

TESE DE DOUTORADO

MECÂNICA ESTATÍSTICA NÃO EXTENSIVA - APLICAÇÕES
A PROPRIEDADES DE TRANSPORTE

ERVIN KAMINSKI LENZI

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

RIO DE JANEIRO, 2002

MECÂNICA ESTATÍSTICA NÃO EXTENSIVA

APLICAÇÕES A PROPRIEDADES DE TRANSPORTE

Tese de Doutorado submetida ao Centro Brasileiro
de Pesquisas Físicas sob orientação do
Professor Dr. Constantino Tsallis
para a obtenção do título de
Doutor em Física por Ervín Kaminski Lenzi.

2002

AGRADEÇO

Imensamente ao professor Dr. Constantino Tsallis por todas as chances que tive e também pela orientação.

Aos meus pais e ao meu irmão que sempre estiveram ao meu lado em todas as ocasiões de minha vida.

A Giane Gonçalves por tudo que fez por mim e por estar sempre presente na minha vida de uma forma muito especial.

Aos amigos professor Dr. Renio dos Santos Mendes, professor Dr. Luciano R. da Silva, professor Dr. Liacir S. Lucena, professor Dr. Luis Malacarne, professor Dr. Kwok Sau Fá pela confiança e apoio dedicado.

A Vanda Wood e Luzia Amaral pelo apoio e ajuda que têm dedicado a mim durante este período.

A Celia Anteneodo que me ajudou quando precisei. Espero algum dia poder retribuir.

A Lisa Borland, pela ajuda que dedicou a mim em muitas ocasiões durante sua

permanência no CBPF.

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

Aos colegas e amigos que me acompanharam ao longo destes quatro anos. Aos colegas e amigos que chegaram um pouco depois ou que foram embora um pouco antes mas que não tiveram, por isso, um papel menos importante.

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

Novamente agradeço a todos que me ajudaram, o meu muito obrigado por tudo que fizeram por mim.

Resumo

Nesta tese analisaremos alguns aspectos da mecânica estatística não extensiva levando em conta sua formulação baseada em vínculos normalizados. A formulação anterior, baseada em vínculos não normalizados, será abordada quando se fizer necessária. Analisaremos também as aplicações da mecânica estatística não extensiva para processos de transporte, focando principalmente a difusão anômala. Particularmente, a nossa discussão sobre a difusão anômala será feita através da equação de Fokker-Planck, levando em conta as derivadas com índices inteiros e reais. Neste contexto, vamos explorar as relações que podem ser estabelecidas com a mecânica estatística não extensiva. Assim, a tese encontra-se subdividida em duas partes contendo nove capítulos. Na primeira parte, que vai desde o capítulo um até o capítulo cinco, vamos discutir alguns desenvolvimentos formais. Na segunda parte, que compreende do capítulo seis até o capítulo nove, vamos analisar algumas aplicações da mecânica estatística não extensiva. O capítulo um servirá como um auxílio quanto à notação empregada no decorrer da tese. No capítulo dois, analisaremos a estabilidade termodinâmica para uma Hamiltoniana genérica; um exemplo será discutido como ilustração dos resultados obtidos. No capítulo três, vamos discutir alguns aspectos formais de considerarmos outras formas entrópicas (por exemplo, a de Renyi) na formulação de uma termo-estatística e suas relações com a mecânica estatística não extensiva. O capítulo quatro será dedicado ao estudo das aproximações baseadas em expansões em potências de $(1 - q)$ ou fatorizações. Como veremos os resultados obtidos sugerem que tais aproximações são boas para sistemas não interagentes desde que $(1 - q)N \ll 1$. No capítulo

cinco discutiremos as funções de Green na formulação da mecânica estatística não extensiva baseada em vínculos normalizados. No capítulo seis, vamos obter uma expressão exata para a equação de estado de um sistema gravitacional em duas dimensões. No capítulo sete, obteremos a equação de transporte de Boltzmann sem a presença de termos de colisões. No capítulo oito, abordaremos a difusão anômala utilizando a equação de Fokker-Planck não linear fracionária. No capítulo nove, vamos obter uma generalização da lei de Arrhenius. Cada capítulo contém uma seção onde discutimos as idéias apresentadas. Por fim, dedicamos um espaço às conclusões e perspectivas após o último capítulo.

Abstract

This thesis is dedicated to the analysis of some aspects of nonextensive mechanical statistics taking into account normalized constraints. The results obtained in unnormalized version of nonextensive mechanical statistics are discussed when necessary. We also analyse the applications of the nonextensive mechanical statistics to the transport process. In this context, we essentially focus on the anomalous diffusion, which is discussed by considering a nonlinear fractional Fokker-Planck equation. Thus, this thesis is divided in two parts. The first one contains chapters one to five, which are dedicated to discuss some formal aspects of the nonextensive mechanical statistics. The second part, that contains chapters six to nine, is dedicated to analyse some applications of the nonextensive statistics. Chapter one introduces the notation and the basic formulae employed in this thesis. In chapter two, we analyse the thermodynamical stability for the nonextensive mechanical statistics, by considering a generic Hamiltonian H and discuss an example. In chapter three, we discuss some formal aspects obtained by considering the Renyi entropy in a thermostatics approach. Chapter four is dedicated to study the approximations based on $(1 - q)$ expansion and factorizations. In chapter five, we discuss the theory of Green functions based on the normalized version of the nonextensive mechanical statistics. In chapter six, we obtain an exact expression for the state equation, by considering a bidimensional gravitational system. In chapter seven, collisionless Boltzmann equation is generalized. In chapter eight, we analyse the anomalous diffusion by using the nonlinear fractional Fokker-Planck equation. In chapter nine, we obtain a generalization for

Arrhenius' law. Each chapter contains several sections where the ideas are presented and discussed. The conclusions and perspectives are presented after chapter nine.

Conteúdo

Parte - I

Mecânica Estatística Não Extensiva - Formalismo	7
1 Introdução à mecânica estatística não extensiva de Tsallis	8
1.1 Valores médios normalizados e representação integral	9
1.2 Valores médios normalizados versus valores médios não normalizados	13
2 Estabilidade termodinâmica da mecânica estatística não extensiva	16
2.1 Estabilidade termodinâmica	17
2.2 Ilustração	19
2.3 Conclusões	22
3 Uma termoestatística baseada na entropia de Renyi	24
3.1 Entropia de Renyi	24
3.2 Entropia de Renyi e a Termoestatística	25
3.3 Aplicações	29
3.4 Conclusões	32

4	Validade das aproximações baseadas em expansões em potências de $(1 - q)$ e fatorizações	34
4.1	Cálculos exatos versus aproximados - vínculos não normalizados	35
4.2	Cálculos exatos versus aproximados - vínculos normalizados	39
4.3	Conclusões	42
5	Funções de Green baseadas em vínculos normalizados	43
5.1	Teoria das funções de Green	43
5.2	Teoria de resposta linear	48
5.3	Implicações numéricas dos vínculos normalizados	49
5.4	Conclusões	53
Parte - II		
	Mecânica Estatística Não Extensiva - Aplicações	53
6	Equação de Estado para sistemas gravitantes em duas dimensões	55
6.1	Sistemas gravitantes em duas dimensões	56
6.2	Conclusão	60
7	Equação de transporte de Boltzmann e a mecânica estatística não extensiva	61
7.1	Equação de transporte de Boltzmann	62
7.2	Aplicação	66
7.3	Conclusões	71

8	Difusão anômala: equação de Fokker-Planck não linear fracionária	72
8.1	Difusão anômala do tipo correlacionada e “Lévy flight”	72
8.2	Equação de Fokker-Planck não linear inteira	74
8.3	Equação de Fokker-Planck não linear fracional	77
8.4	Conclusões	83
9	Tempo de escape e difusão anômala	84
9.1	Introdução	85
9.2	O modelo	86
9.3	Resultados numéricos nas vizinhanças de um estado de equilíbrio	89
9.4	Considerações Analíticas	92
9.5	Resultados numéricos para sistemas fora do estado de equilíbrio	95
9.6	Conclusões	97
	Discussões e Perspectivas	98
	Bibliografia	100

Lista de Figuras

- 2.1 C_q vs. T para alguns valores típicos de q considerando $r = 2$ e $\varepsilon = 1$ 21
- 2.2 T' vs. T para alguns valores típicos de q considerando $r = 2$ e $\varepsilon = 1$ 22
- 4.1 Nesta figura ilustramos o comportamento das Eqs. (4.12), (4.13) e (4.16) versus N para $q = 0.99$ e $q = 0.9999$ 39
- 4.2 Nesta figura mostramos o comportamento das Eqs. (4.20), (4.21) e (4.22) versus N para $q = 0.99$ e $q = 0.9999$ 41
- 5.1 (a) Nesta figura mostramos a dependência de $\langle N \rangle_q / \langle N \rangle_1$ com $T_c^{(N,q)}/T_c^{(1)}$ para alguns valores típicos de q considerando $\langle N \rangle_1 = 150$. Os gráficos para $q = 0.5$ e 0.9 são indistinguíveis nesta figura. Para exibir a diferença entre eles apresentamos a mesma figura em (b) na escala log-log. 52
- 7.1 Representação gráfica de $(1/(4\pi e^2 \langle n \rangle_q))\omega^2$ versus $(1/(4\pi e^2))k$ considerando, por simplicidade, $1/\beta = 1272.5$, $m = 1$, $V = 1$ e $\langle n \rangle_q = 0.0004$. 69

- 8.1 Este gráfico ilustra o comportamento de $[(1 + \nu + \theta)k't]^{1/(1+\nu+\theta)} \rho(x, t)$ versus $x/[(1 + \nu + \theta)k't]^{1/(1+\nu+\theta)}$ da Eq.(8.11) com $q = 3/2$ e $k_\alpha = 2k'(q-1)/(2+\theta)$ para valores típicos de \mathcal{D} e θ 77
- 8.2 O comportamento de $\left[\left(|\bar{k}_1|t \right)^{\frac{1+\gamma+\theta}{\gamma^2+2\gamma\theta-\gamma+\theta^2-1}} \right] \rho(x, t)$ vs. $x/ \left[\left(|\bar{k}_1|t \right)^{\frac{1+\gamma+\theta}{\gamma^2+2\gamma\theta-\gamma+\theta^2-1}} \right]$ ilustra a Eq.(8.21) para valores típicos de γ e θ satisfazendo as condições $\gamma < -1 - \theta$ e $\theta \geq 0$ 80
- 8.3 Comportamento de $\left[\left(|\bar{k}_1|t \right)^{\frac{1+\gamma+\theta}{\gamma^2+2\gamma\theta-\gamma+\theta^2-1}} \right] \rho(x, t)$ vs. $x/ \left[\left(|\bar{k}_1|t \right)^{\frac{1+\gamma+\theta}{\gamma^2+2\gamma\theta-\gamma+\theta^2-1}} \right]$, ilustra a Eq.(8.21) para valores típicos de γ e θ satisfazendo $0 < \gamma < 1/2$ e $0 \leq \theta < 1/2 - \gamma$ 81
- 9.1 A condição de “cut-off”. (a) Nesta figura ilustramos o potencial $V(x) = ax^4 + bx^3 + cx^2 + d$, com $a = 1/48, b = -1/9, c = 1/8, d = 3/16$. A distribuição estacionária $\rho_s(x)$ é mostrada para $\nu = 2$ em (b) e para $\nu = 0.5$ em (c), para diferentes valores de D como indicado na figura. Para $\nu \leq 1$ o espaço é coberto por caudas do tipo lei de potências. Para $\nu > 1$ a condição de “cut-off” restringe a distribuição. Observe em (b) que quando D decresce o número de partículas confinadas é maior. As linhas horizontais em (a) representam a condição de “cut-off” $V(\bar{x}) = 1/\beta$ que define as regiões permitidas para $\nu = 2$ com os valores de D presentes na figura (b). Todas as quantidades empregadas são adimensionais. 88

- 9.2 Representação de $T(x) \equiv T(x_L \rightarrow x)$ vs. x com $\nu = 2$ na figura (a) e $\nu = 0.5$ na figura (b). Os pontos cheios correspondem aos experimentos numéricos e as linhas correspondem às predições teóricas dadas pela Eq.(9.6). 91
- 9.3 O tempo de escape $T \equiv T(x_R)$ como uma função de $1/D$, para diferentes valores de $\nu > 0$. As linhas cheias correspondem à Eq.(9.6) e as linhas pontilhadas correspondem à aproximação dada pela Eq.(9.7) para D pequeno. Os símbolos correspondem aos resultados numéricos. 94
- 9.4 Ilustramos a evolução temporal da Eq.(9.2) com $\rho(x, 0) = \delta(x)$ para $(\nu, D) = (4.0, 2.5)$ na figura (a) e $(0.5, 0.1)$ na figura (b). 96

Introdução

Recentemente estudos envolvendo presença de efeitos não extensivos dentro da física tem despertado muita atenção, principalmente pelo fato de que estes efeitos em geral não são convenientemente descritos pela mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs. Os exemplos mais comuns da presença da não extensividade podem ser encontrados em sistemas astrofísicos [1, 2, 3, 4, 5, 6], alguns sistemas magnéticos [7, 8, 9], em tensão superficial [10, 11], turbulência em plasma [12], difusão anômala [13, 14, 15, 16]. De uma maneira simples, podemos dizer que a não extensividade pode ocorrer quando: (i) as interações são de curto alcance sendo o sistema de tamanho finito e menor do que o alcance das interações ou (ii) com interações de longo alcance sendo o tamanho do sistema qualquer. Neste contexto, apontando de maneira clara que a mecânica estatística usual tem limitações, podemos mencionar que R. Balian [17] escreveu em seu livro:

“As condições para a validade do limite termodinâmico tem sido estabelecidas, mostrando sob quais circunstâncias a entropia é uma quantidade extensiva. Isto ajuda-nos a entender as limitações que existem, por exemplo em astrofísica, sobre a estabilidade da matéria”.

Completamentando a discussão acima, cabe citar o seguinte trecho:

“Usually W is put equal to the number of complexions ... In order to calculate W , one needs a complete (molecular-mechanical) theory of the system under in consideration. Therefore it is dubious whether the Boltzmann principle has any meaning without a complete molecular-mechanical theory or some other theory which describes the elementary processes. Eq.(1) seems without content, from a phenomenological point of view, without giving in addition such an Elementartheorie.”

pertencente ao trabalho de Einstein (traduzido ao inglês por Abraham Pais) [18], falando sobre a falta de especificação da validade da mecânica estatística usual.

Assim, consistentemente com observações pioneiras como estas e com a ubiquidade de casos anômalos (alguns já mencionados e outros que mencionaremos oportunamente), vemos a necessidade de reformularmos a mecânica estatística usual, de maneira a incorporar os efeitos causados pela presença da não extensividade. Neste sentido, uma ferramenta teórica baseada em uma entropia não extensiva (entropia de Tsallis)[19, 20, 21] tem sido sucessivamente aplicada em muitas situações físicas. Por exemplo, superdifusão anômala do tipo Lévy[22], difusão anômala do tipo correlacionada [23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30], turbulência [31, 32], sistemas auto-gravitantes[33, 34, 35, 36], radiação cósmica de fundo[37, 38], velocidade peculiar de galáxias espirais[39], interação elétron-fonon[40], sistemas ferrofuidos[41], sistemas dissipativos com dimensão baixa [42] e Hamiltonianos sensitivos às condições iniciais [43], no estudo da condensação de Bose-Einstein via equação de Gross-Pitaevskii [44], distribuição de Fermi-Dirac e Bose-Einstein [45, 46], informação quântica [47, 48]. Este formalismo também possibilitou a extensão de algumas ferramentas de cálculo presentes na mecânica estatística usual tais como o método das funções de Green

[49], teoria da resposta linear[50], integrais de trajetória [51], métodos variacional [52, 53] e perturbativo [53], transformada de Laplace [54] e outros. Então, somos conduzidos por fortes indícios que esta é uma forma adequada de tratar questões relativas a sistemas não extensivos, usando um formalismo diferente do tradicional (veja também [55]), a fim de obtermos as modificações necessárias.

A reformulação da mecânica estatística no sentido de generalizar a de Boltzmann-Gibbs (BG) é obviamente empreendimento complexo e volumoso. Esta proposta de Tsallis esta sendo estudada ativamente pela comunidade de física estatística há mais de uma década. Podemos distinguir neste ambicioso projeto três frentes de ataque. A primeira consiste em analisar o próprio formalismo, estudando as suas implicações matemáticas e formais. A segunda consiste em explorar os fenômenos da natureza que exibem leis notoriamente semelhantes às que emergem deste formalismo, notadamente a forma funcional para a entropia, e as leis de potência que substituem, nas distribuições relevantes, as formas exponenciais (distribuição de BG e gaussianas). A terceira consiste em estudar os fundamentos dinâmicos da teoria, o que permite o cálculo do parâmetro entropico q *a priori* (isto é, a partir da dinâmica microscópica do sistema), e não somente através de ajustes. Pertencem a primeira frente de ataque trabalhos tais como o estudo dos teoremas que provam a unicidade da entropia de Tsallis [56], estudos sobre a distribuição “escort” dentro da estatística não extensiva [57], o estudo do principio de Clausius[58], estudo do teorema H no contexto da mecânica estatística generalizada[59] e a generalização da função distribuição de um gás diluído[60].

Na segunda frente de trabalho temos o estudo dos neutrinos solares [61], a analise do

fluxo dos raios cósmicos [62], aglomeração urbana [63], o estudo de problemas nucleares de muitos corpos [64], na descrição de experimentos de espalhamento hadrônico da aniquilação elétrons – pósitrons ($e^+e^- \rightarrow$ hadrons) [65], distribuições de velocidades da “Hydra viridíssima” em agregados celulares [66], linguística [67] e outros.

A terceira frente de pesquisa compreende, por exemplo, o estudo da relação entre sensibilidade às condições iniciais e relaxação em sistemas dinâmicos [68], a análise da entropia de Kolmogorov-Sinai no mapa standard [69], a evolução temporal da entropia de Tsallis para mapas conservativos e dissipativos [70], no estudo da sensibilidade às condições iniciais em mapas logísticos generalizados [71].

A presente tese tem por objetivo contribuir essencialmente na primeira frente de ataque. Efetivamente, obteremos uma equação de transporte [72], estudaremos um sistema gravitacional em duas dimensões [73], faremos uma discussão mais detalhada sobre as aproximações que se baseiam em expansões em potências de $(1 - q)$ e fatorizações [74]. Dentro deste contexto, também analisaremos as mudanças produzidas pelo emprego de vínculos normalizados [75], ao invés de vínculos não normalizados. Pois com esta mudança ressurgiram algumas questões que estavam esclarecidas; dentre as quais temos a estabilidade termodinâmica de um sistema não extensivo [76], as implicações de tais vínculos na formulação e nos resultados obtidos através do método das funções de Green [77]. Outro ponto interessante é possibilidade de que alguma outra entropia, diferente da entropia de Tsallis, seja capaz de descrever também sistemas físicos de natureza não extensiva (veja por exemplo [78]). Tal fato torna interessante o estudo de outras formas entrópicas [79, 80, 81], em uma formulação termoestatística. Em um contexto mais aplicado temos os processos

de difusão anômalo que encontram dentro da mecânica estatística não extensiva uma base para uma formulação entrópica. Nossa discussão, neste sentido, será essencialmente baseada em uma equação de Fokker-Planck não linear que será analisada com derivadas de ordem inteira ou fracionárias [82, 83]. Dentro deste contexto, obteremos naturalmente uma generalização para a consagrada *Lei de Arrhenius*[84].

A tese encontra-se dividida em duas partes contendo um total de nove capítulos. Na primeira parte, faremos uma análise das questões de natureza mais formais da mecânica estatística não extensiva que vai desde o capítulo um até o capítulo cinco. A segunda parte da tese será dedicada às aplicações da mecânica estatística não extensiva indo desde o capítulo seis até o capítulo nove. No capítulo um, faremos uma revisão dos conceitos e das relações formais necessárias para a discussão presente nos capítulos seguintes. No capítulo dois, faremos um estudo da estabilidade termodinâmica da estatística não extensiva. O capítulo três será dedicado ao estudo das formulações alternativas à mecânica estatística não extensiva e a mecânica estatística usual empregando outras entropias e o princípio de máxima entropia. No capítulo quatro, discutiremos as aproximações baseadas em expansões em potências de $(1 - q)$ e fatorizações utilizando um exemplo solúvel. No capítulo cinco, faremos uma análise das mudanças obtidas para as funções de Green, e conseqüentemente seus resultados, ao empregarmos vínculos normalizados. No capítulo seis, analisaremos um sistema gravitacional em duas dimensões empregando a estatística não extensiva. No capítulo sete, desenvolveremos uma equação de transporte sem termos de colisões usando as técnicas de funções de Green desenvolvidas no capítulo cinco. No capítulo oito, obteremos uma nova classe de soluções para uma equação de Fokker-Planck

não linear fracionária. No capítulo nove, vamos propor uma generalização para a *Lei de Arrhenius*. As conclusões gerais sobre tais capítulos, bem como as perspectivas, são apresentadas a seguir.

Parte - I

Mecânica Estatística Não Extensiva - Formalismo

Capítulo 1

Introdução à mecânica estatística não extensiva de Tsallis

Neste capítulo abordaremos alguns aspectos da mecânica estatística não extensiva, com a finalidade de fornecer a condição necessária para o leitor familiarizar-se com o assunto e melhor compreender os capítulos que seguem. Assim, apresentaremos algumas relações formais que são baseadas na entropia de Tsallis; dentre elas podemos citar a matriz densidade de equilíbrio e função de partição generalizadas, a conexão entre função de partição generalizada e a energia livre generalizada, a representação da matriz densidade generalizada em termos de representações integrais, bem como da função de partição generalizada, dentre outras propriedades. Também discutiremos de modo abreviado as diferenças e implicações obtidas por considerarmos vínculos normalizados ou não normalizados.

1.1 Valores médios normalizados e representação integral

A entropia de Tsallis[19] e o valor médio q normalizado de um observável \hat{A} [75] são definidos como segue abaixo

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

e

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

onde $\hat{\rho}$ é a matriz densidade, q nos dá uma medida do grau de não extensividade, com $q \in \mathbb{R}$, e k é uma constante positiva que consideraremos de agora em diante tendo o valor da unidade. Note que estamos usando valores médios normalizados, em contraste com a formulação anterior da estatística não extensiva onde os valores médios não normalizados do tipo

$$\langle \hat{A} \rangle_{q,unn} = \text{Tr} \hat{\rho}^q \hat{A} \quad (1.3)$$

(o índice inferior *unn* se refere ao vínculo não normalizado) foram extensivamente empregados. Com esta mudança, o emprego de vínculos normalizados, algumas questões presentes na formulação anterior foram esclarecidas. Dentre elas temos que o valor médio de uma constante agora é a própria constante, as funções termodinâmicas não dependem mais da escolha do zero de energia, as divergências que apareciam quando considerávamos sistemas independentes foram removidas. Na próxima seção ilustraremos algumas con-

seqüências de usarmos vínculos normalizados ao invés dos não normalizados através de um exemplo.

Para obtermos a matriz densidade, por exemplo, para o ensemble canônico basta maximizarmos a entropia de Tsallis Eq.(1.1) juntamente com os respectivos vínculos,

$$U_q = \langle \hat{H} \rangle_q \quad , \quad \text{Tr} \hat{\rho} = 1 \quad (1.4)$$

com o uso dos multiplicadores de Lagrange. Neste caso temos a presença de dois multiplicadores de Lagrange, β e α ; β encontra-se associado com o valor médio q da Hamiltoniana e α é associado com o vínculo de normalização da matriz densidade. Então, após aplicarmos o processo de maximização de S_q , obtemos que a matriz densidade fica dada por,

$$\rho_q = \frac{1}{Z_q} \left[1 - (1-q) \tilde{\beta} (\hat{H} - U_q) \right]^{1/(1-q)} \quad , \quad (1.5)$$

onde $\tilde{\beta} \equiv \beta / \text{Tr} \rho_q^q$. Tomando a Eq.(1.5) em uma base na qual a Hamiltoniana é diagonal,

$$p_{q,n} = p_q(E_n) = \langle E_n | \hat{\rho} | E_n \rangle = \frac{1}{Z_q} \left[1 - (1-q) \tilde{\beta} (E_n - U_q) \right]^{1/(1-q)} \quad , \quad (1.6)$$

onde $\{p_{q,n}\}$ são as probabilidades, $\{E_n\}$ é o conjunto de autovalores da Hamiltoniana e

$$Z_q = \sum_n \left[1 - (1-q) \tilde{\beta} (E_n - U_q) \right]^{1/(1-q)} \quad (1.7)$$

é a função de partição generalizada. Nas Eqs.(1.5), (1.6) e (1.7) assumimos que $1 - (1-q) \tilde{\beta} (E_n - U_q) \geq 0$. Quando esta condição não é satisfeita, pode-se ver que aparece um “cut-off” ($p(E_n) = 0$) [85] mantendo a interpretação probabilística. Consequentemente, devemos ter sempre em mente, ao efetuarmos qualquer cálculo dentro deste contexto, que se a condição acima não for satisfeita, temos a presença de um “cut-off”. Por exemplo,

ao calcularmos uma função de partição clássica, os limites de integração no espaço de fase são dados pela condição $1 - (1 - q) \tilde{\beta} (\hat{H} - U_q) \geq 0$.

Utilizando as equações acima podemos expressar a energia interna como

$$U_q = \frac{\text{Tr} \left[1 - (1 - q) \tilde{\beta} (\hat{H} - U_q) \right]^{q/(1-q)} \hat{H}}{\text{Tr} \left[1 - (1 - q) \tilde{\beta} (\hat{H} - U_q) \right]^{q/(1-q)}}. \quad (1.8)$$

De (1.5) podemos obter uma importante relação

$$\text{Tr} \rho_q^q = Z_q^{1-q} \quad (1.9)$$

que será útil nos capítulos seguintes. Das Eqs. (1.6) e (1.7) podemos obter algumas relações, como por exemplo, a energia livre generalizada

$$F_q = U_q - TS_q = U_q - \frac{1}{\beta} \frac{Z_q^{1-q} - 1}{1 - q}, \quad (1.10)$$

onde $1/T = \partial S_q / \partial U_q$ e a energia interna em termos de F_q como segue

$$U_q = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F_q). \quad (1.11)$$

As relações termodinâmicas de Maxwell também podem ser generalizadas de maneira simples seguindo o desenvolvimento presente em [86].

