) \rangle$, $\langle \mathcal{T}^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu, \alpha) \mathcal{T}^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu, \alpha) \rangle$, $\langle \mathcal{T}^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu, \alpha) \mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu, \alpha) \rangle$, entre outros.

Cada termo na equação (2.63) contém apenas dois pares de variáveis de Grassmann, exce- tuando-se aqueles que contém $\mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu)$, o número reduzido de termos em cada produto facilita a contagem de gráficos. Nesta contagem, precisamos verificar todas as possíveis combinações dos índices espaciais que estamos somando cujas integrais não são nulas. Em ordem β^2 somamos sobre os índices l_1 e l_2 , e no final devemos verificar quantas vezes cada configuração não nula contribui para o resultado final. Apesar de esta contagem ser uma grande fonte de erros no método de Charret *et al.*, nesta ordem, pelo número reduzido de índices espaciais, é possível ainda fazer a contagem sem maiores dificuldades. À medida que abaxamos a temperatura, essa contagem se torna mais difícil.

Para calcular as integrais do l.d. da expressão (2.63) utilizamos o pacote `gint` desenvolvido na linguagem de programação algébrica `maple 5.1`. Fazendo a contagem de cada integral não nula que contribui para a expressão (2.63), obtemos em ordem β^2

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\mathbf{K}^2] &= N2^{2N} \left(|t|^2 + \frac{\mu^2}{2} + \frac{\mu u}{2} + \frac{3u^2}{16} + \frac{m^2}{2} \right) + \\ &+ N^2 2^{2N} \left(\mu + \frac{u}{4} \right)^2. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Como no caso do coeficiente de ordem β , este termo é exato. A presença de termos pro- porcionais a N^2 vem de gráficos desconexos pois a função de partição gran canônica não é uma quantidade intensiva.

2.5.3 Cálculo do coeficiente de ordem β^3

Para calcular o coeficiente de ordem β^3 na expressão (2.27) escrevemos o $\text{Tr}[\mathbf{K}^3]$ como a seguinte integral múltipla nas variáveis de Grassmann

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}[\mathbf{K}^3] &= \int \prod_{i=1}^{6N} d\eta_i d\bar{\eta}_i e^{\sum_{i,j=1}^{6N} \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j} \times \\
 &\times \mathcal{K}^{\textcircled{R}}(\bar{\eta}_{(\alpha-1)nN+l_1}, \eta_{(\alpha-1)nN+l_1}) \times \mathcal{K}^{\textcircled{R}}(\bar{\eta}_{((\alpha-1)n+1)N+l_2}, \eta_{((\alpha-1)n+1)N+l_2}) \times \\
 &\times \mathcal{K}^{\textcircled{R}}(\bar{\eta}_{((\alpha-1)n+2)N+l_3}, \eta_{((\alpha-1)n+2)N+l_3}). \tag{2.65}
 \end{aligned}$$

Aqui novamente utilizamos as propriedades cíclicas do cálculo de traços e as simetrias que aparecem no cálculo de cofatores de matrizes para reduzir o número de integrais que devemos calcular. Lembrando que temos que calcular traços tais como: $\langle T^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha) T^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha) \mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2) \rangle$, $\langle T^-(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha) T^-(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha) \mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2, \alpha = 1) \rangle$, entre outros, são nulos, pois não contém o mesmo número de operadores de criação e aniquilação de férmions no mesmo sítio i com o mesmo índice espinorial α . As integrais não nulas que contribuem para (2.65) e que devemos calcular são

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}[\mathbf{K}^3] &= \sum_{l_1=1}^N \sum_{l_2=1}^N \sum_{l_3=1}^N \int \prod_{i=1}^{6N} d\eta_i d\bar{\eta}_i e^{\sum_{i,j=1}^{6N} \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j} \times \\
 &\times \left\{ 12T^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1) T^-(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 1) \mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2) + \right. \\
 &+ 12T^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1) T^-(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 1) \mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2, \alpha = 1) + \\
 &+ 12T^+(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1) T^-(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 1) \mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2, \alpha = 2) + \\
 &+ 2\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1) \mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 1) \mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2, \alpha = 1) + \\
 &+ 6\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1) \mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 1) \mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2, \alpha = 2) + \\
 &+ 6\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1) \mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 1) \mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2) + \\
 &+ 6\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1) \mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 2) \mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2) + \left. \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 6\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1)\mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1)\mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2) + \\
& + \mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0)\mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1)\mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2) + \\
& + 6\mathcal{M}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1)\mathcal{M}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 2)\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2, \alpha = 1) + \\
& + 6\mathcal{M}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1)\mathcal{M}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 2)\mathcal{E}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2, \alpha = 2) + \\
& + 6\mathcal{M}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 0, \alpha = 1)\mathcal{M}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 1, \alpha = 2)\mathcal{U}(\bar{\eta}_i, \eta_i; \nu = 2) \}. \tag{2.66}
\end{aligned}$$

Utilizando o pacote `gint` e fazendo a contagem de gráficos, obtemos,

$$\begin{aligned}
\text{Tr}[\mathbf{K}^3] &= -2^{2N} N \left(\frac{3\mu^2 u}{8} + \frac{3\mu u^2}{8} + \frac{3u^3}{32} - \frac{3um^2}{8} \right) + \\
& - 2^{2N} N^2 \left(3\mu|t|^2 + \frac{3|t|^2 u}{4} + \frac{15\mu^2 u}{16} + \frac{15\mu u^2}{16} + \frac{9u^3}{64} + \frac{3\mu^3}{2} + \frac{3\mu m^2}{2} + \frac{3um^2}{8} \right) + \\
& - 2^{2N} N^3 \left(\mu + \frac{u}{4} \right)^3. \tag{2.67}
\end{aligned}$$

Aqui a contagem dos gráficos é mais difícil e constitui uma grande fonte de erros. Uma vez que somamos sobre três índices espaciais diferentes, l_1 , l_2 e l_3 , temos que verificar todas as possíveis combinações desses índices e depois contabilizar o peso de cada configuração nas integrais (2.66). O resultado (2.67) é exato em ordem β^3 e válido para qualquer valor das constantes m , μ e g que caracterizam o modelo de Thirring.

2.6 Função de partição gran canônica para o modelo de Thirring até ordem β^3

Na equação (2.27), temos a expansão em β da função de partição gran canônica, escrita em termos dos coeficientes $\text{Tr}[\mathbf{K}^n]$,

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu) = \text{Tr}[\mathbf{1}] - \beta \text{Tr}[\mathbf{K}] + \frac{\beta^2}{2!} \text{Tr}[\mathbf{K}^2] - \frac{\beta^3}{3!} \text{Tr}[\mathbf{K}^3] + \dots \quad (2.68)$$

Na seção 2.5, obtivemos as expressões analíticas de $\text{Tr}[\mathbf{K}]$, $\text{Tr}[\mathbf{K}^2]$ e $\text{Tr}[\mathbf{K}^3]$ utilizando o método desenvolvido por Charret *et al.* [5], de maneira que até ordem β^3 a função de partição gran canônica do modelo de Thirring massivo é

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\beta, \mu) = & 2^{2N} \left\{ 1 + N \left(\mu + \frac{u}{4} \right) \beta + \right. \\ & + \frac{1}{2} \left[N^2 \left(\mu + \frac{u}{4} \right)^2 + N \left(|t|^2 + \frac{\mu^2}{2} + \frac{\mu u}{2} + \frac{3u^2}{16} + \frac{m^2}{2} \right) \right] \beta^2 \\ & + \frac{1}{6} \left[N \left(\frac{3\mu^2 u}{8} + \frac{3\mu u^2}{8} + \frac{3u^3}{32} - \frac{3um^2}{8} \right) + \right. \\ & + N^2 \left(3\mu |t|^2 + \frac{3u|t|^2}{4} + \frac{15\mu^2 u}{16} + \frac{15\mu u^2}{16} + \frac{3\mu^3}{2} + \frac{9u^3}{64} + \frac{3\mu m^2}{2} + \frac{3um^2}{8} \right) + \\ & \left. + N^3 \left(\mu + \frac{u}{4} \right)^3 \right] \beta^3 \left. \right\} + \mathcal{O}(\beta^4). \end{aligned} \quad (2.69)$$

Ressaltamos que a expressão (2.69) não possui singularidade em $m = 0$, de maneira que a expressão da função de partição do modelo de Thirring sem massa é obtida da equação (2.69) fazendo $m = 0$. No entanto, é a partir do grande potencial $\mathcal{W}(\beta, \mu)$ que obtemos as funções físicas que descrevem a termodinâmica do modelo. Devemos lembrar que o grande potencial por sítio é uma quantidade intensiva. A relação entre $\mathcal{Z}(\beta, \mu)$ e $\mathcal{W}(\beta, \mu)$ é

$$\mathcal{W}(\beta, \mu) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N\beta} \ln[\mathcal{Z}(\beta, \mu)]. \quad (2.70)$$

A partir das expressões (2.69) e (2.70), obtemos a expansão em β do grande potencial por sítio para o modelo de Thirring massivo, até ordem β^2

$$\begin{aligned} \mathcal{W}(\beta, \mu) = & -\frac{\ln(4)}{\beta} - \frac{u}{4} - \mu - \left(\frac{\mu u}{4} + \frac{|t|^2}{2} + \frac{\mu^2}{4} + \frac{m^2}{4} + \frac{3u^2}{32} \right) \beta \\ & + \left(-\frac{\mu u^2}{16} - \frac{\mu^2 u}{16} - \frac{u^3}{64} + \frac{um^2}{16} \right) \beta^2 + \mathcal{O}(\beta^3). \end{aligned} \quad (2.71)$$

A expansão em altas temperaturas (2.71) para o grande potencial $\mathcal{W}(\beta, \mu)$ do modelo de Thirring é válida para qualquer regime da constante de auto-interação $u = \frac{4g}{a}$. O coeficiente de cada termo em β^n da expansão (2.71) é exato.

É importante observar que a redução do número de integrais que contribuem para $\mathcal{Z}(\beta, \mu)$ em cada ordem β^n é determinada caso a caso, observando-se as especificidades de cada ordem β^n da expansão. Apesar de podermos utilizar o pacote `gint` para o cálculo das integrais em si, todo o resto, incluindo a contagem dos gráficos e a redução do número de integrais que realmente devemos calcular, é feito “manualmente”. Isto representa um grande gasto de tempo e uma grande fonte de erros. Por exemplo em ordem β^3 temos $(9)^3$ termos que foram analisados e tivemos que determinar o peso de cada termo não nulo que contribui para a função de partição gran canônica. O cálculo do grande potencial em ordens mais altas via o método de Charret *et al.* se torna inviável devido ao grande número de termos presentes na hamiltoniana do modelo de Thirring massivo. No próximo capítulo apresentamos o método de Rojas *et al.* que será utilizado para a obtenção do grande potencial do modelo Thirring massivo até ordem β^5 .

2.7 Comparação da expansão de altas temperaturas e o método perturbativo na integral funcional

A função de partição gran canônica para qualquer sistema é dada pela equação (2.26), ou seja,

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu) = \text{Tr}[e^{-\beta\mathbf{K}}], \quad (2.72)$$

com $\mathbf{K} = \mathbf{H} - \mu\mathbf{N}$.

Suponhamos que a hamiltoniana \mathbf{H} descreva uma teoria com interação (por exemplo o modelo de Thirring massivo), de forma que a reescrevemos como

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + g\mathbf{H}_i, \quad (2.73)$$

onde \mathbf{H}_0 é parte da hamiltoniana livre (termos quadráticos da hamiltoniana), g é a constante de interação e \mathbf{H}_i a hamiltoniana de interação.

A expansão de altas temperaturas da função de partição gran canônica é dada pela equação (2.27). Usando a decomposição (2.73) para reescrever o operador \mathbf{K} ,

$$\mathbf{K} = (\mathbf{H}_0 - \mu\mathbf{N}) + g\mathbf{H}_i, \quad (2.74)$$

o termo $\text{Tr}[\mathbf{K}^n]$ da expansão em β (2.27) fica,

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\mathbf{K}^n] &= \text{Tr} \left[\left((\mathbf{H}_0 - \mu\mathbf{N}) + g\mathbf{H}_i \right)^n \right] = \\ &= \sum_{j=0}^n g^j \text{Tr} [\mathbf{B}(\mathbf{H}_0, \mathbf{N}, \mathbf{H}_i; \mu, j)], \end{aligned} \quad (2.75)$$

onde $\mathbf{B}(\mathbf{H}_0, \mathbf{N}, \mathbf{H}_i; \mu, j)$ é um operador produto de potências dos operadores $\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_i$ e \mathbf{N} e que não depende da constante de acoplamento g . Para obter a expressão exata do coeficiente $\text{Tr}[\mathbf{K}^n]$ é necessário calcular todos os termos que são os produtos de n operadores, e todas as suas permutações, obtidos de potências dos operadores $\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_i$ e \mathbf{N} , que incluam inclusive o produto de n operadores \mathbf{H}_i .

Vamos comparar a expansão em β (eq. (2.27)) da função de partição gran canônica com a expansão perturbativa dessa função termodinâmica obtida via integral funcional.

A função de partição gran canônica escrita como uma integral funcional é

$$\mathcal{Z}(\beta; \mu) = \sum_{\Psi(x,0)} \int_{\Psi(x,0)=-\Psi(x,\beta)} \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\bar{\Psi} e^{-\int_0^\beta d\tau [H(\Psi, \bar{\Psi}; \tau) - \mu N(\Psi, \bar{\Psi}; \tau)]}, \quad (2.76)$$

onde $\beta = \frac{1}{kT}$ e $H(\Psi, \bar{\Psi}; \tau)$ é o *kernel* do operador hamiltoniano do sistema (que estamos considerando como sendo um sistema composto de campos fermiônicos) e $N(\Psi, \bar{\Psi}; \tau)$ é o *kernel* do operador que é uma constante do movimento.

Usando a decomposição (2.73), substituindo-na na expressão (2.76) da integral funcional, e expandindo a exponencial da hamiltoniana de interação em potências de g , obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\beta; \mu) &= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{\Psi(x,0)} \int_{\Psi(x,0)=-\Psi(x,\beta)} \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\bar{\Psi} \times \\ &\times \left[(-g) \int_0^\beta d\tau H_i(\Psi, \bar{\Psi}; \tau) \right]^j e^{-\int_0^\beta d\tau [H_0(\Psi, \bar{\Psi}; \tau) - \mu N(\Psi, \bar{\Psi}; \tau)]}. \end{aligned} \quad (2.77)$$

Da expressão (2.77) vemos que para cada ordem j em teoria de perturbação temos contribuições de potências em β em todas as ordens β^n , $n = 1, 2, \dots$, uma vez que a função $\mathcal{Z}(\beta; \mu)$ não

possui singularidade em β , já que não temos transição de fase para $\beta \neq 0$ em teorias/modelos em $D = 2(1+1)$. No entanto, ao compararmos as equações (2.75) e (2.77), verificamos que para obtermos o coeficiente exato da expansão em β em ordem β^n é necessário calcular contribuições de termos da expansão perturbativa da integral funcional (2.77) até ordem g^n . Portanto, o resultado (2.71) só é obtido via integral funcional se calcularmos a integral funcional da função de partição gran canônica do modelo de Thirring massivo até 3-loops.

O método de Rojas *et al.*

3.1 Introdução

O método de Rojas *et al.* [7] foi desenvolvido para ser aplicado a modelos fermiônicos e/ou bosônicos unidimensionais numa rede de espaçamento a , com interação entre primeiros vizinhos, que satisfaçam condições de contorno espaciais periódicas e que possuam invariância translacional ao longo da rede. Baseados nas simetrias de uma hamiltoniana desse tipo, Rojas *et al.* desenvolveram um método para calcular os coeficientes analíticos da expansão de altas temperaturas do grande potencial, que é uma quantidade termodinâmica intensiva.

No método de Charret *et al.* para o cálculo dos coeficientes da expansão em altas temperaturas da função de partição gran canônica calculamos, em cada ordem β , a contribuição de todas as configurações possíveis (sub-redes conexas e desconexas) e ainda precisamos fazer a contagem dos gráficos (considerar o peso com que cada configuração contribui para a função de partição gran canônica em ordem β^n). Não é possível fazer essa contagem através de um programa em linguagem algébrica. Essa etapa do método de Charret *et al.* é uma fonte de erro para o resultado final. No método de Rojas *et al.* a contagem de gráficos passa a ser intrínseca ao método e no limite termodinâmico calculamos apenas as sub-redes conexas. Isso reduz significativamente o número de termos que devem ser calculados e nos permite obter o grande potencial em ordens mais altas em β . Através desse método é possível calcular os coeficientes analíticos das expansões em β através de linguagens algébricas, como por exemplo o maple 8. Apesar do método de Rojas *et al.* só poder ser aplicado a modelos de cadeia, ele é válido tanto para sistemas quânticos (bósons e/ou férmions) quanto para sistemas clássicos.

3.2 Uma breve descrição do método de Rojas *et al.*

Consideremos a função de partição gran canônica, expressão (2.27), reescrita na forma

$$\mathcal{Z}_N(\beta, \mu) = \text{Tr}_N[\mathbf{1}] + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Tr}_N[\mathbf{K}^n], \quad (3.1)$$

onde $\text{Tr}_N(e^{-\beta\mathbf{K}})$ representa o traço sobre todos os N sítios da rede, inclusive os graus de liberdade internos do sistema tais como o *spin*, $\mathbf{K} = \mathbf{H} - \mu\mathbf{N}$, onde μ é o potencial químico, \mathbf{N} é um operador que comuta com \mathbf{H} e $\mathbf{1}$ é o operador identidade do espaço de Hilbert do espaço produto dos N pontos da cadeia.

Nosso objetivo é calcular os coeficientes $\text{Tr}_N[\mathbf{K}^n]$ da expansão em cada ordem em β . À medida que aumentamos o valor de n em que obtemos os coeficientes da expansão (3.1), diminuímos o valor de temperatura T em que temos informações sobre a termodinâmica do modelo.

Para reduzir a notação, definimos o traço normalizado

$$\langle \mathbf{K}^n \rangle \equiv \frac{\text{Tr}_N[\mathbf{K}^n]}{\text{Tr}_N[\mathbf{1}]} \quad (3.2)$$

Com essa definição a função de partição gran canônica (3.1) fica

$$\mathcal{Z}_N(\beta, \mu) = \text{Tr}_N[\mathbf{1}] \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \mathbf{K}^n \rangle \right\}. \quad (3.3)$$

A partir deste ponto nos restringiremos a estudar sistemas unidimensionais, com invariância translacional, interação apenas entre primeiros vizinhos e condição de contorno espacial periódica. Para essa classe de sistemas, o operador \mathbf{K} é escrito genericamente como:

$$\mathbf{K} = \sum_{i=1}^N \tilde{\mathbf{K}}_{i,i+1}, \quad (3.4)$$

onde $\tilde{\mathbf{K}}_{i,i+1} \in \mathcal{H}^{(N)}$, sendo $\mathcal{H}^{(N)}$ o espaço de Hilbert produto dos N sítios da rede. Cada operador $\tilde{\mathbf{K}}_{i,i+1}$ é definido como

$$\tilde{\mathbf{K}}_{1,2} = \mathbf{K}_{1,2} \otimes \mathbf{1}_3 \cdots \otimes \mathbf{1}_N,$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{K}}_{2,3} &= \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{K}_{2,3} \otimes \mathbf{1}_4 \cdots \otimes \mathbf{1}_N, \\
&\quad \vdots \\
\tilde{\mathbf{K}}_{i,i+1} &= \mathbf{1}_1 \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}_{i-1} \otimes \mathbf{K}_{i,i+1} \otimes \mathbf{1}_{i+2} \cdots \otimes \mathbf{1}_N
\end{aligned} \tag{3.5}$$

e $\mathbf{K}_{i,i+1} \in \mathcal{H}_i \otimes \mathcal{H}_{i+1}$.

Calculando o traço do operador (3.5) para uma cadeia com N sítios, obtemos

$$\mathrm{Tr}_N[\tilde{\mathbf{K}}_{i,i+1}] = \mathrm{Tr}_2[\mathbf{K}_{i,i+1}](\mathrm{Tr}_1[\mathbf{1}])^{N-2}, \tag{3.6}$$

que dividida por $\mathrm{Tr}_N[\mathbf{1}]$, como na expressão (3.2), nos mostra que o traço normalizado para sistemas com interação entre primeiros vizinhos é:

$$\frac{\mathrm{Tr}_N[\tilde{\mathbf{K}}_{i,i+1}]}{\mathrm{Tr}_N[\mathbf{1}]} = \langle \tilde{\mathbf{K}}_{i,i+1} \rangle = \frac{\mathrm{Tr}_2[\mathbf{K}_{i,i+1}]}{\mathrm{Tr}_2[\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}]} = \langle \mathbf{K}_{i,i+1} \rangle. \tag{3.7}$$

Uma vez que o operador \mathbf{K} é invariante por translação espacial, calcular o traço normalizado nos sítios $i, i+1$, sendo i um sítio arbitrário da cadeia, é equivalente a calcular o traço normalizado nos sítios 1 e 2, isto é,

$$\langle \tilde{\mathbf{K}}_{i,i+1} \rangle = \langle \mathbf{K}_{i,i+1} \rangle = \langle \mathbf{K}_{1,2} \rangle. \tag{3.8}$$

Para ilustrar o método de Rojas *et al.* escreveremos os resultados obtidos em cada etapa daqui por diante em ordens β , β^2 e β^3 [7].