Algumas vezes é útil expressarmos a matriz densidade através de representações integrais a fim de contornarmos certas dificuldades que aparecem durante o processo de cálculo. Temos então algumas possíveis representações integrais para o peso estatístico, quais sejam a de Hilhorst [87], a de Prato[88] e, por fim, a representação integral por nós proposta[89]. Todas estas representações integrais advém de representações da função Gamma. Assim, podemos unificar todas as três representações integrais acima em uma só, através da

seguinte representação para a função Gamma (Ref. [90], pág. 935 ou Ref.[91])

$$b^{1-z} \frac{i}{2\pi} \int_C du \exp(-u b) (-u)^{-z} = \frac{1}{\Gamma(z)} \quad (1.12)$$

com $b > 0$ e $\text{Re } z > 0$, e o contorno, C , começando em $+\infty$ indo em direção a origem, circunda a mesma no sentido anti-horário e retorna a $+\infty$. A partir desta, as três representações acima e outras podem ser obtidas através de deformações do contorno, C , conforme a necessidade. Empregando Eq.(1.12) com, $b = 1 - (1-q)\tilde{\beta} (\hat{H} - U_q)$, e $z = 1 + 1/(1-q)$, na Eq.(1.6), obtemos a expressão para a matriz densidade, ρ_q ,

$$\begin{aligned} \rho_q(\beta) &= \frac{1}{Z_q(\beta)} \int_C du K_q^{(1)}(u) \tilde{Z}_1(\tilde{\beta}(-u)(1-q)) \rho_1(-\tilde{\beta}u(1-q)) \\ K_q^{(1)} &= i \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{2\pi} (-u)^{\frac{2-q}{1-q}} e^{-u} \end{aligned} \quad (1.13)$$

onde $\tilde{Z}_1(\beta)$ é função de partição usual multiplicada pelo fator $e^{-\beta U_q}$, conseqüentemente, a função de partição generalizada fica,

$$Z_q(\beta) = \int_C du K_q^{(1)}(u) \tilde{Z}_1(-\tilde{\beta}u(1-q)) . \quad (1.14)$$

A extensão destes cálculos para o ensemble Grand Canônico é imediata (veja Ref. [55]), assim, não há necessidade de o fazermos neste momento, e todas as expressões obtidas aqui reduzem-se ao caso usual no limite $q \rightarrow 1$.

1.2 Valores médios normalizados versus valores médios não normalizados

Agora discutiremos um sistema solúvel de emaranhamento quântico empregando o princípio de entropia máxima, os valores médios normalizados e os valores médios não normalizados [47]. As implicações obtidas serão discutidas, mostrando a importância de usarmos valores médios normalizados. Maiores detalhes dos cálculos empregados aqui podem ser encontrados em [47].

(a) Emaranhamento quântico dos estados e máxima entropia de Tsallis - Valores médios normalizados:

Vamos considerar o par Einstein-Podolsky-Rosen de duas partículas com spins $1/2$, A e B , com os estados emaranhados de Bell do par dados por

$$|\Phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B \pm |\downarrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \right), \quad |\Psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \pm |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B \right) \quad (1.15)$$

Seguindo nossa análise, maximizamos a entropia de Tsallis, Eq.(1.1), sujeita aos vínculos normalizados do operador de Bell, \hat{B} ,

$$\hat{B} = 2\sqrt{2} \left(|\Phi^+\rangle\langle\Phi^+| - |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| \right), \quad 0 \leq \langle\hat{B}\rangle_q \equiv \frac{\text{Tr}\hat{\rho}^q \hat{B}}{\text{Tr}\hat{\rho}^q} = b_q \leq 2\sqrt{2}, \quad (1.16)$$

e de seu quadrado

$$\hat{B}^2 = 8 \left(|\Phi^+\rangle\langle\Phi^+| + |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| \right), \quad 0 \leq \langle\hat{B}^2\rangle_q \equiv \frac{\text{Tr}\hat{\rho}^q \hat{B}^2}{\text{Tr}\hat{\rho}^q} = \sigma_q^2 \leq 8. \quad (1.17)$$

Lembrando que a desigualdade de Schwarz, $\langle\hat{X}^2\rangle_q \langle\hat{Y}^2\rangle_q \geq \langle\hat{X}\hat{Y}\rangle_q^2$, com $\hat{X} = \hat{B}$ e $\hat{Y} = \hat{B}^2$

após algumas manipulações conduz à relação de incerteza,

$$\sigma_q^2 \geq 2\sqrt{2}b_q . \quad (1.18)$$

Note que as desigualdades presentes na Eq.(1.16) e Eq.(1.17) são independentes do modelo [47]. Ao aplicarmos o procedimento de entropia máxima obtemos a seguinte expressão para a matrix densidade:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_q(\hat{A}, \hat{B}) = & \frac{1}{Z_q^{(q-1)/q}} \left\{ \left(\frac{8 - \sigma_q^2}{16} \right)^{1/q} \left(|\Phi^-\rangle\langle\Phi^-| + |\Psi^+\rangle\langle\Psi^+| \right) \right. \\ & \left. + \left(\frac{\sigma_q^2 + 2\sqrt{2}b_q}{16} \right)^{1/q} |\Phi^+\rangle\langle\Phi^+| + \left(\frac{\sigma_q^2 - 2\sqrt{2}b_q}{16} \right)^{1/q} |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| \right\} \quad (1.19) \end{aligned}$$

onde

$$Z_q^{(q-1)/q} = \left\{ 2 \left(\frac{8 - \sigma_q^2}{16} \right)^{1/q} + \left(\frac{\sigma_q^2 + 2\sqrt{2}b_q}{16} \right)^{1/q} + \left(\frac{\sigma_q^2 - 2\sqrt{2}b_q}{16} \right)^{1/q} \right\} . \quad (1.20)$$

Para obtermos o emaranhamento, é suficiente requerer que o maior autovalor da matrix densidade obedeça à condição

$$\left[\frac{\sigma_q^2 + 2\sqrt{2}b_q}{16Z_q^{q-1}} \right]^{1/q} > \frac{1}{2} . \quad (1.21)$$

Agora, nós trabalharemos o mesmo problema, mas com valores médios não normalizados.

(b) Emaranhamento quântico e entropia de Tsallis - vínculos não normalizados:

Agora os vínculos os quais devemos aplicar o princípio de máxima entropia são dados por

$$0 \leq \langle \hat{B} \rangle_q^U \equiv \text{Tr} \hat{\rho}^q \hat{B} = b_q \leq 2\sqrt{2} , \quad 0 \leq \langle \hat{B}^2 \rangle_q^U \equiv \text{Tr} \hat{\rho}^q \hat{B}^2 = \sigma_q^2 \leq 8 \quad (1.22)$$

Observe que mantivemos os valores numéricos dos valores médios iguais aos do caso anterior (a). Também é interessante observar que as relações de incertezas, Eq.(1.17), trazem

em sua definição os valores médios devido a desigualdade de Schwarz que neste caso são não normalizados. Aplicando o procedimento de entropia máxima de maneira análoga ao caso anterior obtemos que

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{q,unn}(\hat{A}, \hat{B}) = & \frac{1}{Z_{q,unn}} \left\{ \left(|\Phi^-\rangle\langle\Phi^-| + |\Psi^+\rangle\langle\Psi^+| \right) + Z_{q,unn} \left(\frac{\sigma_q^2 + 2\sqrt{2}b_q}{16} \right)^{1/q} |\Phi^+\rangle\langle\Phi^+| \right. \\ & \left. + Z_{q,unn} \left(\frac{\sigma_q^2 - 2\sqrt{2}b_q}{16} \right)^{1/q} |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| \right\} \end{aligned} \quad (1.23)$$

onde

$$Z_{q,unn} = 2 \left\{ 1 - \left(\frac{\sigma_q^2 + 2\sqrt{2}b_q}{16} \right)^{1/q} - \left(\frac{\sigma_q^2 - 2\sqrt{2}b_q}{16} \right)^{1/q} \right\}^{-1}. \quad (1.24)$$

Note que a função de partição em Eq.(1.20) tem uma dependência diferente sobre os parâmetros do vínculo quando comparada com a Eq.(1.24). Assim a condição para obtermos o emaranhamento quântico dado pela Eq.(1.21) é a versão renormalizada dos resultados obtidos com o vínculo não normalizado como segue

$$\left[\frac{\sigma_q^2 + 2\sqrt{2}b_q}{16} \right]^{1/q} > \frac{1}{2}. \quad (1.25)$$

A Eq.(1.21) tem um fator extra $Z_q^{(1-a)/q}$ quando comparada com a Eq.(1.25). Com este simples resultado, nós vemos a importância dos vínculos normalizados simplificando e tornando claro a condição de emaranhamento quântico. No Cap. V discutiremos outro exemplo onde os vínculos normalizados são aplicados e novamente os resultados obtidos conduzem à uma melhora quando comparados com os resultados obtidos com a formulação antiga [47].

Capítulo 2

Estabilidade termodinâmica da mecânica estatística não extensiva

Neste capítulo estudaremos a estabilidade termodinâmica da mecânica estatística não extensiva, considerando um Hamiltoniano genérico H . Em particular, vamos analisar o sinal do calor específico de maneira a determinar quando ele é não negativo, pois através do comportamento do calor específico demonstraremos a estabilidade termodinâmica. Em particular, veremos no decorrer do capítulo que o calor específico, C_q/q , é não negativo para $q \notin [0, 1)$, no ensemble canônico. Como uma ilustração, analisaremos o comportamento de um sistema cujo espectro de energia é $E_n = \varepsilon |n|^r$ ($\varepsilon, r > 0$) no contexto clássico e quântico.

2.1 Estabilidade termodinâmica

A estabilidade termodinâmica desempenha um papel muito importante dentro da mecânica estatística[92, 93, 94]. No contexto da mecânica estatística não extensiva esta questão foi abordada por Ramshaw [95] e Tsallis [96], considerando a formulação baseada em vínculos não normalizados. Entretanto esta questão ainda não foi analisada de maneira genérica dentro da nova formulação da mecânica estatística não extensiva[75], apenas ilustrada com exemplos [97, 98]. Aqui pretendemos analisar esta questão considerando a seguinte definição para o calor específico:

$$C_q = -\beta^2 \frac{\partial U_q}{\partial \beta}, \quad (2.1)$$

onde $\beta \equiv 1/T$, com U_q dado por

$$U_q = \frac{\text{Tr} \left(1 - (1-q)\beta Z_q^{q-1} (\hat{H} - U_q) \right)^{q/(1-q)} \hat{H}}{\text{Tr} \left(1 - (1-q)\beta Z_q^{q-1} (\hat{H} - U_q) \right)^{q/(1-q)}}. \quad (2.2)$$

Então, relacionando Eq.(2.2) e Eq.(2.1) e usando $\text{Tr} \rho_q^q = Z^{1-q}$, obtemos, após alguns cálculos, que o calor específico é dado por

$$C_q = - \frac{q\beta^2 \text{Tr} \left(1 - (1-q)\beta Z_q^{q-1} (H - U_q) \right)^{\frac{2q-1}{1-q}} (H - U_q)^2}{Z_q^{2-q} - 2q(1-q)\beta^2 Z_q^{q-1} \text{Tr} \left(1 - (1-q)\beta Z_q^{q-1} (H - U_q) \right)^{\frac{2q-1}{1-q}} (H - U_q)^2}. \quad (2.3)$$

A equação acima pode ser escrita em uma forma mais simples se usarmos a definição de ρ_q , simplificando as discussões que seguem. Então, expressando Eq.(2.3) em termos de ρ_q , obtemos

$$\frac{C_q}{q} = \frac{\beta^2 Z_q^{3q-3} \text{Tr} \rho_q \left\{ \hat{\rho}_q^{q-1} (H - U_q) \right\}^2}{1 + 2q(q-1)\beta^2 Z_q^{4q-4} \text{Tr} \rho_q \left\{ \hat{\rho}_q^{q-1} (H - U_q) \right\}^2}, \quad (2.4)$$

onde $\text{Tr} \hat{\rho}_q \left\{ \hat{\rho}_q^{q-1} (H - U_q) \right\}^2 \geq 0$. Da equação (2.4) podemos facilmente verificar por simples inspeção que o calor específico (Eq.(2.4)) é não negativo se $q(q-1) \geq 0$, *i.e.*, $q \notin [0, 1]$. Tal fato é importante pois está diretamente associado com a estabilidade termodinâmica do sistema, *i.e.*,

$$\frac{\partial^2 F_q}{\partial T^2} = -\frac{C_q}{T} \leq 0 \text{ se } q \geq 1 \quad (\geq 0 \text{ se } q < 0) \quad ; \quad F_q = U_q - TS_q \quad . \quad (2.5)$$

Assim, uma vez que provamos que $C_q/q \geq 0$, a estabilidade termodinâmica está estabelecida para o ensemble canônico. Agora, usando o fato de que

$$C_q = -\frac{\partial \beta'}{\partial \beta} \frac{\partial U_q}{\partial \beta'} , \quad (2.6)$$

onde

$$\beta' = \frac{\beta}{\text{Tr} \rho^q + (1-q)\beta U_q} , \quad (2.7)$$

uma relação interessante pode ser obtida usando (2.2), (2.4) e (2.7),

$$\frac{\partial \beta'}{\partial \beta} = \frac{\left(1 + (1-q)\beta Z_q^{q-1} U_q\right)^{-2} Z_q^{q-1}}{1 + 2q(q-1)\beta^2 Z_q^{4q-4} \text{Tr} \hat{\rho}_q \left\{ \hat{\rho}_q^{q-1} (H - U_q) \right\}^2} \quad (2.8)$$

que é não negativa para $q \notin [0, 1]$. Esta relação, (2.8), pode ser usada como uma forma alternativa, ao desenvolvimento acima, de estabelecermos as condições para que $C_q/q \geq 0$. É importante ressaltar que estamos considerando a flutuação da energia com relação ao parâmetro de Lagrange β . Se estivéssemos considerando uma temperatura efetiva, $T_{eff} \equiv \text{Tr} \rho_q^q / \beta$, os cálculos seriam semelhantes e verificaríamos que o calor específico seria não negativo para a região $q(q-1) \geq 0$ [81]. Entretanto o seu comportamento muda consideravelmente quando comparado com o obtido a partir da Eq.(2.4).

2.2 Ilustração

Como ilustração dos resultados obtidos analisaremos funções termodinâmicas para uma partícula simples, ou quase partícula, cujo espectro de energia é $E_n = \varepsilon |n|^r$ ($\varepsilon, r > 0$), $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Vamos começar abordando o caso clássico com $q \leq 1$. O procedimento de cálculo empregado nesta seção pode ser encontrado de forma detalhada em [75]. Em particular, é fácil verificar que a função de partição fica dada por

$$Z_q = \int_{-n_{max}}^{n_{max}} dn \left[1 - (1-q)\beta Z_q^{q-1} (E_n - U_q) \right]^{1/(1-q)}, \quad (2.9)$$

onde n_{max} é obtido usando a condição de “cut-off” $(1 - (1-q)\beta Z_q^{q-1}(E_n - U_q)) \geq 0$. Após alguns cálculos, obtemos que

$$\begin{aligned} Z_q &= \int_{-n_{max}}^{n_{max}} dn \left[1 - (1-q)\beta Z_q^{q-1} (\varepsilon |n|^r - U_q) \right]^{1/(1-q)} \\ &= \frac{2}{r} \left(\frac{1}{(1-q)\beta Z_q^{q-1} \varepsilon} \right)^{1/r} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) \Gamma\left(\frac{1}{r}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + \frac{1}{r}\right)} \left(1 + (1-q)\beta Z_q^{q-1} U_q \right)^{\frac{1}{1-q} + \frac{1}{r}}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde a energia interna é dada por

$$U_q = \frac{1}{r\beta} Z_q^{1-q}. \quad (2.11)$$

Relacionando (2.10) e (2.11) temos que

$$Z_q = \left(\frac{1}{(1-q)\beta \varepsilon} \right)^{\frac{1/r}{1-(1-q)/r}} \left\{ \frac{2 \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) \Gamma\left(\frac{1}{r}\right)}{r \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + \frac{1}{r}\right)} \left(1 + (1-q)\frac{1}{r} \right)^{\frac{1}{1-q} + \frac{1}{r}} \right\}^{\frac{r}{r-(1-q)}}, \quad (2.12)$$

com a energia interna

$$U_q = \frac{1}{r\beta} \left\{ \frac{2}{r} \left(\frac{1}{(1-q)\beta \varepsilon} \right)^{1/r} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) \Gamma\left(\frac{1}{r}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + \frac{1}{r}\right)} \left(1 + (1-q)\frac{1}{r} \right)^{\frac{1}{1-q} + \frac{1}{r}} \right\}^{\frac{(1-q)r}{r-(1-q)}}. \quad (2.13)$$

Agora passaremos a considerar o caso $q \geq 1$. Seguindo o mesmo procedimento de cálculo que empregamos acima, obtemos a função de partição

$$Z_q = \left(\frac{1}{(q-1)\beta\varepsilon} \right)^{i-\frac{1/r}{(1-q)^{1/r}}} \left\{ \frac{2\Gamma\left(\frac{r-q+1}{r(q-1)}\right)\Gamma\left(\frac{1}{r}\right)}{r\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \left(1 + (1-q)\frac{1}{r}\right)^{\frac{1}{1-q} + \frac{1}{r}} \right\}^{\frac{r}{r-(1-q)}} \quad (2.14)$$

e a energia interna

$$U_q = \frac{1}{r\beta} \left\{ \frac{2}{r} \left(\frac{1}{(q-1)\beta\varepsilon} \right)^{1/r} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} - \frac{1}{r}\right)\Gamma\left(\frac{1}{r}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \left(1 + (1-q)\frac{1}{r}\right)^{\frac{1}{1-q} + \frac{1}{r}} \right\}^{\frac{(1-q)r}{r-(1-q)}} \quad (2.15)$$

para $1 \leq q < 1+r$.

O calor específico pode ser obtido diretamente de (2.13) e (2.15) empregando sua definição, Eq.(2.1), ou usando Eq.(2.4). Assim para o caso $q \leq 1$, C_q é dado por

$$C_q = \frac{1}{r-(1-q)} \left\{ \left(\frac{1}{(1-q)\beta\varepsilon} \right)^{1/r} \frac{2\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)\Gamma\left(\frac{1}{r}\right)}{r\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + \frac{1}{r}\right)} \left(1 + (1-q)\frac{1}{r}\right)^{\frac{1}{1-q} + \frac{1}{r}} \right\}^{\frac{(1-q)r}{r-(1-q)}} \quad (2.16)$$

e para $q \geq 1$ nós temos que

$$C_q = \frac{1}{r-(1-q)} \left\{ \left(\frac{1}{(q-1)\beta\varepsilon} \right)^{1/r} \frac{2\Gamma\left(\frac{r-q+1}{r(q-1)}\right)\Gamma\left(\frac{1}{r}\right)}{r\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \left(1 + (1-q)\frac{1}{r}\right)^{\frac{1}{1-q} + \frac{1}{r}} \right\}^{\frac{(1-q)r}{r-(1-q)}} \quad (2.17)$$

Em particular, ambas equações (2.16) e (2.17) foram essencialmente obtidas por *Tsallis et al.* em [75] para $r = 1$ e por Abe em [99] para $r = 2$. Por simplicidade, estudaremos apenas o caso quântico com $r = 2$, i.e., uma partícula livre sujeita a condição periódica de contorno $\Psi_n(x) = \Psi_n(x+L)$ ($\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$ e L é o comprimento da caixa). Neste caso a função de partição fica dada por

$$Z_q = \sum_{n=-n_{max}}^{n_{max}} \left[1 - (1-q)\beta Z_q^{q-1} (n^2 - U_q) \right]^{1/(1-q)}, \quad (2.18)$$

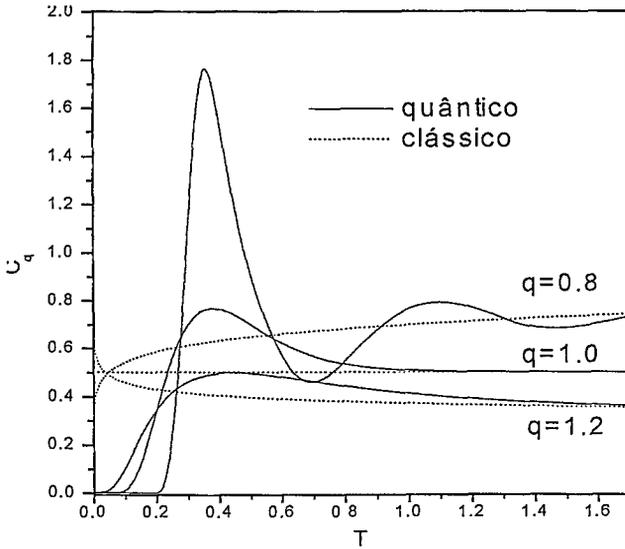


Figura 2.1: C_q vs. T para alguns valores típicos de q considerando $r = 2$ e $\varepsilon = 1$.

onde, sem perda de generalidade, estamos considerando $\varepsilon = 1$. Para a energia interna temos que

$$U_q = \frac{\sum_{n=-n_{max}}^{n_{max}} n^2 \left[1 - (1-q)\beta Z_q^{q-1} (n^2 - U_q) \right]^{q/(1-q)}}{\sum_{n=-n_{max}}^{n_{max}} \left[1 - (1-q)\beta Z_q^{q-1} (n^2 - U_q) \right]^{q/(1-q)}}. \quad (2.19)$$

As equações (2.18) e (2.19), juntas com a Eq.(1.9), podem ser resolvidas auto consistentemente ou através de um procedimento alternativo descrito em [75, 97] empregando mudanças de variáveis. Em ambos os casos temos a presença do “cut-off” para que a interpretação de probabilidade se mantenha. O calor específico também pode ser obtido com a Eq.(2.3) ou Eq.(2.4). Na Fig.(2.1) mostramos o comportamento do calor específico clássico e quântico para alguns valores típicos de q . A não extensividade induz oscilações

obtidos por Di Sisto *et al.* em [98]. Em particular, para este intervalo de valores de q , podemos mencionar importantes sistemas como os descritos pela interação elétron-fônon [40], dissipativos com baixa dimensão [42] para $q > 1$ e sistemas auto-gravitantes [100] para $q < 0$. A estabilidade para $0 < q < 1$ tem sido verificada em várias situações [75, 97, 98], entretanto sua discussão é mais complexa. Também ilustramos os resultados obtidos analisando as funções termodinâmicas de um espectro de energia dado por $E_n = \varepsilon |n|^r$ tanto no contexto clássico quanto para o caso quântico com $r = 2$. Os resultados obtidos para o exemplo contém os resultados obtidos por Tsallis *et al.* [75] para $r = 1$ e os resultados obtidos por Abe [99] para $r = 2$.

Capítulo 3

Uma termoestatística baseada na entropia de Renyi

Neste capítulo exploraremos alguns aspectos formais obtidos ao considerarmos outras formas entrópicas, diferentes da proposta por Tsallis, na formulação de uma termoestatística. Basicamente focaremos nossa atenção na entropia de Renyi, mas sempre que possível estenderemos nossas análises para entropias que sejam do tipo $S = S(\text{Tr}\rho^\alpha)$. Alguns exemplos também serão trabalhados neste capítulo para ilustrar os resultados obtidos.

3.1 Entropia de Renyi

As entropias têm desempenhado um papel muito importante dentro da mecânica estatística [101] e da teoria de informação [102]. Em particular, na última década muita

atenção tem sido dedicada para este tema, resultando em uma formulação não extensiva para a mecânica estatística [19, 75] e conseqüentemente influenciando a teoria de informação. Uma das características presentes na mecânica estatística não extensiva é o fato de que sua distribuição de probabilidade é do tipo lei de potência, ao invés de exponencial, e a outra é sua pseudo aditividade dada por

$$S_q^{AUB} = S_q^A + S_q^B + (1 - q)S_q^A S_q^B, \quad (3.1)$$

assumindo que $\rho^{AUB} = \rho^A \otimes \rho^B$. Entretanto, como a literatura mostra, podemos ter outras entropias [103, 104, 105, 106, 107]. Uma destas é a entropia de Renyi [103], dada por

$$S_q^R = \frac{1}{1 - q} \ln(\text{Tr} \rho^q), \quad (q \in \mathbb{R}) \quad (3.2)$$

que é freqüentemente aplicada na discussão de sistemas fractais e multifractais [108] e no limite de $q \rightarrow 1$ recupera a entropia de Boltzmann-Gibbs. Observe que a Eq.(3.2) pode ser escrita como uma função da entropia de Tsallis, i.e.,

$$S_q^R = \frac{1}{1 - q} \ln(1 + (1 - q)S_q^T) \quad (3.3)$$

e ambas são tipo $S = S(\text{Tr} \rho^q)$.

3.2 Entropia de Renyi e a Termoestatística

A entropia de Renyi (3.2) tem algumas propriedades que são iguais ou semelhantes a entropia Boltzmann-Gibbs. Por exemplo, ela é aditiva para dois (A, B) ou mais (A, B, \dots, L) conjuntos de probabilidades independentes ($\rho_q^{AUB\dots UL} = \rho_q^A \otimes \rho_q^B \otimes \dots \otimes \rho_q^L$) e sua concavidade é bem definida para $q < 1$. Além destas propriedades, ela satisfaz três dos quatro

axiomas de Khinchin[109] descritos por Curado em [110] e, em particular, se relaxarmos um pouco o quarto axioma, e assumirmos somente uma condição um pouco menos restritiva na qual as entropias sejam aditivas quando os subsistemas não são correlacionados, neste caso então a entropia de Renyi também satisfaz todos os axiomas.

A distribuição de probabilidades para o ensemble canônico devido a entropia de Renyi e a Eq.(1.4), pode ser obtida usando o princípio de entropia máxima de maneira análoga ao procedimento empregado em [75]. Então, após um cálculo simples obtemos que

$$\begin{aligned}\rho_q^R &= \frac{1}{Z_q^R} \left(1 - (1 - q)\beta (H - U_q^R)\right)^{1/(1-q)} \\ Z_q^R &= \text{Tr} \left(1 - (1 - q)\beta (H - U_q^R)\right)^{1/(1-q)},\end{aligned}\quad (3.4)$$

onde ρ_q^R é a matriz densidade equilíbrio e Z_q^R é a função de partição (o índice superior R se refere a entropia de Renyi). Observe que a Eq.(3.4) é formalmente idêntica a distribuição de Tsallis [75], pois S_q^R é uma função monótona crescente de S_q^T . É interessante ressaltar também, que se tivéssemos usado $S = S(\text{Tr}\rho^q)$ obteríamos uma distribuição de probabilidades semelhante com a diferença que no lugar de β teríamos $\beta\mathcal{F}(\text{Tr}\rho^q)$ [81]. De maneira análoga ao formalismo de Tsallis, devemos empregar um “cut-off”, $\rho(H) = 0$, se $1 - (1 - q)\beta(H - U_q) < 0$ para termos uma interpretação de probabilidade para ρ_q^R consistente, i.e., a mesma deve ter autovalores não negativos. Eq.(3.4), junto com Eq.(3.2) e Eq.(1.4), tem algumas propriedades interessantes. Uma delas diz respeito ao fato de que Eq.(3.4) é invariante através de uma translação uniforme do espectro de energia $\{\epsilon_i\}$, i.e., as propriedades termodinâmicas do sistema não dependem da escolha do zero de energia. O parâmetro de Lagrange β parece desempenhar de uma forma natural o papel do usual

presente na estatística de Boltzmann-Gibbs ($\rho \propto e^{-\beta H}$). Seguindo [86], podemos mostrar que

$$\frac{\partial S_q^R}{\partial U_q^R} = \frac{1}{T} \quad (T \equiv 1/\beta) \quad (3.5)$$

e

$$F_q^R \equiv U_q^R - TS_q^R = U_q - \frac{1}{\beta} \ln Z_q^R, \quad (3.6)$$

onde $S_q^R = \ln Z_q$ e F_q é a energia livre obtida com a entropia de Renyi. Podemos também verificar que a energia interna e a energia livre podem ser relacionadas da seguinte forma

$$U_q^R = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F_q^R), \quad (3.7)$$

usando a relação

$$\beta \frac{\partial U_q^R}{\partial \beta} = \frac{\partial \ln Z_q^R}{\partial \beta}. \quad (3.8)$$

O conjunto de equações (1.9), (3.5) e (3.7) podem ser verificadas também supondo que $S = S(\text{Tr}\rho^q)$. Note que Z_q^R depende de $\{\varepsilon_i\}$ e U_q^R , assim de modo a considerar o zero como o menor valor da energia vamos definir Z_q^R como

$$\ln \tilde{Z}_q^R = \ln Z_q^R - \beta U_q^R \quad (3.9)$$

Assim, Eq.(3.6) e Eq.(3.7) podem ser escritas em formas familiares como segue

$$F_q^R = -\frac{1}{\beta} \ln \tilde{Z}_q^R \quad (3.10)$$

$$U_q^R = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \tilde{Z}_q^R. \quad (3.11)$$

Finalmente podemos verificar que

$$C_q^R \equiv T \frac{\partial S_q^R}{\partial T} = \frac{\partial U_q^R}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 F_q^R}{\partial T^2} . \quad (3.12)$$

Em outras palavras, a entropia de Renyi (3.2) com vínculos normalizados (1.4) satisfaz uma estrutura de Legendre. As médias macroscópicas obtidas com o uso do ensemble canônico tendo como base a entropia de Renyi dão os mesmos resultados que as médias usuais (BG) para alguns tipos de Hamiltonianas (veja a próxima seção). Outro fato é a presença das distribuições “escorts” dada por

$$P_q \equiv \frac{(\rho_q^R)^q}{\text{Tr}(\rho_q^R)^q} , \quad (3.13)$$

presente na forma da energia interna,

$$U_q^R = \text{Tr} \frac{(\rho_q^R)^q H}{\text{Tr}(\rho_q^R)^q} = \text{Tr} P_q H . \quad (3.14)$$

É importante mencionar que existe uma relação dual entre P_q e ρ_q [108], i.e.,

$$\rho_q^R = \frac{P_q^{1/q}}{\text{Tr} P_q^{1/q}} . \quad (3.15)$$

Em conexão com esta relação dual, a entropia de Renyi, expressa em termos de P_q , fica dada por

$$\begin{aligned} S_q^R(\{\rho_i\}) &= \bar{S}_q^R(\{P_i\}) \\ &= \frac{1}{1-q} \left\{ \ln(\text{Tr} P_q) - q \ln(\text{Tr} P_q^{1/q}) \right\} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Em particular, em (3.4) se considerarmos $\beta = \beta^R \rightarrow \beta^T / \text{Tr} \rho_q^q$ (β^R e β^T são os parâmetros de Lagrange associados com a entropia de Renyi e a entropia de Tsallis) nós obteremos a distribuição de Tsallis [75].

3.3 Aplicações

Nesta seção, aplicaremos os desenvolvimentos feitos acima em algumas situações para ilustrar as modificações obtidas ao usarmos a entropia de Renyi. Os resultados obtidos nesta seção são comparados com os resultados usuais (BG) e com os resultados obtidos na mecânica estatística não extensiva. Nas discussões que faremos vamos empregar a Hamiltoniana

$$H = \sum_{i=1}^N H_i = \sum_{i=1}^N \frac{\tilde{p}_i^2}{2m} + \sum_{i \neq j} V(|\tilde{r}_{i,j}|) + \sum_i V(|\tilde{r}_i|) \quad , \quad (3.17)$$

onde $V(|\tilde{r}_{i,j}|)$ e $V(|\tilde{r}_i|)$ representam a energia potencial. Nos desenvolvimentos que seguirem basicamente vamos considerar apenas a energia potencial que se refere a interação de um corpo, interação entre dois corpos será considerada no capítulo seis. Então começaremos por considerar o gás ideal em uma dimensão. Agora, usando a Eq.(3.4) com $V(|\tilde{r}_{i,j}|) = 0$, $V(|\tilde{r}_i|) = 0$, $q < 1$ e empregando a condição de “cut-off” obtemos que a função de partição fica dada por

$$\begin{aligned} Z_q^R &= \frac{1}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \frac{dx_i dp_i}{2\pi\hbar} \left[1 - (1-q)\beta (H - U_q^R) \right]^{1/(1-q)} \\ &= \frac{1}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \frac{dx_i dp_i}{2\pi\hbar} \left[1 - (1-q)\beta \left(\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} - U_q^R \right) \right]^{1/(1-q)} \\ &= \frac{V^N}{N! h^N} \left(\frac{2m\pi}{(1-q)\beta} \right)^{N/2} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + \frac{N}{2}\right)} \left(1 + (1-q)\beta U_q^R \right)^{1/(1-q) + N/2} \end{aligned} \quad (3.18)$$

a energia interna

$$\begin{aligned} U_q^R &= \frac{\text{Tr}(\rho_q^R)^q H}{\text{Tr}(\rho_q^R)^q} \\ &= \frac{1}{Z_q^R N!} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \frac{dx_i dp_i}{2\pi\hbar} \left\{ \left[1 - (1-q)\beta \left(\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} - U_q^R \right) \right]^{q/(1-q)} \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{N}{2\beta} \frac{V^N}{Z_q^R N! h^N} \left(\frac{2m\pi}{(1-q)\beta} \right)^{N/2} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + \frac{N}{2}\right)} \left(1 + (1-q)\beta U_q^R\right)^{1/(1-q) + N/2} \\
&= \frac{N}{2\beta} . \tag{3.19}
\end{aligned}$$

Este resultado é muito interessante, pois ele é igual ao usual (BG). Conseqüentemente não tem a presença do parâmetro q em contraste com o resultado obtido em [111] com o emprego da estatística não extensiva. Se considerarmos, ainda neste ensemble, as partículas sujeitas a energia potencial $V(|r_i|) = \delta|x_i|^\alpha$ ($\alpha \geq 1, \delta > 0$) com $q < 1$ então, após alguns cálculos verificamos que

$$\begin{aligned}
Z_q^R &= \frac{1}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \frac{dx_i dp_i}{2\pi\hbar} \left[1 - (1-q)\beta (H - U_q^R) \right]^{1/(1-q)} \\
&= \frac{1}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \frac{dx_i dp_i}{2\pi\hbar} \left[1 - (1-q)\beta \left(\sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \delta|x_i|^\alpha \right) - U_q^R \right) \right]^{1/(1-q)} \\
&= \left[\left(\frac{2m\pi}{(1-q)\beta} \right)^{1/2} \left(\frac{2\Gamma\left(\frac{1}{\alpha} + 1\right)}{((1-q)\beta\delta)^{1/\alpha}} \right) \right]^N \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) \left(1 + (1-q)\beta U_q^R\right)^{\frac{1}{1-q} + \frac{N}{2} + \frac{N}{\alpha}}}{N! h^N \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + \frac{N}{2} + \frac{N}{\alpha}\right)} \tag{3.20}
\end{aligned}$$

e a correspondente energia interna é dada por

$$\begin{aligned}
U_q^R &= \frac{\text{Tr}(\rho_q^R)^q H}{\text{Tr}(\rho_q^R)^q} \\
&= \frac{1}{Z_q^R N!} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \frac{dx_i dp_i}{2\pi\hbar} \left\{ \left[1 - (1-q)\beta \left(\sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \delta|x_i|^\alpha \right) - U_q^R \right) \right]^{q/(1-q)} \right. \\
&\quad \left. \times \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \delta|x_i|^\alpha \right) \right\} \\
&= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha} \right) \frac{N}{\beta} \left[\left(\frac{2m\pi}{(1-q)\beta} \right)^{1/2} \left(\frac{2\Gamma\left(\frac{1}{\alpha} + 1\right)}{((1-q)\beta\delta)^{1/\alpha}} \right) \right]^N \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) \left(1 + (1-q)\beta U_q^R\right)^{\frac{1}{1-q} + \frac{N}{2} + \frac{N}{\alpha}}}{N! Z_q^R h^N \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + \frac{N}{2} + \frac{N}{\alpha}\right)} \\
&= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha} \right) \frac{N}{\beta} . \tag{3.21}
\end{aligned}$$

Note que novamente não temos a presença do parâmetro q no resultado da energia interna e o resultado obtido é igual ao usual. As correlações entre as partículas, $\mathcal{P}_q(H_i, H_j)$, usando

a definição empregada em [112], sujeitas a Eq.(3.17) com $V(|\vec{r}_{i,j}|) = \delta|x_i|^\alpha$ ($\alpha \geq 1, \delta > 0$) e $q < 1$, para $N \gg 1$ são dadas por,

$$\begin{aligned}
(\Delta_q H_i)^2 &= \langle H_i^2 \rangle_q - \langle H_i \rangle_q^2 \\
&= \frac{1}{\beta^2} \left\{ \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha} \right) + \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha} \right)^2 \right] \frac{1 + (1-q)N \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha} \right)}{2-q + (1-q)N \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha} \right)} - \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha} \right)^2 \right\} \\
C_q(H_i, H_j) &= \langle H_i H_j \rangle_q - \langle H_i \rangle_q \langle H_j \rangle_q = \frac{q-1}{\beta^2} \left\{ \frac{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha} \right)^2}{2-q + (1-q) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha} \right) N} \right\} \\
\mathcal{P}_q(H_i, H_j) &= \frac{C(H_i, H_j)}{((\Delta H_i)^2 (\Delta H_j)^2)^{1/2}} \sim -\frac{1}{N} \tag{3.22}
\end{aligned}$$

e no limite termodinâmico ($N, V \rightarrow \infty$), $\mathcal{P}_q(H_i, H_j)$ é nulo.

Como verificamos até agora os resultados obtidos para a energia interna até agora são os mesmos que os resultados usuais. Este fato também pode ser verificado quando a Hamiltoniana tem a seguinte propriedade: $\lambda H = \sum H_i(\lambda^\alpha p_i, \lambda^\gamma x_i)$ (λ é um parâmetro e $\alpha, \gamma \in \mathbf{R}$; estamos assumindo que p_i, x_i pertence ao intervalo $(-\infty, \infty)$). Usando a representação integral [38] para a função de partição e para a energia interna nós obtemos, para $q < 1$, que

$$\begin{aligned}
Z_q^R &= \frac{\Gamma \left(\frac{2-q}{1-q} \right)}{2\pi N!} \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{e^{1+iu}}{(1+iu)^{(2-q)/(1-q)}} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \frac{dx_i dp_i}{2\pi \hbar} e^{-\beta(1-q)(1+iu)(H-U_q^R)} \\
&= \frac{\Gamma \left(\frac{2-q}{1-q} \right) (1 + (1-q)\beta U_q^R)^{1/(1-q)+N(\alpha+\gamma)}}{(1-q)^{N(\alpha+\gamma)} \Gamma \left(\frac{2-q}{1-q} + N(\alpha+\gamma) \right)} Z_1(\beta) \tag{3.23}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_q^R &= \frac{\Gamma \left(\frac{1}{1-q} \right)}{2\pi N! Z_q(\beta)} \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{e^{1+iu}}{(1+iu)^{1/(1-q)}} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \frac{dx_i dp_i}{2\pi \hbar} e^{-\beta(1-q)(1+iu)(H-U_q^R)} \\
&= \frac{\Gamma \left(\frac{2-q}{1-q} \right) (1 + (1-q)\beta U_q^R)^{1/(1-q)+N(\alpha+\gamma)}}{(1-q)^{N(\alpha+\gamma)} \Gamma \left(\frac{2-q}{1-q} + N(\alpha+\gamma) \right) Z_q(\beta)} Z_1(\beta) U_1(\beta). \tag{3.24}
\end{aligned}$$

Relacionando Eq.(3.23) e Eq.(3.24) obtemos

$$U_q^R = U_1(\beta), \quad (3.25)$$

onde $U_1(\beta)$ é a energia interna usual. O resultado acima ainda pode ser estendido para uma Hamiltoniana mais geral com a seguinte característica

$$\lambda H(p_1, p_2, \dots, p_N, q_1, q_2, \dots, q_N) = H(\lambda^{\alpha_1} p_1, \lambda^{\alpha_2} p_2, \dots, \lambda^{\alpha_N} p_N, \lambda^{\gamma_1} x_1, \lambda^{\gamma_2} x_2, \dots, \lambda^{\gamma_N} x_N) \quad (3.26)$$

com p_i e x_i pertencendo ao intervalo $(-\infty, \infty)$. Neste contexto é simples verificar que o resultado obtido em Eq.(3.22) para $\mathcal{P}_q(H_i, H_j)$ tem o mesmo comportamento com N , quando consideramos a Hamiltoniana (3.26). Assim, o resultado obtido para $\mathcal{P}_q(H_i, H_j)$ com Eq.(3.17), considerando $V(|\vec{r}_{i,j}|) = \delta|x_i|^\alpha$ (ou a Hamiltoniana acima Eq.(3.26)) *estende* o resultado obtido por Abe[112] para o gás ideal ao considerarmos a seguinte mudança de variável, $\beta^R \rightarrow \beta^T / \text{Tr} \rho_q^\alpha$. Outra propriedade é

$$\begin{aligned} \langle \beta^{(\text{microcanonico})} \rangle_q &= \frac{\int dE \Omega(E) \left(1 - (1-q)\beta \left(E - U_q^R\right)\right)^{q/(1-q)} \frac{\partial}{\partial E} \ln \Omega(E)}{\int dE \Omega(E) \left(1 - (1-q)\beta \left(E - U_q^R\right)\right)^{q/(1-q)}} \\ &= \frac{\partial S_q^R}{\partial U_q^R} = \beta^{(\text{canonico})} \end{aligned} \quad (3.27)$$

($\Omega(E)$ é a densidade de estados) conduzindo a uma conexão entre o parâmetro de Lagrange e a temperatura junto com a Eq.(3.19) e Eq.(3.25). As Eq.(3.19), Eq.(3.21) and Eq.(3.25) podem ser verificadas para $q > 1$ seguindo o mesmo procedimento de cálculo.

3.4 Conclusões

Nesta capítulo exploramos vários aspectos formais de uma termoestatística formulada em termos da entropia de Renyi com vínculos normalizados (1.4). Dentro desse contexto,

quando possível, estendemos nossa análise para formas entrópicas tipo $S = S(\text{Tr}\rho^q)$. Obtivemos uma distribuição do tipo lei de potência que é funcionalmente idêntica à obtida em [75] com a entropia de Tsallis. Também mostramos que os resultados das médias macroscópicas, no ensemble canônico clássico, são iguais aos resultados usuais para certos tipos de Hamiltonianas (3.26). O parâmetro de Lagrange parece naturalmente ocupar o mesmo papel que o usual nos casos analisados acima. Analisamos também algumas relações formais como, por exemplo, a energia livre e o calor específico, sendo importante notar que a energia livre é uma função *logarítmica* da função de partição. Logo, a forma funcional apresentada pela energia livre *não* é a forma funcional inversa da distribuição de probabilidades, em contraste à mecânica estatística não extensiva. Com efeito, no formalismo não extensivo usual, a relação entre a energia livre e a função de partição é o q -logaritmo, função inversa da q -exponencial.

De uma maneira geral, os resultados obtidos aqui podem ser relacionados com os presentes na mecânica estatística não extensiva através da mudança de variável $\beta^R \rightarrow \beta^T/\text{Tr}\rho^q$. Como último comentário deste capítulo, enfatizamos que a entropia de Tsallis tem se mostrado a opção mais adequada para descrever os sistemas não extensivos (ver também [78]).

Capítulo 4

Validade das aproximações baseadas em expansões em potências de $(1 - q)$ e fatorizações

Neste capítulo discutiremos a validade das aproximações baseadas em expansões em potências de $(1 - q)$ e fatorizações. A discussão será feita levando em conta os vínculos normalizados e não normalizados e considerando a Hamiltoniana

$$H = \sum_{n=1}^N \left(\frac{p_n^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_n^2 x_n^2 \right) . \quad (4.1)$$

4.1 Cálculos exatos versus aproximados - vínculos não normalizados

Nesta seção, empregaremos apenas os vínculos não normalizados nas nossas discussões sobre as aproximações. Os vínculos normalizados serão considerados na próxima seção.

A distribuição de probabilidades, na mecânica estatística não extensiva com vínculos não normalizados, no ensemble canônico é dada por

$$\rho_{q,unn} = \frac{1}{Z_q} [1 - (1 - q)\beta H]^{1/(1-q)} , \quad (4.2)$$

onde

$$Z_{q,unn} = \int \prod_{n=1}^N dp_n dx_n [1 - (1 - q)\beta H]^{1/(1-q)} \quad (4.3)$$

é a função de partição e $\beta \equiv 1/T$. Eq.(4.2) é obtida através da maximização da entropia de Tsallis sujeita ao vínculo não normalizado

$$U_{q,unn} = \int \prod_{n=1}^N dp_n dx_n \rho_{q,unn}^q H \quad (4.4)$$

e a condição de normalização

$$\int \prod_{n=1}^N dp_n dx_n \rho_{q,unn} = 1 , \quad (4.5)$$

com $U_{q,unn}$ sendo a energia interna. Neste contexto, como mencionamos no primeiro capítulo, estamos empregando

$$A_{q,unn} = \langle A \rangle_{q,unn} = \int \prod_{n=1}^N dp_n dx_n \rho_{q,unn}^q A \quad (4.6)$$

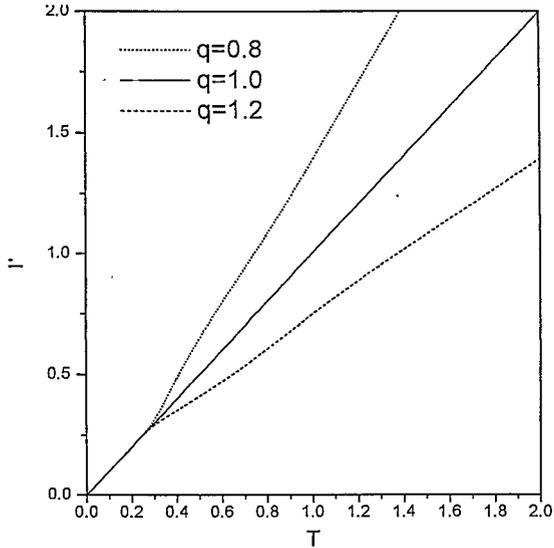


Figura 2.2: T' vs. T para alguns valores típicos de q considerando $r = 2$ e $\varepsilon = 1$.

em C_q para o caso $0 < q < 1$. Em contraste com $q > 1$ onde não se verifica nenhuma oscilação para o calor específico. Na Fig.(2.2) graficamos T' versus T para diferentes valores de q .

2.3 Conclusões

Neste capítulo provamos de maneira genérica a estabilidade termodinâmica para a mecânica estatística não extensiva quando $q \notin [0, 1)$. Tal resultado é consistente com os resultados

como o valor médio generalizado de uma função clássica $A(p, x)$ e funções termodinâmicas tais como a energia livre e calor específico definidos como $F_{q,unn} = (Z_{q,unn}^{q-1} - 1)/[(1-q)\beta]$, e $C_{q,unn} = \partial U_{q,unn}/\partial T$ [20]. A função de partição (4.3) para N osciladores harmônicos é dada por

$$Z_{q,unn} = \int \prod_{n=1}^N dp_n dx_n \left[1 - (1-q)\beta \left(\sum_{k=1}^N \frac{p_k^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_n^2 x_k^2 \right) \right]^{1/(1-q)} \quad (4.7)$$

Para calcular esta integral, nós introduzimos as variáveis: $y_n = [(1-q)m\omega^2\beta/2]^{1/2}x_n$ e $y_{N+n} = [(1-q)\beta/(2m)]^{1/2}p_n$, onde $n = 1, 2, 3, \dots, N$. Em termos destas variáveis, $Z_{q,unn}$ é

$$Z_{q,unn} = \left\{ \prod_{n=1}^N \left[\frac{2}{(1-q)\omega_n\beta} \right] \right\} \int \prod_{n=1}^{2N} dy_n \left(1 - \sigma \sum_{k=1}^{2N} y_k^2 \right)^{1/(1-q)}, \quad (4.8)$$

onde $\sigma = \text{sign}(1-q)$. Para N suficientemente grande esta integral diverge quando $\sigma = -1$, *i.e.*, quando $q \geq 1 + 1/N$. Este fato indica que a mecânica estatística não extensiva com $q > 1$ não pode ser empregada para um número muito grande de subsistemas. Assim, restringiremos nossa discussão para o caso em que $q \leq 1$. Usando coordenadas esféricas com $u = (\sum_{n=1}^{2N} y_n^2)^{1/2}$ e fazendo a integral sobre todas as variáveis angulares, obtemos que

$$Z_{q,unn} = \left\{ \prod_{n=1}^N \left[\frac{2}{(1-q)\omega_n\beta} \right] \right\} \frac{\Omega_{2N}}{2} \int_0^1 du u^{N-1} (1-u)^{1/(1-q)}. \quad (4.9)$$

Substituindo a expressão para o ângulo sólido $\Omega_{2N} = 2\pi^N/\Gamma(N)$, e empregando a representação integral da função beta de Euler, verificamos que

$$Z_{q,unn} = \left\{ \prod_{n=1}^N \left[\frac{2\pi}{(1-q)\omega_n\beta} \right] \right\} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1 + N\right)} = \left[\left(\frac{2-q}{1-q} \right)_N \right]^{-1} \prod_{n=1}^N \left[\frac{2\pi}{(1-q)\omega_n\beta} \right], \quad (4.10)$$

onde $(a)_n \equiv \prod_{k=0}^{n-1} (a+k)$ é o símbolo de Pochhammer. Nas análises que seguem, vamos considerar $\omega_n = \omega$.

Para investigar as aproximações baseadas em expansões em potências de $(1-q)$ e fatorizações devemos empregar funções termodinâmicas, entretanto restringiremos nossa discussão para a energia interna.

A energia interna pode ser obtida através da relação

$$U_{q,unn} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \frac{Z_{q,unn}^{1-q} - 1}{1-q}, \quad (4.11)$$

que pode ser facilmente verificada através da identidade $U_{q,unn} = F_{q,unn} + \beta \partial F_{q,unn} / \partial \beta$.

Então, após alguns cálculos temos que

$$U_{q,unn} = \frac{N}{\beta} Z_{q,unn}^{1-q} = \frac{N}{\beta} \left\{ \left[\frac{2\pi}{(1-q)\omega\beta} \right]^N \left[\left(\frac{2-q}{1-q} \right)_N \right]^{-1} \right\}^{1-q}. \quad (4.12)$$

Para analisar a aproximação baseada em expansões em potências de $(1-q)$, vamos considerar a expansão da Eq.(4.12) em série de potências de $(1-q)$,

$$U_{q,unn} = \frac{N}{\beta} \left[\frac{2\pi}{\omega\beta} \right]^{(1-q)N} \left[1 - \frac{1}{2}(1-q)^2 N(N+1) + \frac{1}{12}(1-q)^3 N(N+1)(2N+1) + \dots \right]. \quad (4.13)$$

Note que o n -ésimo termo desta série contem fatores do tipo $[(1-q)N]^n$, logo a convergência desta serie é boa se $(1-q)N \ll 1$. Em outras palavras, a expansão acima mostra-se razoável para β, m e ω arbitrários somente se $(1-q)N \ll 1$.