Os coeficientes da expansão (3.3) escritos em termos de traços normalizados são:

$$\langle \mathbf{K} \rangle = N \langle \mathbf{K}_{1,2} \rangle, \tag{3.9}$$

$$\langle \mathbf{K}^2 \rangle = N \langle \mathbf{K}_{1,2}^2 \rangle + 2N \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3} \rangle + N(N-3) \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \rangle, \tag{3.10}$$

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{K}^3 \rangle &= N \langle \mathbf{K}_{1,2}^3 \rangle + 3N \left\{ \frac{\langle \mathbf{K}_{1,2}^2 \mathbf{K}_{2,3} \rangle}{2!} + \frac{\langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3}^2 \rangle}{2!} \right\} + \\
&\quad + 3N \left\{ \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3} \mathbf{K}_{3,4} \rangle + \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{2,3} \rangle \right\} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 3N(N-3) \left\{ \frac{\langle \mathbf{K}_{1,2}^2 \mathbf{K}_{3,4} \rangle}{2!} + \frac{\langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4}^2 \rangle}{2!} \right\} \\
& + 3N(N-4) \left\{ \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3} \mathbf{K}_{4,5} \rangle + \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{4,5} \rangle \right\} + \\
& + N(N-4)(N-5) \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{5,6} \rangle. \tag{3.11}
\end{aligned}$$

Observa-se que o termo $3\langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3} \mathbf{K}_{3,4} \rangle + 3\langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{2,3} \rangle$ contém todos os traços normalizados que podem ser obtidos do conjunto de operadores $\{\mathbf{K}_{1,2}, \mathbf{K}_{2,3}, \mathbf{K}_{3,4}\}$. Com isso, define-se um novo traço, o *traço-g* (traço generalizado)

$$\langle \mathbf{K}_{i_1, i_1+1}^{n_1} \mathbf{K}_{i_2, i_2+1}^{n_2} \cdots \mathbf{K}_{i_m, i_m+1}^{n_m} \rangle_g \equiv \frac{n_1! n_2! \cdots n_m!}{n!} \sum_{\mathcal{P}} \langle \mathcal{P}(\mathbf{K}_{i_1, i_1+1}^{n_1}, \cdots, \mathbf{K}_{i_m, i_m+1}^{n_m}) \rangle. \tag{3.12}$$

Pela definição anterior, $\langle \mathcal{P}(\mathbf{K}_{i_1, i_1+1}^{n_1}, \mathbf{K}_{i_2, i_2+1}^{n_2}, \cdots, \mathbf{K}_{i_m, i_m+1}^{n_m}) \rangle$ representa todas as permutações distintas e inequivalentes sob permutações cíclicas que se pode obter do conjunto de operadores $\{\mathbf{K}_{i_1, i_1+1}, \cdots, \mathbf{K}_{i_m, i_m+1}\}$. Este é um objeto “comutante”, uma vez que não é importante a ordem com que escrevemos os operadores $\mathbf{K}_{i, i+1}$ nas expressões dos traços-g. Por exemplo,

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3} \mathbf{K}_{3,4} \rangle_g & = \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3} \mathbf{K}_{3,4} \rangle + \langle \mathbf{K}_{2,3} \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{1,2} \rangle + \langle \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3} \rangle + \\
& + \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{2,3} \rangle + \langle \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{2,3} \mathbf{K}_{1,2} \rangle + \langle \mathbf{K}_{2,3} \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \rangle + \\
& = 3 \left\{ \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3} \mathbf{K}_{3,4} \rangle + \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{2,3} \rangle \right\} \\
& = \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{2,3} \rangle_g. \tag{3.13}
\end{aligned}$$

Em termos dos traços-g, os coeficientes (3.9), (3.10) e (3.11) da expansão (3.3) ficam

$$\langle \mathbf{K} \rangle = N \langle \mathbf{K}_{1,2} \rangle_g, \tag{3.14}$$

$$\frac{\langle \mathbf{K}^2 \rangle}{2!} = \frac{N}{2!} \langle \mathbf{K}_{1,2}^2 \rangle_g + N \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3} \rangle_g + \frac{N(N-3)}{2!} \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \rangle_g, \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\langle \mathbf{K}^3 \rangle}{3!} &= \frac{N}{3!} \langle \mathbf{K}_{1,2}^3 \rangle_g + N \left\{ \frac{\langle \mathbf{K}_{1,2}^2 \mathbf{K}_{2,3} \rangle_g}{2!} + \frac{\langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3}^2 \rangle_g}{2!} \right\} + \\
&+ N \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3} \mathbf{K}_{3,4} \rangle_g + \frac{N(N-3)}{2!} \left\{ \frac{\langle \mathbf{K}_{1,2}^2 \mathbf{K}_{3,4} \rangle_g}{2!} + \frac{\langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4}^2 \rangle_g}{2!} \right\} + \\
&+ \frac{N(N-4)}{2!} \{ \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{2,3} \mathbf{K}_{4,5} \rangle_g + \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{4,5} \rangle_g \} + \\
&+ \frac{N(N-4)(N-5)}{3!} \langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \mathbf{K}_{5,6} \rangle_g. \tag{3.16}
\end{aligned}$$

Alguns traços- g em ordem n podem ser “quebrados” em produtos de traços normalizados em ordens mais baixas como por exemplo $\langle \mathbf{K}_{1,2} \mathbf{K}_{3,4} \rangle_g$ na equação (3.15). Se conseguirmos identificar estes traços, conseguiremos reduzir o número de termos que iremos calcular em cada ordem n da expansão de altas temperaturas de $\mathcal{Z}_N(\beta, \mu)$.

Utilizamos a notação $K_{r,m}^{(n)}$ onde n representa a potência de β^n na expansão (3.3) para o qual o traço- g contribui, r é o número de produtos de traços irredutíveis em que o traço original pode ser quebrado e m é o número de operadores $\mathbf{K}_{i,i+1}$ distintos que aparecem no traço- g . Todas as funções $K_{r,m}^{(n)}$ com $r = 1$ correspondem aos traços- g que aparecem pela primeira vez na expansão (3.3) em ordem β^n . Esperamos poder escrever as funções $K_{r,m}^{(n)}$ para $r \geq 1$, em termos dos $K_{1,m}^{(n')}$ sendo $n' < n$. As funções $K_{1,m}^{(n')}$ representam os traços irredutíveis que constituem a base geradora do espaço dos $K_{r,m}^{(n)}$.

As funções $K_{1,m}^{(n)}$ são definidas como

$$\begin{aligned}
K_{1,1}^{(n)} &= \frac{\langle \mathbf{K}_{1,2}^n \rangle_g}{n!}, \\
K_{1,2}^{(n)} &= \sum_{\{n_i\}}^n \frac{\langle \mathbf{K}_{1,2}^{n_1} \mathbf{K}_{2,3}^{n_2} \rangle_g}{n_1! n_2!}, \\
&\vdots \\
K_{1,m}^{(n)} &= \sum_{\{n_i\}}^n \frac{\langle \mathbf{K}_{1,2}^{n_1} \mathbf{K}_{2,3}^{n_2} \cdots \mathbf{K}_{m,m+1}^{n_m} \rangle_g}{n_1! n_2! \cdots n_m!}. \tag{3.17}
\end{aligned}$$

A notação $\sum_{\{n_i\}}^n$ representa a restrição $\sum_{i=1}^m n_i = n$ e $n_i \neq 0$ para $i = 1, 2, \dots, m$. O índice m satisfaz à condição $1 \leq m \leq \min(n, N)$ e supusemos que $m \leq n$. Para $m > n$ definimos $K_{1,m}^{(n)} = 0$.

Na referência [7], Rojas et al. mostraram que:

$$K_{r,m}^{(n)} \equiv \sum_{\{n_i\}}^n \sum_{\{m_i\}}^m \prod_{j=1}^r K_{1,m_j}^{(n_j)}, \quad (3.18)$$

onde $\{n_i\} \equiv \{n_1, n_2, \dots, n_r\}$, $\{m_i\} \equiv \{m_1, m_2, \dots, m_r\}$ e $r > 1$. Os índices r e m satisfazem as condições $1 \leq r \leq \min(n, N)$ e $r \leq m \leq \min(n, N)$ e supusemos que $n \geq r$ e m , do contrário, $K_{r,m}^{(n)} = 0$. Na equação anterior usamos a notação descrita em seguida à equação (3.17).

Em termos das funções $K_{r,m}^{(n)}$, os traços normalizados $\langle \mathbf{K} \rangle$, $\langle \mathbf{K}^2 \rangle$ e $\langle \mathbf{K}^3 \rangle$, ficam

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{K} \rangle &= NK_{1,1}^{(1)}, \\ \frac{\langle \mathbf{K}^2 \rangle}{2!} &= NK_{1,1}^{(2)} + NK_{1,2}^{(2)} + \frac{N(N-3)}{2!} K_{2,2}^{(2)}, \\ \frac{\langle \mathbf{K}^3 \rangle}{3!} &= NK_{1,1}^{(3)} + NK_{1,2}^{(3)} + NK_{1,3}^{(3)} + \frac{N(N-3)}{2!} K_{2,2}^{(3)} + \\ &+ \frac{N(N-4)}{2!} K_{2,3}^{(3)} + \frac{N(N-4)(N-5)}{3!} K_{3,3}^{(3)}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Os coeficientes das funções $K_{r,m}^{(n)}$ nas expressões acima podem ser escritos em forma de binômio de Newton e generalizados para n arbitrário. O resultado é

$$\frac{\langle \mathbf{K}^n \rangle}{n!} = \sum_{r=1}^{[n,N]} \sum_{m=r}^{[n,N]} \frac{N}{r} \binom{N-m-1}{r-1} K_{r,m}^{(n)}. \quad (3.20)$$

No método de Charret *et al.* [5], a contagem do peso dos gráficos era feita de forma independente do cálculo dos traços normalizados que contribuem para os coeficientes da expansão (3.3). Apenas a partir da equação (3.20) é que o peso de cada sub-rede $K_{r,m}^{(n)}$ que contribui para $\langle \mathbf{K}^n \rangle$ é obtido como parte do resultado do cálculo, nenhuma contagem adicional de gráficos precisa ser feita. A equação (3.20) estabelece que o coeficiente que multiplica $K_{r,m}^{(n)}$ é independente do particular modelo em questão, contanto que ele descreva um sistema unidimensional com interação entre primeiros vizinhos.

Para $n < N$ o traço é calculado no subespaço máximo $\mathcal{H}^{(n+1)}$, enquanto, para $n \geq N$, devido às condições de contorno periódicas, os operadores atuam no espaço de Hilbert completo $\mathcal{H}^{(N)}$,

neste caso, podemos dizer que os operadores atuam mais de uma vez ao longo de um período completo da cadeia periódica.

Rojas *et al.* reescreveram o coeficiente de $K_{r,m}^{(n)}$ em (3.20) numa forma mais conveniente

$$\frac{\langle \mathbf{K}^n \rangle}{n!} = \sum_{r=1}^{[n,N]} \sum_{m=r}^{[n,N]} \sum_{k=1}^r (-1)^{r+k} \frac{k}{r} \binom{m+r-k-1}{r-k} \binom{N}{k} K_{r,m}^{(n)} \equiv \sum_{k=1}^{[n,N]} \binom{N}{k} \mathfrak{K}_{k,n} \quad (3.21)$$

onde

$$\mathfrak{K}_{k,n} \equiv \sum_{r=k}^{[n,N]} \sum_{m=r}^{[n,N]} (-1)^{r+k} \frac{k}{r} \binom{m+r-k-1}{r-k} K_{r,m}^{(n)}. \quad (3.22)$$

A função $\mathfrak{K}_{k,n}$ tem a propriedade

$$\mathfrak{K}_{k,n} = \sum_{\{n_i\}}^n \prod_{i=1}^k \mathfrak{K}_{1,n_i}, \quad (3.23)$$

onde $\{n_i\} \equiv \{n_1, n_2, \dots, n_k\}$.

Substituindo a equação (3.21) na expansão (3.3) e utilizando a propriedade (3.23) adequadamente, obtemos a expansão de altas temperaturas da função de partição gran canônica:

$$\mathcal{Z}_N(\beta, \mu) = \left\{ \text{tr}_1(\mathbf{1}) \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-\beta)^n \mathfrak{K}_{1,n} \right) \right\}^N. \quad (3.24)$$

O grande potencial por sítio é obtido da expressão de $\mathcal{Z}_N(\beta, \mu)$,

$$\mathcal{W}_N(\beta, \mu) = -\frac{1}{N\beta} \ln \mathcal{Z}_N(\beta, \mu). \quad (3.25)$$

Substituindo a equação (3.24) na equação (3.25) obtemos para qualquer valor de N finito:

$$\mathcal{W}_N(\beta, \mu) = -\frac{1}{\beta} \left\{ \ln \left(\text{tr}_1(\mathbf{1}) \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-\beta)^n \mathfrak{K}_{1,n} \right) \right) \right\}. \quad (3.26)$$

Na expressão (3.26) a função $\mathfrak{K}_{1,n}$ contém todas as sub-redes conexas e desconexas que contribuem para o grande potencial em ordem β^n . Para N finito, a equação (3.26) é a expressão

mais simples do grande potencial por sítio já que n pode ser maior que N , o que significa percorrer a cadeia completa mais do que uma vez.

3.3 O limite termodinâmico

Na referência [7], Rojas *et al.* mostraram que no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), a expressão (3.26) se reduz a

$$\mathcal{W}(\beta, \mu) = -\frac{1}{\beta} \left\{ \ln \left(\text{tr}_1(\mathbf{1}) \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-\beta)^n \mathfrak{K}_{1,n} \right) \right) \right\}. \quad (3.27)$$

As equações (3.26) e (3.27) parecem iguais. A diferença entre elas está no fato de que na equação (3.27) a maior sub-rede que contribui para $\mathfrak{K}_{1,n}$ tem, no máximo, o tamanho da rede.

Na equação (3.27) temos que calcular a seguinte soma

$$\xi \equiv \sum_{n=1}^{\infty} (-\beta)^n \mathfrak{K}_{1,n}. \quad (3.28)$$

A notação acima pode sugerir que apenas as sub-redes conexas contribuem para a função $\mathfrak{K}_{1,n}$. Entretanto, pela equação (3.22) observamos que na definição deste operador estão incluídas tanto as sub-redes conexas quanto as sub-redes desconexas. Nosso propósito é escrever o grande potencial (eq.(3.27)) em termos apenas das sub-redes conexas. Para tanto, definimos a função

$$\Gamma_m \equiv \sum_{n=1}^{\infty} (-\beta)^n K_{1,m}^{(n)} \quad (3.29)$$

como uma série de potências em β . Enfatizamos que pela definição de $K_{1,m}^{(n)}$ apenas sub-redes abertas conexas contribuem para Γ_m .

Definimos também a função auxiliar $\varphi(\lambda)$ em termos das funções Γ_m como

$$\varphi(\lambda) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\Gamma_m}{\lambda^m}, \quad (3.30)$$

onde λ é um parâmetro real. Se pudermos escrever a função ξ em termos das funções $\varphi(\lambda)$,

então, podemos garantir que para a equação (3.27) do grande potencial contribuem apenas as sub-redes conexas.

Substituindo a expressão de $\mathfrak{K}_{1,n}$ (eq.(3.22) com $k = 1$) em ξ (eq.(3.28)) e levando em conta que na expressão de $K_{1,m}^{(n)}$ é necessário que $n > m$ para que $\mathbf{K}_{1,m}^{(n)} \neq 0$, a equação (3.28) fica

$$\begin{aligned} \xi &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^n (-\beta)^n K_{1,m}^{(n)} - \frac{1}{2} \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=2}^n (-\beta)^n \binom{m}{1} K_{2,m}^{(n)} + \\ &+ \frac{1}{3} \sum_{n=3}^{\infty} \sum_{m=3}^n (-\beta)^n \binom{m+1}{2} K_{3,m}^{(n)} + \dots \\ &\equiv \sum_{r=1}^{\infty} \varphi_r, \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde a função φ_r é definida por

$$\varphi_r \equiv \frac{(-1)^{r+1}}{r} \sum_{n=r}^{\infty} \sum_{m=r}^n (-\beta)^n \binom{m+r-2}{r-1} K_{r,m}^{(n)}. \quad (3.32)$$

O limite superior da soma em m foi modificado de $\min(n, N)$ para n porque agora tomamos primeiramente o limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) o que significa, necessariamente, que temos $n < N$.

Aplicando a igualdade

$$\sum_{n=r}^{\infty} \sum_{m=r}^n \dots = \sum_{m=r}^{\infty} \sum_{n=r}^{\infty} \dots \quad (3.33)$$

na equação (3.32), que só é válida para $N \rightarrow \infty$, obtemos

$$\varphi_r = \frac{(-1)^{r+1}}{r} \sum_{m=r}^{\infty} \binom{m+r-2}{r-1} \sum_{n=r}^{\infty} (-\beta)^n K_{r,m}^{(n)}. \quad (3.34)$$

Substituindo a equação (3.29) na equação (3.30), temos

$$\varphi(\lambda) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda^m} \sum_{n=1}^{\infty} (-\beta)^n K_{1,m}^{(n)}. \quad (3.35)$$

Calculando as potências de $\varphi(\lambda)$

$$\begin{aligned}
 \varphi^2(\lambda) &= \sum_{m=2}^{\infty} \frac{1}{\lambda^m} \sum_{n=2}^{\infty} (-\beta)^n K_{2,m}^{(n)}, \\
 \varphi^3(\lambda) &= \sum_{m=3}^{\infty} \frac{1}{\lambda^m} \sum_{n=3}^{\infty} (-\beta)^n K_{3,m}^{(n)}, \\
 &\quad \vdots \\
 \varphi^r(\lambda) &= \sum_{m=r}^{\infty} \frac{1}{\lambda^m} \sum_{n=r}^{\infty} (-\beta)^n K_{r,m}^{(n)},
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

notamos, então, que

$$\begin{aligned}
 \varphi_1 &= \varphi(\lambda) \Big|_{\lambda=1}, \\
 \varphi_2 &= \frac{d}{d\lambda} \left(\frac{\varphi^2(\lambda)}{2!} \right) \Big|_{\lambda=1}, \\
 \varphi_3 &= \frac{d^2}{d\lambda^2} \left(\frac{\varphi^3(\lambda)}{3!} \right) \Big|_{\lambda=1}, \\
 &\quad \vdots \\
 \varphi_r &= \frac{d^{r-1}}{d\lambda^{r-1}} \left(\frac{\varphi^r(\lambda)}{r!} \right) \Big|_{\lambda=1}.
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

Finalmente obtemos uma expressão de ξ em termos apenas das sub-redes conexas,

$$\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^n}{d\lambda^n} \left(\frac{\varphi^{n+1}(\lambda)}{(n+1)!} \right) \Big|_{\lambda=1}. \tag{3.38}$$

A equação (3.38) é o resultado mais importante da referência [7]. Da expressão (3.35) para $\varphi(\lambda)$ verificamos que esta não depende do valor de N , o que mostra que a expansão em β para o grande potencial descreve uma quantidade termodinâmica intensiva.

Apenas para exemplificar, escrevemos a seguir, para $n = 1, 2$ e 3 , os operadores $K_{1,m}^{(n)}$ em termos dos traços normalizados de qualquer hamiltoniana que descreva modelos unidimensionais com interação apenas entre primeiros vizinhos, condições de contorno espaciais periódicas e invariância translacional ao longo da rede:

- $m = 1$:

$$\begin{aligned}K_{1,1}^{(1)} &= \langle \mathbf{H}_{1,2} \rangle, \\K_{1,1}^{(2)} &= \frac{1}{2!} \langle \mathbf{H}_{1,2}^2 \rangle, \\K_{1,1}^{(3)} &= \frac{1}{3!} \langle \mathbf{H}_{1,2}^3 \rangle,\end{aligned}\tag{3.39}$$

- $m = 2$:

$$\begin{aligned}K_{1,2}^{(2)} &= \langle \mathbf{H}_{1,2} \mathbf{H}_{2,3} \rangle, \\K_{1,2}^{(3)} &= \frac{1}{2!} \left\{ \langle \mathbf{H}_{1,2}^2 \mathbf{H}_{2,3} \rangle + \langle \mathbf{H}_{1,2} \mathbf{H}_{2,3}^2 \rangle \right\},\end{aligned}\tag{3.40}$$

- $m = 3$:

$$K_{1,3}^{(3)} = \langle \mathbf{H}_{1,2} \mathbf{H}_{2,3} \mathbf{H}_{3,4} \rangle.\tag{3.41}$$

Estudo da termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional

4.1 Introdução

Um crescente interesse em torno das propriedades físicas de estruturas quase unidimensionais tem levado a um intenso estudo dos modelos unidimensionais. Por exemplo, o estudo de transições de fase do parâmetro de carga ordenado em materiais quase unidimensionais tais como óxidos de metais de transição e sais orgânicos com transferência de carga [32]; que podem ser descritos pelo modelo de Hubbard estendido unidimensional com um quarto de banda preenchida, onde a repulsão eletrônica entre primeiros vizinhos é levada em conta [32, 33]. Outros exemplos são o estudo das propriedades de condução em polímeros [34], cupratos de alta temperatura crítica e supercondutores orgânicos [35, 36]. Materiais supercondutores podem ser modelados pelo modelo de Hubbard estendido tipo escada no caso de um quarto de banda preenchida.

Propriedades a baixas energias do modelo de Hubbard estendido unidimensional, nos casos de bandas semi-cheias e um quarto de banda, têm sido estudadas ao longo das últimas duas décadas. Recentemente, Nakamura [37] discutiu a existência de um ponto triplo no diagrama de fase deste modelo para o caso de banda semi-cheia a temperatura zero ($T = 0$), e propôs uma fase de onda de densidade de carga ligada entre a carga e a fase de onda de densidade de *spins*. Num trabalho recente, Jeckelmann [38] mostrou que a fase de carga ligada não existe.

Num trabalho anterior [39], Charret *et al.* obtiveram a termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional na região de altas temperaturas, e a expansão analítica a altas temperaturas do grande potencial deste modelo até ordem β^2 , para um potencial químico arbitrário. A maioria dos trabalhos envolvendo as propriedades termodinâmicas do modelo de Hubbard estendido é numérica. Por exemplo, na referência [40] o método do grupo de renormalização via matriz densidade a temperatura finita é utilizado para calcular a dependência na temperatura da ionicidade do modelo de Hubbard estendido unidimensional com ou sem alternância da integral de transferência e do campo magnético externo. Este modelo é empregado na modelagem de complexos orgânicos com camadas mistas e transferência de carga.

Sólyom e Timonen aplicaram a transformação de Jordan-Wigner ao modelo XXZ , sendo que em cada sítio temos a soma de dois $spins-\frac{1}{2}$, para mostrar que este modelo pode ser levado ao modelo de Hubbard estendido unidimensional mais uma hamiltoniana de corda, onde temos correlação infinita [15, 16]. Nas referências [15] e [16], Sólyom e Timonen compararam o diagrama de fase, em $T = 0$, do modelo de $spin-1$ composto e o modelo de Hubbard estendido unidimensional.

Neste capítulo, estendemos os resultados da referência [39] para temperaturas mais baixas. Calculamos os três termos seguintes da expansão em β do grande potencial do modelo de Hubbard estendido unidimensional utilizando o método de Rojas *et al.* [7] apresentado no capítulo 3. Esta é a primeira vez que este método é aplicado a um modelo fermiônico unidimensional com graus de liberdade espinoriais em cada sítio da cadeia. Da expansão encontrada para o grande potencial, derivamos quantidades termodinâmicas tais como: calor específico, susceptibilidade magnética estática e energia média por sítio. Comparamos também a termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional, na região de altas temperaturas, com a termodinâmica do modelo de $spin-1$ composto [10].

Este capítulo é organizado da seguinte forma: na seção 4.2 apresentamos o estudo da termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional na região de altas temperaturas; na seção 4.3 derivamos a hamiltoniana do modelo de Hubbard estendido unidimensional mais uma hamiltoniana de correlação infinita a partir do modelo de $spin-1$ composto e comparamos nossos resultados com os obtidos a partir da hamiltoniana de Sólyom e Timonen, descrita nas referências [15] e [16], na região de altas temperaturas. No apêndice A apresentamos o grande potencial do modelo de Hubbard estendido unidimensional até ordem β^5 e uma expansão para o potencial químico deste modelo com um quarto de banda preenchida, obtidos via o método de Rojas *et al.*.