Agora vamos analisar a possibilidade de fatorizarmos a função de partição de um sistema composto de N subsistemas independentes. Em outras palavras, queremos entender

quando a função de partição pode ser aproximada por

$$Z_{q,unn}^{factor} = \prod_{i=1}^N Z_{q,unn}^{(i)}, \quad (4.14)$$

onde o índice superior *factor* se refere as quantidades obtidas com a fatorização e $Z_{q,unn}^{(i)}$ representa a função de partição do subsistema i , e N é o número de subsistemas. No presente estudo, cada $Z_{q,unn}^{(i)}$ é a função de partição de um oscilador harmônico. Assim, a função de partição $Z_{q,unn}^{factor}$ pode ser obtida de (4.10) usando $N = 1$, *i.e.*,

$$Z_q^{factor} = \prod_{i=1}^N \frac{2\pi}{(2-q)\omega\beta} = \left[\frac{2\pi}{(2-q)\omega\beta} \right]^N, \quad (4.15)$$

onde empregamos $Z^{(i)} = 2\pi/((2-q)\omega\beta)$ e $\omega_n = \omega$. A energia interna neste caso é dada por

$$U_{q,unn}^{factor} = \frac{N}{\beta} \left[\frac{2\pi}{(2-q)\omega\beta} \right]^{(1-q)N} \quad (4.16)$$

Após fazermos uma expansão em potências de $(1-q)$ a Eq.(4.15) pode ser escrita como,

$$U_{q,unn}^{factor} = \frac{N}{\beta} \left[\frac{2\pi}{(2-q)\omega\beta} \right]^{(1-q)N} = \frac{N}{\beta} \left[\frac{2\pi}{\omega\beta} \right]^{(1-q)N} \left[1 - (1-q)^2 N - \frac{1}{2}(1-q)^3 N + \dots \right] \quad (4.17)$$

A comparação entre (4.13) e (4.17) mostra que as dependências em $(1-q)$ e N na energia interna $U_{q,unn}$ e $U_{q,unn}^{factor}$ são diferentes. Tais diferenças também estão presentes nas demais funções termodinâmicas. Sendo importante ressaltar que a dependência em N nas equações (4.12) e (4.16) diferem drasticamente para N muito grande (veja Fig.(1)). Por outro lado, como podemos ver na Fig.(1) as Eq.(4.12) e Eq.(4.13) são muito próximas para valores de q e N que verificam condição $(1-q)N \ll 1$. Quando tal condição não

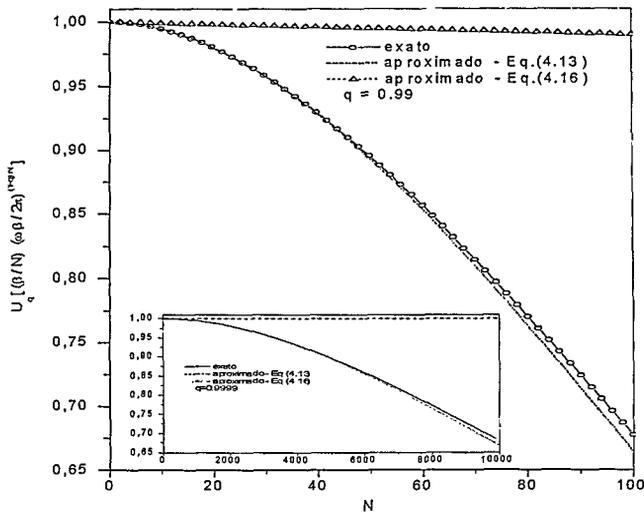


Figura 4.1: Nesta figura ilustramos o comportamento das Eqs. (4.12), (4.13) e (4.16) versus N para $q = 0.99$ e $q = 0.9999$

é verificada, estas equações diferem drasticamente do resultado exato, Eq. (4.12) (veja Fig.(4.1)). Além disto, o erro devido a tais aproximações é mais pronunciado no caso em que há fatorização. Assim, $U_{q,unn}^{factor}$ não é uma boa aproximação quando consideramos um valor de q arbitrário e N muito grande.

4.2 Cálculos exatos versus aproximados - vínculos normalizados

Nesta seção, analisaremos as diferenças entre as aproximações, baseadas em expansões em potências de $(1 - q)$ e fatorizações, e os cálculos exatos utilizando a versão normalizada da estatística não extensiva. A distribuição canônica de probabilidades $\rho_{q,nor}$ (o índice

inferior *nor* se refere ao uso de vínculos normalizados), que emerge por considerarmos o princípio de entropia máxima e os vínculos normalizados (1.4), é dada por

$$\rho_{q,nor} = \frac{1}{Z_{q,nor}} \left[1 - (1-q) \frac{\beta}{\text{Tr} \rho_q^q} (H - U_{q,nor}) \right]^{1/(1-q)}, \quad (4.18)$$

onde $Z_{q,nor}$ é a função de partição

$$Z_{q,nor} = \text{Tr} \left[1 - (1-q) \frac{\beta}{\text{Tr} \rho_{q,nor}^q} (H - U_{q,nor}) \right]^{1/(1-q)}. \quad (4.19)$$

Em geral, os resultados obtidos com a versão normalizada da estatística não extensiva podem ser relacionados com os resultados obtidos com os vínculos não normalizados [75].

Desta maneira, empregando as Eqs. (1.4) e (4.18) com a Hamiltoniana dada pela Eq. (4.1) e levando em conta Eq.(4.10), obtemos que

$$U_{q,nor} = \frac{N}{\beta} \left\{ \left[\frac{2\pi}{(1-q)\omega\beta} \right]^N \left[\left(\frac{2-q}{1-q} \right)_N \right]^{-1} \right\}^{\frac{(1-q)}{1-(1-q)N}} [1 + (1-q)N]^{\frac{1+(1-q)N}{1-(1-q)N}} \quad (4.20)$$

para o caso exato. A equação (4.20) expressa em termos da temperatura efetiva $T_{eff} = \text{Tr}(\rho_q^{nor})^q/\beta$ (para maiores discussões a respeito de temperatura efetiva e parâmetro de Lagrange veja [75, 81]) é $U_{q,nor} = NT_{eff}$. Agora vamos calcular a energia interna utilizando a expansão em potências de $(1-q)$ e as fatorizações. Começaremos por expandir Eq. (4.20) em série de potências de $(1-q)$ como segue:

$$\begin{aligned} U_{q,nor} &= \frac{N}{\beta} \left[\frac{2\pi}{\omega\beta} \right]^{\frac{(1-q)N}{1-(1-q)N}} [1 + (1-q)N]^{\frac{1+(1-q)N}{1-(1-q)N}} \\ &\times \left[1 - \frac{1}{2}(1-q)^2 N(N+1) - \frac{1}{12}(1-q)^3 N(N+1)(4N-1) + \dots \right]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

A energia interna dentro do contexto da aproximação de fatorização pode ser obtida empregando um procedimento similar ao utilizado na seção anterior. Desta forma obtemos

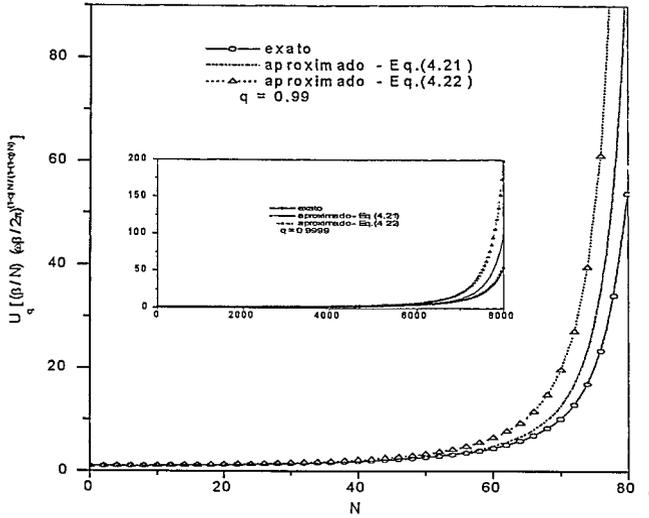


Figura 4.2: Nesta figura mostramos o comportamento das Eqs. (4.20), (4.21) e (4.22) versus N para $q = 0.99$ e $q = 0.9999$

que

$$\begin{aligned}
 U_{q,nor}^{factor} &= \frac{N}{\beta} \left[\frac{2\pi}{(2-q)\omega\beta} \right]^{\frac{(1-q)N}{1-(1-q)N}} [1 + (1-q)N]^{\frac{1+(1-q)N}{1-(1-q)N}} \\
 &= \frac{N}{\beta} \left[\frac{2\pi}{\omega\beta} \right]^{\frac{(1-q)N}{1-(1-q)N}} [1 + (1-q)N]^{\frac{1+(1-q)N}{1-(1-q)N}} \\
 &\times \left[1 - (1-q)^2N + \frac{1}{2}(1-q)^3N(2N-1) + \dots \right] . \quad (4.22)
 \end{aligned}$$

A dependência de N e $(1-q)$ nas expansões (4.21) e (4.22) é notoriamente diferente. Em particular, estas dependências essencialmente relembram as dependências obtidas na seção anterior. Assim, as conclusões a respeito da precisão das aproximações baseadas em expansões em potências de $(1-q)$ ou fatorizações são similares aquelas obtidas na seção anterior, i.e., elas são razoáveis somente para $(1-q)N \ll 1$. A dependência das Eqs. (4.20), (4.21) e (4.22) com N é ilustrada na Fig.(4.2).

4.3 Conclusões

A discussão realizada ao longo deste capítulo demonstra que as aproximações baseadas em expansões em potências de $(1 - q)$ ou fatorizações não são úteis para um sistema que seja composto de N osciladores harmônicos para um valor arbitrário de q e N muito grande. Em particular, para sistemas onde o número de osciladores harmônicos é tomado como sendo da ordem do número de Avogrado, i.e., $N \approx 10^{23}$, implica em $q \approx 1$. Ressaltando que estes resultados foram verificados tanto para os vínculos não normalizados como para os vínculos normalizados. Conclusões similares seriam obtidas se tivéssemos considerado o gás ideal.

Capítulo 5

Funções de Green baseadas em vínculos normalizados

Neste capítulo, vamos analisar a teoria de funções Green recentemente apresentada em [77] utilizando os valores médios normalizados. Também, reformularemos a teoria de resposta linear e para ilustrar os resultados obtidos neste capítulo examinaremos a condensação de Bose-Einstein.

5.1 Teoria das funções de Green

Antes de explorarmos as consequências de usarmos os valores médios normalizados, começaremos por reescrever as funções de Green definidas em [49] em termos dos valores médios

normalizados como segue abaixo:

$$\begin{aligned}\tilde{G}^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu) &= \frac{1}{i} \langle \text{T}(\Psi(1)\Psi^\dagger(1')) \rangle_q, \\ &\equiv \frac{1}{i} \frac{\text{Tr} [\tilde{\rho}^q \text{T}(\Psi(1)\Psi^\dagger(1'))]}{\text{Tr} \tilde{\rho}^q}.\end{aligned}\quad (5.1)$$

Agora, usando a representação integral descrita no primeiro capítulo podemos expressar a equação acima, Eq.(5.1), em termos da função de Green usual ($q = 1$):

$$\tilde{G}^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu) = \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu) G^{(1)}(1, 1'; -u(1-q)\tilde{\beta}, \mu), \quad (5.2)$$

com

$$\begin{aligned}\tilde{K}_q^{(2)}(u) &= i \frac{\Gamma(1/(1-q))}{2\pi \tilde{Z}_q} \exp(-u)(-u)^{1/(1-q)} \\ 1 &= \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu).\end{aligned}\quad (5.3)$$

onde \tilde{Z}_1 corresponde a função de partição usual multiplicada pelo fator $e^{-u\tilde{\beta}(1-q)(\tilde{U}_q - \mu\tilde{N}_q)}$.

Note que estas expressões têm uma aparência similar com as expressões obtidas em [49].

No limite de $q \rightarrow 1$ a Eq.(5.2) recupera a função de Green usual. De maneira análoga aos desenvolvimentos feitos em [49, 113] introduziremos as funções de correlações

$$\begin{aligned}\tilde{G}_>^{(q)}(11'; \beta, \mu) &= \frac{1}{i} \langle \Psi(1)\Psi^\dagger(1') \rangle_q, \\ \tilde{G}_<^{(q)}(11'; \beta, \mu) &= \frac{\pm}{i} \langle \Psi^\dagger(1')\Psi(1) \rangle_q.\end{aligned}\quad (5.4)$$

A notação $>$ e $<$ é usada para exibir o fato que $\tilde{G}^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu) = \tilde{G}_>^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu)$ para $t_1 > t_{1'}$ e $\tilde{G}^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu) = \tilde{G}_<^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu)$ para $t_1 < t_{1'}$. Novamente fazendo uso da representação integral, podemos expressar as funções de correlações, $\tilde{G}_>^{(q)}$ e $\tilde{G}_<^{(q)}$, em termos das funções de correlações usuais e conseqüentemente expressa-las em termos da função

espectral e do número médio de ocupação. Ressaltando que a função espectral no espaço das frequências, i.e., tomando a transformada de Fourier com respeito a diferença dos tempos, $A(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega)$ introduzida em [113] reflete somente as propriedades da Hamiltoniana \hat{H} . E por sua vez, o número médio de ocupação no ensemble grão canônico de um modo com energia ω , $f(\omega, \beta) = (\exp(\beta(\omega - \mu)) \mp 1)^{-1}$, leva em conta a simetria do sistema. Logo temos que

$$\begin{aligned} i\tilde{G}_{>}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega; \beta, \mu) &= \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu) i\tilde{G}_{>}^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega; -u(1-q)\tilde{\beta}, \mu) \\ &= \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) (1 \pm f(\omega, -u(1-q)\tilde{\beta}, \mu)) A(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega) \tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu) , \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} i\tilde{G}_{<}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega; \beta, \mu) &= \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu) i\tilde{G}_{<}^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega; -u(1-q)\tilde{\beta}, \mu) \\ &= \pm \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) f(\omega, -u(1-q)\tilde{\beta}, \mu) A(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega) \tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu) . \end{aligned} \quad (5.6)$$

Utilizando as equações (5.5) e (5.6) vemos que a função espectral fica dada por

$$\begin{aligned} A(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega) &= i \left(\tilde{G}_{>}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega; \beta, \mu) - \tilde{G}_{<}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega; \beta, \mu) \right) \\ &= \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) A(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega) \tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu) . \end{aligned} \quad (5.7)$$

A partir desta relação, Eq.(5.7), podemos deduzir uma importante regra de soma

$$i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left(\tilde{G}_{>}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega; \beta, \mu) - \tilde{G}_{<}^{(q)}(\vec{r}_1, \vec{r}_1'; \omega; \beta, \mu) \right) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_1') , \quad (5.8)$$

que é justamente uma expressão de CCR em tempos iguais dos campos de uma partícula. Desta forma mostramos que a função espectral de um dado sistema é uma propriedade que independe do ensemble usado. Usando a representação de Fourier da função degrau

envolvida nas funções de Green ordenadas no tempo em Eq.(5.1), um importante resultado encontrado em [114] é deduzido:

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{(q)}(1, 1'; \beta, \mu) &= \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t_1-t_1')} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} A(\tilde{r}_1, \tilde{r}_1'; \omega') \left\{ P\left(\frac{1}{\omega-\omega'}\right) - i\pi\delta(\omega-\omega') \left[\tanh\left(\frac{-u}{2}\tilde{\beta}(1-q)(\omega-\mu)\right) \right]^{\mp 1} \right\} \end{aligned} \quad (5.9)$$

Note que em vista da Eq.(5.7), somente a função delta nesta equação depende explicitamente de q como em [114].

A função distribuição dos momentos de uma partícula $\langle \hat{N}(\vec{p}) \rangle_q$ em termos da função espectral de um sistema de N -partículas é

$$\tilde{N}(\vec{p})_q = \pm \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A(\vec{p}; \omega) \tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu)}{e^{-u(1-q)\tilde{\beta}(\omega-\mu)} \mp 1}. \quad (5.10)$$

De maneira similar a função distribuição nas frequências $\langle \hat{N}(\omega) \rangle_q$ fica dada por

$$\tilde{N}(\omega)_q = \pm V \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \frac{\tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu)}{e^{-u(1-q)\tilde{\beta}(\omega-\mu)} \mp 1} \int \frac{d^D p}{(2\pi)^D} A(\vec{p}; \omega). \quad (5.11)$$

Aqui V é o volume em um espaço em D dimensões no qual as partículas residem. O potencial químico é determinado pela expressão abaixo

$$\frac{\tilde{N}_q}{V} = \pm \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^D p}{(2\pi)^D} \frac{\tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu)}{e^{-u(1-q)\tilde{\beta}(\omega-\mu)} \mp 1} A(\vec{p}; \omega). \quad (5.12)$$

Agora, usaremos a equação (5.10) para derivarmos a função distribuição dos momentos de um gás de Fermi na estatística não extensiva. Consequentemente, temos que $A(\vec{p}, \omega) = 2\pi\delta(\omega - \epsilon_p)$ onde ϵ_p é a energia de uma partícula. A função de partição para um gás de Fermi na teoria de Gibbs é dada por

$$\ln Z_1(\beta, \mu) = V \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{(l+1)} e^{\beta\mu l}}{l^{5/2}} \cong V \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} e^{\beta\mu}. \quad (5.13)$$

Agora considerando a aproximação que segue para a equação acima

$$Z_1(\beta, \mu) \cong \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \left[V \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} \right]^l e^{\beta\mu} \quad (5.14)$$

e levando em conta o fato de que $1/(e^x + 1) = \sum_{J=1}^{\infty} (-1)^{J+1} e^{-Jx}$ para $|e^{-x}| < 1$, finalmente temos o resultado desejado,

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{N}(\tilde{\beta})_q}{V} &\cong \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)}{\tilde{Z}_q} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \left[V \left(\frac{m}{2\pi\tilde{\beta}} \right)^{\frac{3}{2}} \right]^l \\ &\times \sum_{J=1}^{\infty} \frac{(-1)^{J+1}}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + \frac{3J}{2}\right)} \left\{ 1 + (1-q)\tilde{\beta} \left(\tilde{U}_q - \mu\tilde{N}_q + \mu l - J(\epsilon_p - \mu) \right) \right\}^{\frac{q}{1-q} + \frac{3J}{2}} \end{aligned} \quad (5.15)$$

Deste resultado podemos deduzir a expressão presente em [115] para a distribuição dos momentos de um gás de Fermi, obtida na primeira formulação da mecânica estatística não extensiva. Assim, fazendo drásticas aproximações, tais como, $l = 0$, $\tilde{Z}_q = 1$, eliminando \tilde{U}_q , \tilde{N}_q e tomando $\tilde{\beta} = \beta$ para estarmos de acordo com a primeira versão da mecânica estatística não extensiva [75], obtemos o resultado,

$$\frac{\tilde{N}(\tilde{\beta})_q}{V} \approx \sum_{J=1}^{\infty} (-1)^{J+1} \{1 - (1-q)\beta J(\epsilon_p - \mu)\}^{q/(1-q)}. \quad (5.16)$$

Adicionando as aproximações acima à aproximação correspondente ao esquema de altas temperaturas onde $\beta(\epsilon_p - \mu) \ll 1$, temos que

$$\frac{\tilde{N}(\tilde{\beta})_q}{V} \approx \sum_{J=1}^{\infty} (-1)^{J+1} \{1 - (1-q)\beta(\epsilon_p - \mu)\}^{qJ/(1-q)} = \frac{1}{1 + \{1 - (1-q)\beta(\epsilon_p - \mu)\}^{-q/(1-q)}}. \quad (5.17)$$

Para verificarmos a precisão da aproximação Eq.(5.17) em relação a um resultado mais exato, Eq.(5.16), comparamos os termos de segunda ordem das séries, $(qJ(qJ - (1 - q))/2) (\beta(\epsilon_p - \mu))^2$ e $(q(2q - 1)/2) (J\beta(\epsilon_p - \mu))^2$, e achamos que o erro envolvido é da

ordem de $(1-q)$. Este resultado, Eq.(5.17), foi obtido em [115] através de uma abordagem alternativa. Cálculos similares para os gases de Bose e Maxwell podem ser feitos seguindo o procedimento utilizado acima.

5.2 Teoria de resposta linear

Seguindo [50] e empregando vínculos normalizados vamos reobter alguns resultados presentes na teoria de resposta linear. Logo, temos que

$$\langle \Delta \hat{B}(t) \rangle_q \equiv \text{Tr} [\hat{P}(t) \hat{B}] - \text{Tr} [P_q^{eq} \hat{B}] \quad (5.18)$$

onde $\hat{P}(t) = \hat{\rho}^q(t) / \text{Tr} \hat{\rho}^q(t)$ e $P_q^{eq} = \rho_q^q / \text{Tr} \rho_q^q$ (ρ_q é a distribuição de equilíbrio). Com estas novas definições, todas as médias são calculadas tendo a unidade como normalização. O operador dependente do tempo \hat{P} na Eq.(5.18) obedece a equação de movimento usual com a Hamiltoniana $\hat{H} - \hat{A}X(t)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{P}(t) = [\hat{H}, \hat{P}(t)] - [\hat{A}, \hat{P}(t)] X(t) \quad (5.19)$$

cuja a condição inicial é $\hat{P}(t = -\infty) = P_q^{eq}$. Tomando o traço em ambos os lados, observamos que $\text{Tr} \hat{P}(t) = 1$ para todos os tempos. A solução devida a ordem linear em $X(t)$ pode ser achada empregando os procedimentos padrões:

$$\hat{P}(t) \approx P_q^{eq} - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt e^{-i(t-t')\hat{H}/\hbar} [\hat{A}, P_q^{eq}] e^{i(t-t')\hat{H}/\hbar}. \quad (5.20)$$

Assim

$$\langle \Delta \hat{B} \rangle_q = \int_{-\infty}^t dt \tilde{\phi}_{BA}^{(q)}(t-t') X(t')$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\phi}_{BA}^{(q)}(t-t') &= -\frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \{ [\hat{A}, P_q^{eq}] \hat{B}(t) \} \\
&= \frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \{ [\hat{A}, \hat{B}(t)] P_q^{eq} \} .
\end{aligned} \tag{5.21}$$

A equação acima, que em sua formulação anterior aparece em todos os resultados e conclusões de [50], agora traz em sua definição os valores médios normalizados com a temperatura renormalizada e a condição de auto-consistência.

Seguindo o procedimento empregado em [49], podemos reescrever a resposta dinâmica e a seção de espalhamento levando em conta o formalismo não extensivo com valores médios normalizados usando as representações integrais. De maneira similar, agora expressaremos a função de espalhamento definida em Lovesey [116] em termos do formalismo não extensivo levando em conta os vínculos normalizados

$$\tilde{S}^{(q)}(\vec{k}, \omega, \beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \langle \hat{A}^\dagger(0) \hat{A}(t) \rangle_q^{(c)}, \tag{5.22}$$

onde \hat{A} é o operador que afeta a mudança de estados do sistema em um processo de espalhamento. O índice superior (c) denota ensemble canônico ao invés do grão canônico usado anteriormente. Assim, podemos expressar como em [49] a função de espalhamento q , bem como a parte imaginária da susceptibilidade q em termos de integrais paramétricas cujo núcleo contém as funções de espalhamento usuais. É possível obtermos também outras propriedades dentro desta formulação como as obtidas em [49].

5.3 Implicações numéricas dos vínculos normalizados

Nesta seção faremos uma discussão adicional sobre o fato de empregarmos os valores

médios normalizados ao invés dos valores médios não normalizados, complementando a nossa análise feita no capítulo um. Seguindo [75], podemos colocar este formalismo em uma forma que relembra o formalismo anterior, nos levando a interpretar o novo formalismo como uma renormalização dos parâmetros de Lagrange presentes na formulação anterior. Entretanto, esta afirmação é só superficialmente verdadeira como ficará evidente na descrição dos resultados de muitos exemplos onde ambas formulações da estatística não extensiva são aplicadas. Os exemplos são: (a) Emaranhamento quântico de um sistema de dois bits (discutido no primeiro capítulo); (b) Mecânica estatística de um gás clássico [112]; (c) Estatística de Lévy [22]; (d) “Stellar polytropes” [33]; (e) Turbulência em plasma [31]. Nos casos (b-e), temos diferenças dependendo dos valores médios que são empregados. Entretanto, existem efeitos importantes que os vínculos normalizados levam em conta. Em (b), as médias que eram divergentes ficam convergentes tornando as quantidades termodinâmicas finitas; Em (c) o comportamento ao redor do ponto singular ($q < 5/3$) fica simétrico e fisicamente mais aceitável no sentido que o coeficiente de difusão é simétrico em ambos os lados de $q = 5/3$. Em (d), para $q < 7/9$, temos soluções estáveis da equação de Vlasov derivadas do princípio de entropia máxima. E em (e) ($q = 1/2$), a renormalização das constantes que aparecem na equação deduzida para a densidade de estados baseando-se no princípio de entropia máxima e não são calculadas de maneira auto-consistente mas de dados experimentais.

Em contraste com a discussão acima, a determinação da temperatura de condensação para um sistema que segue a distribuição de Bose-Einstein envolve auto-consistências, diferente da obtida em [49]. Agora daremos detalhes dos cálculos numéricos da temperatura crítica,

$T_c^{(q,N)}$, de condensação levando em conta a formulação normalizada da mecânica estatística não extensiva. Empregamos o procedimento apresentado em [75] e a representação integral descrita no primeiro capítulo para obtermos a função de partição, $c_q (= \text{Tr} \tilde{\rho}_q^q)$, o valor médio do número de partículas e a energia interna. Para determinar, $T_c^{(q,N)}$, é suficiente calcular estas quantidades para o caso especial em que o potencial químico é nulo ($\mu = 0$), neste caso as correspondentes expressões são dadas por

$$Z_q = \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) \left(1 + (1-q)\tilde{\beta}U_q\right)^{1/(1-q)} \\ \times \phi\left(\frac{3}{2}, \frac{2-q}{1-q}, \langle \hat{N} \rangle_1 \left(\frac{1+(1-q)\tilde{\beta}U_q}{(1-q)\tilde{\beta}/\beta_c^{(1)}}\right)^{3/2} \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})}\right) \quad (5.23)$$

$$\text{Tr} \tilde{\rho}_q^q = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)}{Z_q^q} \left(1 + (1-q)\tilde{\beta}U_q\right)^{q/(1-q)} \\ \times \phi\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{1-q}, \langle \hat{N} \rangle_1 \left(\frac{1+(1-q)\tilde{\beta}U_q}{(1-q)\tilde{\beta}/\beta_c^{(1)}}\right)^{3/2} \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})}\right) \quad (5.24)$$

$$\frac{\langle \hat{N} \rangle_q}{\langle \hat{N} \rangle_1} = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)}{\text{Tr} \tilde{\rho}_q^q Z_q^q} \left(\frac{1+(1-q)\tilde{\beta}U_q}{(1-q)\tilde{\beta}/\beta_c^{(1)}}\right)^{3/2} \left(1 + (1-q)\tilde{\beta}U_q\right)^{q/(1-q)} \\ \times \phi\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{1-q} + \frac{3}{2}, \langle \hat{N} \rangle_1 \left(\frac{1+(1-q)\tilde{\beta}U_q}{(1-q)\tilde{\beta}/\beta_c^{(1)}}\right)^{3/2} \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})}\right) \quad (5.25)$$

$$\frac{U_q \beta_c^{(1)}}{\langle \hat{N} \rangle_1} = \left(\frac{1+(1-q)\tilde{\beta}U_q}{(1-q)\tilde{\beta}/\beta_c^{(1)}}\right)^{5/2} \frac{3\zeta(\frac{5}{2})\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)}{2\zeta(\frac{3}{2})\text{Tr} \tilde{\rho}_q^q Z_q^q} \left(1 + (1-q)\tilde{\beta}U_q\right)^{q/(1-q)} \\ \times \phi\left(\frac{3}{2}, \frac{2-q}{1-q} + \frac{3}{2}, \langle \hat{N} \rangle_1 \left(\frac{1+(1-q)\tilde{\beta}U_q}{(1-q)\tilde{\beta}/\beta_c^{(1)}}\right)^{3/2} \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})}\right) \quad (5.26)$$

onde $\phi(\alpha, \beta; z) = \sum_{k=0}^{\infty} z^k / (k! \Gamma(\alpha k + \beta))$ com $\alpha, \beta > 0$ e $\langle \hat{N} \rangle_1 \propto (1/\beta_c^{(1)})^{3/2}$. Das Eqs.(5.23-5.26) obtemos a temperatura crítica, $T_c^{(N,q)}$, correspondendo a um dado número

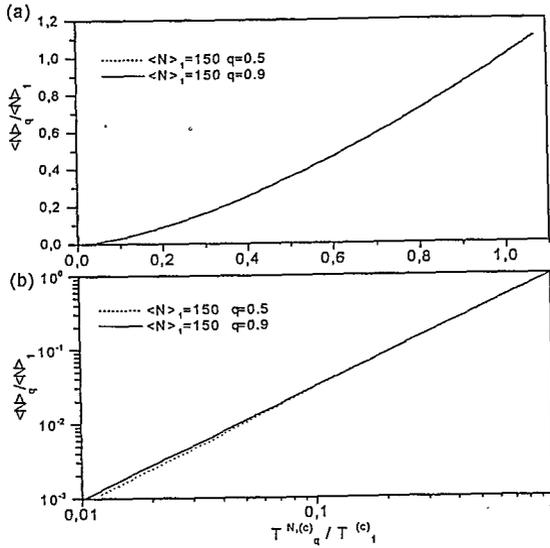


Figura 5.1: (a) Nesta figura mostramos a dependência de $\langle N \rangle_q / \langle N \rangle_1$ com $T_c^{(N,q)} / T_c^{(1)}$ para alguns valores típicos de q considerando $\langle N \rangle_1 = 150$. Os gráficos para $q = 0.5$ e 0.9 são indistinguíveis nesta figura. Para exibir a diferença entre eles apresentamos a mesma figura em (b) na escala log-log.

de partículas, $\langle \hat{N} \rangle_q / \langle \hat{N} \rangle_1$. Para resolver, Eqs.(5.23 - 5.26) nós usamos a nova variável

$$\beta' = \frac{\tilde{\beta}}{1 + (1 - q)\tilde{\beta}U_q} \quad (5.27)$$

Na seqüência, escolhemos um dado valor para β' e obtemos numericamente o valor de $U_q\beta_c^{(1)}$ e $\langle \hat{N} \rangle_q / \langle \hat{N} \rangle_1$. Usando o β' escolhido e o correspondente $U_q\beta_c^{(1)}$, nós usamos Eq.(5.27) para obter $\tilde{\beta}_c$ ($\equiv 1/T_c^{(q,N)}$) [117]. Este procedimento é empregado para um grande número de valores de β' , assim obtemos um gráfico da razão de $\langle \hat{N} \rangle_q / \langle \hat{N} \rangle_1$ vs.

$T_c^{(q,N)}/T_c^{(1)}$ para vários valores de q , como mostramos na Fig.(5.1). As diferenças entre os resultados para $q = 0.5$ e $q = 0.9$ são pequenas e achamos que tal fato se deve ao sistema que estamos considerando, ser não interagente. Em um contexto diferente tal comportamento foi obtido para um gás ideal clássico [112].

5.4 Conclusões

Neste capítulo, nós trabalhamos em detalhes os desenvolvimentos feitos [49] da teoria de funções de Green para sistemas não extensivos nos baseando em valores médios normalizados[75]. Também reanalisamos a teoria de resposta linear dentro deste contexto. A aparência formal dos novos resultados relembra de maneira superficial os nossos resultados obtidos recentemente com uma temperatura renormalizada e uma importante condição de auto-consistência, Eq.(1.9). A importância de tais resultados foi ilustrada na seção anterior. Neste contexto, é interessante mencionar que as propriedades termodinâmicas de um gás ideal clássico dentro da mecânica estatística não extensiva usando os valores médios normalizados são convergentes. De um ponto de vista diagramático, a nova formulação, envolve apenas diagramas conectados. Assim, acreditamos ter colocado a teoria das funções de Green na formulação correta da mecânica estatística não extensiva.

Parte - II

Mecânica Estatística Não Extensiva - Aplicações

Capítulo 6

Equação de Estado para sistemas gravitantes em duas dimensões

A descrição de sistemas gravitacionais em termos da mecânica estatística é muito importante para a análise de sistemas astro-físicos. Entretanto, devido à natureza das interações gravitacionais ser de longo alcance, alguns problemas surgem quando empregamos a mecânica estatística usual no estudo deste tipo de sistemas. Por exemplo, temos a divergência do volume de fase $g(E)$ ao fazermos a descrição micro-canônica ou a presença de divergências na função de partição quando utilizamos o ensemble canônico, quando consideramos o potencial gravitacional [1]. Por outro lado, contornando vários desses problemas, a mecânica estatística não extensiva tem sido usada em várias situações, como por exemplo em [111]. Assim, neste capítulo analisaremos a equação de estado para um sistema gravitacional clássico em duas dimensões, usando a mecânica estatística não extensiva.

6.1 Sistemas gravitantes em duas dimensões

Antes de empregarmos a mecânica estatística não extensiva vamos inicialmente discutir alguns resultados obtidos com o formalismo usual, pois assim a extensão de tais resultados será mais fácil. O Hamiltoniano de um sistema gravitacional de N partículas em duas dimensões é dada por

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} 2Gm^2 \ln |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|. \quad (6.1)$$

Observe que este sistema é análogo a um plasma em duas dimensões quando a constante (Gm^2) é substituída por $(-e_i e_j)$, onde $e_i e_j$ é o produto das cargas das partículas. Embora a forma funcional seja semelhante para estes sistemas, as propriedades físicas deles são diferentes pois neste último podemos ter blindagem se o sistema não for não neutro [8]. É fácil mostrar que o volume no espaço de fase $g(E)$ do sistema, no ensemble microcanônico, não será divergente desde que as partículas estejam dentro de uma caixa com comprimento $2L$, $(-L, +L)$ [1]. Porém, nesta situação $g(E)$ não pode ser calculado analiticamente. Em uma descrição baseada no ensemble canônico usual, a quantidade central é a função de partição. Conseqüentemente a partir dela podemos calcular as quantidades termodinâmicas. Esta é determinada por

$$Z_1 = \int_{-L}^{+L} \prod_{i=1}^N d^2 p_i d^2 x_i \exp(-\beta H) \quad (6.2)$$

na mecânica estatística clássica. Integrando sobre os momentos, obtemos

$$Z_1 = \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^N \int_{-L}^{+L} \prod_{i=1}^N d^2 x_i \exp \left(-\beta \sum_{i \neq j} Gm^2 \ln |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \right). \quad (6.3)$$

Note que esta integral não existe perto da origem, exceto para

$$\beta < \beta_c = 2 [Gm^2(N-1)]^{-1} . \quad (6.4)$$

Isto significa que abaixo de T_c a função de partição diverge.

Agora vamos calcular a equação de estado para o sistema acima usando a mecânica estatística não extensiva. Primeiro vamos discutir o sistema gravitacional levando em conta os vínculos não normalizados e depois analisaremos ele usando os vínculos normalizados. Como na mecânica estatística usual, substituímos a soma que é presente na função de partição pela seguinte integral:

$$Z_{q,unn} = \int_{-L}^{+L} \prod_{i=1}^N d^2 p_i d^2 x_i [1 - \beta(1-q)H]^{1-\frac{1}{q}} . \quad (6.5)$$

Note que estamos usando a mecânica estatística não extensiva com vínculos não normalizados, no final desta seção discutiremos os resultados obtidos com os vínculos normalizados. Ressaltando que $Z_{q,unn}$ não existe perto da origem para $q > 1$. Por esta razão, restringimos nossa análise para $q < 1$. Além disso, também assumiremos que as partículas estão dentro de uma caixa onde cada x_i é pertencente ao intervalo $(-L, +L)$ de maneira a manter a integral (6.5) finita para x_i grande. Para efetuarmos a integração de $Z_{q,unn}$ vamos utilizar o “cut-off” e a representação integral, ambos definidos no primeiro capítulo.

Assim temos que

$$Z_{q,unn} = A \int_{-L}^{+L} d^2 x_1 \dots d^2 x_N \left(1 + \beta(q-1) \sum_{i \neq j} Gm^2 \ln |x_i - x_j| \right)^{N + \frac{1}{1-q}} , \quad (6.6)$$

onde

$$A = \left(\frac{2\pi m}{\beta(1-q)} \right)^N \frac{\Gamma\left(1 + \frac{1}{1-q}\right)}{\Gamma\left(1 + N + \frac{1}{1-q}\right)} . \quad (6.7)$$

A integral (6.6) é muito semelhante a integral do volume do fase (veja Eq.(3.40) presente na referência [1]). Ela tem a forma $\int dx x \left[\ln \left(x^{\beta(1-q)Gm^2} \right)^{-1} \right]^{N+1/(1-q)}$ em coordenadas polares e a mesma se transforma em $\int dz z^{N+1/(1-qdez)} \exp[-2z/(\beta(1-q)Gm^2)]$ com a variável $z = -\ln x^{\beta(1-q)Gm^2}$. Próximo da origem ($x \rightarrow 0$ e $z \rightarrow \infty$), a função exponencial, então, suprime a lei de potência e portanto a integral não diverge. Isto significa que a função de partição (6.6) é finita. Agora, redefinindo a variável $y_i = x_i/L$ em Eq.(6.6), obtemos que

$$Z_{q,unn} = A \int_{-1}^1 d^2 y_1 \cdots d^2 y_N \times \left[1 + (q-1)\beta Gm^2 \left(N(N-1) \ln L + \sum_{i \neq j} \ln |y_i - y_j| \right) \right]^{N+1/(1-q)}. \quad (6.8)$$

Diferenciando $Z_q(\beta, L)$ com respeito a L e usando a seguinte expressão para a pressão

$$P_{q,unn} = -\frac{\partial F_{q,unn}}{\partial V} = \frac{1}{\beta Z_{q,unn}^q} \frac{\partial Z_{q,unn}}{\partial V}, \quad (6.9)$$

onde V é o volume em duas dimensões (L^2), obtemos

$$P_{q,unn} = \frac{N}{V\beta} \left\{ Z_{q,unn}^{1-q} - [1 + N(1-q)] \frac{N-1}{2} \beta Gm^2 H(\beta, L) \right\} \quad (6.10)$$

$$H(\beta, L) = A \int_{-L}^{+L} d^2 x_1 \dots d^2 x_N \left(1 + \beta(q-1) \sum_{i \neq j} Gm^2 \ln |x_i - x_j| \right)^{-1+N+1/(1-q)}. \quad (6.11)$$

Embora a função de partição $Z_{q,unn}$ seja finita, a pressão $P_{q,unn}$ se torna negativa para todo V se $[1 + N(1-q)](N-1)\beta Gm^2 H(\beta, L) / (2Z_{q,unn}^{1-q}) > 1$. Usando as expressões (1.1)

$F_{q,unn} = (Z_{q,unn}^{1-q} - 1)/(q-1)$, podemos escrever a expressão (6.10) como segue

$$P_{q,unn} = \frac{N}{V\beta} \left\{ 1 - \frac{N-1}{2} \beta Gm^2 - (1-q)\beta \left[F_{q,unn} + \frac{N-1}{2} Gm^2 S_{q,unn} \right] \right\}. \quad (6.12)$$

Para $q \rightarrow 1$, recuperamos o resultado usual [1]

$$P_1 = \frac{N}{V\beta} \left\{ 1 - \frac{N-1}{2} \beta Gm^2 \right\}. \quad (6.13)$$

Para tornar completa a análise, agora discutiremos o sistema gravitacional no caso tridimensional. Neste caso, o Hamiltoniano é

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{Gm^2}{|x_i - x_j|}. \quad (6.14)$$

O volume do espaço de fase $g(E)$ deste sistema diverge para $N \geq 3$ [1]. No ensemble canônico usual, a função de partição diverge perto da origem porque o integrando tem a forma $r^2 \exp(1/r)$. No caso da mecânica estatística não extensiva, para $q < 1$, temos

$$Z_{q,unv} = B \int_{-L}^{+L} \prod_{i=1}^N d^3x_i \left[1 + \beta(1-q) \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{Gm^2}{|x_i - x_j|} \right]^{\frac{3N}{2} + \frac{1}{1-q}}, \quad (6.15)$$

onde

$$B = \left(\frac{2\pi m}{\beta(1-q)} \right)^{\frac{3N}{2}} \frac{\Gamma\left(1 + \frac{1}{1-q}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{3N}{2} + \frac{1}{1-q}\right)}. \quad (6.16)$$

A integral a ser calculada em (6.15) é da forma

$$\int_0^\varepsilon dx x^2 \left[1 + \beta(1-q) \frac{1}{2} \frac{Gm^2}{x} \right]^{\frac{3N}{2} + \frac{1}{1-q}} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} x^{3 - \frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}} \quad (6.17)$$

que diverge para $N > 2 - 2/[3(1-q)]$. Esta condição é mais restritiva que a obtida no cálculo do volume do espaço de fase.

Considerando a terceira versão da mecânica estatística não extensiva [75], onde temos a presença de vínculos, a função de partição do sistema (6.1), para $q < 1$, é dada por

$$(Z_{q,nor})^2 = A \int_{-L}^{+L} \prod_{i=1}^N d^2x_i \left\{ (Z_{q,nor})^{1-q} + \beta(1-q) \left[U_{q,nor} - \sum_{i \neq j} Gm^2 \ln |x_i - x_j| \right] \right\}^{N + \frac{1}{1-q}} \quad (6.18)$$

onde integramos sobre todos os momentos. Fazendo a seguinte mudança de variável $y_i = x_i/L$, temos

$$(Z_{q,nor})^2 = A \int_{-1}^{+1} \prod_{i=1}^N d^2 y_i \times L^{2N} \left\{ (Z_{q,nor})^{1-q} + \beta(1-q) \left[U_{q,nor} - \sum_{i \neq j} Gm^2 \ln(L|y_i - y_j|) \right] \right\}^{N+\frac{1}{1-q}} \quad (6.19)$$

Observe que esta última equação depende implicitamente em $Z_{q,nor}$ e L . Este fato torna muito difícil (de acordo com nossa análise) obter uma expressão exata para a equação de estado.

6.2 Conclusão

Neste capítulo, mostramos que a mecânica estatística não extensiva pode ser usada também para descrever sistemas gravitacionais bidimensionais. Pois a função de partição Z_q é finita para $q < 1$ o que torna o sistema termodinamicamente aceitável em ambas as formulações. Entretanto, uma investigação mais profunda sobre este assunto é ainda necessária.

Capítulo 7

Equação de transporte de Boltzmann e a mecânica estatística não extensiva

Neste capítulo generalizaremos a equação de transporte usando as funções de Green desenvolvidas no capítulo cinco. Como consequência direta desta generalização verificaremos que a equação obtida é invariante com o índice q assim como as leis de conservação úteis na descrição da propagação do som que vamos obter. Por fim, aplicaremos os desenvolvimentos feitos neste capítulo para um sistema fermiônico obtendo a resposta dinâmica da função dielétrica.

7.1 Equação de transporte de Boltzmann

Como é conhecido, existe uma classe de perturbações que não é convenientemente descrita pelas funções de Green de equilíbrio [113]: as perturbações produzidas por uma força externa dependente do tempo, $\vec{F}(\vec{r}, t) = -\nabla U(\vec{r}, t)$, aplicada ao sistema. Muitos fenômenos interessantes aparecem em resposta a este tipo de perturbação. Por exemplo, em um gás ordinário, uma variação suave de $U(\vec{r}, t)$ produz ondas de som. Esperamos que fatos similares devam ocorrer em sistemas não extensivos, nos levando a empregar a estatística não extensiva para investigar tal tema. De fato, ao incorporarmos a estatística não extensiva na equação de Boltzmann abrimos a possibilidade de explorarmos aspectos dinâmicos de sistemas que possuem interações de longo alcance, condições de contorno fractais e outros. Começaremos por escrever a matriz densidade $\hat{\rho}_q$, obtida no primeiro capítulo, no contexto do “ensemble grand” canônico empregando vínculos normalizados

$$\begin{aligned}\rho_q &= \exp_q \left[\frac{-\beta}{\text{Tr} \hat{\rho}_q^q} (\hat{H} - \mu \hat{N} - \langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle_q) \right] / Z_q \\ Z_q &= \text{Tr} \left\{ \exp_q \left[\frac{-\beta}{\text{Tr} \hat{\rho}_q^q} (\hat{H} - \mu \hat{N} - \langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle_q) \right] \right\},\end{aligned}\quad (7.1)$$

onde $\exp_q[x] = [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)}$ e Z_q é a função de partição. O valor médio escrito de acordo com a representação de interação fica dado por

$$\langle \hat{X}(\mathbf{R}, t) \rangle_{U,q} = \frac{\sum_i \hat{\rho}_i^q \langle i, t_0 | \hat{X}_U(\mathbf{R}, t) | i, t_0 \rangle}{\sum_i \hat{\rho}_i^q} = \langle X_U(\mathbf{R}, T) \rangle_q, \quad (7.2)$$

$\hat{X}_U(\mathbf{R}, t) = \mathcal{V}(t)^{-1} \hat{X}(\mathbf{R}, t) \mathcal{V}(t)$ com $\mathcal{V}(t) = \text{T} \left\{ \exp \left[-i \int_{t_0}^t dt' \int d^3r' \hat{n}(r', t') U(r', t') \right] \right\}$ (onde T é operador de ordenamento temporal), seguindo o desenvolvimento feito em [113]. Note que $\mathcal{V}(t)$ é escolhido de maneira a incorporar perturbações externas tais como $\hat{H}'(t) =$

$\int d^3r \hat{n}(r, t)U(r, t)$, onde $\hat{n}(r, t) = \Psi_U^\dagger(r, t)\Psi_U(r, t)$. Assim, podemos escrever as funções de Green desenvolvidas no capítulo anterior em uma forma mais apropriada,

$$\tilde{G}^{(q)}(1, 1'; U) = \frac{1}{i} \langle T(\Psi_U^\dagger(1')\Psi_U(1)) \rangle_q \quad (7.3)$$

e

$$\tilde{G}^{(q)}(12, 1'2'; U) = \left(\frac{1}{i}\right)^2 \langle T(\Psi_U(1)\Psi_U(2)\Psi_U^\dagger(2)\Psi_U^\dagger(1')) \rangle_q \quad (7.4)$$

Em termos destas funções de Green poderemos descrever a resposta de um sistema, inicialmente em equilíbrio, a uma perturbação aplicada $U(\vec{r}, t)$.

Empregando os desenvolvimentos acima temos que a densidade média de um ponto (\mathbf{R}, T) é dada por

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}(\mathbf{R}, T) \rangle_{U,q} &= \langle \Psi_U^\dagger(\mathbf{R}, T)\Psi_U(\mathbf{R}, T) \rangle_q \\ &= \pm i \tilde{G}_<^{(q)}(\mathbf{R}, T, \mathbf{R}, T; U) \quad , \end{aligned} \quad (7.5)$$

e a densidade de corrente no mesmo ponto é

$$\langle \hat{J}(\mathbf{R}, T) \rangle_{U,q} = \left\{ \frac{\nabla - \nabla'}{2mi} \left[\pm i \tilde{G}_<^{(q)}(\mathbf{R}, T, \mathbf{R}', T; U) \right] \right\}_{\mathbf{R}=\mathbf{R}'} \quad (7.6)$$

Nestas equações e nas discussões que se seguirão, o sinal superior (+) será empregado para o caso bosônico e o sinal inferior será empregado para sistemas fermiônicos.

As leis de conservação para o número de partículas, energia e o momento total são preservadas aqui como no caso usual. Em termos de $\langle \hat{n}(\mathbf{R}, T) \rangle_{U,q}$ e $\langle \hat{J}(\mathbf{R}, T) \rangle_{U,q}$, os principais resultados para a derivação da propagação do som são

$$\frac{\partial}{\partial T} \langle \hat{n}(\mathbf{R}, T) \rangle_{U,q} + \nabla \cdot \langle \hat{J}(\mathbf{R}, T) \rangle_{U,q} = 0 \quad , \quad (7.7)$$

$$\frac{d}{dT} \langle \hat{H}(T) \rangle_{U,q} + \int dR [\nabla U(\mathbf{R}, T)] \cdot \langle \hat{J}(\mathbf{R}, T) \rangle_{U,q} = 0, \quad (7.8)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}(t) \rangle_{U,q} + \int dR [\nabla U(\mathbf{R}, t)] \cdot \langle \hat{n}(\mathbf{R}, t) \rangle_{U,q} = 0. \quad (7.9)$$

As equações acima podem ser verificadas usando a equação de Heisenberg (veja [120], para uma simples explicação sobre a equação de Heisenberg) para Ψ^\dagger e Ψ , bem como, Eq.(7.5) e Eq.(7.6). No contexto da estatística não extensiva, a distribuição de Wigner de $f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T)$ (com $\mathbf{r} = \bar{r}_1 - \bar{r}_1'$, $\mathbf{R} = (\bar{r}_1 + \bar{r}_1')/2$, $t = t_1 - t_1'$ e $T = (t_1 + t_1')/2$) pode ser definida como,

$$\begin{aligned} f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T) &= \int \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{G}_<^{(q)}(\mathbf{p}, \omega, \mathbf{R}, T; U) \\ &= \int d^3 r e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \langle \Psi_U^\dagger \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}, T \right) \Psi_U \left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, T \right) \rangle_q. \end{aligned} \quad (7.10)$$

De maneira similar ao caso usual, $f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T)$ nos conduz para uma densidade de partículas dada por

$$\int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T) = \langle \Psi_U^\dagger(\mathbf{R}, T) \Psi_U(\mathbf{R}, T) \rangle_q = \langle \hat{n}(\mathbf{R}, T) \rangle_q, \quad (7.11)$$

cuja corrente de partículas é

$$\langle \hat{J}(\mathbf{R}, T) \rangle_{U,q} = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{p}}{m} f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T). \quad (7.12)$$

As definições acima para a função distribuição $f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T)$ nos conduzirá a obter a relação entre funções de Green, equações de transporte e a equação de Boltzmann generalizada sem termos de colisão.

A equação de Boltzmann generalizada pode ser obtida usando a equação de movimento

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} - U(1) \right) \tilde{G}^{(q)}(1, 1'; U) = \delta(1 - 1') \pm \int d2V(1 - 2) \tilde{G}^{(q)}(12, 1'2'; U) \quad (7.13)$$

($d2 = d^3r_2dt_2$, $V(1-2) = v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\delta(t_1 - t_2)$) e a aproximação de Hartree $\tilde{G}^{(q)}(12, 1'2'; U) = \tilde{G}^{(q)}(1, 1'; U) \tilde{G}^{(q)}(2, 2'; U)$ que é fisicamente motivada pela interpretação de propagador de $\tilde{G}^{(q)}(1, 1'; U)$ e $\tilde{G}^{(q)}(12, 1'2'; U)$ [49, 77, 113]. Assim, obtemos da Eq.(7.13) e da aproximação de Hartree, após algumas simplificações, a equação

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} - U_{eff}(1) \right) \tilde{G}^{(q)}(1, 1'; U) = \delta(1 - 1') \quad , \quad (7.14)$$

onde

$$U_{eff}(\mathbf{R}, T) = U(\mathbf{R}, T) \pm i \int d\mathbf{R}' v(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \tilde{G}_Z^{(q)}(\mathbf{R}', T; \mathbf{R}', T) \quad . \quad (7.15)$$

Tomando a diferença da Eq.(7.14) nas variáveis 1 e 1', achamos que

$$\left\{ i \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial t_{1'}} \right) + (\nabla_1 + \nabla_{1'}) \cdot \left(\frac{\nabla_1 - \nabla_{1'}}{2m} \right) - [U_{eff}(1) - U_{eff}(1')] \right\} \tilde{G}^{(q)}(1, 1'; U) = 0 \quad . \quad (7.16)$$

Considerando $t_{1'} = t_1^+ = T$, expressando Eq.(7.16) em termos de $\mathbf{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_{1'}$, $\mathbf{R} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_{1'})/2$, e usando Eq.(7.10), verificamos que

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial T} + \frac{\nabla_{\mathbf{R}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}}{im} - \frac{1}{i} \left[U_{eff}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, T) - U_{eff}(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}, T) \right] \right\} \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} e^{ip' \cdot \mathbf{r}} f_q(\mathbf{p}', \mathbf{R}, T) = 0 \quad . \quad (7.17)$$

Agora supondo que $U_{eff}(\mathbf{R}, T)$ varia suavemente em \mathbf{R} , a equação de Boltzmann generalizada sem termos de colisão fica dada por

$$\left[\frac{\partial}{\partial T} + \frac{\mathbf{p}}{2m} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} - \nabla_{\mathbf{R}} U_{eff}(\mathbf{R}, T) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \right] f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T) = 0 \quad , \quad (7.18)$$

com

$$U_{eff}(\mathbf{R}, T) = U(\mathbf{R}, T) + \int d\mathbf{R}' v(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} f_q(\mathbf{p}', \mathbf{R}', T) \quad . \quad (7.19)$$

A equação (7.18) preserva sua forma usual para um valor de q arbitrário assim como a desigualdade de Bogoliubov [24]. Embora a equação de transporte obtida aqui tenha o mesmo aspecto formal da usual [113], ela conduz a diferentes resultados. De fato, os sistemas de interesse em ambos os casos são promovidos por diferentes fatos, *i.e.*, as condições de contorno para $f_q(\mathbf{R}, \mathbf{R}', T)$ com $q \neq 1$ e $q = 1$ são diferentes. Para tornar clara esta diferença entre $f_q(\mathbf{R}, \mathbf{R}', T)$ e a usual, trabalharemos a Eq.(7.18) na seção abaixo considerando a linearização da aproximação de Hartree.