4.2 Estudo da termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional

A hamiltoniana do modelo de Hubbard estendido unidimensional é dada por [39, 41]

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{he} = & \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (E_0 - \sigma\lambda_B) \mathbf{a}_{i,\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{i,\sigma} + t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \mathbf{a}_{i,\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{j,\sigma} + \\ & + U \sum_{i=1}^N \mathbf{n}_{i\uparrow} \mathbf{n}_{i\downarrow} + V \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma,\sigma'=\uparrow,\downarrow} \mathbf{n}_{i,\sigma} \mathbf{n}_{j,\sigma'}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

onde $\mathbf{a}_{i\sigma}^\dagger$ ($\mathbf{a}_{i\sigma}$) são os operadores de criação (destruição) de um elétron de *spin*- σ no i -ésimo sítio da rede e $\mathbf{n}_{i,\sigma}$ é o operador número, $\mathbf{n}_{i,\sigma} = \mathbf{a}_{i,\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{i,\sigma}$. A constante E_0 representa a contribuição diagonal para a energia cinética. Definimos $\lambda_B = -\frac{1}{2}g\mu_B B$, onde g é o fator de Landé, μ_B é o magnéton de Bohr e B é o campo magnético externo constante na direção z . A notação $\langle ij \rangle$ representa $j = i \pm 1$, onde $i = 1, 2, \dots, N$. A constante t é o parâmetro responsável pela transferência de elétrons entre sítios vizinhos, U representa a interação entre os elétrons no mesmo sítio com *spins* opostos e a constante V representa a interação entre elétrons em sítios diferentes. Não fixamos os sinais das constantes U e V .

Para aplicarmos o método de Rojas *et al.*, devemos escrever a hamiltoniana \mathbf{H}_{he} na forma $\mathbf{H} = \sum_{i=1}^N \mathbf{H}_{i,i+1}$, como a seguir

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{he} = & \sum_{i=1}^N \left\{ \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left[(E_0 - \sigma\lambda_B) \mathbf{a}_{i,\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{i,\sigma} + t \left(\mathbf{a}_{i,\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{i+1,\sigma} + \mathbf{a}_{i+1,\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{i,\sigma} \right) \right] + \right. \\ & \left. + U \mathbf{n}_{i\uparrow} \mathbf{n}_{i\downarrow} + 2V(\mathbf{n}_{i,\uparrow} + \mathbf{n}_{i,\downarrow})(\mathbf{n}_{i+1,\uparrow} + \mathbf{n}_{i+1,\downarrow}) \right\}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Utilizamos o operador $\mathbf{K} = \mathbf{H}_{he} - \mu\mathbf{N}$, sendo \mathbf{N} o operador número total de elétrons na cadeia e μ o potencial químico, para o cálculo da função de partição (2.27) do modelo.

Todos os termos presentes na hamiltoniana (4.2) podem ser representados em forma matricial. Utilizamos a base dos auto-estados do número de partículas em cada sítio com *spin*- σ . Isto facilitará a implementação do método de Rojas *et al.* na linguagem de programação algébrica maple 8. O conjunto de matrizes é

$$a_{i,\uparrow}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}_i \quad e \quad a_{i,\downarrow}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}_i; \quad (4.3)$$

$$Q_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta - \lambda_B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta + \lambda_B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\Delta + U \end{pmatrix}_i, \quad (4.4)$$

onde $Q_i \equiv (E_0 - \sigma \lambda_B) \mathbf{a}_{i,\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{i,\sigma} + U \mathbf{n}_{i\uparrow} \mathbf{n}_{i\downarrow}$ e $\Delta = E_0 - \mu$. Temos também

$$V_{i,i+1} = 2V \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}_i \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}_{i+1}. \quad (4.5)$$

As representações matriciais dos operadores de destruição são exatamente as matrizes transpostas às matrizes (4.3).

Implementamos o método de Rojas *et al.* na linguagem de programação algébrica maple 8 e obtemos como resultado as funções $K_{1,m}^{(n)}$ até ordem $n = 6$. A partir dessas funções obtemos a expansão de altas temperaturas do grande potencial do modelo de Hubbard estendido unidimensional até ordem β^5 (veja a equação (A.1)). Nossos resultados são válidos para quaisquer valores das constantes U e V presentes na hamiltoniana (4.2). Devemos lembrar que a expressão (A.1) é analítica e cada coeficiente do polinômio em β é exato, a única expansão feita neste cálculo é a expansão em β da função de partição gran canônica.

Para o caso da banda semi-cheia com $t = 0$, Beni e Pincus [42] obtiveram o grande potencial exato para o modelo de Hubbard estendido unidimensional. Nestas condições, nossos resultados coincidem exatamente com os dos autores acima mencionados até ordem β^5 . Para esta configuração de ocupação da rede ($\langle \mathbf{n}_i \rangle = 1$), o potencial químico é independente da temperatura, $\mu_{sc} = E_0 + \frac{U}{2} + 4V$.

A partir de agora vamos nos restringir ao estudo do modelo de Hubbard estendido unidimensional com número de ocupação igual a meio ($\langle \mathbf{n}_i \rangle = \frac{1}{2}$). Neste caso, o potencial químico é dependente da temperatura e pode ser obtido da expressão do grande potencial, expressão (A.1),

$$\langle \mathbf{n}_i \rangle = \frac{\partial \mathcal{W}_{he}(\beta, \mu)}{\partial \mu} = \frac{1}{2}, \quad (4.6)$$

onde $\langle \mathbf{n}_i \rangle$ representa o número médio de elétrons em cada sítio da rede. Substituindo a expressão do grande potencial, obtido na equação (A.1), na equação (4.6), nos deparamos com uma equação de quarta ordem no potencial químico que não pode ser resolvida exatamente para valores arbitrários das constantes presentes na hamiltoniana (4.2). Entretanto, podemos encontrar uma expansão em β para o potencial químico com coeficientes analíticos. Seguindo esse procedimento obtemos a equação (A.2) do apêndice A que é uma aproximação muito boa para a dependência em β do potencial químico para o caso em que temos um quarto de banda preenchida.

Para estudar os efeitos da transição de fase na termodinâmica deste modelo com esta configuração de ocupação ($\langle \mathbf{n}_i \rangle = \frac{1}{2}$), consideramos dois pontos distintos no diagrama de fase da referência [16] correspondentes a diferentes fases do modelo em $T = 0$.

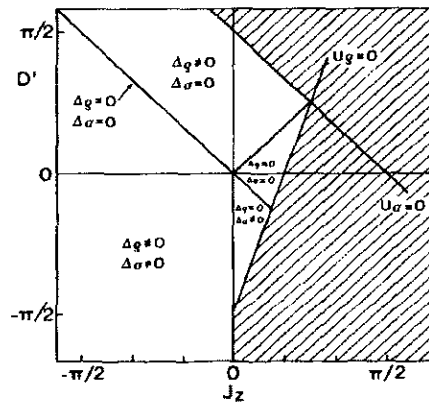


Figura 4.1: Diagrama de fase extraído da referência [16], com as seguintes identificações: $D' \rightarrow \frac{U}{2}$ e $J_z \rightarrow 2V$. Na região hachurada o modelo é instável. As diferentes fases são caracterizadas pelos *gaps* nulos ou finitos de excitação de carga e excitação de *spin*, Δ_ρ e Δ_σ , respectivamente.

Numa primeira abordagem, consideramos conjuntos de pares de dois pontos muito próximos,

embora em fases diferentes, no diagrama da referência [16], e comparamos o comportamento das funções termodinâmicas a altas temperaturas. Como exemplo, apresentamos um conjunto de valores fixos das constantes presentes na hamiltoniana (4.2), $E_0 = 0$, $h = 0$ e $V = 1/16$ utilizamos dois valores distintos para a constante U ($U_1 = -0,49$ e $U_2 = -0,51$) e traçamos os gráficos das diferenças percentuais das quantidades termodinâmicas na Fig. 4.2 para o intervalo de temperatura $\beta \in [0, 0.5]$.

A Fig. 4.2a mostra a diferença percentual da correlação entre primeiros vizinhos, $G_1(\beta, \mu) \equiv \langle \mathbf{n}_i \mathbf{n}_{i+1} \rangle - \langle \mathbf{n}_i \rangle$,

$$G_1(\beta, \mu) = \frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{W}_{he}(\beta, \mu)}{\partial V} - \left(\frac{\partial \mathcal{W}_{he}(\beta, \mu)}{\partial E_0} \right)^2. \quad (4.7)$$

Como podemos observar na Fig. 4.2a, mesmo para dois pontos no diagrama de fase em $T = 0$ que estão próximos mas que pertencem a fases distintas, a diferença entre as duas curvas que representam a função de correlação entre primeiros vizinhos é menor que 1.6% a altas temperaturas.

Com o mesmo conjunto de valores de constantes traçamos o gráfico da susceptibilidade magnética estática $\chi(\beta)$,

$$\chi(\beta) = - \frac{\partial^2 \mathcal{W}_{he}(\beta)}{\partial h^2} \Big|_{h=0}, \quad (4.8)$$

observamos que a diferença percentual neste caso é ainda menor do que no caso de $G_1(\beta, \mu)$, 0.3% para o mesmo intervalo de temperatura.

Estes resultados mostram claramente que, mesmo para dois conjuntos de constantes que remetem a pontos em diferentes fases no diagrama de fase em $T = 0$, o comportamento destas grandezas termodinâmicas a altas temperaturas não é afetado. Verificamos o mesmo comportamento a altas temperaturas nas outras funções termodinâmicas tais como calor específico e energia média por sítio. O mesmo também foi observado para as funções termodinâmicas quando consideramos o caso da banda semi-cheia e pontos em diferentes fases no diagrama de fase da referência [16].

Numa segunda abordagem, tomamos os pontos (U, V) e $(-U, -V)$ correspondendo a diferentes fases do modelo no diagrama de fase da referência [16]. Observando as expressões das funções termodinâmicas derivadas do grande potencial do modelo de Hubbard estendido unidimensional, equação (A.1), vemos que apenas os coeficientes das potências de β pares ou

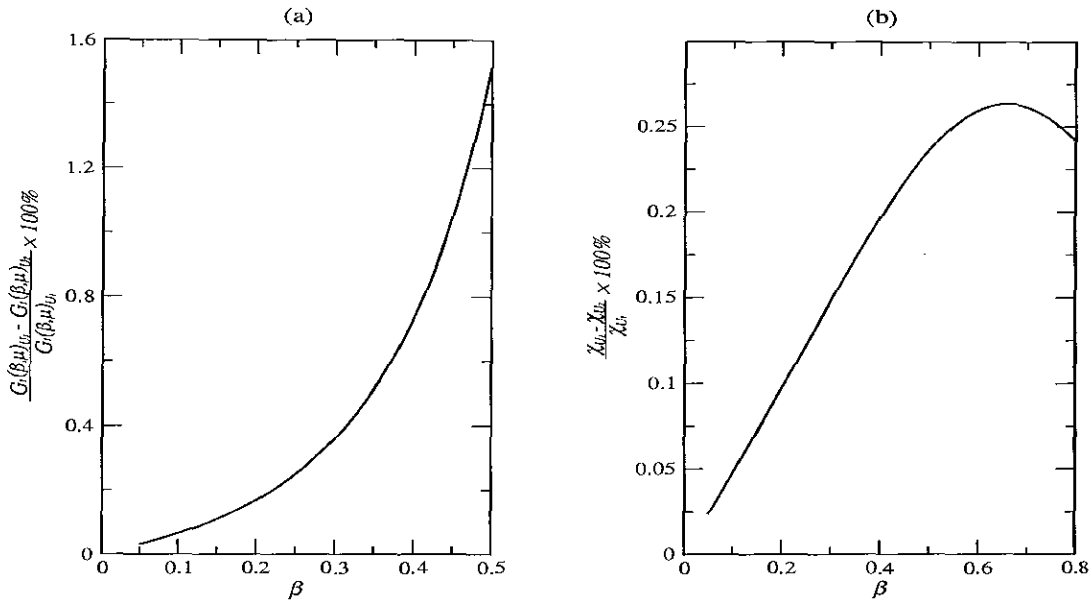


Figura 4.2: Na figura (a) mostramos a diferença percentual a altas temperaturas da correlação entre primeiros vizinhos e na figura (b) a diferença percentual a altas temperaturas da susceptibilidade magnética estática. Em ambos os gráficos consideramos $E_0 = 0$, $h = 0$, $V = \frac{1}{16}$, $U_1 = -0.49$ e $U_2 = -0.51$.

ímpares mudam de sinal pela troca $(U, V) \rightarrow (-U, -V)$. Na Fig. 4.3 consideramos $E_0 = 0$ e $h = 0$ e avaliamos as grandezas termodinâmicas para os dois pares distintos $(U_1 = 1, V_1 = -0.2)$ e $(U_2 = -1, V_2 = 0.2)$.

Na Fig. 4.3a traçamos a diferença percentual do calor específico e observamos que esta varia de 0% para $\beta = 0$ a 25.38% para $\beta = 0.5$. No limite de altas temperaturas, a dependência em β do calor específico por sítio difere significativamente para as duas fases. Para os mesmos valores das constantes E_0 , h , U e V calculamos a energia média por sítio. Na Fig. 4.3b mostramos as curvas referentes a energia média por sítio e observamos que mesmo para $\beta = 0$ os valores traçados são diferentes e a dependência em β desta grandeza também difere significativamente para as diferentes fases.

O comportamento das funções termodinâmicas com a temperatura para o caso da banda semi-cheia, na região de altas temperaturas, é qualitativamente o mesmo que o observado no caso de um quarto de banda.

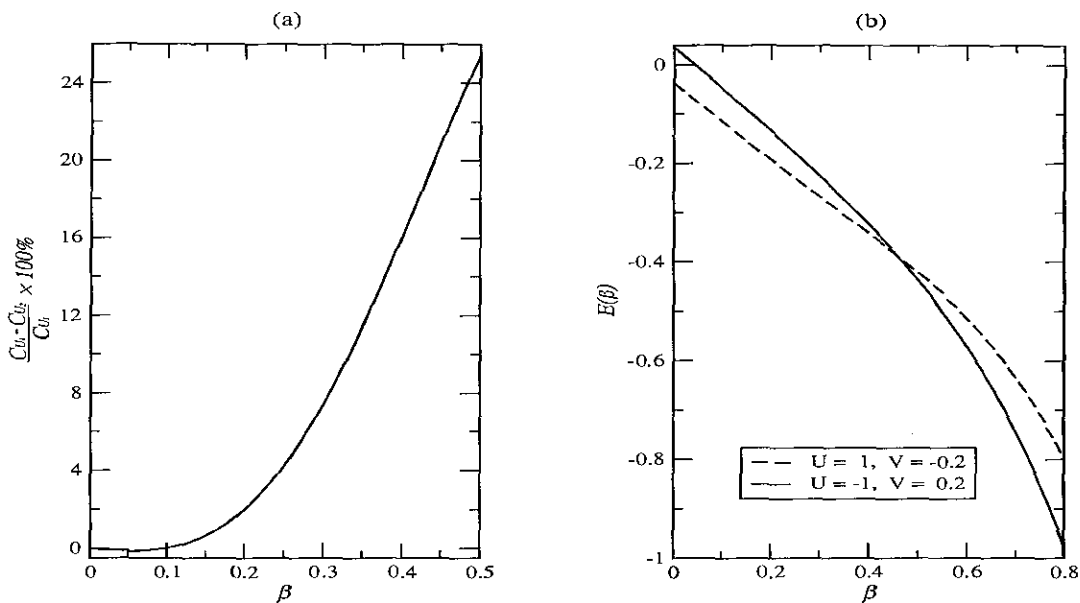


Figura 4.3: Na figura (a) mostramos a diferença percentual a altas temperaturas do calor específico e na figura (b) as curvas referentes à energia média por sítio a altas temperaturas. Em ambos os gráficos consideramos $E_0 = 0$, $h = 0$ e os pontos $(U_1 = 1, V_1 = -0.2)$ e $(U_2 = -1, V_2 = 0.2)$.

4.3 A termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional *versus* a termodinâmica do modelo de *spin-1* composto

4.3.1 Modelo de *spin-1* composto

A hamiltoniana de Sólyom e Timonen [15, 16] para o modelo de *spin-1* composto é

$$H_{st} = - \sum_{i=1}^N [J(\mathbf{S}_i^x \mathbf{S}_{i+1}^x + \mathbf{S}_i^y \mathbf{S}_{i+1}^y) + \Delta \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_{i+1}^z - D(\mathbf{S}_i^z)^2 - h(\mathbf{S}_i^z)], \quad (4.9)$$

onde

$$\mathbf{S}_j^i = \tau_j^i + \sigma_j^i, \quad (4.10)$$

sendo $i = x, y, z$, e $\vec{\tau}_i$ e $\vec{\sigma}_i$ são *spins*- $\frac{1}{2}$ no sítio i , mas distintos entre si. Temos anisotropia ao longo da direção z e D é a anisotropia em um “único sítio”.

Antes de compararmos as funções termodinâmicas entre os dois modelos, apresentamos as transformações de Jordan-Wigner e mostramos como mapear o modelo de *spin-1* composto, que representa a soma de dois *spins*- $\frac{1}{2}$ distintos, no modelo de Hubbard estendido unidimensional mais uma hamiltoniana de correlação infinita.

Definimos os operadores \mathbf{S}_i^\pm como

$$\mathbf{S}_i^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\sigma_i^x + \tau_i^x) \pm i(\sigma_i^y + \tau_i^y)] = \sigma_i^\pm + \tau_i^\pm. \quad (4.11)$$

Utilizamos a equação (4.10) para reescrevermos a hamiltoniana em termos dos *spins*- $\frac{1}{2}$ $\vec{\tau}_i$ e $\vec{\sigma}_i$,

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \sum_{i=1}^N [J(\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+) + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - h \sigma_i^z + D(\sigma_i^z)^2] + \\ & + \sum_{i=1}^N [J(\tau_i^+ \tau_{i+1}^- + \tau_i^- \tau_{i+1}^+) + \Delta \tau_i^z \tau_{i+1}^z - h \tau_i^z + D(\tau_i^z)^2] + \\ & + \sum_{i=1}^N [J(\tau_i^+ \sigma_{i+1}^- + \tau_i^- \sigma_{i+1}^+) + \Delta \tau_i^z \sigma_{i+1}^z + D \tau_i^z \sigma_i^z] + \\ & + \sum_{i=1}^N [J(\sigma_i^+ \tau_{i+1}^- + \sigma_i^- \tau_{i+1}^+) + \Delta \sigma_i^z \tau_{i+1}^z + D \sigma_i^z \tau_i^z], \end{aligned} \quad (4.12)$$

que verificamos estar na forma

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\sigma\sigma} + \mathbf{H}_{\tau\tau} + \mathbf{H}_{\tau\sigma} + \mathbf{H}_{\sigma\tau} \quad (4.13)$$

À cada termo $\mathbf{H}_{\alpha\alpha}$ da hamiltoniana (4.13) aplicamos as transformações de Jordan-Wigner,

$$\sigma_j^+ = \mathbf{c}_{j\uparrow}^\dagger \exp \left[i\pi \sum_{n=1}^{j-1} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} \right],$$

$$\begin{aligned}
 \sigma_j^- &= \exp \left[-i\pi \sum_{n=1}^{j-1} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} \right] \mathbf{c}_{j\uparrow}, \\
 \sigma_j^z &= \mathbf{c}_{j\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{j\uparrow} - \frac{1}{2}, \\
 \tau_j^+ &= \mathbf{c}_{j\downarrow}^\dagger \exp \left[i\pi \sum_{n=1}^{j-1} \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} + i\pi \sum_{n=1}^N \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} \right], \\
 \tau_j^- &= \exp \left[-i\pi \sum_{n=1}^{j-1} \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} - i\pi \sum_{n=1}^N \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} \right] \mathbf{c}_{j\downarrow}, \\
 \tau_j^z &= \mathbf{c}_{j\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{j\downarrow} - \frac{1}{2},
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

onde $\mathbf{c}_{j\sigma}^\dagger$ e $\mathbf{c}_{j\sigma}$ são os operadores de criação e destruição fermiônicos no sítio j e *spin*- σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$), respectivamente, e que satisfazem as relações de anticomutação usuais. Substituindo essas transformações nas quatro hamiltonianas do l.d. da equação (4.13), obtemos

$$\mathbf{H}_{\sigma\sigma} = \sum_{j=1}^N \left[\frac{J}{2} \left(\mathbf{c}_{j\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{j+1\uparrow} + \mathbf{c}_{j+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{j\uparrow} \right) + \Delta \mathbf{n}_{j\uparrow} \mathbf{n}_{j+1\uparrow} - (\Delta + h) \mathbf{n}_{j\uparrow} + \left(\frac{\Delta}{4} + \frac{h}{2} + \frac{D}{4} \right) \right], \tag{4.15a}$$

$$\mathbf{H}_{\tau\tau} = \sum_{j=1}^N \left[\frac{J}{2} \left(\mathbf{c}_{j\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{j+1\downarrow} + \mathbf{c}_{j+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{j\downarrow} \right) + \Delta \mathbf{n}_{j\downarrow} \mathbf{n}_{j+1\downarrow} - (\Delta + h) \mathbf{n}_{j\downarrow} + \left(\frac{\Delta}{4} + \frac{h}{2} + \frac{D}{4} \right) \right], \tag{4.15b}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H}_{\tau\sigma} &= \sum_{j=1}^N \frac{J}{2} \left(e^{i\pi \sum_{n=1}^{j-1} \mathbf{n}_{n\downarrow}} e^{i\pi \sum_{n=j+2}^N \mathbf{n}_{n\uparrow}} \mathbf{c}_{j\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{j+1\uparrow} + e^{-i\pi \sum_{n=1}^{j-1} \mathbf{n}_{n\downarrow}} e^{-i\pi \sum_{n=j+2}^N \mathbf{n}_{n\uparrow}} \mathbf{c}_{j+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{j\uparrow} \right) + \\
 &+ \sum_{j=1}^N \Delta \mathbf{n}_{j\downarrow} \mathbf{n}_{j+1\uparrow} + \sum_{j=1}^N D \mathbf{n}_{j\downarrow} \mathbf{n}_{j\uparrow} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (D + \Delta) (\mathbf{n}_{j\uparrow} + \mathbf{n}_{j\downarrow}) + \sum_{j=1}^N \left(\frac{\Delta}{4} + \frac{D}{4} \right),
 \end{aligned} \tag{4.15c}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H}_{\sigma\tau} &= \sum_{j=1}^N \frac{J}{2} \left(e^{i\pi \sum_{n=1}^j \mathbf{n}_{n\downarrow}} e^{i\pi \sum_{n=j+1}^N \mathbf{n}_{n\uparrow}} \mathbf{c}_{j+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{j\uparrow} + e^{-i\pi \sum_{n=j+1}^N \mathbf{n}_{n\uparrow}} e^{-i\pi \sum_{n=1}^j \mathbf{n}_{n\downarrow}} \mathbf{c}_{j\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{j+1\downarrow} \right) + \\
 &+ \sum_{j=1}^N \Delta \mathbf{n}_{j\uparrow} \mathbf{n}_{j+1\downarrow} + \sum_{j=1}^N D \mathbf{n}_{j\uparrow} \mathbf{n}_{j\downarrow} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (D + \Delta) (\mathbf{n}_{j\uparrow} + \mathbf{n}_{j\downarrow}) + \sum_{j=1}^N \left(\frac{\Delta}{4} + \frac{D}{4} \right).
 \end{aligned} \tag{4.15d}$$

Comparando a hamiltoniana completa do modelo de *spin-1* composto da soma de dois *spins-1/2* distintos, $\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\sigma\sigma} + \mathbf{H}_{\tau\tau} + \mathbf{H}_{\tau\sigma} + \mathbf{H}_{\sigma\tau}$, com a hamiltoniana do modelo de Hubbard estendido unidimensional, expressão (4.2), obtemos

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} &= \mathbf{H}_{he} + N(D + \Delta + h) + \\
 &+ \frac{J}{2} \sum_{j=1}^N \left[\left(e^{i\pi \sum_{n=1}^{j-1} \mathbf{n}_{n\downarrow}} e^{i\pi \sum_{n=j+2}^N \mathbf{n}_{n\uparrow}} \mathbf{c}_{j\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{j+1\uparrow} + e^{-i\pi \sum_{n=1}^{j-1} \mathbf{n}_{n\downarrow}} e^{-i\pi \sum_{n=j+2}^N \mathbf{n}_{n\uparrow}} \mathbf{c}_{j+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{j\downarrow} \right) + \right. \\
 &\left. + \left(e^{i\pi \sum_{n=1}^j \mathbf{n}_{n\downarrow}} e^{i\pi \sum_{n=j+1}^N \mathbf{n}_{n\uparrow}} \mathbf{c}_{j+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{j\uparrow} + e^{-i\pi \sum_{n=j+1}^N \mathbf{n}_{n\uparrow}} e^{-i\pi \sum_{n=1}^j \mathbf{n}_{n\downarrow}} \mathbf{c}_{j\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{j+1\downarrow} \right) \right],
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

onde fazemos as seguinte identificações

$$t \rightarrow \frac{J}{2}, \quad \lambda_B \rightarrow 0, \quad E_0 \rightarrow (-2\Delta - D - h), \quad U \rightarrow 2D, \quad V \rightarrow \frac{\Delta}{2} \quad \text{e} \quad \mu \rightarrow 0.$$

Denominamos hamiltoniana de corda o último operador do l.d. da equação (4.16). Observamos que a hamiltoniana de corda é multiplicada apenas pela constante J .