7.2 Aplicação

Vamos começar o nosso exemplo considerando que o potencial $U(\mathbf{R}, T)$ seja pequeno e $q < 1$, *i.e.*, queremos resolver a Eq.(7.18) usando a aproximação de fase aleatória com $q < 1$. Para resolver a Eq.(7.18) devemos conhecer as condições iniciais. Assim, vamos considerar que no limite $T \rightarrow -\infty$ a perturbação se anula; então, neste limite $f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T)$ é dado pela condição de equilíbrio. Além disto, empregando a aproximação de Hartree temos que

$$\lim_{T \rightarrow -\infty} f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T) = f_q(E(p)), \quad (7.20)$$

com $f_q(E(p))$ definido em [77] como:

$$f_q(E(p)) = \int_G du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \frac{\tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu)}{e^{-u(1-q)\tilde{\beta}(E(p)-\mu)} + 1}, \quad (7.21)$$

onde $\tilde{K}_q^{(2)}(u)$ é dado por

$$\tilde{K}_q^{(2)}(u) = \frac{i}{2\pi Z_q} \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) \exp(-u)(-u)^{-1/(1-q)}, \quad (7.22)$$

com $\tilde{\beta} = \beta/\text{Tr}\rho^q$, $E(p) = p^2/(2m) + \langle \hat{n} \rangle_q \int dr v(r)$ e \tilde{Z}_1 sendo a função de partição usual multiplicada por $e^{-u\tilde{\beta}(1-q)(\tilde{U}_q - \mu\tilde{N}_q)}$.

A primeira ordem em $U(\mathbf{R}, T)$ nos conduz para

$$f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T) = f_q(E(p)) + \delta f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T), \quad (7.23)$$

onde

$$\delta f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R}, T) = \int_{-\infty}^T \int dT' d\mathbf{R}' \frac{\delta}{\delta U} f_q(\mathbf{p}, \mathbf{R} - \mathbf{R}', T - T') U(\mathbf{R}', T'). \quad (7.24)$$

Esta equação define a resposta linear no domínio de tempo real. Devido ao fato de que $U(\mathbf{R}, T)$ é pequeno, substituindo-o em (7.23) e levando em conta o caso em que $U(\mathbf{R}, T)$ tenha a forma $U(\mathbf{R}, T) = U(k, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R} - i\omega T}$ podemos calcular duas quantidades de interesse físico. A primeira delas é a variação de densidade,

$$\delta \langle \hat{n}(\mathbf{k}, \omega) \rangle_q = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \delta f_q(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega) = \frac{U(k, \omega)}{1 - v(k) \frac{\delta}{\delta U} \langle \hat{n}(\mathbf{k}, \omega) \rangle_q} \frac{\delta}{\delta U} \langle \hat{n}(\mathbf{k}, \omega) \rangle_q, \quad (7.25)$$

com

$$\frac{\delta}{\delta U} \langle \hat{n}(\mathbf{k}, \omega) \rangle_q = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{f_q(E(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2)) - f_q(E(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2))}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}/m}. \quad (7.26)$$

A outra quantidade é a resposta dinâmica da função dielétrica, K_q , que é dada por

$$K_q(k, \omega) = \left[1 - v(k) \frac{\delta}{\delta U} \langle \hat{n}(\mathbf{k}, \omega) \rangle_q \right]^{-1}. \quad (7.27)$$

Agora vamos analisar um sistema de partículas carregadas utilizando as expressões desenvolvidas acima. A interação se dá através do potencial de Coulomb, $v(R) = e^2/R$.

Após alguns cálculos e considerando o limite no qual as perturbações variam suavemente no espaço com $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p})^2 \ll \omega^2$, obtemos,

$$\frac{\delta}{\delta U} \langle \hat{n}(\mathbf{k}, \omega) \rangle_q = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left[f_q \left(\frac{(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2)^2}{2m} \right) - f_q \left(\frac{(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2)^2}{2m} \right) \right] \left[\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m\omega^2} + \frac{1}{\omega^5} \left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m} \right)^3 \right]. \quad (7.28)$$

Integrando a equação acima, Eq.(7.28), e considerando os termos até a ordem k^4 , temos que

$$\frac{\delta}{\delta U} \langle \hat{n}(\mathbf{k}, \omega) \rangle_q = \frac{\langle \hat{n} \rangle_q}{m\omega^2} \left[1 + \frac{k^2}{\omega^2} \langle \mathbf{v}^2 \rangle_q \right], \quad (7.29)$$

onde

$$\langle \hat{n} \rangle_q = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int_C du \tilde{K}_q^{(2)}(u) \frac{\tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu)}{e^{-u(1-q)\tilde{\beta}(E(p)-\mu)} + 1} \quad (7.30)$$

e

$$\langle \mathbf{v}^2 \rangle_q = \frac{1}{\langle \hat{n} \rangle_q} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int_C du \frac{p^2}{m^2} \tilde{K}_q^{(2)}(u) \frac{\tilde{Z}_1(-u(1-q)\tilde{\beta}, \mu)}{e^{-u(1-q)\tilde{\beta}(E(p)-\mu)} + 1}. \quad (7.31)$$

Para $\vec{k} \cdot \vec{p} \ll \omega^2$, a função dielétrica (7.27) pode ser achada com a substituição da Eq.(7.29), então obtemos que

$$K_q(k, \omega) = \omega^2 \left[\omega^2 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \langle \hat{n} \rangle_q \left[1 + \frac{k^2}{\omega^2} \langle \mathbf{v}^2 \rangle_q \right] \right]^{-1}, \quad (7.32)$$

com $\langle \hat{n} \rangle_q$ e $\langle \mathbf{v}^2 \rangle_q$ definidos nas Eqs.(7.30) e (7.31). Note que existem polos na função resposta (7.32) em $\omega^2 \approx 4\pi e^2 \langle \hat{n} \rangle_q / m + k^2 \langle \mathbf{v}^2 \rangle_q$. Estes polos que dependem de q , podem indicar possíveis excitações, ou resposta ressonante do sistema. Na Fig.(7.1), mostramos o comportamento de ω^2 para valores típicos de q de maneira a ilustrar os resultados obtidos no contexto generalizado ($q \neq 1$).

$$\times \frac{\left\{1 + (1-q)\tilde{\beta} \left(\langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle_q + \mu(n+1) \right)\right\}^{q/(1-q)+3/2(n+1)}}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + \frac{3}{2}(n+1)\right)}, \quad (7.34)$$

com

$$Z_q = \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[V \left(\frac{m}{2\pi(q-1)\tilde{\beta}} \right)^{3/2} \right]^n \\ \times \frac{\left\{1 + (1-q)\tilde{\beta} \left(\langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle_q + \mu n \right)\right\}^{1/(1-q)+3/2n}}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + \frac{3}{2}n\right)}, \quad (7.35)$$

onde $\langle v^2 \rangle_q = (2/m) \langle \langle \hat{H} \rangle_q / V \rangle$. No limite de baixas temperaturas a expressão para $\langle v^2 \rangle_q$ e $\langle \hat{n} \rangle_q$ fica dada por

$$\langle v^2 \rangle_q \approx \frac{1}{\langle \hat{n} \rangle_q} \left\{ \frac{3}{5m} \langle \hat{n} \rangle_1 \epsilon_F + \frac{2}{m} (\mu - \epsilon_F) \epsilon_F g(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{2m} \frac{g(\mu)}{(1-q)\tilde{\beta}^2} \left[\frac{\pi^2 \langle \hat{n} \rangle_1}{(1-q)\tilde{\beta} \epsilon_F} \left(\frac{\mu}{\epsilon_F} \right)^{1/2} \right]^{-1/2} \right. \\ \left. \times \frac{I_{\frac{2-q}{1-q}} \left\{ \left[\frac{\pi^2 \langle \hat{n} \rangle_1}{(1-q)\tilde{\beta} \epsilon_F} \left(\frac{\mu}{\epsilon_F} \right)^{1/2} \right]^{1/2} \right\}}{I_{\frac{1}{1-q}} \left\{ \left[\frac{\pi^2 \langle \hat{n} \rangle_1}{(1-q)\tilde{\beta} \epsilon_F} \left(\frac{\mu}{\epsilon_F} \right)^{1/2} \right]^{1/2} \right\}} \right\} \quad (7.36)$$

e

$$\langle \hat{n} \rangle_q \approx \langle \hat{n} \rangle_1 + (\mu - \epsilon_F) g(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} \frac{1}{(1-q)\tilde{\beta}^2} g'(\mu) \left[\frac{\pi^2 \langle \hat{n} \rangle_1}{(1-q)\tilde{\beta} \epsilon_F} \left(\frac{\mu}{\epsilon_F} \right)^{1/2} \right]^{-1/2} \\ \times \frac{I_{\frac{2-q}{1-q}} \left\{ \left[\frac{\pi^2 \langle \hat{n} \rangle_1}{(1-q)\tilde{\beta} \epsilon_F} \left(\frac{\mu}{\epsilon_F} \right)^{1/2} \right]^{1/2} \right\}}{I_{\frac{1}{1-q}} \left\{ \left[\frac{\pi^2 \langle \hat{n} \rangle_1}{(1-q)\tilde{\beta} \epsilon_F} \left(\frac{\mu}{\epsilon_F} \right)^{1/2} \right]^{1/2} \right\}}, \quad (7.37)$$

onde ϵ_F é a energia de Fermi, $\langle \hat{n} \rangle_1 = 3/2g(\epsilon_F)\epsilon_F$, $g(\epsilon) = 1/(4\pi^2)(2m)^{3/2}\epsilon^{1/2}$ é a densidade de estados e $I_\alpha(x)$ é a função modificada de Bessel de primeira espécie.

Antes de concluirmos esta seção, chamamos a atenção para a Eq.(7.25), que na teoria usual de muitos corpos ($q = 1$), pode ser obtida usando a teoria de resposta linear. De fato, o procedimento empregado aqui e a teoria de resposta linear são equivalentes para

$q = 1$ [113]. Entretanto, provar a equivalência destes formalismos para $q \neq 1$ não é possível. Isto se deve ao fato de que as condições de contorno baseadas nas propriedades cíclicas do traço não podem ser estabelecidas para $q \neq 1$, por exemplo $\langle \Psi(r, t) \Psi^\dagger(\bar{r}, \bar{t}) \rangle_q \neq \langle \Psi^\dagger(\bar{r}, \bar{t} - i\beta) \Psi(r, t) \rangle_q$ para $q \neq 1$. Assim, obter a Eq.(7.25) a partir da teoria de resposta linear [50] torna-se uma tarefa muito difícil.

7.3 Conclusões

Neste capítulo desenvolvemos a equação de transporte de Boltzmann para sistemas não extensivos empregando a técnica de funções de Green desenvolvidas no capítulo cinco [77]. Também aplicamos o formalismo desenvolvido aqui para um sistema fermiônico, obtendo a função resposta dielétrica e as oscilações de plasma. Estas quantidades físicas, a função resposta dielétrica e as oscilações de plasma, podem ser usadas para verificar uma possível relação entre sistemas anômalos e a mecânica estatística não extensiva.

Capítulo 8

Difusão anômala: equação de Fokker-Planck não linear fracionária

Neste capítulo discutiremos as soluções da equação de Fokker-Planck não linear fracionária $\partial_t \rho = \partial_x \{D(x) \partial_x^{\gamma-1} \rho - F(x) \rho\}$ cujo coeficiente de difusão e o termo de “drift” são dados por $D \propto |x|^{-\theta}$ ($\theta \in \mathcal{R}$) e $F(x) \propto x|x|^{\alpha-1}$. Também analisaremos a conexão entre resultados obtidos aqui e os resultados presentes na mecânica estatística não extensiva.

8.1 Difusão anômala do tipo correlacionada e “Lévy flight”

Atualmente os aspectos teórico e experimental da difusão anômala são estudados com grande interesse. De fato, a difusão anômala é observada em uma grande variedade de sistemas físicos tais como micelas de CTAB dissolvidas em água salgada [121], na análise

de histogramas das batidas do coração de um indivíduo saudável [122], no crescimento de superfície [123], no transporte caótico de um fluido em um fluxo laminar [124], no movimento conservativo em um potencial periódico com $d=2$ [125], no transporte de fluidos em meios porosos (veja [123] e referências contidas nela).

O estudo teórico da difusão anômala pode ser feito com o emprego de equações de Fokker-Planck não lineares, fracionárias ou uma mistura de ambas [126, 127, 128, 129, 130, 131]. Dentro deste contexto, uma representativa equação de difusão não linear é $\partial_t \rho = D \partial_{xx}^2 \rho^\nu$, às vezes chamada de *equação de meios porosos*. Tal equação tem sido aplicada em várias situações físicas tais como a percolação de gases através de meios porosos ($\nu \geq 2$) [132], regiões finas saturadas em meios porosos ($\nu = 2$) [133], modelos de crescimento de superfície sólido-sólido ($\nu = 3$). Na análise da difusão anômala também podemos usar as equações de difusão fracionárias. Elas são consideradas como uma formulação alternativa para modelos de caminhadas aleatórias com tempo contínuo, equações de Langevin generalizadas, ou generalizações da equação mestra. Neste sentido, podemos mencionar que uma equação mestra generalizada relacionada à equação de Fokker-Planck fracionária foi usada para modelar processos dinâmicos não Markovianos em proteínas [134].

De uma maneira geral as situações físicas mencionadas acima são essencialmente caracterizadas por uma difusão anômala do tipo Lévy (superdifusão; veja [22] e as referências contidas nela) ou do tipo correlacionada (ambas sub- e superdifusão; veja [30] e as referências dentro dela). A primeira é essencialmente caracterizada pela distribuição de Lévy e conseqüentemente não tem o segundo momento finito, i.e., $\langle x^2 \rangle$ diverge. A di-

fusão anômala do tipo correlacionada pode ter o segundo momento finito $\langle x^2 \rangle \propto t^\sigma$ ($\sigma > 1$, $\sigma = 1$ e $0 < \sigma < 1$ correspondem respectivamente a superdifusão, difusão normal e subdifusão; $\sigma = 0$ basicamente corresponde a localização). Dentro deste contexto é interessante saber mais a respeito destas equações, aos fenômenos relacionados a elas, suas soluções, suas propriedades e relações com a estatística extensiva [135] ou não extensiva [75]. Assim, dedicamos este capítulo a estabelecer algumas classes de soluções para as equações fracionais não lineares. Focaremos nossa atenção basicamente sobre a seguinte equação generalizada:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ D(x) \frac{\partial^{\gamma-1}}{\partial x^{\gamma-1}} [\rho(x, t)]^\nu \right\} - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ F(x) \rho(x, t) \right\} \quad (8.1)$$

onde $\nu, \gamma \in \mathcal{R}$, $D(x)$ é o coeficiente de difusão, $F(x) \equiv -dV(x)/dx$ é a força externa associada com o potencial $V(x)$, e (x, t) é 1+1 espaço-tempo. Pode ser verificado que $\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t)$ é independente do tempo. Sem dúvida, se escrevermos a equação acima sob a forma de $\partial_t \rho = \partial_x \mathcal{J}$ e assumirmos as condições de contorno $\mathcal{J}(\pm\infty, t) \rightarrow 0$, podemos mostrar que $\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t)$ é uma constante de movimento.

8.2 Equação de Fokker-Planck não linear inteira

Antes de começarmos nossa discussão, recordaremos alguns resultados apresentados em [23, 29, 131, 136, 24] que são soluções da Eq.(8.1) onde a posição e o tempo aparecem escalados como segue abaixo

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\Phi(t)} \tilde{\rho} \left[\frac{x}{\Phi(t)} \right]. \quad (8.2)$$

Inserindo a equação acima na Eq.(8.1) com $\gamma = 2$, $F(x) = 0$ e $D(x) = \mathcal{D} = \text{constante}$, obtemos

$$-\frac{\dot{\Phi}(t)}{\Phi(t)^2} \left[z \frac{d}{dz} \tilde{\rho}(z) + \tilde{\rho}(z) \right] = \frac{\mathcal{D}}{\Phi(t)^{2+\nu}} \frac{d^2}{dz^2} [\tilde{\rho}(z)]^\nu . \quad (8.3)$$

Seguindo [136], podemos resolver a equação anterior escolhendo o “ansatz”

$$[\Phi(t)]^\nu \frac{d}{dt} \Phi(t) = k , \quad (8.4)$$

que implica em

$$\Phi(t) = [(1 + \nu)kt]^{1/(1+\nu)} , \quad (8.5)$$

onde adotamos a solução que satisfaz $\Phi(0) = 0$. Agora, retornando a equação (8.3) e substituindo a Eq.(8.4) obtemos

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\Phi(t)} \exp_q \left[-\frac{k}{2\mathcal{D}\nu} \left(\frac{x}{\Phi(t)} \right)^2 \right] , \quad (8.6)$$

com $q = 2 - \nu$ e $\exp_q(x) \equiv [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)}$ sendo a função q -exponencial que surge do formalismo não extensivo ao otimizarmos, com vínculos apropriados, a forma entrópica $S_q = (1 - \int dx [\rho(x, t)]^q) / (q - 1)$ [75]. A constante k pode ser obtida da condição de normalização $\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t) = 1$. Sua extensão para o caso $F = k_1 - k_2x$ é dada por

$$\rho(x, t) = \exp_q \left[-\beta(t) (x - x_0(t))^2 \right] / Z(t) , \quad (8.7)$$

onde

$$\frac{\beta(t)}{\beta(0)} = \left[\frac{Z_q(0)}{Z_q(t)} \right]^2 \quad (8.8)$$

e

$$Z_q(t) = Z_q(0) \left[\left(1 - \frac{1}{K_2} \right) e^{-t/\tau} + \frac{1}{K_2} \right]^{\frac{1}{1+\nu}} , \quad (8.9)$$

com $x_0(t) = k_1/k_2 + [x_0(0) - k_1/k_2] e^{-k_2 t}$, $K_2 \equiv k_2/(2\nu D\beta(0)[Z_q(0)]^{1-\nu})$ e $\tau \equiv 1/(k_2(1+\nu))$ [29]. Agora voltando ao caso $F = 0$ (i.e., sem força externa) mas estendendo $D(x)$ e assumindo que o mesmo seja dado por $D(x) = \mathcal{D}|x|^{-\theta}$ ($\theta \in \mathcal{R}$) ($\theta = 0$ recuperamos o caso em que $D(x)$ é constante). A solução da Eq.(8.1) é dada em termos de uma q -exponencial alongada

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\bar{\Phi}(t)} \exp_q \left[\frac{k''}{\nu(2+\theta)\mathcal{D}} \left(\frac{|x|}{\bar{\Phi}(t)} \right)^{2+\theta} \right], \quad (8.10)$$

com $\bar{\Phi}(t) \propto t^{1/(1+\nu+\theta)}$ [24]. Como estamos interessados nas soluções físicas que decaiam a longas distâncias, por conseguinte temos que $\theta > -2$. Além disso, verificamos que os casos $\theta + \nu > 1$, $\theta + \nu = 1$ e $\theta + \nu < 1$ correspondem respectivamente aos regimes subdifusivo, normal e superdifusivo.

Podemos estender a solução (8.6) assumindo $F(x) = k_\alpha x|x|^{\alpha-1}$ (k_α coincidindo com nosso prévio k_2 para $\alpha = 1$; $k_\alpha = 0$ corresponde ao caso de ausência de força externa), mantendo $D(x) = \mathcal{D}|x|^{-\theta}$. Embora não saibamos o que acontece no caso genérico (α, θ, ν) quaisquer, há uma situação especial para a qual a solução escalada indicada em Eq.(8.2) ainda é válida. Este caso especial corresponde a $\alpha = q - \theta - 2$, i.e., $\alpha + \theta + \nu = 0$. Se esta condição for satisfeita obtemos

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\bar{\Phi}(t)} \exp_q \left[-\frac{1}{\mathcal{D}\nu} \left(\frac{k'}{2+\theta} \left(\frac{|x|}{\bar{\Phi}(t)} \right)^{2+\theta} - k_\alpha \ln_{2-q} \left(\frac{|x|}{\bar{\Phi}(t)} \right) \right) \right], \quad (8.11)$$

onde $\ln_q x \equiv (x^{1-q} - 1)/(1 - q)$ é a função q -logarítmica (que é a função inversa da função q -exponencial) e $\bar{\Phi}(t) = [(1 + \nu + \theta)k't]^{1/(1+\nu+\theta)}$, onde k' é uma constante que desempenha um papel análogo ao k na Eq.(8.6), e a mesma é determinada através da condição de normalização. Veja Fig.(8.1). Como último comentário desta seção cabe

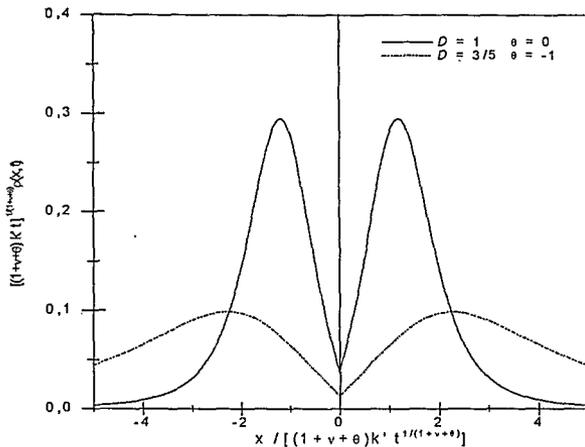


Figura 8.1: Este gráfico ilustra o comportamento de $[(1 + \nu + \theta)k't]^{1/(1+\nu+\theta)} \rho(x, t)$ versus $x/[(1 + \nu + \theta)k't]^{1/(1+\nu+\theta)}$ da Eq.(8.11) com $q = 3/2$ e $k_\alpha = 2k^{(q-1)/(2+\theta)}$ para valores típicos de \mathcal{D} e θ .

mencionar que a distribuição indicada pela Eq.(8.10) pode ser obtida ao otimizarmos S_q com o vínculo $\langle\langle |x|^{2+\theta} \rangle\rangle_q = \text{constante}$, onde o valor médio normalizado é definido como $\langle\langle \dots \rangle\rangle_q \equiv \int dx (\dots) [p(x)]^q / \int dx [p(x)]^q$.

8.3 Equação de Fokker-Planck não linear fracional

Nesta seção, analisaremos a equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ |x|^{-\theta} \frac{\partial^{\gamma-1}}{\partial x^{\gamma-1}} [\rho(x, t)]^\nu \right\}, \quad (8.12)$$

que unifica as equações presentes em [24, 131, 137]; sem perda de generalidade vamos considerar $\mathcal{D} = 1$. Seguiremos o procedimento empregado na seção anterior levando em

conta a propriedade genérica que segue,

$$\frac{d^\delta}{dx^\delta} \mathcal{G}(ax) = a^\delta \frac{d^\delta}{d\bar{z}^\delta} \mathcal{G}(\bar{z}) \quad (\delta \in \mathcal{R}) \quad (8.13)$$

com $\bar{z} = ax$. Esta propriedade não só é válida para derivadas ordinárias mas também para todos os operadores fracionários que vamos considerar. Assim, substituindo Eq.(8.2) em Eq.(8.12) e escolhendo o “ansatz”

$$-[\Phi(t)]^{\nu+\gamma+\theta-2} \frac{d}{dt} \Phi(t) = \bar{k} \quad , \quad (8.14)$$

onde \bar{k} é uma constante arbitrária, obtemos

$$\Phi(t) = \frac{1}{(\bar{k}_1 t + \bar{k}_2)^{\frac{1}{\nu+\gamma+\theta-1}}} \quad (8.15)$$

e

$$\frac{d}{dz} \left\{ z^{-\theta} \frac{d^{\gamma-1}}{dz^{\gamma-1}} [\tilde{\rho}(z)]^\nu \right\} = \bar{k} \left[z \frac{d}{dz} \tilde{\rho}(z) + \tilde{\rho}(z) \right] = \bar{k} \frac{d}{dz} [z\tilde{\rho}(z)] \quad , \quad (8.16)$$

com $\bar{k}_1 \equiv -(\gamma + \nu + \theta - 1)\bar{k}$, \bar{k}_2 sendo outra constante arbitrária. Finalmente, fazendo uma integração, temos que

$$\frac{d^{\gamma-1}}{dz^{\gamma-1}} [\tilde{\rho}(z)]^\nu = \bar{k} z^{1+\theta} \tilde{\rho}(z) + \mathcal{C} \quad , \quad (8.17)$$

onde \mathcal{C} é outra constante arbitrária (veja [131] para detalhes). Seguindo [131], também usaremos o operador de Riemann-Liouville [138], e trabalharemos com x *positivo* e, mais tarde, usaremos a simetria para estender os resultados ao eixo real (i.e., estamos trabalhando, em outras palavras, com $\frac{\partial^{\gamma-1}}{\partial|x|^{\gamma-1}}$ e $D(x) \propto |x|^{-\theta}$). Também, vamos usar o seguinte resultado genérico:

$$D_x^\delta [x^\alpha (a + bx)^\beta] = a^\delta \frac{\Gamma[\alpha + 1]}{\Gamma[\alpha + 1 - \delta]} x^{\alpha-\delta} (a + bx)^{\beta-\delta} \quad , \quad (8.18)$$

com $D_x^\delta \equiv d^\delta/dx^\delta$ e $\delta \equiv \alpha + \beta + 1$. Definindo $g(x) \equiv x^{\frac{\alpha}{\nu}} (a + bx)^{\frac{\beta}{\nu}}$ e $\lambda \equiv \alpha \left(1 - \frac{1}{\nu}\right) - \delta$, e rearrumando os índices, a Eq.(8.18) pode ser escrita como segue:

$$D_x^\delta [g(x)]^\nu = \frac{\Gamma[\alpha + 1]}{\Gamma[\alpha + 1 - \delta]} a^\delta x^\lambda g(x). \quad (8.19)$$

Usando esta propriedade em Eq.(8.16) e, por simplicidade, escolhendo $C = 0$, encontramos,

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{(2 - \gamma)(\gamma + \theta)}{1 - 2\gamma - \theta}, \\ \beta &= -\frac{(\gamma - 1)(\gamma - 2)}{1 - 2\gamma - \theta}, \\ \nu &= \frac{2 - \gamma}{1 + \gamma + \theta}. \end{aligned} \quad (8.20)$$

Note que os resultados acima recuperam aqueles obtidos em [131] para $\theta = 0$. Estes resultados nos levam a escrever a solução da seguinte forma

$$\rho(x, t) = \frac{A}{\left(|\bar{k}_1|t\right)^{\frac{1+\gamma+\theta}{\gamma^2+2\gamma\theta-\gamma+\theta^2-1}}} \left[\frac{z^{\gamma(1+\gamma+\theta)}}{(1+bz)^{(1-\gamma)(1+\gamma+\theta)}} \right]^{\frac{1}{1-2\gamma-\theta}}, \quad (8.21)$$

com

$$A = \left[\frac{\Gamma(-\beta)}{\Gamma(\alpha + 1)} \right]^{\frac{1+\gamma+\theta}{1-2\gamma-\theta}} \quad \text{e} \quad z \equiv \frac{x}{\left(|\bar{k}_1|t\right)^{\frac{1+\gamma+\theta}{\gamma^2+2\gamma\theta-\gamma+\theta^2+1}}}, \quad (8.22)$$

onde b é uma constante arbitrária (a ser considerada mais tarde, como ± 1 de acordo com as soluções que serão estudadas) e, sem perda de generalidade, fixamos $\bar{k}_2 = 0$ e $a = 1$.

Sem dúvida, a constante \bar{k}_2 pode ser incorporada através de uma mudança na origem dos tempos, e a constante a pode ser incorporada na constante de normalização A .

Podemos analisar várias regiões de intervalos para γ e θ , por simplicidade, ilustramos duas delas: $-\infty < \gamma < -1 - \theta$ com $\theta \geq 0$, e $0 < \gamma < 1/2$ com $0 \leq \theta < 1/2 - \gamma$.

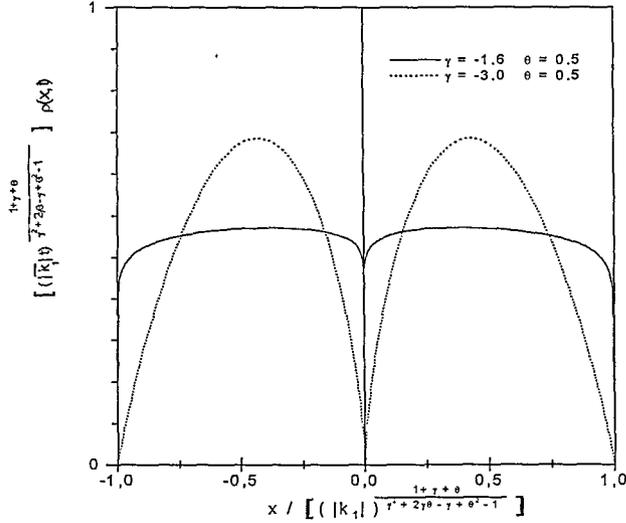


Figura 8.2: O comportamento de $\left[\left(|\bar{k}_1|t \right)^{\frac{1+\gamma+\theta}{\gamma^2+2\gamma\theta-\gamma+\theta^2-1}} \right] \rho(x, t)$ vs. $x / \left[\left(|\bar{k}_1|t \right)^{\frac{1+\gamma+\theta}{\gamma^2+2\gamma\theta-\gamma+\theta^2-1}} \right]$ ilustra a Eq.(8.21) para valores típicos de γ e θ satisfazendo as condições $\gamma < -1 - \theta$ e $\theta \geq 0$.

Vamos começar considerando a região $-\infty < \gamma < -1 - \theta$. Novamente sem perda de generalidade, podemos escolher $b = -1$. A condição de normalização implica em

$$A \int_{-1}^1 \left[\frac{z^{\gamma(1+\gamma+\theta)}}{(1-z)^{(1-\gamma)(1+\gamma+\theta)}} \right]^{\frac{1}{1-2\gamma-\theta}} dz = 2A \frac{\Gamma \left[\frac{\gamma^2+\gamma\theta-2\theta-2\gamma}{1-2\gamma-\theta} \right] \Gamma \left[\frac{1-\gamma+\gamma^2-\theta+\gamma\theta}{1-2\gamma-\theta} \right]}{\Gamma \left[2 - \frac{(1-2\gamma)(1+\gamma+\theta)}{1-2\gamma-\theta} \right]} = 1 \quad (8.23)$$

(veja Fig.(8.2)). Agora vamos analisar a região $0 < \gamma < 1/2$ e $0 \leq \theta < 1/2 - \gamma$ (onde $b = 1$). A normalização implica em

$$A = \frac{\Gamma \left(\frac{(1-\gamma)(1+\gamma+\theta)}{1-2\gamma-\theta} \right)}{2\Gamma \left(\frac{\gamma(1+\gamma+\theta)}{1-2\gamma-\theta} + 1 \right) \Gamma \left(\frac{(1-2\gamma)(1+\gamma+\theta)}{1-2\gamma-\theta} - 1 \right)}. \quad (8.24)$$

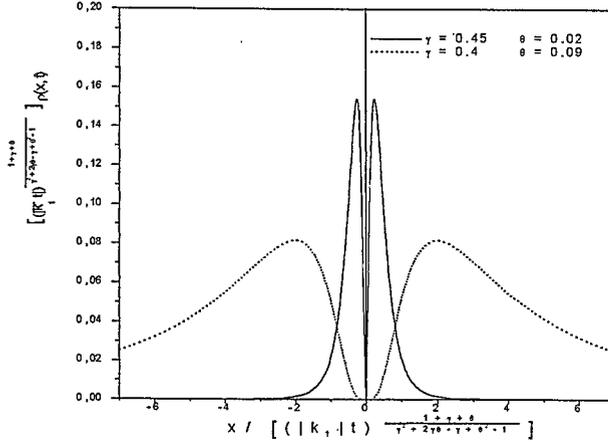


Figura 8.3: *Comportamento de $\left[\left(|\bar{k}_1 |t| \right)^{\frac{1+\gamma+\theta}{\gamma^2+2\gamma\theta-\gamma+\theta^2-1}} \right] \rho(x,t)$ vs. $x / \left[\left(|\bar{k}_1 |t| \right)^{\frac{1+\gamma+\theta}{\gamma^2+2\gamma\theta-\gamma+\theta^2-1}} \right]$, ilustra a Eq.(8.21) para valores típicos de γ e θ satisfazendo $0 < \gamma < 1/2$ e $0 \leq \theta < 1/2 - \gamma$. (veja Fig.(8.3)).*

Nós também consideraremos dois casos particulares, isto é, $\gamma = 0$ e $\gamma = 1$. O caso $\gamma = 2$ foi analisado em [24]. Começaremos considerando $\gamma = 0$ e ν arbitrário. Então substituindo estes valores na Eq.(8.1) obtemos que

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x,t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ |x|^{-\theta} \int_0^x [\rho(y,t)]^\nu dy \right\}. \quad (8.25)$$

Para resolver esta equação voltaremos para a Eq.(8.16), que depois de alguma simplifi-

cação fica dada por

$$\bar{k}z^{1+\theta}\bar{\rho}(z) = \int_0^z d\bar{z} [\bar{\rho}(\bar{z})]^\nu . \quad (8.26)$$

Após, alguns cálculos podemos verificar que solução da acima é dada por

$$\bar{\rho}(z) \propto \frac{1}{z^{1+\theta}} \left(1 + \bar{C}z^{1-\nu(1+\theta)}\right)^{1/(1-\nu)} , \quad (8.27)$$

onde \bar{C} é uma constante.

Por sua vez, o caso $\gamma = 1$ corresponde à equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ |x|^{-\theta} [\rho(x, t)]^\nu \right\} . \quad (8.28)$$

Para obtermos a solução desta equação é conveniente voltarmos para a Eq.(8.16). Seguindo, obtemos a equação

$$\bar{k}z\bar{\rho}(z) = z^{-\theta} [\bar{\rho}(z)]^\nu + \bar{C} , \quad (8.29)$$

que determina implicitamente $\bar{\rho}(z)$, onde \bar{C} é uma constante. A solução que corresponde ao caso $\bar{C} = 0$ é $\bar{\rho}(z) \propto z^{(1+\theta)/(\nu-1)}$.

Uma conexão entre os resultados que obtivemos aqui e as soluções que surgem da otimização da entropia [129] pode ser estabelecida. Estas distribuições não coincidem para um valor arbitrário de x . Porém, a comparação dos comportamentos assintóticos ($|x| \rightarrow \infty$) nos permitem identificar os tipos de caudas. Assim, identificando o comportamento exibido pela Eq.(8.21) com o comportamento assintótico $1/|x|^{2/(q-1)}$ que vem do problema entrópico [129], obtemos

$$q = \frac{3 + \gamma + \theta}{1 + \gamma + \theta} . \quad (8.30)$$

Esta relação, para $\theta = 0$, foi estabelecida em [131].

8.4 Conclusões

Em resumo, nós consideramos uma ampla variedade de equações de Fokker-Planck não lineares fracionárias em uma dimensão (Eq.(1)) obtendo algumas classes de soluções exatas. Em particular, estendemos aqui os resultados discutidos em [24, 131, 136]. Também discutimos a conexão dos resultados obtidos com a estatística não extensiva sempre que possível.

Capítulo 9

Tempo de escape e difusão anômala

Neste capítulo, vamos investigar um questão importante, qual seja a primeira passagem de tempo em sistemas unidimensionais governados pela equação de difusão não linear $\partial_t \rho = \partial_x [\partial_x U \rho] + D \partial_x^2 \rho^\nu$, onde o potencial externo, $U(x)$, apresenta dois mínimos e D, ν são parâmetros reais. Como resultado, obtemos expressões analíticas para a primeira passagem de tempo ao considerarmos estes sistemas próximos ao estado estacionário e conseqüentemente uma generalização da lei de Arrhenius. Tais predições analíticas estão de acordo com os resultados numéricos obtidos pela integração da equação de Ito-Langevin referente à estes sistemas. Comparamos também estes resultados com os resultados obtidos numericamente para condições iniciais fora do estado estacionário.

9.1 Introdução

O antigo problema de superar uma barreira potencial, conhecido como o problema de Kramers, é indubitavelmente presente em muitos campos da ciência que variam desde a física até a economia. Sendo, por exemplo, um ingrediente fundamental para a compreensão das transições de fase em sistemas complexos, tanto para sistemas em equilíbrio como para sistemas fora de equilíbrio térmico. Em particular, a quantidade conhecida como o tempo de fuga (ou tempo de primeira passagem), de um estado estável para outro, tem numerosas aplicações em uma variedade de problemas interessantes e modernos. Podemos, por exemplo, mencionar que a primeira passagem de tempo tem um papel fundamental em ressonância estocástica [139]. Até mesmo a extensão de caos em sistemas Hamiltonianos tem mostrado ter conexões com esta quantidade [140]. Uma interessante coleção destes e outros processos estocásticos relacionados a primeira passagem de tempo podem ser achados em [141]. Todos os exemplos que mencionamos acima foram formulados levando em conta o movimento Browniano usual para o qual propriedades de difusão são normais. Neste capítulo, analisaremos o problema de calcular a primeira passagem de tempo para sistemas que exibem difusão anômala do tipo correlacionado (a difusão do tipo Lévy não discutiremos aqui). A compreensão em um contexto mais amplo das propriedades do tempo de fuga em tais sistemas pode abrir a porta para o entendimento de novos fenômenos estocásticos que não seguem o movimento Browniano usual.

Os sistemas nos quais estamos interessados são aqueles que a difusão depende da densidade de partículas ρ , resultando em um coeficiente que é proporcional a potência de ρ a $(\nu -$

1). Como mencionamos anteriormente, no oitavo capítulo, muitos sistemas físicos são convenientemente descritos por esta classe de processos. Explicitamente, podemos dizer que estes processos, em geral, são governados por uma equação conhecida na literatura como *equação de meios porosos*

$$\partial_t \rho(x, t) = D \partial_x^2 [\rho(x, t)]^\nu, \quad (9.1)$$

onde x é uma coordenada adimensional que representa o espaço, ângulo ou uma variável de estado (química ou física), t se refere ao tempo e $\nu D > 0$. Reescrevendo o termo não linear como $\partial_x (D\nu\rho^{\nu-1}\partial_x\rho)$, fica evidente que a restrição $D\nu > 0$ garante que o fluxo seguirá das regiões mais densas para regiões menos densas. A não linearidade presente em ρ nos conduz a difusão anômala se $\nu \neq 1$ (isto é, superdifuso para $\nu < 1$ e subdifuso para $\nu > 1$ [30], com $\langle x^2(t) \rangle \propto t^{\frac{2}{\nu+1}}$) logo esperamos que interessantes anomalias deverão aparecer quando observarmos o comportamento das partículas ao atravessarem uma barreira de potencial. Isto é, precisamente o que queremos analisar aqui, como as propriedades de escape são alteradas quando $\nu \neq 1$.

9.2 O modelo

Vamos considerar um conjunto de partículas idênticas imersas em um ambiente térmico tal que este seja descrito pela equação de meios porosos (9.1). Sob a influência de um potencial externo $U(x)$ biestável, introduzido para analisar o comportamento de fuga, a densidade de partículas evolui seguindo a equação nonlinear de Fokker-Planck:

$$\partial_t \rho(x, t) = \partial_x [\partial_x U(x) \rho(x, t)] + D \partial_x^2 [\rho(x, t)]^\nu. \quad (9.2)$$

Esta equação tem sido objeto de diversos estudos como discutimos anteriormente no capítulo oito. A solução estacionária da Eq.(9.2) é

$$\rho_s(x) = [1 - (\nu - 1)\beta V(x)]_+^{\frac{1}{\nu-1}} / Z, \quad (9.3)$$

onde $[f]_+ = \max\{f, 0\}$, Z é uma constante de normalização positiva, $\beta = Z^{\nu-1}/(\nu D)$ e $V(x) = U(x) - U_0$, com U_0 o mínimo absoluto do potencial. Ressaltando que para $\nu \neq 1$ as soluções estacionárias da Eq.(9.2) têm a forma das distribuições de probabilidades obtidas a partir entropia de Tsallis. No limite $\nu \rightarrow 1$ recuperamos a equação de Fokker-Planck usual.

Na Fig.(9.1) ilustramos a solução estacionária para o caso em que o potencial seja da forma de um polinômio de ordem quatro. Note que a condição de “cut-off”, nos leva a obter regiões com probabilidade nula para o caso $\nu > 1$ (veja Fig.(9.1(1b))). Para um potencial de quarta ordem a condição $\nu > -3$ assegura que as soluções são normalizáveis, entretanto o caso em que não temos a presença de “drift” requer $\nu > -1$ assim restringiremos nossa discussão a esta região de valores de ν .

A não linearidade no termo de difusão da Eq.(9.2) leva em conta o fato de que o espaço envolvido apresenta uma espécie de desordem ou correlações de longo alcance nos confundindo a anomalias na difusão. A expressão $\beta = Z^{\nu-1}/(\nu D)$ pode ser interpretada como uma relação de Einstein generalizada dentro deste cenário. Lembrando que os sistemas esordenados ou correlacionamos tais como os discutidos aqui, devem recuperar a relação de Einstein na ausência de desordem [14], correspondendo ao caso de $\nu = 1$ e levando ao resultado conhecido $D = 1/\beta$. Também, como é mostrado em [29], podemos usar as

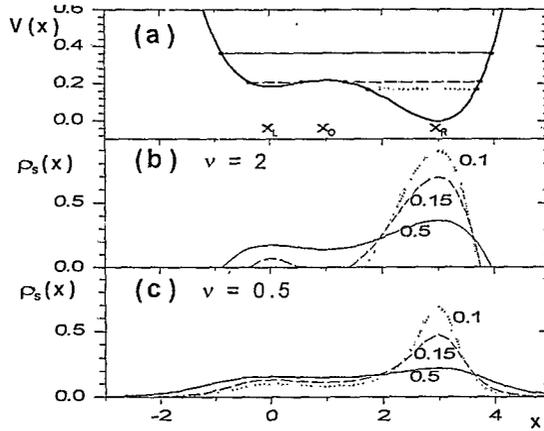


Figura 9.1: A condição de “cut-off”. (a) Nesta figura ilustramos o potencial $V(x) = ax^4 + bx^3 + cx^2 + d$, com $a = 1/48, b = -1/9, c = 1/8, d = 3/16$. A distribuição estacionária $\rho_s(x)$ é mostrada para $\nu = 2$ em (b) e para $\nu = 0.5$ em (c), para diferentes valores de D como indicado na figura. Para $\nu \leq 1$ o espaço é coberto por caudas do tipo lei de potências. Para $\nu > 1$ a condição de “cut-off” restringe a distribuição. Observe em (b) que quando D decresce o número de partículas confinadas é maior. As linhas horizontais em (a) representam a condição de “cut-off” $V(x) = 1/\beta$ que define as regiões permitidas para $\nu = 2$ com os valores de D presentes na figura (b). Todas as quantidades empregadas são adimensionais.

formas dependentes do tempo das relações de Einstein, as quais podem ser usadas para demonstrar as propriedades de escala destes sistemas que são não lineares. Por exemplo, para a partícula livre temos que $\langle x^2(t) \rangle \propto 1/\beta(t) \propto Z^2(t) \propto t^{\frac{2}{\nu+1}}$.

A equação de Ito-Langevin (IL) associada com a Eq.(9.2) é dada por [30]

$$\dot{x} = -\partial_x U(x) + \sqrt{|D|} [\rho(x, t)]^{\frac{\nu-1}{2}} \eta(t), \quad (9.4)$$

onde $\eta(t)$ é um ruído Gaussian com valor médio nulo e variância 2. No caso particular $\nu = 1$ recuperamos a equação de Langevin usual para ruído constante. Como o ruído depende do estado, podemos ver tal fato como a influência do meio. Assim uma partícula que evolui interage com o ambiente que reage à densidade coletiva de estados ao seu redor. Neste sentido, podemos pensar em subdifusão como um tipo de “atração” entre as partículas: as partículas tendem a ficar perto das outras partículas. Consequentemente, podemos ver a superdifusão com um tipo de reação para o escasseamento: se a partícula está em uma região altamente povoada em certo sentido é confinada pelas outras partículas, e flutuações não são tão grandes, mas tão logo ela consiga entrar em regiões menos densas que não experimenta este confinamento e as flutuações ficam grandes.

9.3 Resultados numéricos nas vizinhanças de um estado de equilíbrio

Para realizar os experimentos numéricos, escolhemos um potencial na forma de um polinômio de quarto grau $V(x) = ax^4 + bx^3 + cx^2 + d$. Os coeficientes foram escolhidos como se

encontra ilustrado na Fig.(9.1), para os quais $(x_L, x_O, x_R) = (0, 1, 3)$, com x_L , x_O e x_R correspondem ao mínimo do lado esquerdo, o topo da barreira e o mínimo do lado direito, respectivamente. Vamos estudar o comportamento de escape próximo ao estado de equilíbrio. Isto é, uma vez que a população de um grande número de partículas tenha atingido o equilíbrio descrito pela Eq.(9.3), colocamos um contador em x_L .

Então a trajetória das partículas é obtida resolvendo, seguindo o procedimento numérico de [135], a equação (9.4) para $\rho(x, t) = \rho_s(x)$, começando de $x(t=0) = x_L$. Para $\nu > 1$, as flutuações são reduzidas e as trajetórias resultantes confinadas na região que tem como limite as condições de “cut-off” (Fig.(9.1b)); além disso, quando a constante difusão D é menor que um valor crítico D_c (aqui $D_c \simeq 0.17$ para $\nu = 2$), o espaço dos estados se torna desconectado e os cruzamentos são proibidos. Para $\nu < 1$, a amplitude de ruído é aumentada nas regiões de baixa densidade e o espaço inteiro tende ser povoado.

Medimos a primeira passagem de tempo, i.e., o intervalo de tempo médio $T(x_L \rightarrow x)$ que uma partícula em x_L leva para chegar pela primeira vez a um determinado estado $x > x_L$. Na Fig.(9.2), apresentamos o gráfico de $T(x) \equiv T(x_L \rightarrow x)$ vs. x . Para $\nu \geq 1$ (Fig.(9.2a)), os patamares ficam evidentes quando D se aproxima de D_c indicando maior patamar, de tempo gasto para superar a barreira ao redor de x_O . Por outro lado, para $\nu < 1$ (Fig.(9.2b)), o tempo de passagem é sensível ao estado final e não há um patamar bem definido, até mesmo no regime em que D é pequeno. Além disso, com D decrescendo, as curvas sofrem um colapso em um estado limite abaixo de x_R , mas, crescem mais rápido acima de x_R , divergindo no limite $D \rightarrow 0$.

O comportamento de escape parece ser descontínuo em $D = 0$. Na realidade, para $D = 0$,

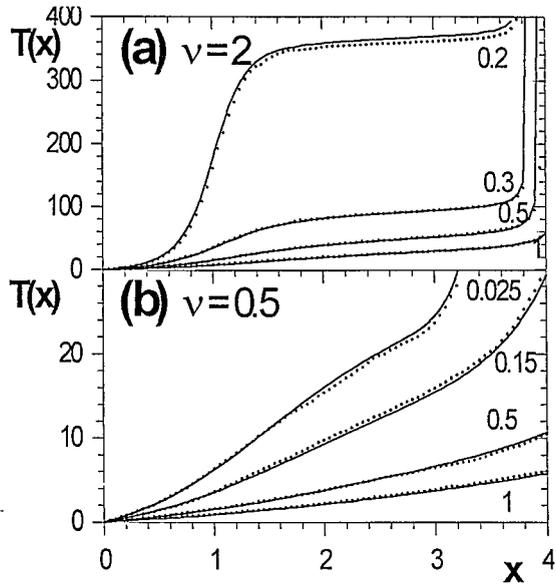


Figura 9.2: Representação de $T(x) \equiv T(x_L \rightarrow x)$ vs. x com $\nu = 2$ na figura (a) e $\nu = 0.5$ na figura (b). Os pontos cheios correspondem aos experimentos numéricos e as linhas correspondem às predições teóricas dadas pela Eq.(9.6).

não há difusão, entretanto para D finito a partícula é atraída para o vale maior em x_R e fica aprisionada com um intervalo de tempo típico que é limitado por cima. Este efeito pode ser entendido tendo em mente que flutuações dependem de D não só pelo fator $\sqrt{|D|}$ mas também através da densidade por um fator que, para $\nu < 1$, se torna muito grande fora das vizinhanças do mínimo absoluto onde as partículas tendem a se concentrar com $D \rightarrow 0$. Em outras palavras, o caso determinístico não é recuperado quando $D \rightarrow 0$ sendo que o coeficiente efetivo de difusão $D\rho^{\nu-1}$ não se anula neste limite devido à singularidade em $\rho = 0$.

9.4 Considerações Analíticas

Agora mostraremos que os resultados discutidos anteriormente podem ser entendidos analiticamente. Para sistemas na vizinhança do estado estacionário, podemos considerar a seguinte aproximação para Eq.(9.2)

$$\partial_t \rho(x, t) \simeq \partial_x [\partial_x U(x) \rho(x, t)] + D \partial_x^2 [\{\rho_s(x)\}^{\nu-1} \rho(x, t)]. \quad (9.5)$$

Um vez que a equação de Fokker-Planck é linear, o problema de escape pode ser tratado diretamente, seguindo de maneira análoga dos processos homogêneos caracterizados por uma força externa de “drift” e um coeficiente de difusão [142]. Basicamente uma equação para a probabilidade que a partícula esteja ainda em um dado espaço e tempo t é achada om a equação de Fokker-Planck nas variáveis anteriores com as condições de contorno apropriadas. Desta maneira, achamos a primeira passagem de tempo médio $T(x_1 \rightarrow x_2)$,

para $x_1 < x_2$, dada por

$$T(x_1 \rightarrow x_2) = |\nu|\beta \int_{x_1}^{x_2} [1 - (\nu - 1)\beta V(y)]_+^{\frac{|\nu|}{1-\nu}} dy \int_{-\infty}^y [1 - (\nu - 1)\beta V(z)]_+^{\frac{\mu}{1-\nu}} dz, \quad (9.6)$$

onde $\mu = 1$ se $\nu > 0$ e $\mu = 1 - 2\nu$ se $\nu < 0$. A expressão (9.6) reproduz com boa concordância os dados numéricos como mostra a Fig.(9.2).

Na Fig.(9.3), mostramos $T \equiv T(x_R) \equiv T(x_L \rightarrow x_R)$ como uma função de $1/D$ (linhas cheias), para diferentes valores de $\nu > 0$, calculados da Eq.(9.6). T representa a medida do tempo de escape do mínimo da esquerda para o mínimo da direita, para todos os casos em que $\nu < 1$ os patamares não são bem definidos. No intervalo $\nu > 1$, T diverge em D_c , definido pela condição de “cut-off”, abaixo da qual o lado direito se torna inacessível. No caso em que $0 < \nu < 1$, T satura com $1/D$ decrescendo. O regime hiperdifuso $\nu < 0$ (com $D < 0$), onde o espalhamento é mais rápido que o balístico, demonstra o fato geral de que para a região $0 < \nu < 1$ devemos considerar $|D|$ ao invés de D . Para um ν e $1/|D|$ pequeno o tempo de escape segue a lei de potência $T \sim \beta^{\frac{3}{2}} \sim 1/|D|^{\frac{3}{2}}$.