Segundo a referência [16], na região de U -grande ($\frac{U}{t} \gg 1$), podemos aproximar a dinâmica do modelo composto pela soma de dois *spins-1/2* pela hamiltoniana

$$\mathbf{H}_{st} \approx \mathbf{H}_{he} + N(D + \Delta + h), \tag{4.17}$$

sendo \mathbf{H}_{he} a hamiltoniana do modelo de Hubbard estendido com as constantes dadas pelas substituições (4.17).

4.3.2 Termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional versus o modelo de *spin-1* composto

A função de partição do modelo de *spin-1* composto na região de U -grande é

$$\mathcal{Z}_{st} = e^{-\beta N(D+\Delta+h)} \text{Tr}[e^{-\beta \mathbf{H}_{he}}]. \quad (4.18)$$

Nesta aproximação a relação entre as energias livres de Helmholtz por sítio do modelo da soma de dois *spins-1/2*, para U -grande, e o modelo de Hubbard estendido unidimensional é,

$$\mathcal{W}_{st} = \mathcal{W}_{he} + (D + \Delta + h). \quad (4.19)$$

Para estudar a validade da aproximação (4.17) comparamos a termodinâmica da hamiltoniana (4.16), onde incluímos a presença de um campo magnético externo na direção z , e a termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional obtida na seção 4.2. Na referência [10] Rojas *et al.* obtiveram a expansão em β da energia livre de Helmholtz por sítio do modelo de *spin-1* composto até ordem β^5 , para quaisquer valores das constantes da hamiltoniana (4.16). Comparamos, nesta seção, a termodinâmica dos dois modelos na região de altas temperaturas.

Nas comparações entre o modelo de Hubbard estendido unidimensional e o modelo de *spin-1* composto, utilizamos $J_z = J\Delta$ e $J = 1$. Na Fig. 4.4 apresentamos os gráficos das diferenças percentuais entre as susceptibilidades magnéticas estáticas dos dois modelos para diferentes valores de Δ . Devemos mencionar que apenas a partir da ordem β^3 a susceptibilidade magnética dos dois modelos difere.

Como pode ser observado na Fig. 4.4a, a diferença percentual entre as susceptibilidades magnéticas estáticas dos dois modelos não é muito grande mesmo quando $\Delta/t < 1$. Na Fig. 4.4a apresentamos as diferenças percentuais entre as susceptibilidades magnéticas dos dois modelos para o seguinte conjunto de parâmetros: $D = 0.5$, $h = 0$, $\Delta_1 = -0.5$ (linha tracejada) e $\Delta_2 = 0.5$ (linha cheia). Em ambos os casos as diferenças percentuais se aproximam de 9% para o intervalo de temperatura $\beta \in [0, 0.8]$.

Na Fig. 4.4b apresentamos nossos resultados para $\Delta = \pm 3$ no intervalo de temperatura $\beta \in [0, 0.2]$. Para este conjunto de parâmetros as diferenças percentuais não ultrapassam 0.6%. Concluimos então que na região onde $\Delta/t > 1$ (limite de interação forte entre os elétrons no mesmo sítio), para esta função termodinâmica, o modelo de Hubbard estendido unidimensional é uma boa aproximação para o modelo de *spin-1* composto na região de altas temperaturas.

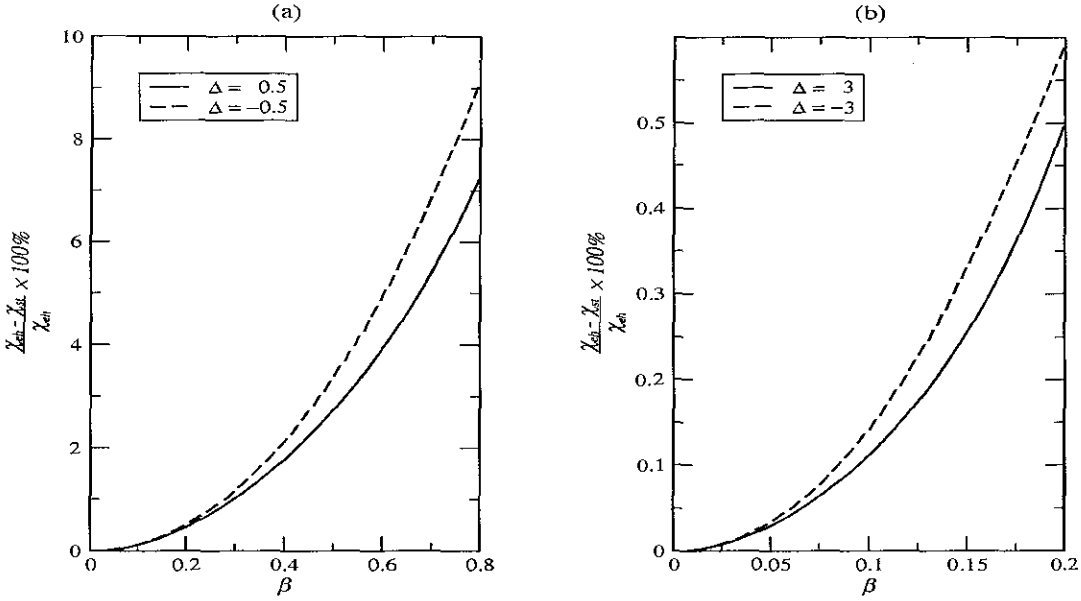


Figura 4.4: Nesta figura mostramos a diferença percentual a altas temperaturas da susceptibilidade magnética estática, na figura (a) $\Delta = \pm 0.5$ e na figura (b) $\Delta = \pm 3$.

Para outras funções termodinâmicas como o valor médio do quadrado da componente z do *spin* por sítio $\langle (S_i^z)^2 \rangle$,

$$\langle (S_i^z)^2 \rangle = -\frac{\partial \mathcal{W}(\beta)}{\partial D}, \quad (4.20)$$

obtemos que a diferença percentual entre os dois modelos é menor que 0.8%, para o intervalo $\beta \in [0, 0.32]$, com o seguinte conjunto de parâmetros $\Delta \in [-3, 3]$, $D = 0$ e/ou $D = \pm 3$.

A função de correlação entre primeiros vizinhos da componente z do *spin* $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$,

$$\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle = \frac{\partial \mathcal{W}(\beta)}{\partial J_z}, \quad (4.21)$$

apresenta valores muito próximos para os dois modelos na região de altas temperaturas e no limite de grande interação entre os elétrons no mesmo sítio. Mesmo quando temos $D = 0.5$, $\Delta = \pm 1$ e $h = 0$ a maior diferença percentual para esta função termodinâmica para os dois modelos é 5.69% para o intervalo $\beta \in [0, 0.32]$.

As diferenças percentuais relativas ao calor específico e à energia média por sítio entre os dois modelos apresentam valores significativamente diferentes, mesmo no limite de interação forte entre os elétrons no mesmo sítio.

Na Fig. 4.5a apresentamos as curvas referentes à diferença percentual do calor específico a altas temperaturas entre os dois modelos no limite de interação forte entre os elétrons no mesmo sítio, no intervalo de temperatura $\beta \in [0, 0.2]$. Para as duas curvas utilizamos $D = 0$, $h = 0$, $\Delta = -3$ (linha tracejada) e $\Delta = 3$ (linha cheia). Note que no caso de configuração tipo antiferromagnética ($\Delta = 3$) a diferença percentual cresce à medida que a temperatura abaixa, enquanto, no caso de configuração tipo ferromagnética ($\Delta = -3$) esta decresce junto com a temperatura.

A Fig. 4.5b mostra a diferença percentual entre as energias médias por sítio dos dois modelos para os seguintes valores dos parâmetros $D = 0$, $h = 0$, $\Delta_1 = 4$ (linha cheia) e $\Delta_2 = -4$ (linha tracejada). Ressaltamos que estes valores referem-se ao caso limite de interação forte entre os elétrons no mesmo sítio. Neste caso, verificamos que além de as diferenças percentuais a altíssimas temperaturas chegarem a 6%, estas também podem ser negativas.

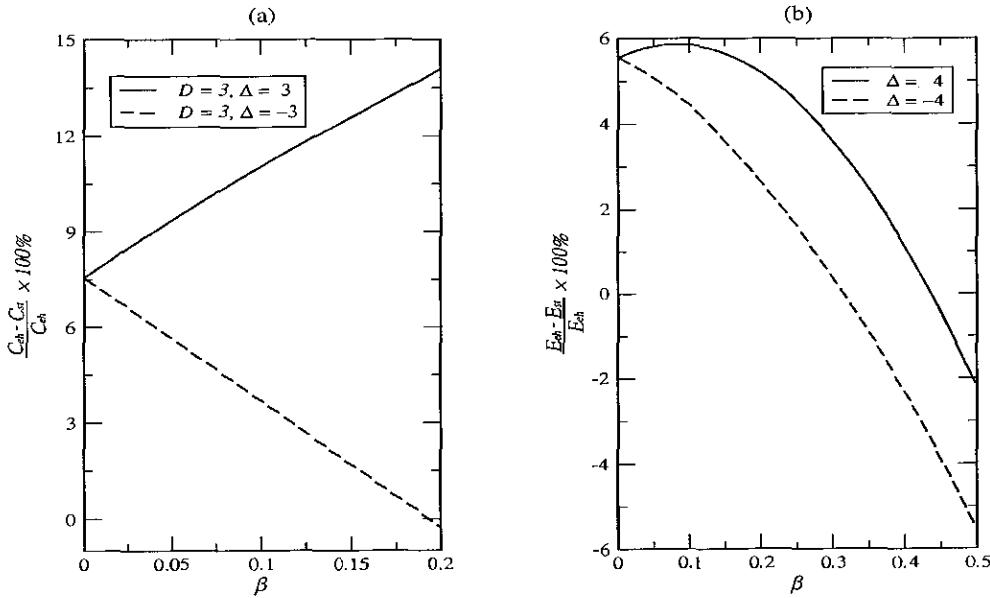


Figura 4.5: Diferenças percentuais entre os valores específicos e energias médias por sítio a altas temperaturas. Na figura (a) consideramos $h = 0$, $D = \pm 3$ e $\Delta = \pm 3$. Na figura (b) consideramos $D = 0$, $h = 0$ e $\Delta = \pm 4$.

No entanto, embora o valor desta função termodinâmica não diminua para valores mais altos de β , isto não garante que as propriedades termodinâmicas do modelo de *spin*-1 composto são bem descritas pelo modelo de Hubbard estendido unidimensional, no limite de interação forte entre os elétrons no mesmo sítio, na região de altas temperaturas.

4.4 Discussão dos resultados

Neste capítulo estudamos as propriedades termodinâmicas do modelo de Hubbard estendido unidimensional na região de altas temperaturas e calculamos a expansão do grande potencial deste modelo até ordem β^5 , estendendo o resultado anterior conhecido na literatura [39]. Os coeficientes do grande potencial em cada ordem em β são exatos e analíticos. A expansão (A.1) é válida para quaisquer valores e sinais das constantes presentes na hamiltoniana (4.2). Da expansão do grande potencial, obtemos uma expansão na região de altas temperaturas para o potencial químico com um quarto de banda preenchida; os coeficientes desta expansão são analíticos embora não sejam exatos. Neste caso, a expressão (A.2) é uma boa aproximação para o potencial químico, e podemos sempre utilizar a expressão (A.1) para encontrar o potencial químico para qualquer número médio de elétrons distribuídos na rede.

Mostramos que as funções termodinâmicas do modelo de Hubbard estendido unidimensional, com um quarto de banda preenchida, quando tomamos dois pontos próximos do diagrama de fase em $T = 0$, têm a mesma dependência na temperatura na região de altas temperaturas. Ressaltamos que esta afirmação permanece válida para a função de correlação entre primeiros vizinhos e para a susceptibilidade magnética estática, que apresentam comportamentos distintos em diferentes fases do diagrama em $T = 0$. Também comparamos as funções termodinâmicas nos pontos (U, V) e $(-U, -V)$, que pertencem a diferentes fases no diagrama em $T = 0$, e verificamos que estas funções exibem uma diferença de comportamento considerável na região de altas temperaturas.

Comparamos as funções termodinâmicas entre o modelo de Hubbard estendido unidimensional e o modelo de Sólyom e Timonen que corresponde ao modelo de *spin*-1 composto [15, 16], para verificar se a aproximação deste modelo composto pelo modelo de Hubbard estendido unidimensional é válida na região de altas temperaturas e no limite de interação forte entre os elétrons da rede. Verificamos, neste regime que, a susceptibilidade magnética estática, a função de correlação entre primeiros vizinhos e o valor médio do quadrado da componente z do *spin* do modelo de *spin*-1 composto são bem aproximados pelo modelo de Hubbard estendido unidimensional e esta aproximação permanece satisfatória mesmo quando $\frac{\Delta}{t} < 1$. Para o calor

específico e para a energia média por sítio, verificamos que o modelo de *spin*-1 composto não é bem aproximado pelo modelo de Hubbard estendido unidimensional, mesmo no regime de interação forte entre os elétrons da rede.

Estudo da termodinâmica do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas

5.1 Introdução

Neste capítulo apresentamos o estudo da termodinâmica do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas via o método de Rojas *et al.*. Na seção 5.2 discutimos as vantagens do método de Rojas *et al.* em relação ao método de Charret *et al.*, utilizado no capítulo 2 para obtenção dos coeficientes da expansão de altas temperaturas do grande potencial do modelo de Thirring massivo até ordem β^2 . Na subseção 5.2.1 discutimos as condições para a implementação do método de Rojas *et al.* e apresentamos a representação matricial utilizada na implementação desse método ao modelo de Thirring massivo. Discutimos na seção 5.3 a termodinâmica do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas obtida da expansão em β do grande potencial até ordem β^5 . A partir da expansão analítica do grande potencial obtemos o comportamento de algumas quantidades físicas: o parâmetro de ordem, o vértice efetivo da interação e o calor específico na região de altas temperaturas para diferentes valores de densidade linear de carga média e de massa, inclusive o caso em que $m = 0$. Apresentamos na seção 5.4 um resumo dos resultados obtidos neste capítulo da tese.

5.2 A escolha do método de Rojas *et al.*

No capítulo 2 calculamos os coeficientes analíticos e exatos da expansão em altas temperaturas da função de partição gran canônica do modelo de Thirring massivo até ordem β^3 via o método de Charret *et al.* [5]. O próximo termo a ser calculado na expansão em β desta função termodinâmica é o coeficiente de ordem β^4 ($\frac{1}{4!}\text{Tr}[\mathbf{K}^4]$). Ressaltamos que o operador \mathbf{K} do modelo de Thirring massivo contém 9 termos (veja a equação (2.16)) e isso representa 9^4 termos para serem analisados. Cada termo se quebra em dois ou mais subtermos que são então calculados. A grande maioria desses termos é nula, o que reduz significativamente o número real de termos que contribuem para esta ordem da expansão. Somos nós que obtemos manualmente os tipos de termos que são nulos em cada ordem em β e que são então implementados no programa gint. Ressaltamos que, à medida que a ordem n (de β^n) aumenta, temos novos tipos de configurações que podem dar contribuição não nula para a função de partição gran canônica. Cada termo não nulo que contribui para $\text{Tr}[\mathbf{K}^4]$ se quebra em diferentes integrais grassmannianas e o cálculo do peso de cada integral também é realizado manualmente. Só após realizar a contagem dos gráficos é que se obtém o coeficiente analítico exato da expansão em altas temperaturas da função de partição gran canônica em ordem β^4 via o método de Charret *et al.* É a partir desta função termodinâmica que calculamos o grande potencial, e é nesta grandeza, no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), que estamos interessados pois esta é uma grandeza intensiva. De todas as etapas necessárias para o cálculo da expansão de altas temperaturas do grande potencial via o método de Charret *et al.*, apenas o cálculo das integrais de Grassmann é que pode ser implementado em linguagem algébrica de programação. Para exemplificar o que significa essa última frase, consideramos o caso particular do modelo de Thirring massivo: o operador \mathbf{K} contém 9 termos e, em ordem β^4 , temos que realizar todos os passos do método de Charret *et al.* para $9^4 = 6561$ termos, sendo a maior parte desse procedimento feito a mão, sem a ajuda da computação algébrica.

Devido às dificuldades em implementar o método de Charret *et al.* em ordens mais altas em β , utilizamos o método de Rojas *et al.* [7] para obtermos os coeficientes da expansão de altas temperaturas do grande potencial do modelo de Thirring massivo. A grande vantagem desse método é o fato dele poder ser quase inteiramente implementado em linguagem algébrica de programação. Além disso, nesse método, os coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial são calculados diretamente e o resultado já é obtido no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Devido aos recursos computacionais disponíveis, obtemos os coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial do modelo de Thirring massivo via o método de Rojas *et al.* até ordem β^5 ($9^4 + 9^5 + 9^6$ termos são analisados durante o cálculo,

sendo que necessitamos determinar manualmente em cada ordem β^n , $n = 4, 5$ e 6 , que tipo de termos é identicamente nulo para otimizarmos, nos programas algébricos, a utilização de memória RAM !!!). É importante ressaltar que, no método de Rojas *et al.*, precisamos utilizar o operador \mathbf{K} do modelo de Thirring massivo na sua forma renormalizada, onde as divergências e a dependência no parâmetro regulador a já foram removidas.

5.2.1 Obtenção do coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial via o método de Rojas *et al.*

Quando escrevemos o operador \mathbf{K} do modelo de Thirring massivo numa rede de espaçamento a e N sítios, aparecem divergências do tipo $\frac{1}{a}$ neste operador. Como o resultado do método de Rojas *et al.* são os coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial já no limite termodinâmico, não pode haver nenhuma divergência neste resultado, uma vez que isso significaria termos um modelo inconsistente. No apêndice **B** apresentamos a renormalização do modelo de Thirring massivo e mostramos que a renormalização escolhida preserva as identidades de Ward-Takahashi.

Para utilizarmos o método de Rojas *et al.* para calcular a termodinâmica, na região de altas temperaturas, do modelo de Thirring massivo precisamos que o operador \mathbf{K} renormalizado esteja na forma $\mathbf{K}_R = \sum_{i=1}^N \mathbf{K}_{i,i+1}$. Como verificamos pela equação (B.7) este operador já se encontra nesta forma e, por conveniência, o reescrevemos como

$$\mathbf{K}_R = \sum_{i=1}^N (\mathbf{C}_i + \mathbf{N}_{i,i+1})_R \quad (5.1)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{i,R} = & -\mu_R \sum_{\alpha=1}^2 \hat{\Psi}_{\alpha,R}^\dagger(n, t) \hat{\Psi}_{\alpha,R}(n, t) + \\ & - 4g_R \hat{\Psi}_{1,R}^\dagger(n, t) \hat{\Psi}_{1,R}(n, t) \hat{\Psi}_{2,R}^\dagger(n, t) \hat{\Psi}_{2,R}(n, t) \end{aligned} \quad (5.2)$$

é o conjunto de operadores que comutam entre si e

$$\mathbf{N}_{i,i+1;R} = t_R \hat{\Psi}_{1,R}^\dagger(n, t) \hat{\Psi}_{1,R}(n+1, t) + t_R^* \hat{\Psi}_{2,R}^\dagger(n, t) \hat{\Psi}_{2,R}(n+1, t) +$$

$$\begin{aligned}
& + t_R^* \hat{\Psi}_{1,R}^\dagger(n+1, t) \hat{\Psi}_{1,R}(n, t) + t_R \hat{\Psi}_{2,R}^\dagger(n+1, t) \hat{\Psi}_{2,R}(n, t) + \\
& - m_R \left(\hat{\Psi}_{1,R}^\dagger(n, t) \hat{\Psi}_{2,R}(n, t) + \hat{\Psi}_{2,R}^\dagger(n, t) \hat{\Psi}_{1,R}(n, t) \right)
\end{aligned} \tag{5.3}$$

é o conjunto de operadores que não comutam entre si.

Escrevemos a representação matricial do operador \mathbf{K}_R utilizando a decomposição (5.1), onde o operador $\mathbf{C}_{i,R}$ é escrito como uma única matriz e os demais operadores são escritos em termos de produtos de representações matriciais dos operadores de criação e aniquilação $\hat{\Psi}_{\alpha,R}^\dagger(n, t)$ e $\hat{\Psi}_{\alpha,R}(n, t)$, respectivamente. Utilizamos a base dos auto-estados do número de partículas em cada sítio para escrever a base no espaço produto de $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$: $\{|0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2, |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2, |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2, |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2\}$, na qual escrevemos a representação matricial dos operadores,

$$\Psi_{1,R}^\dagger(i) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}_i \quad \text{e} \quad \Psi_{2,R}^\dagger(i) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}_i; \tag{5.4}$$

$$C_R(i) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mu_R & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mu_R & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -4g_R - 2\mu_R \end{pmatrix}_i. \tag{5.5}$$

com $i = 1, 2, 3, \dots, N$, sendo N o número de sítios espaciais na cadeia periódica. Note que as matrizes $\Psi_{1,R}(i)^\dagger$, $\Psi_{2,R}(i)^\dagger$ e $C_R(i)$ são definidas num único sítio i . Utilizando a decomposição (5.1) do operador \mathbf{K}_R e as representações matriciais (5.4) e (5.5), obtemos a função auxiliar $\varphi(\lambda)$ (veja a equação (3.30)) do modelo de Thirring massivo. A partir desta função $\varphi(\lambda)$ do modelo calculamos os coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial do modelo de Thirring massivo até ordem β^5 (que corresponde ao termo β^6 da função de partição gran canônica). Nossa expansão do grande potencial até ordem β^5 é apresentada na equação (C.1) do apêndice C. Devemos observar que a expansão até ordem β^5 do grande potencial do modelo de Thirring massivo não apresenta nenhuma singularidade em $m_R = 0$, de forma que esta expressão continua sendo verdadeira para o modelo sem massa ($m_R = 0$). Além disso, a expressão (C.1) é válida para qualquer regime de massa e constante de acoplamento, inclusive para valores negativos de g_R .

5.3 Estudo da termodinâmica do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas

No estudo da termodinâmica do modelo de Hubbard estendido unidimensional [14] a constante do movimento que introduzimos multiplicando o potencial químico é o número total de elétrons na cadeia, que é a quantidade conservada neste modelo. Na escala de energia em que tratamos o modelo de Thirring massivo há a possibilidade de criação e aniquilação de pares elétron-pósitron. Dessa forma, a quantidade que se conserva nesse modelo é a carga elétrica total, que introduzimos no operador \mathbf{K} do modelo (veja as equações (2.7)-(2.9)). Como estamos supondo a invariância translacional do modelo, a densidade linear de carga média $\langle \rho \rangle$ pode variar no intervalo $[-1,1]$. Para a densidade linear de carga média igual a zero ($\langle \rho \rangle = 0$) é sabido que o modelo de Thirring massivo e o modelo de sine-Gordon são equivalentes [43]. Essa equivalência é estabelecida termo a termo na expansão perturbativa dos dois modelos e a relação entre as constantes de acoplamento desses modelos no setor de densidade linear de carga média nula é dada por $\frac{4\pi}{\beta^2} = 1 - \frac{2g_R}{\pi}$, onde β é a constante de acoplamento do modelo de sine-Gordon e g_R é a constante de acoplamento do modelo de Thirring massivo renormalizado. Neste regime a constante de acoplamento g_R do modelo de Thirring massivo tem significado físico no intervalo $g_R \in [0, \pi/4]$. Para $g_R = 0$ a teoria é livre e para $g_R > \frac{\pi}{4}$ a teoria não é consistente pois não apresenta estado fundamental. Para o modelo de Thirring sem massa essa região se estende para $0 \leq g_R \leq \frac{\pi}{2}$, este intervalo é válido para qualquer valor do parâmetro de massa. Nossa proposta é estudar, a partir da expansão (C.1) do grande potencial do modelo de Thirring massivo, no contínuo, a dependência na temperatura de quantidades físicas como o parâmetro de ordem, o vértice efetivo da interação e o calor específico no setor de densidade linear de carga média nula, $\langle \rho \rangle = 0$, e verificar a influência do potencial químico não nulo nessas quantidades na região de altas temperaturas.

5.3.1 A densidade de carga média

Estudamos a termodinâmica do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas para diversos valores de densidade linear de carga média no intervalo $\langle \rho \rangle \in [-1, 1]$. A relação entre a densidade linear de carga média e o potencial químico é (veja a equação (2.26))

$$\begin{aligned}
 \langle \rho \rangle &= -\frac{\partial \mathcal{W}_{Thi}}{\partial \mu_R} \\
 &= 1 + \left(\frac{\mu_R}{2} + g_R \right) \beta + \left(g_R^2 + \frac{g_R \mu_R}{2} \right) \beta^2 + \\
 &+ \left(-\frac{g_R^3}{3} - \frac{\mu_R}{16} - \frac{m_R^2 \mu_R}{8} - \frac{m_R^2 g_R}{4} - \frac{\mu_R^3}{24} - \frac{g_R}{8} - \frac{g_R^2 \mu_R}{2} - \frac{g_R \mu_R^2}{4} \right) \beta^3 + \\
 &+ \left(-\frac{5g_R^4}{3} - g_R^2 \mu_R^2 - \frac{g_R^2}{4} - \frac{g_R \mu_R^3}{6} - \frac{13g_R^3 \mu_R}{6} - \frac{g_R \mu_R}{8} \right) \beta^4 + \\
 &+ \left(\frac{\mu_R^5}{240} + \frac{\mu_R^3}{48} + \frac{\mu_R}{128} - \frac{13g_R^5}{15} + \frac{g_R \mu_R^4}{24} + \frac{g_R^2 \mu_R^3}{24} - \frac{5g_R^3 \mu_R^2}{12} - \frac{7g_R^4 \mu_R}{6} + \frac{m_R^2 g_R}{24} + \right. \\
 &+ \frac{7m_R^2 g_R^3}{12} + \frac{m_R^2 \mu_R^3}{24} + \frac{m_R^4 \mu_R}{48} + \frac{5m_R^2 \mu_R g_R^2}{8} + \frac{m_R^2 \mu_R^2 g_R}{4} + \frac{m_R^4 g_R}{24} + \frac{m_R^2 \mu_R}{48} + \\
 &+ \left. \frac{5g_R^3}{24} + \frac{13g_R^2 \mu_R}{48} + \frac{g_R \mu_R^2}{8} + \frac{g_R}{64} \right) \beta^5 + \mathcal{O}(\beta^6). \tag{5.6}
 \end{aligned}$$

Para cada valor de densidade linear de carga média obtemos um valor para o potencial químico. No caso em que $\langle \rho \rangle = 1$, o potencial químico é independente da temperatura, $\mu_R = -2g_R$. Nos outros casos que estudamos, o potencial químico é um polinômio de quarta ordem em μ_R cujos coeficientes possuem uma expansão em β até ordem β^5 . Este polinômio em μ_R não pode ser resolvido exatamente para valores arbitrários das constantes m_R e g_R presentes no operador \mathbf{K}_R do modelo de Thirring massivo renormalizado (B.7). Entretanto, obtemos uma expressão analítica aproximada para os coeficientes das expansões em β dos potenciais químicos para diferentes valores de $\langle \rho \rangle$. Apresentamos no apêndice C as expansões em β do potencial químico para: $\langle \rho \rangle = -1$ (eq. (C.3)), $\langle \rho \rangle = -0.5$ (eq. (C.5)), $\langle \rho \rangle = 0$ (eq. (C.7)), $\langle \rho \rangle = 0.1$ (eq. (C.9)) e $\langle \rho \rangle = 0.5$ (eq. (C.11)).

Na segunda metade da década de 80, Yokota [19], utilizando o método de integral funcional, estudou as funções de Green do modelo de Thirring sem massa para $T \neq 0$ e $\mu \neq 0$ e mostrou que o potencial termodinâmico desse modelo não é alterado pelos efeitos da temperatura. Baseado nesse resultado, Yokota mostrou que a relação entre o potencial químico e a densidade linear de carga média desse modelo é independente da temperatura T . Utilizando o formalismo de tempo imaginário, Alvarez-Estrada e Nicola [13] reviram o modelo de Thirring sem massa (também com T e μ diferentes de zero) no final da década de 90. A densidade linear de carga média foi calculada e uma correção ao resultado de Yokota foi encontrada. As expressões para a

densidade linear de carga média encontrada nesses trabalhos são

$$\langle \rho \rangle_Y = \frac{\mu}{\pi} \quad \text{e} \quad \langle \rho \rangle_{A-E\&N} = \frac{\mu}{\pi + g'^2}. \quad (5.7)$$

onde g'^2 é a constante de acoplamento do modelo de Thirring sem massa na referência [13] e está associada à constante de acoplamento do modelo de Thirring massivo renormalizado pela relação: $-\frac{g'^2}{2} \rightarrow g_R$. Note que o primeiro resultado à esquerda na equação (5.7) é equivalente à densidade de carga média de um gás de férmions livres. Enquanto o segundo à direita leva em conta as interações entre os férmions e, desse modo, a densidade de carga média ganha uma correção em g'^2 .

Nossos resultados são obtidos para o modelo de Thirring massivo. Entretanto, não há singularidades no grande potencial quando tomamos $m_R = 0$. Isso significa que a densidade de carga média do modelo de Thirring sem massa pode ser obtida da expressão (5.6) apenas substituindo $m_R = 0$. É importante ressaltar que mesmo nesse regime de massa a densidade linear de carga média obtida via o método de Rojas *et al.* é um polinômio de quinto grau em μ_R . Essa é uma importante correção aos resultados de Yokota e Alvarez-Estrada e Nicola e mostra que no formalismo utilizado a relação entre a densidade linear de carga média e o potencial químico é dependente da temperatura. Note que, para densidade linear de carga média igual a 1, cada um dos métodos acima admite um valor distinto para o potencial químico. O tratamento de Yokota leva a um valor do potencial químico constante $\mu = \pi$ e no formalismo de Alvarez-Estrada e Nicola o potencial químico depende da constante de acoplamento g' (veja a equação (5.7)). Em termos de g_R definida em (B.6) o potencial químico encontrado via o formalismo de tempo imaginário é $\mu = \pi - 2g_R$. No nosso tratamento encontramos que, para densidade linear de carga média igual a 1, o potencial químico vale $\mu_R = -2g_R$.

5.3.2 O parâmetro de ordem

A relação entre o parâmetro de ordem σ (massa efetiva à temperatura T) e o grande potencial do modelo de Thirring massivo é:

$$\sigma = -\frac{\partial \mathcal{W}_{Thi}}{\partial m_R}. \quad (5.8)$$

Substituindo a expansão (C.1) em (5.8), obtemos

$$\begin{aligned}
 \sigma &= \frac{1}{2}m_R\beta - \frac{1}{2}m_Rg_R\beta^2 + \\
 &- \left(\frac{1}{8}m_R\mu_R^2 + \frac{1}{2}m_R\mu_Rg_R + \frac{1}{24}m_R^3 + \frac{1}{2}m_Rg_R^2 + \frac{1}{48}m_R \right)\beta^3 + \\
 &- \left(-\frac{1}{6}m_Rg_R^3 - \frac{1}{24}m_Rg_R - \frac{1}{6}m_R^3g_R \right)\beta^4 + \\
 &- \left(-\frac{1}{24}m_R^3g_R^2 - \frac{5}{6}m_Rg_R^4 - \frac{1}{240}m_R^5 - \frac{1}{48}m_R\mu_R^2 - \frac{31}{240}m_Rg_R^2 + \right. \\
 &- \frac{1}{12}m_R\mu_Rg_R - \frac{1}{640}m_R - \frac{1}{240}m_R^3 - \frac{1}{24}m_R^3\mu_R^2 - \frac{1}{48}m_R\mu_R^4 + \\
 &- \left. \frac{1}{6}m_R^3\mu_Rg_R - \frac{1}{6}m_R\mu_R^3g_R - \frac{7}{6}m_R\mu_Rg_R^3 - \frac{5}{8}m_R\mu_R^2g_R^2 \right)\beta^5 + \mathcal{O}(\beta^6). \quad (5.9)
 \end{aligned}$$

Uma observação importante que devemos fazer a respeito desse resultado é que para qualquer valor da constante de acoplamento g_R , a simetria quiral do modelo de Thirring sem massa é preservada a altas temperaturas via o método de Rojas *et al.*. Para verificar essa afirmação basta tomarmos $m_R = 0$ no operador \mathbf{K}_R do modelo de Thirring massivo (B.7). Com essa condição, os coeficientes na expansão (5.9) que obtemos para o parâmetro de ordem são todos nulos e nenhum termo sobrevive para nenhum valor de g_R , inclusive $g_R = \frac{\pi}{4}$. Na referência [44], McCoy e Wu discutem a questão da geração dinâmica de massa para o modelo de Thirring sem massa e mostram que este processo ocorre para um único valor da constante de acoplamento, $g_R = \frac{\pi}{4}$. Nesse trabalho, os autores mostram que tomando-se cuidadosamente dois limites simultâneos no modelo de Thirring sem massa, $a \rightarrow 0$ e $\Delta \rightarrow -1$, onde a é o espaçamento entre os sítios da rede e $\Delta = \frac{J_z}{J_x}$, com J_z e J_x representando os parâmetros da hamiltoniana do modelo XYZ de Heisenberg, observa-se que há geração dinâmica de massa para um valor específico de g_R , $g_R = \frac{\pi}{4}$. Portanto, não conseguimos reproduzir a geração dinâmica de massa da referência [44] com os resultados obtidos via o método de Rojas *et al.* pois não é possível implementar nos cálculos esses dois limites simultaneamente.

Estudamos o comportamento do parâmetro de ordem para diversos valores distintos da densidade linear de carga média no intervalo $\langle \rho \rangle \in [-1, 1]$. Observamos o fato de que, para o intervalo de temperatura que estudamos, $\beta \in [0, 0.12]$, as curvas que representam o parâmetro de ordem em função de β são todas crescentes. O intervalo em β é escolhido de forma que o termo de ordem mais elevada em β da expansão do parâmetro de ordem seja $\lesssim 5\%$ do valor total dessa função. Um critério similar é utilizado para todas as quantidades físicas. Além disso, as

curvas que representam os parâmetros de ordem para as diferentes densidades de carga médias vão a zero quando $\beta = 0$. A diferença entre essas curvas é que, para valores negativos da densidade linear de carga média, a inclinação das curvas é muito maior. A Fig. 5.1 ilustra esses resultados para $m_R = 0.5$ e $m_R = 1$, respectivamente. Nos dois gráficos da Fig. 5.1 utilizamos $g_R = \frac{\pi}{8}$. Para verificarmos a influência do potencial químico não nulo no parâmetro de ordem, na Fig. 5.1 consideramos diferentes valores de densidade linear de carga.

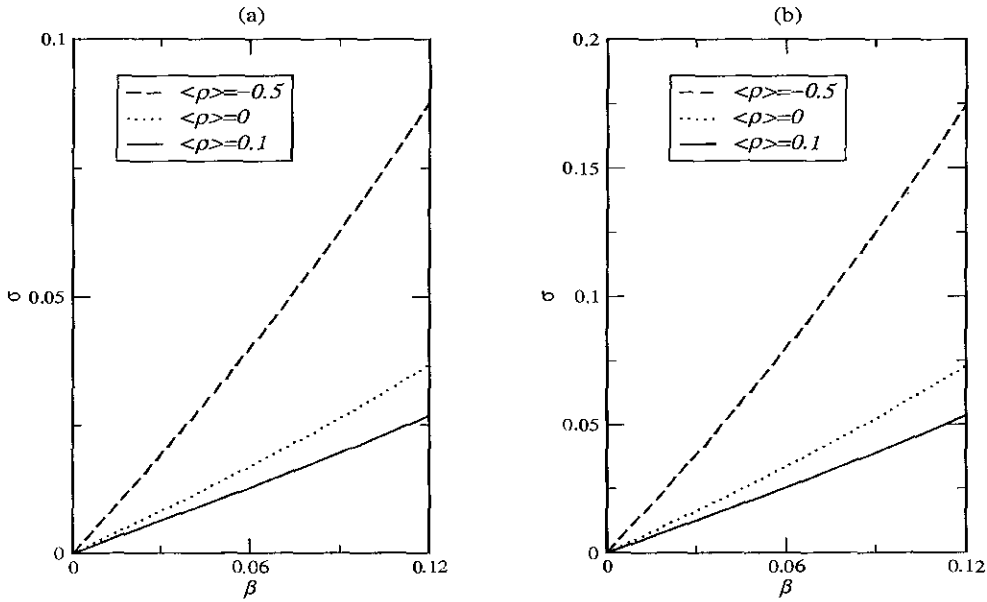


Figura 5.1: Apresentamos o parâmetro de ordem em função do inverso da temperatura β e a influência da densidade linear de carga nesta função. Na figura (a) apresentamos nossos resultados para $m_R = 0.5$ e na figura (b) utilizamos $m_R = 1$. Em ambas as figuras temos $g_R = \frac{\pi}{8}$.

O que se observa na Fig. 5.1 é que o comportamento das curvas não se altera qualitativamente pelas variações nos valores de m_R e de $\langle \rho \rangle$. Apenas as inclinações das curvas são alteradas quando variamos esses parâmetros. Notamos que as curvas não se interceptam em nenhum dos casos acima. Percebemos pela Fig. 5.1 que, se aumentarmos o valor da energia de repouso dos férmions, o parâmetro de ordem aumenta com a mesma escala. Como estamos numa região de altas temperaturas, as energias térmicas envolvidas são muito maiores que as energias de repouso dos férmions. Por isso para $\beta \rightarrow 0$ o modelo se comporta como sendo de massa efetiva nula ($\sigma \rightarrow 0$).

5.3.3 O vértice efetivo da interação

Estudamos o comportamento do vértice efetivo da interação do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas para diferentes valores da densidade linear de carga média $\langle \rho \rangle$ e do parâmetro de massa m_R . Esperamos que, mesmo na região de altas energias, o vértice efetivo da interação seja fortemente afetado pelos diferentes valores da densidade linear de carga média. Ressaltamos que essa quantidade física representa a interação entre os férmions da rede. Como obtivemos a expansão em β aproximada do potencial químico para diferentes valores de densidade linear de carga, desejamos verificar a influência de cargas médias não nulas na intensidade do acoplamento das correntes fermiônicas.

Obtemos o vértice efetivo da interação como um polinômio em β a partir da expressão do grande potencial do modelo de Thirring massivo renormalizado (C.1) através da relação

$$g_{ef} = -\frac{\partial \mathcal{W}_{Thi}}{\partial g_R}. \quad (5.10)$$

O resultado obtido é

$$\begin{aligned} g_{ef} = & 1 + (\mu_R + 3g_R)\beta + \left(-\frac{1}{4}m_R^2 + 3g_R^2 + 2g_R\mu_R + \frac{1}{4}\mu_R^2\right)\beta^2 + \\ & - \left(\frac{1}{4}m_R^2\mu_R + g_R^2\mu_R + \frac{1}{2}g_R\mu_R^2 + g_R^3 + \frac{1}{12}\mu_R^3 + \frac{1}{2}m_R^2g_R + \frac{1}{8}\mu_R + \frac{5}{12}g_R\right)\beta^3 + \\ & - \left(\frac{1}{24}\mu_R^4 + \frac{2}{3}g_R\mu_R^3 + \frac{3}{4}g_R^2 + \frac{13}{4}g_R^2\mu_R^2 - \frac{1}{4}m_R^2g_R^2 - \frac{1}{48}m_R^2 + \right. \\ & + \left.\frac{1}{2}g_R\mu_R + 5g^4 + \frac{1}{16}\mu_R^2 - \frac{1}{24}m_R^4 + \frac{20}{3}g_R^3\mu_R\right)\beta^4 + \\ & - \left(-\frac{1}{120}\mu_R^5 + \frac{7}{3}g_R^3\mu_R^2 - \frac{1}{48}g_R\mu_R^4 - \frac{1}{48}m_R^4g_R - \frac{5}{3}m_R^2g_R^3 + \frac{13}{3}g_R^4\mu_R - \frac{31}{240}m_R^2g_R + \right. \\ & - \left.\frac{5}{8}g_R^2\mu_R - \frac{13}{48}g_R\mu_R^2 - \frac{1}{24}\mu_R^3 - \frac{1}{64}\mu_R - \frac{7}{10}g_R^3 - \frac{1}{24}m_R^2\mu_R - \frac{37}{640}g_R + \frac{5}{12}g_R^2\mu_R^3 + \right. \\ & + \left.\frac{13}{5}g_R^5 - \frac{1}{24}m_R^4\mu_R - \frac{1}{12}m_R^2\mu_R^3 - \frac{7}{4}m_R^2\mu_Rg_R^2 - \frac{5}{8}m_R^2\mu_R^2g_R\right)\beta^5 + \mathcal{O}(\beta^6). \quad (5.11) \end{aligned}$$

Para a densidade linear de carga média igual a 1, o potencial químico é constante e não depende de β , de forma que, no limite $\beta \rightarrow 0$ a curva que representa o vértice efetivo da

interação corta o eixo vertical no ponto $g_{ef} = 1$. Para os demais valores da densidade linear de carga média temos uma expansão em β para o potencial químico de ordem β^4 . Em cada caso, devemos substituir a expansão em β do potencial químico na expressão do vértice efetivo da interação (5.11) e, truncar a série em ordem β^5 . Como para cada valor da densidade linear de carga média obtemos uma expressão distinta para o potencial químico, esperamos que as curvas que representam o vértice efetivo da interação nos diversos casos cortem o eixo vertical em pontos distintos.

Estudamos o vértice efetivo da interação para diversos valores da densidade de carga média no intervalo $\langle \rho \rangle \in [-1, 1]$ e para valores do parâmetro de massa fixos em $m_R = 0$ e $m_R = 1$. Apresentamos nossos resultados na Fig. 5.2.

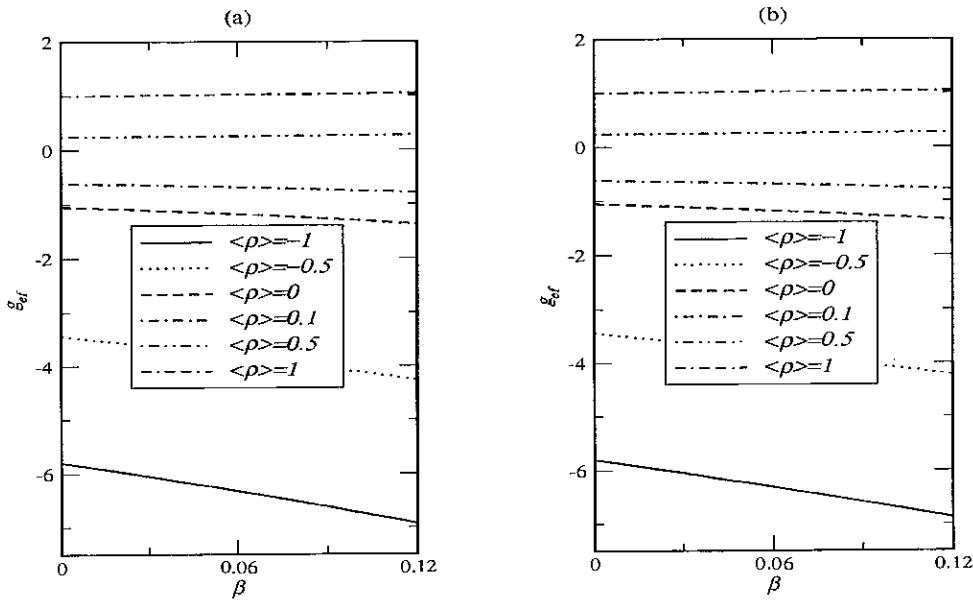


Figura 5.2: Apresentamos a dependência do vértice efetivo de interação com a temperatura e a influência da densidade linear de carga não nula nesta função. Na figura (a) temos $m_R = 0$ e na figura (b), $m_R = 1$. Em ambas as figuras temos $g_R = \frac{\pi}{8}$.

Como esperado, as curvas do vértice efetivo da interação apresentam alteração significativa para os diversos valores da densidade linear de carga média. Em particular, verificamos que essa grandeza física cresce com a densidade linear de carga média, assumindo seu maior valor para $\langle \rho \rangle = 1$ e seu menor valor para $\langle \rho \rangle = -1$. Note que para valores da densidade linear de carga positivos, as curvas que representam o vértice efetivo da interação são retas quase paralelas ao

eixo horizontal e estão na região $g_{ef} > 0$. À medida que diminuimos o valor da densidade linear de carga média, os gráficos também são aproximadamente retas mas apresentam coeficiente angular negativo que aumenta com a diminuição da densidade linear de carga média. Para a densidade linear de carga média nula, a curva que representa o vértice efetivo da interação é uma reta com coeficiente angular negativo e está na região $g_{ef} < 0$. Observando a Fig. 5.2 verificamos que a energia de repouso dos férmions não altera significativamente as curvas que representam o vértice efetivo da interação. Calculamos as diferenças percentuais entre as curvas da Fig. 5.2 com os respectivos valores de densidade linear de carga. O maior valor dessa diferença encontrado foi 1.5%, referente à densidade linear de carga média igual a 0.

5.3.4 O calor específico

O calor específico do modelo de Thirring massivo é obtido da expressão

$$C_L = -\beta^2 \frac{\partial^2 (\beta \mathcal{W}_{T\mu})}{\partial \beta^2}. \quad (5.12)$$

Utilizando o grande potencial renormalizado (C.1), obtemos a expansão em β para o calor específico até ordem β^6 ,

$$\begin{aligned} C_L = & \left(2g_R \mu_R + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} m_R^2 + 3g_R^2 + \frac{1}{2} \mu_R^2 \right) \beta^2 + \\ & + \left(-\frac{3}{2} m_R^2 g_R + 6g_R^3 + 6g_R^2 \mu_R + \frac{3}{2} g_R \mu_R^2 \right) \beta^3 + \\ & + \left(-\frac{3}{2} g_R \mu_R - 4g_R^3 \mu_R - \frac{3}{8} \mu_R^2 - 3m_R^2 \mu_R g_R - \frac{5}{2} g_R^2 - \frac{1}{8} m_R^4 - g_R \mu_R^3 + \right. \\ & - \left. \frac{3}{4} m_R^2 \mu_R^2 - 3g_R^4 - 3g_R^2 \mu_R^2 - \frac{1}{8} m_R^2 - \frac{3}{64} - \frac{1}{8} \mu_R^4 - 3m_R^2 g_R^2 \right) \beta^4 + \\ & + \left(\frac{5}{6} m_R^4 g_R - \frac{65}{3} g_R^3 \mu_R^2 + \frac{5}{3} m_R^2 g_R^3 - \frac{20}{3} g_R^2 \mu_R^3 - \frac{100}{3} g_R^4 \mu_R + \frac{5}{12} m_R^2 g_R + \right. \\ & - \left. \frac{5}{6} g_R \mu_R^4 - \frac{5}{4} g_R \mu_R^2 - 20g_R^5 - 5g_R^3 - 5g_R^2 \mu_R \right) \beta^5 + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \left(\frac{1}{48}\mu_R^6 + \frac{5}{768} + \frac{75}{8}m_R^2\mu_R^2g_R^2 + \frac{5}{32}\mu_R^4 + \frac{15}{128}\mu_R^2 - 26\mu_Rg_R^5 + \frac{1}{4}\mu_R^5g_R + \frac{5}{16}\mu_R^4g_R^2 + \right. \\
 & - \frac{25}{6}\mu_R^3g_R^3 - \frac{35}{2}\mu_R^2g_R^4 + \frac{25}{2}m_R^2g_R^4 + \frac{5}{16}m_R^4g_R^2 + \frac{1}{32}m_R^4 + \frac{3}{128}m_R^2 - 13g_R^6 + \frac{5}{16}m_R^2\mu_R^4 + \\
 & + \frac{5}{16}m_R^4\mu_R^2 + \frac{5}{4}m_R^2\mu_Rg_R + \frac{5}{4}m_R^4\mu_Rg_R + \frac{5}{2}m_R^2\mu_R^3g_R + \frac{35}{2}m_R^2\mu_Rg_R^3 + \frac{5}{16}m_R^2\mu_R^2 + \frac{31}{16}m_R^2g_R^2 + \\
 & \left. + \frac{1}{48}m_R^6 + \frac{25}{4}g_R^3\mu_R + \frac{65}{16}g_R^2\mu_R^2 + \frac{5}{4}g_R\mu_R^3 + \frac{15}{32}g_R\mu_R + \frac{21}{4}g_R^4 + \frac{111}{128}g_R^2 \right) \beta^6 + \mathcal{O}(\beta^7). \quad (5.13)
 \end{aligned}$$

Estudamos o calor específico na região de altas temperaturas em duas situações distintas. Na primeira, fixamos a densidade linear de carga média em $\langle \rho \rangle = 0$ e observamos o comportamento do calor específico com a constante de acoplamento do modelo de Thirring massivo dentro e fora do intervalo $g_R \in [0, \frac{\pi}{4}]$. Ressaltamos que, para a densidade linear de carga média nula, tomar a constante de acoplamento g_R na região $g_R > \frac{\pi}{4}$ implica um modelo onde não existe um estado fundamental de energia.

Na Fig. 5.3 apresentamos as diferenças percentuais entre os calores específicos com o valor da densidade de carga média fixo em $\langle \rho \rangle = 0$ para diferentes valores da constante de acoplamento g_R , onde definimos essas diferenças como:

$$dif\% = \frac{C_L(m_>) - C_L(m_<)}{C_L(m_>)} \times 100\%, \quad (5.14)$$

onde $m_>$ corresponde a massa maior e $m_<$ a massa menor.

Da Fig. 5.3 verificamos $g_R = 1$ e 2 , que correspondem a constante de acoplamento maiores que o valor crítico $g_{cr} = \frac{\pi}{4}$, as curvas não apresentam um comportamento anômalo para o caso de densidade linear de carga média nula, $\langle \rho \rangle = 0$. Observamos igualmente, dos gráficos dessa figura, que o valor da massa dos férmions não influencia significativamente o comportamento do calor específico na região de altas temperaturas.

Na segunda situação que estudamos, fixamos o valor de g_R e variamos o valor da densidade linear de carga média. Escolhemos um valor da constante de acoplamento dentro do intervalo de validade de g_R para a densidade linear de carga média nula (tomamos $g_R = \frac{\pi}{8}$). Estudamos o comportamento do calor específico para diferentes valores de densidade linear de carga no intervalo $\langle \rho \rangle \in [-1, 1]$ e valores do parâmetro de massa fixos. Para cada valor da densidade linear de carga média, a curva que representa o calor específico deve cortar o eixo vertical num ponto diferente, uma vez que, para cada valor da densidade de carga média, obtemos uma expressão distinta para o potencial químico. Apresentamos nossos resultados na Fig. 5.4.

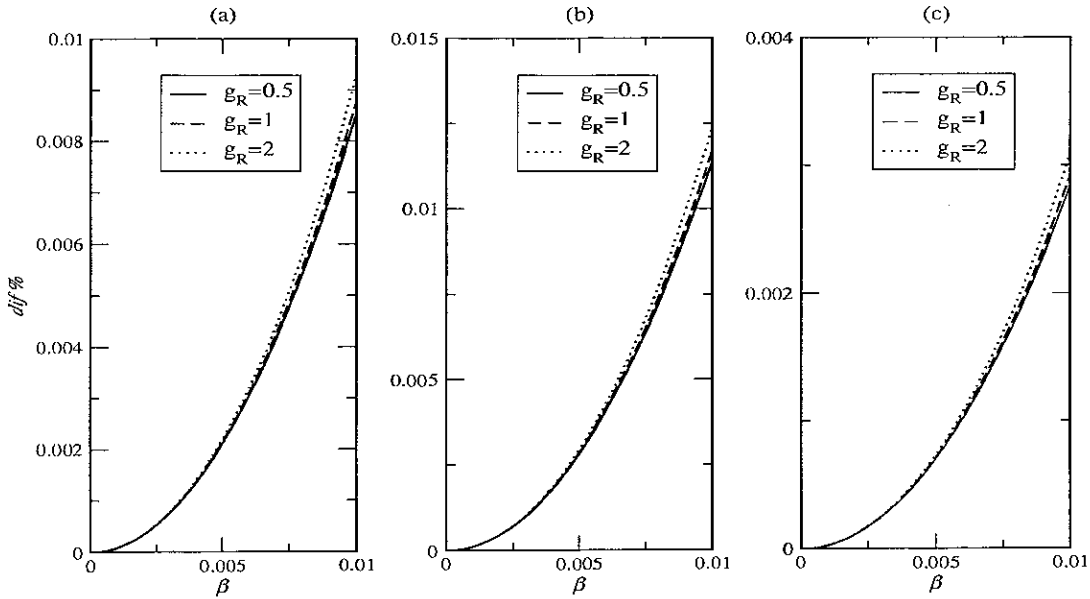


Figura 5.3: Apresentamos as diferenças percentuais (5.14) entre os calores específicos em função de β para o valor da densidade linear de carga fixo em $\langle \rho \rangle = 0$ para diferentes valores da constante de acoplamento g_R . Na figura (a) apresentamos as diferenças percentuais de C_L para $m_R = 1$ e $m_R = 0.5$. Na figura (b) temos a diferença percentual do calor específico entre $m_R = 1$ e $m_R = 0$. Na figura (c) a diferença percentual dessa função termodinâmica entre $m_R = 0.5$ e $m_R = 0$.

Observamos que o calor específico é fortemente afetado por valores distintos da densidade linear de carga média. Isso significa que a diferença entre o número de elétrons e o número de pósitrons presentes na rede, e a conseqüente interação entre os férmions, se reflete no comportamento do calor específico na região de altas temperaturas. Observamos também que o calor específico cresce com o inverso da densidade linear de carga média, assumindo seu maior valor quando $\langle \rho \rangle = -1$ e seu menor valor para $\langle \rho \rangle = 1$. Entretanto, verificamos que a massa dos férmions não afeta significativamente o comportamento do calor específico nesta escala de energia. Para cada valor da densidade linear de carga média apresentados na Fig. 5.4, calculamos as diferenças percentuais entre os calores específicos dos férmions com $m_R = 0.5$ e $m_R = 1$ utilizando a definição (5.14). Verificamos que o maior valor para essa diferença é aproximadamente 4.6% e ocorre para $\langle \rho \rangle = 1$.

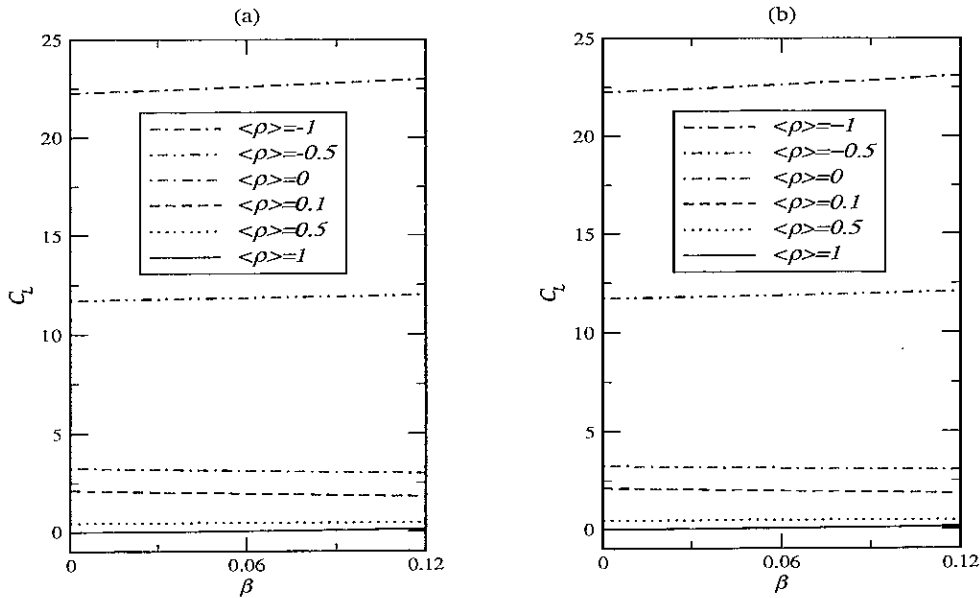


Figura 5.4: Apresentamos os resultados para o calor específico em função de β com $g_R = \frac{\pi}{8}$ para diferentes densidades lineares de carga. Na figura (a) temos $m_R = 0$ e na figura (b), $m_R = 1$.

5.4 Discussão dos resultados

Neste capítulo apresentamos o estudo da termodinâmica do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas e calculamos os coeficientes da expansão do grande potencial até ordem β^5 via o método de Rojas *et al.*. Ressaltamos que os coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial do modelo de Thirring massivo são analíticos e exatos. Como discutido na seção 2.7 para obtermos os coeficientes da expansão (C.1) do grande potencial via a integral funcional do modelo de Thirring massivo, teríamos que calculá-la até 6-loops. A partir dessa expansão obtemos as expressões aproximadas para o potencial químico para diferentes valores da densidade linear de carga média. Essas expressões são soluções de polinômios de quinto grau em μ_R (exceto para o caso $\langle \rho \rangle = 1$, onde $\mu_R = -2g_R$) e são apresentadas no apêndice C. Destacamos que essas expressões são excelentes aproximações para o potencial químico obtido, para os diferentes valores da densidade linear de carga média.

Estudamos o comportamento das quantidades físicas do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas e estudamos a dependência dessas quantidades para diversos valores da densidade linear de carga média e da energia de repouso dos férmions. Temos a

possibilidade de estudar a influência do potencial químico não nulo nas quantidades físicas, uma vez que temos expressões analíticas para essa função para diferentes valores de $\langle \rho \rangle$. Comparamos nossos resultados para a expressão da densidade linear de carga média com os resultados das referências [13] e [19] e mostramos que, no nosso formalismo, essa quantidade é dependente da constante de acoplamento e do inverso da temperatura β . Nessas referências, a constante de acoplamento é independente da temperatura.

Mostramos que o parâmetro de ordem não é sensível aos valores distintos da densidade linear de carga média e que, ao duplicarmos o valor da massa de repouso dos férmions, há também a duplicação dessa quantidade física. Entretanto, não verificamos nenhuma alteração na forma das curvas que representam o parâmetro de ordem. Ressaltamos que não há singularidades na expansão em altas temperaturas (B.7) do grande potencial do modelo de Thirring massivo quando tomamos $m_R = 0$. Dessa forma, obtemos a expansão em altas temperaturas do modelo de Thirring sem massa apenas substituindo $m_R = 0$ na expressão (C.1). Observamos que nesse caso a invariância quiral do modelo sem massa é preservada na região de altas temperaturas via o método de Rojas *et al.*. Ressaltamos que não recuperamos os resultados da referência [44], onde verifica-se a geração dinâmica de massa para o modelo de Thirring sem massa para $g_R = \frac{\pi}{4}$.

Estudamos o comportamento do vértice efetivo da interação e verificamos que este não é sensível a variações na energia de repouso dos férmions. Entretanto, essa quantidade física é fortemente afetada pelas variações nos valores da densidade linear de carga média. A última grandeza que estudamos foi o calor específico. Mostramos que, como esperado, essa quantidade não percebe a ausência do estado fundamental para $g_R > \frac{\pi}{4}$ do modelo de Thirring massivo na região de altíssimas temperaturas $\beta \in [0, 0.01]$. Verificamos que o calor específico é muito sensível a variações nos valores da densidade linear de carga média e que este cresce como inverso da densidade linear de carga média.

Conclusões e Perspectivas

Nesta tese estudamos a termodinâmica do modelo de Thirring massivo e do modelo de Hubbard estendido unidimensional na região de altas temperaturas. Utilizamos o método de Charret *et al.* para obter os coeficientes analíticos e exatos da expansão des altas temperaturas da função de partição do modelo de Thirring massivo. Devido às dificuldades de implementação desse método e levando em conta que a hamiltoniana do modelo de Thirring massivo contém 9 termos, o utilizamos para calcular os coeficientes dessa expansão até ordem β^3 . Para obtermos os coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial do modelo de Thirring massivo em ordens mais altas em β , utilizamos o método de Rojas *et al.* Uma das maiores vantagens desse último método é que ele pode ser quase inteiramente implementado em linguagem algébrica de programação. Além disso, o resultado obtido são os coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial no limite termodinâmico.

Como um laboratório para a aplicação do método de Rojas *et al.* em modelos fermiônicos, o aplicamos ao modelo de Hubbard estendido unidimensional e calculamos os coeficientes analíticos e exatos da expansão em altas temperaturas do seu grande potencial até ordem β^5 [14]. Ressaltamos que esta é a primeira vez que esse método é aplicado a modelos fermiônicos. A partir da expressão do grande potencial do modelo de Hubbard estendido unidimensional calculamos quantidades físicas como o calor específico, a susceptibilidade magnética, a energia média por sítio e a correlação entre primeiros vizinhos para o potencial químico com um quarto de banda preenchida. Mostramos que para esse número de ocupação a expressão do potencial químico é um polinômio de quarto grau em μ com coeficientes expandidos até ordem β^4 . Os coeficientes dessa expansão são analíticos, embora não sejam exatos, e representam uma excelente aproximação para o valor do potencial químico para um quarto de banda preenchida.

Mostramos que, na região de altas temperaturas, as funções termodinâmicas do modelo de Hubbard estendido unidimensional, com um quarto de banda preenchida, têm dependência similar na temperatura quando tomamos dois pontos próximos, mas em fases distintas, no diagrama de fase do modelo em $T = 0$. Quantidades físicas como a susceptibilidade magnética e a função de correlação entre primeiros vizinhos têm comportamentos distintos nas diferentes fases do diagrama de fase em $T = 0$. Para essas quantidades mostramos que a dependência com a temperatura também é essencialmente a mesma quando tomamos pontos próximos mas em fases distintas no diagrama de fase em $T = 0$, com um quarto de banda preenchida, na região de altas temperaturas. Estudamos o comportamento dessas funções termodinâmicas para valores das constantes U e V nos pontos (U, V) e $(-U, -V)$ que correspondem a fases distintas no diagrama de fase em $T = 0$ e observamos que a diferença de comportamento dessas quantidades físicas na região de altas temperaturas é apreciável. Alcançando uma diferença percentual superior a 25%, para o calor específico na região de altas temperaturas.

Para temperatura zero, é conhecido na literatura que no regime de U -grande o modelo de Hubbard estendido unidimensional pode ser mapeado no modelo de $spin-1$ composto da soma de dois $spins-\frac{1}{2}$ distintos. Comparamos as funções termodinâmicas desses dois modelos para verificarmos se essa aproximação permanece válida na região de altas temperaturas e no limite de interação forte entre os elétrons da rede. Mostramos que, nesse regime, o calor específico e a energia média por sítio desses modelos não têm comportamento equivalente e, portanto, o modelo de $spin-1$ composto não é bem aproximado pelo modelo de Hubbard estendido unidimensional. Entretanto, quantidades físicas como a susceptibilidade magnética estática, a função de correlação entre primeiros vizinhos e o valor médio da componente z do $spin$ desses dois modelos têm comportamento semelhante, inclusive na região $\frac{\Delta}{t} < 1$. Portanto, para essas funções termodinâmicas a aproximação entre o modelo de $spin-1$ composto e o modelo de Hubbard estendido unidimensional é satisfatória.

Utilizando o método de Rojas *et al.*, obtemos os coeficientes analíticos e exatos da expansão em altas temperaturas do grande potencial do modelo de Thirring massivo até ordem β^5 . Ressaltamos que é possível calcular via integral funcional a dependência na temperatura do grande potencial deste modelo. No entanto, para obtermos os coeficientes exatos da expansão em β dessa função até ordem β^5 teríamos que calcular, na integral funcional, até 6-loops. Para implementar os métodos de Charret *et al.* e de Rojas *et al.* escrevemos o modelo de Thirring massivo numa rede de espaçamento a e N sítios. É conhecido na literatura [23] que a discretização de modelos fermiônicos em qualquer dimensão espacial, provoca a duplicação dos graus de liberdade dos férmions quando o espaçamento a é não nulo, como ocorre nos trabalhos numéricos via Monte Carlo. Entretanto, como nossos resultados são calculados via

o método de Rojas *et al.*, e este nos dá os resultados no limite termodinâmico ($a \rightarrow 0$), não precisamos utilizar nenhum método para remover os graus de liberdade fermiônicos extras que aparecem nos modelos de rede. Calculamos a renormalização do modelo de Thirring massivo e mostramos que apenas uma renormalização multiplicativa nos campos fermiônicos é necessária para remover as divergências no limite do contínuo ($a \rightarrow 0$). Utilizando o modelo de Thirring massivo renormalizado obtemos a expansão em altas temperaturas do grande potencial do modelo até ordem β^5 para qualquer regime de massa e constante de acoplamento. Os nossos resultados também são válidos para valores negativos da constante de acoplamento.

Obtemos expansões aproximadas para o potencial químico para diversos valores da densidade linear de carga média $\langle \rho \rangle \in [-1, 1]$. Ressaltamos que, exceto para o caso $\langle \rho \rangle = 1$ onde o potencial químico é independente da temperatura ($\mu_R = -2g_R$), as relações entre a densidade linear de carga média e o potencial químico são polinômios de quinto grau em μ_R . Os coeficientes das expansões são analíticos embora não sejam exatos. As relações entre $\langle \rho \rangle$ e μ_R apresentadas nas referências [13] e [19], para o modelo de Thirring sem massa para $T \neq 0$ e $\mu \neq 0$, não são recuperadas pelos nossos resultados.

Estudamos o comportamento do parâmetro de ordem na região de altas temperaturas e mostramos que essa quantidade física não é sensível a variações nos valores da densidade linear de carga média. Entretanto, quando duplicamos a massa de repouso dos férmions, há também a duplicação dessa quantidade física. A invariância quiral para o modelo de Thirring sem massa não é quebrada na região de altas temperaturas para nenhum valor da constante de acoplamento. É conhecido na literatura [44] que, para um único valor da constante de acoplamento, $g_R = \frac{\pi}{4}$, há a geração dinâmica de massa no modelo de Thirring sem massa. Para que isso ocorra é necessário impor os limites de massa e constante de acoplamento de forma simultânea e preservar uma condição específica. Como nossos resultados são obtidos diretamente no limite termodinâmico, não conseguimos tomar esses limites simultâneos e, portanto, não conseguimos obter a geração dinâmica de massa em $g_R = \frac{\pi}{4}$ via o método de Rojas *et al.*

Verificamos que o vértice efetivo da interação não é sensível a variações nos valores do parâmetro de massa, embora essa quantidade física seja fortemente afetada por variações nos valores da densidade linear de carga média. Verificamos que essa quantidade física cresce a medida que aumentamos o valor da densidade linear de carga média. Para a densidade linear de carga média nula, o modelo de Thirring massivo é equivalente ao modelo de sine-Gordon [43]. Nesse regime, a constante de acoplamento do modelo de Thirring massivo tem significado físico no intervalo $g_R \in [0, \frac{\pi}{4}]$ e, para $g_R > \frac{\pi}{4}$ não há um estado fundamental de energia. Estudamos o calor específico na região de altíssimas temperaturas para a densidade linear de carga média nula e verificamos que esta quantidade física não apresenta comportamento anômalo devido a

ausência do estado fundamental de energia. Observamos que o calor específico é fortemente afetado quando variamos os valores da densidade linear de carga média e que essa quantidade física cresce com o inverso de $\langle \rho \rangle$. Não verificamos alterações significativas nas curvas que representam o calor específico quando fixamos o valor da densidade linear de carga média e variamos o valor do parâmetro de massa. Esperamos que otimizações na implementação do método de Rojas *et al.*, permitam calcular os coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial dos modelos estudados nessa tese em ordens mais altas em β .

Como uma continuação do trabalho atual desejamos estudar a termodinâmica, na região de altas temperaturas, do modelo de Hubbard estendido unidimensional tipo escada [45, 46] e do modelo de Hubbard de cadeias ferromagnéticas [47]. Esses modelos quase-unidimensionais são formados por duas cadeias de férmions com *spins* distintos e representam um passo importante na direção do estudo de materiais supercondutores bidimensionais reais. Entretanto, devido aos recursos computacionais disponíveis, a implementação do método de Rojas *et al.* nesses modelos ainda não é possível. As matrizes que representam os operadores do modelo de Hubbard estendido unidimensional tipo escada têm dimensão 16×16 e as que representam o modelo de Hubbard de cadeias ferromagnéticas têm dimensão 64×64 . Estamos atualmente otimizando o método de Rojas *et al.* na linguagem algébrica de programação `maple` 8. Com essas melhorias, esperamos obter os coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial desses modelos acima até ordem β^5 .

Uma extensão natural dessa tese é o estudo da termodinâmica do modelo de Gross-Neveu [3], que também é um modelo fermiônico em $D = 2(1 + 1)$ com interação quártica, cuja a interação é diferente daquela encontrada no modelo de Thirring massivo.

Finalmente uma possibilidade muito interessante para a aplicação do método de Rojas *et al.* que ainda não foi implementada é o estudo da termodinâmica na região de altas temperaturas de modelos que contenham interações entre bósons e férmions, como por exemplo o modelo de Schwinger e o modelo de Schwinger anômalo. Apesar de serem modelos em dimensão $D = 2(1 + 1)$, esses modelos são de grande interesse pois apresentam o mesmo tipo de interação encontrada na QED em $D = 4(3 + 1)$.

Resultados analíticos para o modelo de Hubbard estendido unidimensional via o método de Rojas *et al.*

Utilizando as funções $K_{1,m}^{(n)}$, calculamos o grande potencial por sítio do modelo de Hubbard estendido unidimensional via o método de Rojas *et al.* que apresentamos no capítulo 3. O resultado para a expansão do grande potencial por sítio deste modelo até ordem β^5 ,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{W}_{he}(\beta, \mu) = & \Delta + \frac{U}{4} + 2V + -\frac{\ln(4)}{\beta} + \\
 & + \left(-\frac{9V^2}{2} - VU - 2V\Delta - \frac{\Delta^2}{4} - \frac{t^2}{2} - \frac{\Delta U}{4} - \frac{3U^2}{32} - \frac{\lambda_B^2}{4} \right) \beta + \\
 & + \left(\frac{U^3}{64} + \frac{3VU^2}{8} + \frac{\Delta^2 U}{16} + 8V^3 - \frac{U\lambda_B^2}{16} + \frac{V\Delta^2}{2} + V\Delta U + \frac{t^2 V}{4} + \right. \\
 & + \left. \frac{13V^2 U}{4} + 4V^2 \Delta + \frac{\Delta U^2}{16} \right) \beta^2 + \\
 & + \left(t^2 V \Delta + \frac{5V^2 \lambda_B^2}{4} + \frac{\Delta^2 U^2}{64} - \frac{17V^3 U}{3} + \frac{9t^2 V^2}{4} + \frac{t^2 \Delta^2}{8} + \frac{\Delta^3 U}{48} + \frac{t^2 \lambda_B^2}{8} + \right. \\
 & - \left. \frac{31V^2 U^2}{32} - \frac{10V^3 \Delta}{3} + \frac{V^2 \Delta^2}{4} - \frac{VU^3}{24} + \frac{\Delta U^3}{192} + \frac{V\Delta^3}{6} + \frac{\lambda_B^2 U^2}{64} - \frac{7V^2 \Delta U}{4} + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{V \Delta U^2}{8} + \frac{V \Delta \lambda_B^2}{2} + \frac{t^2 \Delta U}{8} + \frac{\lambda_B^2 \Delta U}{16} + \frac{V U \lambda_B^2}{4} + \frac{13 t^2 V U}{24} + \frac{\Delta^4}{96} + \frac{U^4}{1024} + \\
& - \frac{77 V^4}{8} + \frac{\lambda_B^4}{96} + \frac{t^4}{16} + \frac{5 t^2 U^2}{96} + \frac{\Delta^2 \lambda_B^2}{16} \Big) \beta^3 + \\
& + \left(- \frac{7 t^2 V \Delta U}{8} - \frac{V \lambda_B^2 \Delta U}{4} - 4 V^5 - \frac{V \Delta^4}{12} - \frac{4 V^2 \Delta^3}{3} - \frac{\Delta^3 U^2}{48} - \frac{13 V^3 U^2}{16} + \right. \\
& + \frac{t^4 V}{8} - \frac{13 \Delta^2 U^3}{768} - \frac{5 \Delta U^4}{768} - \frac{83 V^3 \Delta^2}{12} - 4 V^3 \lambda_B^2 - \frac{5 V^2 U^3}{24} + \\
& - \frac{38 V^4 \Delta}{3} - \frac{23 V^4 U}{12} - \frac{t^2 U^3}{64} - \frac{143 t^2 V^3}{24} - \frac{3 V U^4}{128} - \frac{\Delta^4 U}{96} + \frac{\lambda_B^2 U^3}{768} + \frac{\lambda_B^4 U}{96} + \\
& - \frac{V \Delta^2 \lambda_B^2}{4} - \frac{65 t^2 V^2 U}{24} - \frac{7 V \Delta U^3}{48} - 2 V^2 \Delta \lambda_B^2 - \frac{V \Delta^3 U}{3} - 3 t^2 V^2 \Delta + \frac{t^2 U \lambda_B^2}{16} + \\
& - \frac{21 V^2 \Delta U^2}{16} - \frac{t^2 \Delta^2 U}{16} - \frac{73 V^3 \Delta U}{12} - \frac{65 t^2 V U^2}{192} - \frac{41 V^2 \Delta^2 U}{16} - \frac{3 t^2 V \Delta^2}{8} + \\
& + \left. \frac{t^2 V \lambda_B^2}{8} - \frac{17 V^2 U \lambda_B^2}{16} - \frac{V \lambda_B^2 U^2}{16} - \frac{11 V \Delta^2 U^2}{32} - \frac{t^2 \Delta U^2}{16} - \frac{U^5}{1024} \right) \beta^4 + \\
& + \left(\frac{83 V^3 \Delta^3}{18} - \frac{133 t^4 V^2}{120} - \frac{t^4 \Delta^2}{16} - \frac{37 t^4 U^2}{1280} + \frac{1106 V^5 \Delta}{15} + \frac{793 V^5 U}{15} + \right. \\
& + \frac{17 V^2 \Delta^4}{96} - \frac{23 V^2 \lambda_B^4}{96} + \frac{413 V^2 U^4}{1536} + \frac{349 V^4 \Delta^2}{12} + \frac{53 V^4 \lambda_B^2}{12} + \\
& + \frac{3307 V^4 U^2}{192} + \frac{211 V^3 U^3}{72} - \frac{7 t^2 U^4}{2560} - \frac{5 U^4 \lambda_B^2}{3072} - \frac{\lambda_B^4 U^2}{1536} + \frac{7 \Delta^2 U^4}{3072} + \\
& + \frac{13 \Delta U^5}{15360} - \frac{\Delta^5 U}{480} - \frac{\Delta^4 U^2}{1536} - \frac{t^4 \lambda_B^2}{16} - \frac{t^2 \lambda_B^4}{48} + \frac{707 t^2 V^4}{120} - t^2 V \Delta \lambda_B^2 + \\
& - \frac{V^2 \lambda_B^2 \Delta U}{16} - \frac{t^2 V \Delta U^2}{96} - \frac{t^2 \lambda_B^2 \Delta U}{8} - \frac{23 t^2 V \Delta^2 U}{96} - \frac{3 V \lambda_B^2 \Delta U^2}{32} + \\
& - \frac{3 V \Delta^2 \lambda_B^2 U}{16} + \frac{37 t^2 V^2 \Delta U}{48} - \frac{47 t^2 V U \lambda_B^2}{96} - \frac{t^2 \Delta^3 U}{24} + \frac{605 V^4 \Delta U}{12} + \\
& + \left. \frac{333 t^2 V^3 U}{80} + \frac{97 V^2 \Delta^3 U}{48} + \frac{t^4 \Delta U}{16} + \frac{V^2 \lambda_B^2 U^2}{32} - \frac{5 \Delta^2 \lambda_B^2 U^2}{256} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{V \lambda_B^4 U}{24} - \frac{V \lambda_B^2 U^3}{48} + \frac{17 V^3 U \lambda_B^2}{12} - \frac{7 \Delta U^3 \lambda_B^2}{768} - \frac{\Delta^3 \lambda_B^2 U}{48} + \\
& + \frac{23 V^2 \Delta^2 U^2}{8} - \frac{\lambda_B^4 \Delta U}{96} - \frac{17 t^4 V U}{60} - \frac{13 t^2 \lambda_B^2 U^2}{384} - \frac{21 t^2 V^2 \Delta^2}{16} + \\
& - \frac{t^2 V \Delta^3}{3} - \frac{9 V^2 \Delta^2 \lambda_B^2}{16} + \frac{19 V \Delta^3 U^2}{96} + \frac{143 V^2 \Delta U^3}{96} - \frac{13 t^2 \Delta^2 U^2}{384} + \\
& - \frac{t^4 V \Delta}{2} + \frac{V \Delta^4 U}{16} + \frac{V \Delta^3 \lambda_B^2}{6} - \frac{37 t^2 V^2 \lambda_B^2}{16} + \frac{t^2 V^3 \Delta}{6} + \frac{83 t^2 V^2 U^2}{120} + \\
& + \frac{11 t^2 V U^3}{960} - \frac{V \Delta \lambda_B^4}{12} + \frac{t^2 \Delta^2 \lambda_B^2}{8} - \frac{38 V^3 \Delta U^2}{3} + \frac{65 V^3 \Delta^2 U}{4} - \frac{5 t^2 \Delta U^3}{384} + \\
& + \frac{5 V^3 \Delta \lambda_B^2}{6} + \frac{29 V \Delta U^4}{384} + \frac{3 V \Delta^2 U^3}{16} - \frac{\Delta^6}{1440} + \frac{13 U^6}{122880} - \frac{t^6}{72} - \frac{\lambda_B^6}{1440} + \\
& + \frac{977 V^6}{15} - \frac{\Delta^4 \lambda_B^2}{96} - \frac{\Delta^2 \lambda_B^4}{96} - \frac{43 V U^5}{3840} - \frac{V \Delta^5}{60} + \frac{5 \Delta^3 U^3}{2304} - \frac{t^2 \Delta^4}{48} \Big) \beta^5 + \\
& + \mathcal{O}(\beta^6), \tag{A.1}
\end{aligned}$$

onde cada coeficiente de β é exato.

Para obtermos o potencial químico para o caso de um quarto de banda preenchida, substituímos a expansão (A.1) na expressão (4.6). Obtemos um polinômio de quarta ordem em μ . Resolvemos essa equação de quarta ordem fazendo uma expansão em β . O potencial químico depende da temperatura como um polinômio de quarto grau em β ,

$$\begin{aligned}
\mu_{qb} = & - \frac{1.096700792}{\beta} + 0.2837595164 U + 2.270076130 V + E0 + \\
& + (0.06578549378 V U - 0.02281497037 U^2 - 0.1676830424 V^2 - 0.4324809672 t^2 + \\
& - 0.2162404836 \lambda^2) \beta + \\
& + (1.512908543 V \lambda^2 + 0.3782271358 t^2 U - 0.4728529781 V U^2 + 2.303911508 t^2 V + \\
& - 5.774621384 V^2 U + 0.008637173601 U \lambda^2 - 13.30182809 V^3 + 0.007961647604 U^3) \beta^2 + \\
& + (-20.21720190 V^3 U + 2.556500157 t^2 V^2 + 0.1656380845 t^2 U^2 - 3.528806861 V^2 U^2 + \\
& - 0.2515703287 V U^3 + 1.383539606 V^2 \lambda^2 + 0.7391799244 t^2 \lambda^2 + 0.05743882240 \lambda^2 U^2 + \\
& + 0.001598960469 U^4 - 35.89027585 V^4 + 0.3782271358 t^4 + 0.1379650675 t^2 V U + \\
& + 0.2174952047 V U \lambda^2 + 0.06447738492 \lambda^4) \beta^3 +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (0.8443955102 V \lambda^4 + 0.4491443679 t^4 U - 1.826814212 V^3 U^2 + 3.269795589 t^4 V + \\
& - 0.3331611790 V^2 U^3 - 5.819080405 V^4 U + 0.001684518389 t^2 U^3 - 22.76377361 t^2 V^3 + \\
& - 0.02636612057 V U^4 - 12.52062518 V^3 \lambda^2 + 0.01293343351 \lambda^2 U^3 + 0.06512951938 \lambda^4 U + \\
& - 7.772870529 V^5 - 10.61675285 t^2 V^2 U - 0.9186710489 t^2 V U^2 - 0.0006674968883 U^5 + \\
& + 0.4491443679 t^2 U \lambda^2 + 4.078193977 t^2 V \lambda^2 - 4.607870487 V^2 U \lambda^2 + \\
& - 0.3806699184 V \lambda^2 U^2) \beta^4 + \mathcal{O}(\beta^5). \tag{A.2}
\end{aligned}$$

Os coeficientes desta expansão não são exatos, a precisão depende dos valores das constantes na hamiltoniana (4.2). Para uma escolha adequada dessas constantes a precisão obtida é maior que $10^{-6}\%$.

Renormalização do modelo de Thirring massivo e as identidades de Ward-Takahashi

Quando estudamos modelos em Teoria Quântica de Campos encontramos divergências na região ultravioleta. Essas divergências estão presentes nos parâmetros e campos na densidade de lagrangeana original dos modelos em Teoria Quântica de Campos, os chamados parâmetros e campos nús. Em geral esses parâmetros não constituem as grandezas físicas mensuráveis. Identificamos a existência desses infinitos quando tratamos os modelos de forma ingênua e os reestudamos aplicando um método de regularização de forma a torná-los finitos em cada etapa do cálculo. Há várias técnicas de regularização conhecidas: regularização de Pauli-Villars, regularização dimensional, discretização do modelo, entre outras. A escolha da técnica utilizada em cada caso é feita de acordo com o que se deseja obter da teoria. Por exemplo, se desejamos quebrar a invariância quiral, devemos utilizar a técnica de regularização de Pauli-Villars. No nosso caso, desejamos obter as funções termodinâmicas do modelo de Thirring massivo na região de altas temperaturas via os métodos de Charret *et al.* [5] e de Rojas *et al.* [7]. Para esses métodos a técnica de regularização natural é reescrever o modelo numa rede unidimensional de espaçamento a e com N sítios. Uma vez que as divergências do modelo são identificadas, removêmo-las definitivamente através de um processo de renormalização, a partir do qual obtemos os parâmetros vestidos que representam as grandezas físicas mensuráveis e uma teoria finita. De uma maneira geral, alguns parâmetros do modelo permanecem dependentes do regularizador. Entretanto, no processo de renormalização, as grandezas físicas deixam de

dependem do parâmetro regularizador.

Como vimos no capítulo 2, o modelo de Thirring massivo discretizado apresenta todas as condições necessárias para a implementação dos métodos de Charret *et al.* e de Rojas *et al.* para obtermos a sua termodinâmica na região de altas temperaturas. Em ambos os métodos, os nossos resultados devem ser apresentados no limite do contínuo quando o regularizador é removido (limite em que $a \rightarrow 0$). Para obter esse limite devemos renormalizar a teoria.

Da equação (2.1), a densidade de lagrangeana do modelo de Thirring massivo é dada por

$$\mathcal{L} = i\bar{\Psi}(x, t)\gamma^\mu\partial_\mu\Psi(x, t) + m\bar{\Psi}(x, t)\Psi(x, t) + g\mathbf{j}^\mu(x, t)\mathbf{j}_\mu(x, t), \quad (\text{B.1})$$

onde os campos $\bar{\Psi}(x, t)$ e $\Psi(x, t)$ são os campos fermiônicos não renormalizados e as constantes m e g são as constantes nuas.

Vamos mostrar a seguir que no modelo de Thirring só necessitamos renormalizar os campos fermiônicos,

$$\Psi(x, t) = Z_\Psi^{1/2}\Psi_R(x, t) \quad \text{e} \quad \bar{\Psi}(x, t) = Z_\Psi^{1/2}\bar{\Psi}_R(x, t) \quad (\text{B.2})$$

sendo Z_Ψ a constante de renormalização dos campos fermiônicos, Ψ_R e $\bar{\Psi}_R$ são os campos fermiônicos renormalizados. Mostraremos também que essa renormalização é independente da temperatura [13, 19].

A densidade de lagrangeana de modelo de Thirring massivo (B.1) em termos dos campos renormalizados é

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & iZ_\Psi\bar{\Psi}_R(x, t)\gamma^\mu\partial_\mu\Psi_R(x, t) + mZ_\Psi\bar{\Psi}_R(x, t)\Psi_R(x, t) + \\ & + gZ_\Psi^2\bar{\Psi}_R(x, t)\gamma^\mu\Psi_R(x, t)\bar{\Psi}_R(x, t)\gamma^\mu\Psi_R(x, t). \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Lembramos que é a partir do operador \mathbf{K} (veja a definição desse operador na equação (2.16)) que obtemos os coeficientes da expansão em altas temperaturas do grande potencial de cada modelo de interesse. Para o modelo de Thirring massivo substituímos a renormalização (B.2) na expressão (2.16) de seu operador \mathbf{K} e passamos a ter

$$\begin{aligned}
\mathbf{K} = & \sum_{n=1}^N \left[\frac{i}{2a} Z_{\Psi} \sum_{\alpha=1}^2 (-1)^{(\alpha+1)} \left(\hat{\Psi}_{\alpha,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{\alpha,R}(n+1,t) - \hat{\Psi}_{\alpha,R}^{\dagger}(n+1,t) \hat{\Psi}_{\alpha,R}(n,t) \right) + \right. \\
& - m Z_{\Psi} \left(\hat{\Psi}_{1,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{2,R}(n,t) + \hat{\Psi}_{2,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{1,R}(n,t) \right) + \\
& - \mu Z_{\Psi} \sum_{\alpha,R=1}^2 \hat{\Psi}_{\alpha,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{\alpha,R}(n,t) + \\
& \left. - \frac{4g}{a} Z_{\Psi}^2 \hat{\Psi}_{1,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{1,R}(n,t) \hat{\Psi}_{2,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{2,R}(n,t) \right], \tag{B.4}
\end{aligned}$$

onde os campos $\hat{\Psi}_{\alpha,R}^{\dagger}(n,t)$ e $\hat{\Psi}_{\alpha,R}(n,t)$ satisfazem às relações de anticomutação idênticas às equações (2.12).

O grande potencial do modelo de Thirring massivo é função dos parâmetros que multiplicam os produtos dos campos fermiônicos na equação (B.4). Para que o grande potencial seja finito no limite do contínuo ($a \rightarrow 0$), é necessário que esses parâmetros também sejam finitos nesse limite. Percebemos então que uma renormalização que satisfaz essa condição é a renormalização multiplicativa mínima

$$Z_{\Psi} = a. \tag{B.5}$$

Os parâmetros físicos finitos são definidos como

$$m_R \equiv Z_{\Psi} m = am, \quad g_R \equiv Z_{\Psi} g = ag \quad \text{e} \quad \mu_R \equiv Z_{\Psi} \mu = a\mu. \tag{B.6}$$

Usando essa renormalização mínima e os parâmetros m_R , g_R e μ_R vestidos, o operador \mathbf{K} do modelo de Thirring massivo renormalizado fica

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}_R = & \sum_{n=1}^N \left[\frac{i}{2} \sum_{\alpha=1}^2 (-1)^{(\alpha+1)} \left(\hat{\Psi}_{\alpha,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{\alpha,R}(n+1,t) - \hat{\Psi}_{\alpha,R}^{\dagger}(n+1,t) \hat{\Psi}_{\alpha,R}(n,t) \right) + \right. \\
& - \mu_R \sum_{\alpha=1,R}^2 \hat{\Psi}_{\alpha,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{\alpha,R}(n,t) - 4g_R \hat{\Psi}_{1,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{1,R}(n,t) \hat{\Psi}_{2,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{2,R}(n,t) + \\
& \left. - m_R \left(\hat{\Psi}_{1,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{2,R}(n,t) + \hat{\Psi}_{2,R}^{\dagger}(n,t) \hat{\Psi}_{1,R}(n,t) \right) \right], \tag{B.7}
\end{aligned}$$

e é com esse operador \mathbf{K}_R que calculamos a expansão de altas temperaturas (2.71) e (C.1) do grande potencial do modelo de Thirring massivo no limite do contínuo até ordem β^2 e β^5 respectivamente. Ressaltamos que a renormalização (B.5) dos campos fermiônicos é independente da temperatura e que ela é não perturbativa.

Precisamos verificar se as condições de renormalização (B.5) e (B.6) permitem que as funções de Green renormalizadas satisfaçam às identidades de Ward-Takahashi para o modelo de Thirring massivo em $T = 0$. A função de Green fermiônica de dois pontos em $T = 0$ é definida como

$$G_{lm}(x, y) \equiv i \langle 0 | T[\Psi_l(x) \bar{\Psi}_m(y)] | 0 \rangle. \quad (\text{B.8})$$

Para evitarmos confusão futura na contração entre os índices de Lorentz e as contrações entre as componentes dos espinores, que descrevem os campos fermiônicos, a partir deste ponto e apenas neste apêndice, representamos as componentes dos espinores por l e m , sendo que $l, m = 1, 2$. Temos que $T[\Psi_l(x) \bar{\Psi}_m(y)]$ é o operador de ordenação temporal definido por [28]

$$T[\Psi_l(x) \bar{\Psi}_m(y)] \equiv \theta(x^0 - y^0) \Psi_l(x) \bar{\Psi}_m(y) - \theta(y^0 - x^0) \bar{\Psi}_m(y) \Psi_l(x), \quad (\text{B.9})$$

e $x \equiv (x^0, x^1)$ e $y \equiv (y^0, y^1)$ são as bi-coordenadas em $D = 2(1 + 1)$.

Para verificarmos se os parâmetros da densidade de lagrangeana original do modelo de Thirring massivo precisam de uma renormalização não trivial, impomos que as identidades de Ward-Takahashi sejam satisfeitas pelos operadores densidade de corrente escritos em termos tanto dos campos fermiônicos nús assim como pelos campos fermiônicos renormalizados. Ambas as densidades de corrente satisfazem à equação de continuidade,

$$\partial_\mu \mathbf{j}^\mu(x, t) = 0 \quad \text{e} \quad \partial_\mu \mathbf{j}^{\mu, R}(x, t) = 0, \quad (\text{B.10})$$

onde $\mathbf{j}^\mu(x, t) = \bar{\Psi}(x, t) \gamma^\mu \Psi(x, t)$, sendo $\Psi(x, t)$ e $\bar{\Psi}(x, t)$ os campos nús e $\mathbf{j}^{\mu, R}(x, t)$ a densidade de corrente renormalizada, $\mathbf{j}^{\mu, R}(x, t) = \bar{\Psi}^R(x, t) \gamma^\mu \Psi^R(x, t)$. Como os operadores $\mathbf{j}^\mu(x, t)$ e $\mathbf{j}^{\mu, R}(x, t)$ são compostos pelo produto de dois operadores fermiônicos definidos no mesmo ponto do espaço-tempo, então estes operadores são mal definidos e podem gerar uma nova constante multiplicativa divergente,

$$\mathbf{j}^\mu(x, t) = Z_g \mathbf{j}^{\mu, R}(x, t), \quad (\text{B.11})$$

sendo Z_g uma constante de renormalização distinta da contante de renormalização dos campos fermiônicos (Z_Ψ).

Consideremos a seguinte função de Green [48, 49],

$$G_{\mu,lm}(y_1, y_2, y_3) \equiv \langle 0 | T[\mathbf{j}_\mu(y_1)\Psi_l(y_2)\bar{\Psi}_m(y_3)] | 0 \rangle, \quad (\text{B.12})$$

Calculando a derivada dessa função de Green em relação à primeira bi-coordenada y_1 e impondo que $\mathbf{j}_\mu(y_1)$ satisfaça à equação de continuidade (B.10), ficamos com

$$\begin{aligned} \partial_\mu[\langle 0 | T[\mathbf{j}^\mu(y_1)\Psi_l(y_2)\bar{\Psi}_m(y_3)] | 0 \rangle] &= \delta^{(2)}(y_1 - y_3)\langle 0 | T[\Psi_l(y_2)\bar{\Psi}_m(y_1)] | 0 \rangle + \\ &- \delta^{(2)}(y_1 - y_2)\langle 0 | T[\Psi_l(y_1)\bar{\Psi}_m(y_3)] | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

A expressão (B.13) é válida tanto para as quantidades nuas (densidade de corrente e campos fermiônicos) quanto para as quantidades renormalizadas.

i) os campos fermiônicos e o vetor densidade de corrente nús satisfazem à equação (B.13):

Substituindo a renormalização do campo fermiônico (B.2) e a relação (B.11) na igualdade (B.13), temos

$$\begin{aligned} Z_\Psi Z_g \partial_\mu[\langle 0 | T[\mathbf{j}^{\mu,R}(y_1)\Psi_{l,R}(y_2)\bar{\Psi}_{m,R}(y_3)] | 0 \rangle] &= \delta^{(2)}(y_1 - y_3)Z_\Psi \langle 0 | T[\Psi_{l,R}(y_2)\bar{\Psi}_{m,R}(y_1)] | 0 \rangle + \\ &- \delta^{(2)}(y_1 - y_2)Z_\Psi \langle 0 | T[\Psi_{l,R}(y_1)\bar{\Psi}_{m,R}(y_3)] | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

ii) os campos fermiônicos e o vetor densidade de corrente renormalizados satisfazem à equação (B.13):

$$\begin{aligned} \partial_\mu[\langle 0 | T[\mathbf{j}^{\mu,R}(y_1)\Psi_{l,R}(y_2)\bar{\Psi}_{m,R}(y_3)] | 0 \rangle] &= \delta^{(2)}(y_1 - y_3)\langle 0 | T[\Psi_{l,R}(y_2)\bar{\Psi}_{m,R}(y_1)] | 0 \rangle + \\ &- \delta^{(2)}(y_1 - y_2)\langle 0 | T[\Psi_{l,R}(y_1)\bar{\Psi}_{m,R}(y_3)] | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Comparando as expressões (B.14) e (B.15), concluímos que

$$Z_g = 1. \quad (\text{B.16})$$

Utilizamos a identidade de Ward-Takahashi para a corrente quirial

$$\mathbf{j}_\mu^{(5)} \equiv \bar{\Psi}(x, t) \gamma^5 \gamma_\mu \Psi(x, t), \quad (\text{B.17})$$

para discutirmos a renormalização da massa neste modelo.

A partir das equações de movimento dos campos fermiônicos no modelo de Thirring massivo, encontramos a seguinte relação

$$\partial_\mu \mathbf{j}^{(5),\mu}(x, t) = 2im \mathbf{j}_5(x, t), \quad (\text{B.18})$$

onde $\mathbf{j}_5(x, t) \equiv \bar{\Psi}(x, t) \gamma^5 \Psi(x, t)$. Os operadores $\mathbf{j}^{(5),\mu}$ e $\mathbf{j}_5(x, t)$ também são produtos de campos fermiônicos no mesmo ponto do espaço-tempo o que pode gerar uma constante divergente,

$$\mathbf{j}^{(5),\mu}(x, t) = Z_g^{(5)} \mathbf{j}_R^{(5),\mu}(x, t) \quad \text{e} \quad \mathbf{j}_5(x, t) = Z_{(5)} \mathbf{j}_R^{(5)}(x, t). \quad (\text{B.19})$$

Procedendo como fizemos anteriormente, calculamos a identidade de Ward-Takahashi utilizando a equação (B.18) para a corrente quirial e encontramos

$$Z_g^{(5)} = 1, \quad (\text{B.20})$$

c que a massa renormalizada m_R é igual a,

$$m_R = Z_{(5)} m \quad \text{com} \quad Z_{(5)} = Z_\Psi. \quad (\text{B.21})$$

A equação (B.20) é idêntica à condição (B.6) para a relação das massas nua e renormalizada.

Verificamos então que as identidades de Ward-Takahashi para as correntes de calibre e quirial são satisfeitas pelas quantidades nuas e renormalizadas com a nossa escolha para a renormalização (B.2) para os campos fermiônicos e para a renormalização dos parâmetros da densidade de lagrangeana original (B.6).

Resultados analíticos para o modelo de Thirring massivo via o método de Rojas *et al.*

Utilizando as funções $K_{1,m}^{(n)}$ do modelo de Thirring massivo, calculamos o seu grande potencial por sítio via o método de Rojas *et al.*. O resultado para a expansão do grande potencial por sítio deste modelo até ordem β^5 é

$$\begin{aligned}
 \mathcal{W}_{Thi} = & -2\frac{\ln(2)}{\beta} - \mu_R - g_R - \left(\frac{1}{4}\mu_R^2 + \frac{1}{8} + \frac{3}{2}g_R^2 + \frac{1}{4}m_R^2 + g_R\mu_R\right)\beta + \\
 & + \left(\frac{1}{4}m_R^2g_R - g_R^3 - g_R^2\mu_R - \frac{1}{4}g_R\mu_R^2\right)\beta^2 + \\
 & + \left(\frac{1}{256} + \frac{1}{3}g_R^3\mu_R + \frac{1}{96}m_R^2 + \frac{1}{32}\mu_R^2 + \frac{1}{16}m_R^2\mu_R^2 + \frac{1}{4}m_R^2\mu_Rg_R + \frac{1}{4}m_R^2g_R^2 + \right. \\
 & + \left.\frac{1}{96}\mu_R^4 + \frac{1}{8}g_R\mu_R + \frac{1}{96}m_R^4 + \frac{1}{4}g_R^2\mu_R^2 + \frac{1}{12}g_R\mu_R^3 + \frac{5}{24}g_R^2 + \frac{1}{4}g_R^4\right)\beta^3 + \\
 & + \left(-\frac{1}{48}m_R^2g_R + \frac{5}{3}g_R^4\mu_R - \frac{1}{24}m_R^4g_R + \frac{1}{4}g_R^3 + g_R^5 - \frac{1}{12}m_R^2g_R^3 + \frac{1}{3}g_R^2\mu_R^3 + \right. \\
 & + \left.\frac{1}{4}g_R^2\mu_R + \frac{1}{24}g_R\mu_R^4 + \frac{13}{12}g_R^3\mu_R^2 + \frac{1}{16}g_R\mu_R^2\right)\beta^4 +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(-\frac{37}{1280}g_R^2 - \frac{1}{24}m_R^4\mu_R g_R - \frac{5}{16}m_R^2\mu_R^2 g_R^2 - \frac{1}{12}m_R^2\mu_R^3 g_R - \frac{1}{24}m_R^2\mu_R g_R - \frac{7}{12}m_R^2\mu_R g_R^3 + \right. \\
& - \frac{1}{1280}m_R^2 - \frac{7}{40}g_R^4 + \frac{5}{36}\mu_R^3 g_R^3 + \frac{13}{30}g_R^6 - \frac{1}{960}m_R^4 - \frac{1}{96}m_R^2\mu_R^4 - \frac{1}{96}m_R^4\mu_R^2 - \frac{1}{96}m_R^2\mu_R^2 + \\
& - \frac{1}{96}m_R^4 g_R^2 - \frac{5}{12}m_R^2 g_R^4 - \frac{1}{4608} - \frac{1}{96}\mu_R^4 g_R^2 - \frac{1}{120}\mu_R^5 g_R - \frac{31}{480}m_R^2 g_R^2 + \frac{13}{15}\mu_R g_R^5 - \frac{13}{96}g_R^2\mu_R^2 + \\
& - \left. \frac{1}{24}g_R\mu_R^3 - \frac{5}{24}g_R^3\mu_R - \frac{1}{256}\mu_R^2 - \frac{1}{192}\mu_R^4 - \frac{1}{1440}\mu_R^6 - \frac{1}{1440}m_R^6 + \frac{7}{12}\mu_R^2 g_R^4 - \frac{1}{64}g_R\mu_R \right) \beta^5 + \\
& + \mathcal{O}(\beta^6). \tag{C.1}
\end{aligned}$$

A relação entre densidade linear de carga média $\langle \rho \rangle$ e potencial químico renormalizado μ_R é dada pela equação (5.6), isto é,

$$\langle \rho \rangle = \frac{\partial \mathcal{W}_{Thi}}{\partial \mu_R}. \tag{C.2}$$

A partir da equação (5.6) obtemos as expansões em β para o potencial químico para diversos valores da densidade linear de carga média. Ressaltamos que os coeficientes das expansões são analíticos embora não sejam exatos.

Para o caso de $\langle \rho \rangle = -1$, a expansão em β do potencial químico é aproximadamente:

$$\begin{aligned}
\mu_R = & -3.42383275238537 \frac{1}{\beta} - 4.62304991071181 g_R + \\
& + (-5.54298096841019 g_R^2 + 0.655762477677952 m_R^2 + 0.327881238838975) \beta + \\
& + (0.499231332812616 g_R + 1.44953929537548 m_R^2 g_R - 4.92709242627148 g_R^3) \beta^2 + \\
& + (-0.143602692776080 m_R^2 - 0.143602692776080 m_R^4 + 0.625628840769012 g_R^2 + \\
& + 6.34947371845382 g_R^4 + 1.46984159727512 m_R^2 g_R^2 - 0.0312019583007881) \beta^3 + \\
& + (-0.00182667890345341 g_R + 34.2472832276752 g_R^5 - 0.0272056853669578 m_R^4 g_R + \\
& - 0.0186775554727510 m_R^2 g_R - 2.71649849782472 g_R^3 - 7.01349721657292 m_R^2 g_R^3) \beta^4 + \\
& + \mathcal{O}(\beta^5). \tag{C.3}
\end{aligned}$$

Substituindo a expansão (C.3) em (C.2) obtemos

$$\langle \rho \rangle = -1.0000000000000000. \quad (\text{C.4})$$

Para o caso de $\langle \rho \rangle = -0.5$, a expansão em β do potencial químico é aproximadamente:

$$\begin{aligned} \mu_R = & -3.09869877970396 \frac{1}{\beta} - 4.79350942116849g_R + \\ & + (-7.44115991614568g_R^2 + 0.349188677646059 + 0.698377355292124m_R^2)\beta + \\ & + (-9.35606279795541g_R^3 + 2.19698704601137m_R^2g_R + 0.781142270256826g_R)\beta^2 + \\ & + (1.46426090253789g_R^2 - 0.221731505293276m_R^4 - 0.221731505293276m_R^2 + \\ & + 11.0692120691161g_R^4 + 3.47236200550322m_R^2g_R^2 - 0.0488213918910512)\beta^3 + \\ & + (97.6828165028288g_R^5 - 5.16696926286112g_R^3 - 0.276443572694271m_R^2g_R + \\ & - 0.0552661973987817g_R - 13.4109222387946m_R^2g_R^3 - 0.317977660018615m_R^4g_R)\beta^4 + \\ & + \mathcal{O}(\beta^5). \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Substituindo a expansão (C.5) em (C.2) obtemos

$$\langle \rho \rangle = -.5000000000000000. \quad (\text{C.6})$$

Para o caso de $\langle \rho \rangle = 0$, a expansão em β do potencial químico é aproximadamente:

$$\begin{aligned} \mu_R = & -2.48892007105369 \frac{1}{\beta} - 4.52363081727511g_R + \\ & + (-12.1342119243805g_R^2 + 0.315453852159389 + 0.630907704318779m_R^2)\beta + \\ & + (1.52357955348988g_R + 4.23206499196966m_R^2g_R - 41.7994601330191g_R^3)\beta^2 + \\ & + (22.5347747449623m_R^2g_R^2 + 9.42542114708434g_R^2 - 97.2211326884004g_R^4 + \\ & - 0.430265966913720m_R^4 - 0.430265966913720m_R^2 - 0.0952237220931174)\beta^3 + \\ & + (-0.787591618210672g_R - 4.10964758772788m_R^4g - 3.69852710991997m_R^2g_R + \\ & + 61.6736189220219m_R^2g_R^3 + 111.284274791030g_R^5 + 28.5326281154833g_R^3)\beta^4 + \\ & + \mathcal{O}(\beta^5). \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Substituindo a expansão (C.7) na equação (C.2) obtemos

$$\langle \rho \rangle = .5 \times 10^{-14}. \quad (\text{C.8})$$

Para o caso de $\langle \rho \rangle = 0.1$, a expansão em β do potencial químico é aproximadamente:

$$\begin{aligned} \mu_R = & -2.27301995906406 \frac{1}{\beta} - 4.00049136455726g_R + \\ & + (0.250061420569657 - 11.7340059217251g_R^2 + 0.500122841139318m_R^2)\beta + \\ & + (1.34654698424786g_R + 4.07807952887161m_R^2g_R - 54.1684146251411g_R^3)\beta^2 + \\ & + (-0.394344477744295m_R^4 - 0.394344477744293m_R^2 + 30.3992235179278m_R^2g_R^2 + \\ & + 12.2288020604876g_R^2 - 234.167276738003g_R^4 - 0.0841591865154911)\beta^3 + \\ & + (-1.02332816856466g_R - 815.621601775176g_R^5 - 5.69163362444438m_R^4g_R + \\ & - 5.00663893150765m_R^2g_R + 172.651636022421m_R^2g_R^3 + 74.1087953479838g_R^3)\beta^4 + \\ & + \mathcal{O}(\beta^5). \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Substituindo a expansão (C.9) na equação (C.2) obtemos

$$\langle \rho \rangle = .0999999999999999. \quad (\text{C.10})$$

Para o caso de $\langle \rho \rangle = 0.5$, a expansão em β do potencial químico é aproximadamente:

$$\begin{aligned} \mu_R = & -1.09670079153610 \frac{1}{\beta} - 1.13503806542128g_R + \\ & + (-0.365039526363532g_R^2 - 0.216240483644682m_R^2 - 0.108120241822341)\beta + \\ & + (-0.378227135278666g_R - 0.509545445004778g_R^3 - 0.0345486938681197m_R^2g_R)\beta^2 + \\ & + (0.662552338285113g_R^2 + 0.409333881519247g_R^4 + 0.919021157803262m_R^2g_R^2 + \\ & + 0.0644773847909488m_R^2 + 0.0644773847909488m_R^4 + 0.0236391959549165)\beta^3 + \\ & + (-0.112286092061161g_R - 0.0269522964895360g_R^3 - 0.260518077537272m_R^4g_R + \\ & - 0.341357916411860m_R^2g_R + 0.683516809974683g_R^5 - 0.827739747537567m_R^2g_R^3)\beta^4 + \\ & + \mathcal{O}(\beta^5). \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

Finalmente substituindo a expansão (C.11) na equação (C.2) obtemos

$$\langle \rho \rangle = .4999999999999998. \quad (\text{C.12})$$

Pelos resultados (C.4), (C.6), (C.8), (C.10) e (C.12) verificamos que as expansões em β do potencial químico para diferentes valores de densidade linear de carga são excelentes expansões analíticas aproximadas, válidas na região de altas temperaturas.

Referências Bibliográficas

- [1] S.M. de Souza e M.T. Thomaz, *Journ. of Math. Phys.* **31** (1990) 1297.
- [2] W. Thirring, *Ann. of Phys.* **3** (1958) 91.
- [3] D.J. Gross, A. Neveu *Phys. Rev.* **D10** (1974) 3235.
- [4] S.M. de Souza e M.T. Thomaz, *Journ. of Math. Phys.* **32** (1991) 3455.
- [5] I.C. Charret, E.V.C. Silva, S.M. de Souza, O.R. Santos e M.T. Thomaz, *Journ. of Math. Phys.* **40** (1999) 4944.
- [6] I.C. Charret, E.V.C. Silva, O.R. Santos, S.M. de Souza, M.T. Thomaz e A.T. Costa Jr, *Phys. Rev.* **B64** (2001) 195127.
- [7] O. Rojas, S.M. de Souza e M.T. Thomaz, *Journ. of Math. Phys.* **43** (2002) 1390.
- [8] O. Rojas, E.V. Corrêa Silva, S.M. de Souza e M.T. Thomaz, *J. Phys.: Condens. Matter* **15** (2003) 8527.
- [9] O. Rojas, E.V. Corrêa Silva, W.A. Moura-Melo, S. M. de Souza e M. T. Thomaz, *Phys. Rev.* **B67** (2003) 115128.
- [10] Onofre Rojas, E.V. Corrêa Silva, S.M. de Souza e M.T. Thomaz, “*The high temperature expansion of the tetrahedral spin-1/2 e spin-2 XXZ models*”, aceito para publicação no *Phys. Rev. B*.
- [11] M. Luscher, *Nucl. Phys.* **B117** (1976) 475.
- [12] K. Johnson, *Nuovo Cim.* **20** (1961) 773.

- [13] R.F. Alvarez-Estrada e A.G. Nicola, *Phys. Rev.* **D57** (1998) 3618.
- [14] M. Moutinho, E.V.C. Silva e M.T. Thomaz, *Phys. A* **336** (2004) 477.
- [15] J. Sólyom e J. Timonen, *Phys. Rev.* **B34**, (1986) 487.
- [16] J. Sólyom e J. Timonen, *Phys. Rev.* **B40**, (1989) 7150.
- [17] V. Glaser, *Nuovo Cim.* **9** (1958) 990.
- [18] B. Klaiber, *Boulder Lectures in Theoretical Physics*, **Gordon and Breach** vol. **XA**, (1968) 141.
- [19] H. Yokota, *Prog. Theor. Phys.* **77** (1987) 1450.
- [20] S. Lukyanov, A. Zamolodchikov, *Nucl. Phys.* **B607** (2001) 437.
- [21] J.I. Kapusta, *Finite-Temperature Field Theory*, **Cambridge University Press**, (1993).
- [22] M.T. Thomaz e C.E.I. Carneiro, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **22** (2002) 474.
- [23] H.J. Rothe, *Lattice Gauge Theories: An Introduction*, **World Scientific**, Second Edition (1998).
- [24] L. Susskind, *Phys. Rev.* **D16** (1977) 3031.
- [25] K.Wilson, *New Phenomena in Subnuclear Physics*, **Erice**, (1975); **Plenum**, (1977).
- [26] S.D. Drell, M. Weinstein e S. Yankielowicz, *Phys. Rev.* **D14** (1976) 1627.
- [27] K. Symanzik, *Mathematical Problems in Theoretical Physics, Lectures Notes in Physics* vol. **153**, **Springer**, (1982).
- [28] C. Itzykson e J.B. Zuber, *Quantum Field Theory*, **McGraw-Hill Publishing Co.**, (1980).
- [29] S.M. de Souza, O.R. Santos e M.T. Thomaz, *Braz. Journ. of Phys.* **29** (1999) 564.
- [30] I.C. Charret, E.V.C. Silva, S.M. de Souza, O.R. Santos, M.T. Thomaz e C.E.I. Carneiro, *Phys. A* **264** (1999) 204.
- [31] I.C. Charret, S.M. de Souza e M.T. Thomaz, *Braz. Journ. of Phys.* **26** (1996) 720.
- [32] Y. Shibata, S. Nishimoto e Y. Ohta, *Phys. Rev.* **B64** (2001) 235107 e referências contidas.
- [33] R.T. Clay, S. Mazumdar e D.K. Campbell, *Phys. Rev.* **B67** (2003) 115121.

- [34] D. Baeriswyl, D.K. Campbell e S. Mazumdar, “*Theory of Pi-Conjugated Polymers in Conducting Polymers*”, editado por H. Kies (Springer, Heidelberg).
- [35] Y. Tanuma, K. Kuroki, Y. Tanaka e S. Kashiwaya, *Phys. Rev.* **B64** (2001) 214510.
- [36] A. Bernert, P. Thalmeier e P. Fulde, *Phys. Rev.* **B66** (2002) 165108.
- [37] M. Nakamura, *Phys. Rev.* **B61** (2000) 16377.
- [38] E. Jeckelmann, *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 236401.
- [39] I.C. Charret, E.V. Corrêa Silva, O.R. Santos, S.M. de Souza e M.T. Thomaz, *Phys.* **A270** (1999) 462.
- [40] K. Yenemitsu, *Journ. of Phys. e Chem. of Solids* **63** (2002)1495.
- [41] D. Luz e R.R. dos Santos, *Phys. Rev.* **B54** (1996) 1302.
- [42] G. Beni e P. Pincus, *Phys. Rev.* **B9** (1974) 2963.
- [43] S. Coleman, *Phys. Rev.* **11** (1975) 2088.
- [44] B.M. McCoy e T.T. Wu, *Phys. Lett.* **87B** (1979) 50.
- [45] L. Balents e M.P.A. Fisher, *Phys. Rev.* **B53** (1996) 12133.
- [46] M. Vojta, A. Hübsch e R.M. Noack, *Phys. Rev.* **B63** (2001) 045105.
- [47] E.P. Raposo e M.D. Coutinho-Filho, *Phys. Rev.* **B59** (1999) 14384.
- [48] S. Pokorski, *Gauge Field Theories*, Cambridge University Press (1987).
- [49] G. Sterman, *An Introduction To Quantum Field Theory*, Cambridge University Press (1993).

**“TERMODINÂMICA DE TEORIAS DE CAMPOS
FERMIÔNICOS EM $D = 2 (1+1)$ ”**

Márcia Moutinho

Tese de Doutorado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, do Ministério da Ciência e Tecnologia, fazendo parte da banca examinadora os seguintes professores:

Maria Teresa Clímaco dos Santos Thomaz -
Maria Teresa Clímaco dos Santos Thomaz – Presidente/Orientador

Sebastião Alves Dias
Sebastião Alves Dias – Co-orientador

Carlos Farina de Souza
Carlos Farina de Souza

Mucio Amado Continentino
Mucio Amado Continentino

JSM
José Abdalla Helayél Neto

Nami Fux Svaiter
Nami Fux Svaiter

Rio de Janeiro, 30 de abril de 2004