Se $x_1 \simeq x_L$ e $x_2 \simeq x_R$, então, é possível achar uma expressão aproximada para T onde $|D|$ (com $1/\beta$) é suficientemente pequeno, notando que o integrando em Eq.(9.6) apresenta um pico em x_O e x_L respectivamente. Em tais casos a integral pode ser calculada usando o método do ponto de sela. Seguindo este procedimento chegamos em

$$T \simeq \frac{2\pi}{\sqrt{\omega_L \omega_O}} \frac{2|\nu|}{|\nu| + \mu} \left(\frac{1 - (\nu - 1)\beta V(x_O)}{1 - (\nu - 1)\beta V(x_L)} \right)^{\frac{|\nu| + \mu}{2(1-\nu)}}, \quad (9.7)$$

onde ω_L e ω_O são as frequências no mínimo do lado esquerdo e no topo da barreira de potencial. A equação (9.7) é uma generalização da lei de Arrhenius, que, como esperado, recupera sua forma original em $\nu \rightarrow 1$. De fato, no limite, $T \simeq (2\pi/\sqrt{\omega_L \omega_O}) \exp(\Delta V/D)$,

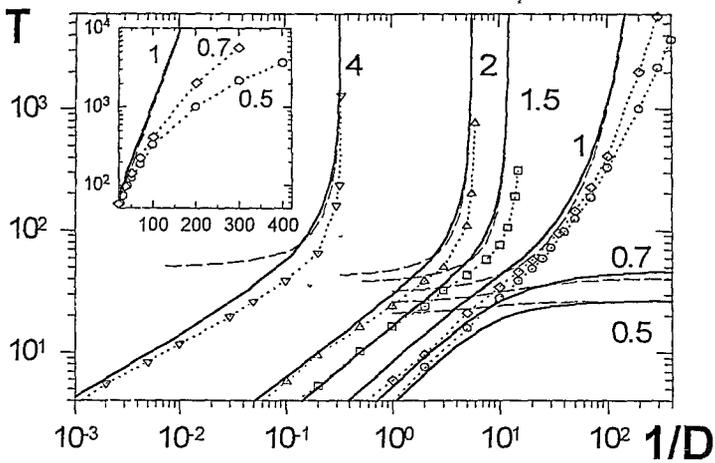


Figura 9.3: O tempo de escape $T \equiv T(x_R)$ como uma função de $1/D$, para diferentes valores de $\nu > 0$. As linhas cheias correspondem à Eq.(9.6) e as linhas pontilhadas correspondem à aproximação dada pela Eq.(9.7) para D pequeno. Os símbolos correspondem aos resultados numéricos.

onde $\Delta V \equiv V(x_0) - V(x_L)$ é a altura da barreira. Para comparação, exibimos a aproximação dada pela Eq.(9.7) na Fig.(9.3) (linhas pontilhadas). Como esperado, a aproximação é boa para $1/|D|$ grande e funciona melhor para $\nu > 1$. Agora comentaremos os principais fatos revelados por esta expressão. Quando $\nu > 1$, ela prevê a divergência de T a D finito. De fato, D_c é obtido de $1/\beta_c \simeq (\nu - 1)V(x_0)$. Quando $\nu < 1$, a saturação de T para $1/|D|$ grande também é prevista (a menos que $V(x_L) = 0$) sendo que β é uma função crescente de $1/|D|$ ilimitada. Se $V(x_L) = 0$, então Eq.(9.7) indica que T para $D|$ se tornando nulo. Em particular, se $0 < \nu < 1$, $T \sim \beta^{\frac{\nu+1}{2(1-\nu)}} \sim 1/D^{1-\nu}$ e o limite determinístico é achado. No limite $\nu \rightarrow 1$ o crescimento exponencial de T com $1/D$ é sempre recuperado.

9.5 Resultados numéricos para sistemas fora do estado de equilíbrio

O problema nas vizinhanças do equilíbrio de um estado corresponde a um problema linear com o coeficiente de difusão dependendo do estado. Permitindo desta forma um tratamento analítico que podemos ter sempre em nossa mente como uma referência para estudar casos mais gerais. Para testar como os resultados anteriores se comportam com relação aos resultados pertencentes a uma situação mais geral, executamos um estudo numérico das propriedades do tempo de escape de um estado fora do equilíbrio. Particularmente, estudamos o caso em que as partículas são injetadas ao mesmo tempo em x_L . Este instante requer uma integração simultânea da equação de Fokker-Planck junto com a equação de IL (9.4). Agora, o parâmetro ν deve estar na região $\nu > 0$ devido a divergência na Eq.(9.2). Empregamos um esquema implícito de diferença finita, com diferenças espaciais centradas, para integração numérica da equação não linear de Fokker-Planck. A evolução temporal da densidade está ilustrada na Fig.(9.4).

O tempo de escape T como uma função de $1/D$ considerando diferentes valores de ν está presente na Fig.(9.3).

Agora vamos comparar estes resultados com os anteriores. Para D suficientemente grande, T não é sensível, dependendo da distribuição inicial a Eq.(9.6) passa pelos dados numéricos para $\nu > 0$, seguindo a lei de potência derivada acima, $T \sim 1/D^{\frac{3}{\nu+3}}$. Por outro lado, para D pequeno, os tempos para atravessar a barreira ficam cada vez mais próximos daqueles obtidos para o caso em que $\nu = 1$ para ν arbitrário. Isto pode ser entendido como segue.

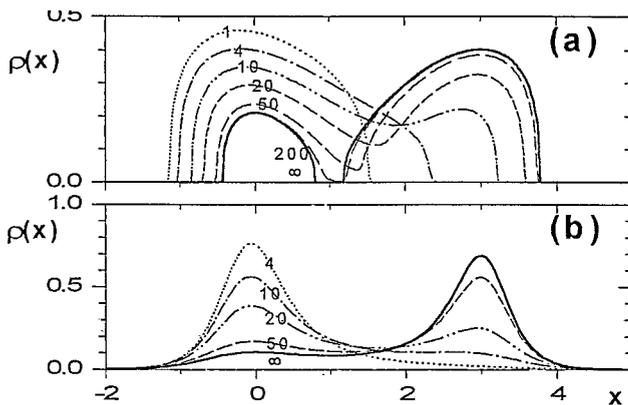


Figura 9.4: Ilustramos a evolução temporal da Eq.(9.2) com $\rho(x,0) = \delta(x)$ para $(\nu,D)=(4.0,2.5)$ na figura (a) e $(0.5,0.1)$ na figura (b).

Para $\nu > 1$, as passagens de tempo são menores que aquelas dada pela Eq. (9.6) visto que exista uma passagem inicial entre duas regiões desconectadas no estado de equilíbrio (veja Fig.(9.4(a))). Entretanto nossos resultados sugerem que a divergência de T para um D crítico finito, próximo a D_c , ainda ocorre. Por outro lado, no intervalo $\nu < 1$, o tempo levado para atravessar a barreira é maior que aquele dado pela Eq.(9.6) (veja Fig.(9.4(b))). A saturação não é observada e o tempo de escape cresce com $1/D$ aparentemente seguindo uma lei de potência.

9.6 Conclusões

Neste capítulo, obtivemos o tempo de escape para sistemas que exibem difusão anômala seguindo uma dependência estocástica não linear sobre a densidade. Para condições de estado de equilíbrio, obtemos expressões analíticas para a primeira passagem de tempo cujas previsões concordam de maneira satisfatória com os resultados numéricos (Fig.(9.2)). Estas expressões trazem uma generalização da lei de Arrhenius. Próximo as condições de estacionaridade, dois regimes são observados: Na região $\nu < 1$ (superdifusão), o tempo de escape T satura para D tornando-se nulo, se $V(x_L) \neq 0$, e cresce com $1/D$ seguindo uma lei de potência, para o outro caso. Na região $\nu > 1$ (subdifusão), T diverge em D_c (Fig.(9.3)). Estes resultados dão a idéia do que esperamos em um caso mais geral. Para sistemas longe do estado de equilíbrio, T cresce com $1/D$ aparentemente seguindo uma lei de potência nos casos superdifusos e diverge com D finito nos casos subdifusos.

Discussões e Perspectivas

Abordamos várias questões ao longo desta tese. Resumidamente os tópicos que analisamos foram os seguintes:

(i) a estabilidade termodinâmica da estatística não extensiva em sua formulação baseada em vínculos normalizados [76];

(ii) as propriedades formais de uma termoestatística baseada na entropia de Renyi e suas extensões para o caso $S = S(\text{Tr}\rho_q^q)$ [79, 80, 81];

(iii) a validade das aproximações baseadas em expansões em potências de $(1 - q)$ e fatorizações [74];

(iv) a teoria de funções de Green usando a versão normalizada da estatística não extensiva [77];

(v) sistema gravitacional em duas dimensões [73];

(vi) a formulação de uma equação de transporte [72];

(vii) obtivemos novas classes de soluções para a equação de Fokker-Planck não linear fracionária [83];

(viii) propomos uma generalização para a lei de Arrhenius [84].

No item (i), provamos que o calor específico não é negativo para $q \notin [0, 1]$. Para a região de $0 < q < 1$ não conseguimos uma prova algébrica, mas temos indícios que em certas circunstâncias ele é não negativo.

Em (ii), exploramos várias propriedades da entropia de Renyi, sendo interessante notar que os resultados das médias são iguais aos resultados usuais para os sistemas que abordamos. Em particular, os valores médios obtidos, usando a distribuição obtida da entropia de Renyi, também são iguais aos valores médios obtidos com a mecânica estatística não extensiva quando consideramos a temperatura efetiva $T_{eff} \equiv \text{Tr}\rho_q^q/\beta$. Neste sentido, podemos mencionar que embora alguns autores tenham sugerido que T_{eff} pode ser uma temperatura física temos indícios, contrários, para dizer que está questão ainda permanece sem uma resposta definitiva. Efetivamente, experimentos de manganitas são descritos de maneira satisfatória se empregarmos uma temperatura efetiva do tipo $T_{eff}^* \equiv (\text{Tr}\rho_q^q + (1-q)\beta U_q)/\beta$ [143]. Assim, esperamos que os resultados obtidos em (i) e (ii) venham a ser de grande ajuda nas discussões que rodeiam este tema.

Em (iii), esclarecemos como as aproximações baseadas em expansões em potências de $(1-q)$ e fatorizações se comportam quando o número de graus de liberdade é muito grande para um sistema não interagente. Ressaltando que nestas aproximações tomar $N \rightarrow \infty$ implica em $q \approx 1$.

No item (iv), revisitamos a teoria de funções de Green usando os valores médios normalizados. No aspecto formal não tivemos grandes mudanças, as diferenças se verificaram quando trabalhamos um exemplo específico pois aí as auto-consistências introduzidas revelaram seus efeitos. Como mostrado no capítulo cinco, onde em contraste com os resultados

anteriores[49], os resultados obtidos para a temperatura crítica não são muito sensíveis ao parâmetro q quando consideramos a versão normalizada da mecânica estatística não extensiva[77].

Analisamos também um sistema gravitacional em duas dimensões obtendo a equação de estado para o mesmo no item (v).

Em (vi), complementando os desenvolvimentos feitos em (iv), obtivemos uma equação de transporte. A equação de transporte obtida formalmente é igual a usual assim como as leis de conservação que se derivam dela. Entretanto, devemos notar que, como a condição de contorno imposta para ela é diferente da usual, os resultados obtidos a partir dela também são diferentes dos usuais.

Em (vii) e (viii) analisamos vários aspectos da difusão anômala usando as equações de Fokker-Planck não linear fracionária. Obtivemos uma nova classe de soluções para estas equações seguida de uma generalização para a lei de Arrhenius.

Nossas perspectivas são de continuarmos explorando cada vez mais a estatística não extensiva e suas relações com sistemas que apresentam não extensividade como difusão anômala, sistemas de muitos corpos com interações de longo alcance, dentre outros. Por exemplo, estamos estudando a equação de Fokker-Planck não linear com anisotropias nos coeficientes de difusão em presença de um “drift” externo e suas relações com o formalismo não extensivo[144], sistemas paramagnéticos[145], os efeitos de considerarmos um operador quântico do tipo lei de potência.

Bibliografia

- [1] T. Padmanabhan, *Phys. Reports* **5**, 285 (1990).
- [2] A. M. Salzberg, *J. Math. Phys.* **6**, 158 (1965).
- [3] L. Tisza, *Generalized Thermodynamics* (MIT Press, Cambridge, 1966).
- [4] P. T. Landsberg, *Equilibrium Always a Entropy Maximum ?*, *J. Stat. Phys.* **35**, 159 (1984).
- [5] J. Binney and S. Tremaine, *Galactic Dynamics* (Princeton University Press, Princeton, 1987).
- [6] H. S. Robertson, *Statistical Thermodynamics* (P. T. R. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey 1993).
- [7] B. J. Hiley and G. S. Joyce, *Proc. Phys. Soc.* **85**, 493 (1965).
- [8] S. K. Ma, *Statistical Mechanics* (World Scientific, New York, 1993).
- [9] S. A. Cannas, *Phys. Rev. B* **52**, 3034 (1995).
- [10] J. O. Indekeu, *Physica A* **183**, 439 (1992).

- [11] J. O. Indekeu and A. Robledo, *Phys. Rev. E* **47**, 4607 (1993).
- [12] X. -P. Huang and C. F. Driscoll, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2187 (1994); F. Andereg, X. -P. Huang, C. F. Driscoll, E. M. Hollmann, T. M. O'Neil, and D. H. E. Dubin, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2128 (1997); X. -P. Huang, F. Andereg, E. M. Hollmann, C. F. Driscoll, and T. M. O'Neil, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 875 (1997).
- [13] M. F. Shlesinger, B. J. West and J. Klafter, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1100 (1987).
- [14] J. P. Bouchaud and A. Georges, *Phys. Rep.* **195**, 127 (1991).
- [15] M. F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky and J. Klafter, *Nature* **363**, 31 (1993).
- [16] J. Klafter, G. Zumofen and A. Blumen, *Chem. Phys.* **177**, 821 (1993).
- [17] R. Balian, *From Microphysics to Macrophysics*, Vol. I (Springer-Verlag, Berlin, 1991).
- [18] A. Einstein, *Annalen de Physik* **33**, 1275 (1910).
- [19] C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* **52**, 479 (1988).
- [20] E. M. F. Curado and C. Tsallis, *J. Phys. A* **24**, L69 (1991); Errata: **24**, 3187 (1991); **25**, 1019 (1992).
- [21] S. R. A. Salinas and C. Tsallis, *Nonextensive Statistical Mechanics and Thermodynamics*, *Braz. J. Phys.* **29**, Number 1 (1999); P. Grigolini, C. Tsallis and B. J. West, *Classical and Quantum Complexity and Nonextensive Thermodynamics*, *Chaos, Solitons and Fractals* **13**, Number 3 (Pergamon-Elsevier, Amsterdam, 2002); G. Kani-

- adakis, M. Lissia and A. Rapisarda, *Non Extensive Thermodynamics and Physical Applications* Physica A (Elsevier, Amsterdam, 2002), in press.
- [22] C. Tsallis, S. V. F. Levy, A. M. C. Souza and R. Maynard, Phys. Rev. Lett. **75**, 3589 (1995); Erratum: **77**, 5442 (1996); D. H. Zanette and P. A. Alemany, Phys. Rev. Lett. **75**, 366 (1995); M. O. Caceres and C. E. Budde, Phys. Rev. Lett. **77**, 2589 (1996); D. H. Zanette and P. A. Alemany, Phys. Rev. Lett. **77**, 2590 (1996); M. Buiatti, P. Grigolini, and A. Montagnini, Phys. Rev. Lett. **82**, 3383 (1999); D. Prato and C. Tsallis, Phys. Rev. E **60**, 2398 (2000).
- [23] A. R. Plastino and A. Plastino, Phys. Lett. A **222** 347 (1995).
- [24] L. C. Malacarne, I. T. Pedron, R. S. Mendes and E.K. Lenzi, Phys. Rev. E **63**, 30101R (2001).
- [25] I. T. Pedron, R. S. Mendes, L. C. Malacarne and E. K. Lenzi, *Nonlinear anomalous diffusion equation and fractal dimension: Exact generalized gaussian solution*, aceito para publicação no Physical Review E (2002).
- [26] L. C. Malacarne, R. S. Mendes, I. T. Pedron and E. K. Lenzi, *N-dimensional nonlinear Fokker-Planck equation with time-dependent coefficients*, aceito para publicação no Physical Review E (2002).
- [27] E. K. Lenzi, R. S. Mendes and L. R. da Silva, *Anomalous diffusion: fractional Fokker-Planck equation and its solutions*, preprint (2001).

- [28] E. K. Lenzi, R. S. Mendes and L. C. Malacarne, *Nonlinear fractional Fokker-Planck Equation*, preprint (2002).
- [29] C. Tsallis and D. J. Bukman, *Phys. Rev. E* **54**, R2197 (1996).
- [30] L. Borland, *Phys. Rev. E* **57**, 6634 (1998).
- [31] B. M. Boghosian, *Phys. Rev. E* **53**, 4754 (1996); C. Tsallis, A. M. C. de Souza, *Phys. Lett. A* **235**, 444 (1997).
- [32] T. Arimitsu and N. Arimitsu, *Phys. Rev. E* **61**, 3237 (2000); T. Arimitsu and N. Arimitsu, *J. Phys. A* **33**, L235 (2000); C. Beck, *Physica A* **277**, 115 (2000); C. Beck, G. S. Lewis and H. L. Swinney, *Phys. Rev. E* **63**, 035303 (2001).
- [33] A. R. Plastino and A. Plastino, *Phys. Lett. A* **174**, 384 (1993); J. J. Aly, *Proceedings of N-Body Problems and Gravitational Dynamics, Aussois, France* ed F. Combes and E. Athanassoula (Publications de l'Observatoire de Paris, Paris, 1993) p. 19.
- [34] V. H. Hamity and D. E. Barraco, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4664 (1996).
- [35] L. P. Chimento, *J. Math. Phys.* **38**, 2565 (1997).
- [36] D. F. Torres, H. Vucetich and A. Plastino, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1588 (1997); [Erratum: **80**, 3889 (1998)].
- [37] C. Tsallis, F. C. Sá Barreto and E. D. Loh, *Phys. Rev. E* **52**, 1447 (1995).
- [38] E. K. Lenzi and R. S. Mendes, *Phys. Lett. A* **250**, 270 (1998).

- [39] A. Lavagno, G. Kaniadakis, M. Rego-Monteiro, P. Quarati and C. Tsallis, *Astro. Lett. and Comm.* **35**, 449 (1998).
- [40] I. Koponen, *Phys. Rev. E* **55**, 7759 (1997).
- [41] P. Jund, S. G. Kim and C. Tsallis, *Phys. Rev. B* **52**, 50 (1995).
- [42] M. L. Lyra and C. Tsallis, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 53 (1998).
- [43] C. Anteneodo and C. Tsallis, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5313 (1998).
- [44] K. S. Fa, R. S. Mendes, P. R. B. Pedreira and E. K. Lenzi, *Physica A* **295**, 242 (2001).
- [45] S. Curilef, *Physics Letters A* **218**, 11 (1996); S. Curilef, *Z. Phys. B* **100**, 433 (1996).
- [46] K. S. Fa and E. K. Lenzi, *Braz. J. Phys.* **31**, 317 (2001); H. H. Aragão-Rêgo, D. J. Soares, L. S. Lucena, L. R. da Silva, E. K. Lenzi and K. S. Fá, *Bose-Einstein and Fermi-Dirac distributions in nonextensive Tsallis statistics: an exact study*, preprint (2001).
- [47] S. Abe and A. K. Rajagopal, *Phys. Rev. A* **60**, 3461 (2000).
- [48] L. C. Malacarne, R. S. Mendes and E. K. Lenzi, *Average Entropy of a Subsystem from its Average Tsallis Entropy*, aceito para publicação no *Phys. Rev. E* (2002).
- [49] A. K. Rajagopal, R. S. Mendes and E. K. Lenzi, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3907 (1998); E. K. Lenzi, R. S. Mendes, and A. K. Rajagopal, *Phys. Rev. E* **59**, (1999) 1397.

- [50] A. K. Rajagopal, Phys. Rev. Lett. **76**, 3469 (1996).
- [51] E. K. Lenzi, L. C. Malacarne and R. S. Mendes, Physica A **278**, 201 (2000).
- [52] A. Plastino and C. Tsallis, J. Phys. A **26**, L893 (1993).
- [53] E. K. Lenzi L. C. Malacarne and R. S. Mendes, Phys. Rev. Lett. **80**, 218 (1998); R. S. Mendes, K. S. Fa, E. K. Lenzi and J. N. Maki, Eur. J. Phys. B **10**, 353 (1999).
- [54] E. K. Lenzi, E. P. Borges and R. S. Mendes, J. Phys. A **32**, 8551 (1999).
- [55] S. Curilef, *Alguns Aspectos Fundamentais da Mecânica Estatística Não Extensiva*, Tese de Doutorado do CBPF (1997).
- [56] R. J. V. dos Santos, J. Math. Phys. **38** (1997) 4104; S. Abe, Phys. Lett. A **271**, 74 (2000).
- [57] S. Abe, Phys. Lett. A **275**, 250 (2000).
- [58] S. Abe, Physica A **300**, 417 (2001).
- [59] A. M. Mariz, Phys. Lett. A **165**, 409 (1992); J. A. S. Lima, R. Silva and A. R. Plastino, Phys. Rev. Lett. **86**, 2938 (2001).
- [60] R. Silva, A. R. Plastino and J. A. S. Lima, Phys. Lett. A **249**, 401 (1998).
- [61] C. Kaniadakis, A. Lavagno and P. Quarati, Astrophys. Space Sci. **258**, 145 (1998); G. Kaniadakis, A. Lavagno, M. Lissia, et al., Physica A **261**, 359 (1998); G. Kaniadakis, A. Lavagno and P. Quarati, Phys. Lett. B **369**, 308 (1996).

- [62] C. Tsallis, E. P. Borges and J. Anjos, *Fluxes of cosmic rays: A delicately balanced anomalous thermal equilibrium*, preprint (2002) (astro-ph/0203258).
- [63] L. C. Malacarne, R. S. Mendes and E. K. Lenzi, Phys. Rev. E **65**, 017106 (2001).
- [64] A. Lavagno and P. Quarati, Chaos Soliton Fract. **13**, 569 (2002).
- [65] I. Bediaga, E.M.F. Curado and J. Miranda, Physica A **286**, 156 (2000).
- [66] A. Upadhyaya, J. P. Rieu, J. A. Glazier and Y. Sawada, Physica A **293**, 549 (2001).
- [67] M. A. Montemurro, Physica A **300**, 15 (2001).
- [68] E. P. Borges, C. Tsallis, G. F. J. Ananos, P. M. C. de Oliveira, *Edge of chaos of logistic-like maps: Sensitivity to the initial conditions and relaxation*, preprint (2002) (cond-mat/0203342).
- [69] F. Baldovin, C. Tsallis, B. Schulze, *Nonstandard mixing in the standard map*, preprint (2001) (cond-mat/0108501).
- [70] M. Baranger, V. Latora, A. Rapisarda, Chaos Soliton Fract. **13**, 471 (2002).
- [71] U. M. S. Costa, M. Lyra, A. R. Plastino and C. Tsallis, Phys. Rev. E **56**, 245 (1997).
- [72] E. K. Lenzi and R. S. Mendes, Eur. Phys. J. B **21**, 401 (2001).
- [73] K. S. Fa, E. K. Lenzi, J. Math. Phys. **42**, 1148 (2001).
- [74] E. K. Lenzi, R. S. Mendes, L. R. da Silva, L. C. Malacarne, Phys. Lett. A **289**, 44 (2001).

- [75] C. Tsallis, R. S. Mendes and A. R. Plastino, *Physica A* **261**, 534 (1998).
- [76] L. R. da Silva, E. K. Lenzi, J. S. Andrade and J. Mendes, *Physica A* **275**, 396 (2000).
- [77] E. K. Lenzi, R. S. Mendes and A. K. Rajagopal, *Physica A* **286**, 503 (2000).
- [78] R. S. Johal and U. Tirnakli, *On the correct entropic form for systems with power-law behavior: the case of dissipative maps*, cond-mat/0201464.
- [79] E. K. Lenzi, R. S. Mendes and L. R. da Silva, *Physica A* **280**, 337 (2000).
- [80] E. K. Lenzi, R. S. Mendes and L. R. da Silva, *Physica A* **295**, 230 (2001).
- [81] E. K. Lenzi, M. K. Lenzi, H. Belich and L. S. Lucena, *Phys. Lett. A* **292**, 315 (2002).
- [82] E. K. Lenzi, R. S. Mendes and C. Tsallis, *Crossover in diffusion equation: anomalous and normal behaviors*, preprint (2002).
- [83] C. Tsallis and E. K. Lenzi, *Anomalous Diffusion: Nonlinear Fractional Fokker-Planck Equation*, in *Strange Kinects ed. H. Hilfer*, Chem. Phys. in press (2002).
- [84] E.K. Lenzi, C. Anteneodo and L. Borland, *Phys. Rev. E* **63**, 051109 (2001).
- [85] G.R. Guerberoff and G. A. Raggio, *J. Math. Phys.* **37**, 1776 (1996); G. R. Guerberoff, P. A. Pury and G. A. Raggio, *J. Math. Phys.* **37**, 1790 (1996).
- [86] A. Plastino and A. R. Plastino, *Phys. Lett. A* **226**, 257 (1997); R. S. Mendes, *Physica A* **242**, 299 (1997).

- [87] C. Tsallis, in *New Trends in Magnetism, Magnetic Materials, and Their Applications* ed. J. L. Morán-López and J. M. Sanchez (Plenum Press, New York, 1994).
- [88] D. Prato, *Phys. Lett. A* **203**, 165 (1995)
- [89] E. K. Lenzi, *Generalização dos Métodos Variacional, Perturbativo, das Funções de Green e de Integral de Trajetória para a Mecânica Estatística Não Extensiva*, Tese de Mestrado do CBPF (1998).
- [90] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals Series and Products* (Academic Press, New York, 1980).
- [91] E. T. Whittaker and G. N. Watson, *A Course in Modern Analysis* (Cambridge University Press, New York, 1943) ch. XII .
- [92] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1987).
- [93] H. B. Callen, *Thermodynamics*, (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1960).
- [94] S. T. A. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, (Editora da Universidade de São Paulo, 1997).
- [95] J. D. Ramshaw, *Phys. Lett. A* **198**, 119 (1995).
- [96] C. Tsallis, *Phys. Lett. A* **206**, 389 (1995).
- [97] A. R. Lima and T. J. P. Penna, *Phys. Lett. A* **256**, 221 (1999).
- [98] R. P. Di Sisto, S. Martinez, R. B. Orellana and A. R. Plastino, *Physica A* **265**, 590 (1999).

- [99] S. Abe, *Phys. Lett. A* **263**, 424 (1999).
- [100] A. R. Plastino and A. Plastino, *Phys. Lett. A* **193**, 251 (1994).
- [101] D. N. Zubarev, *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics* (Consultants Bureau, New York, 1974); J. S. Dugdale, *Entropy and its Physical Meaning* (Taylor & Francis Inc., Philadelphia, 1996).
- [102] W. H. Zurek, *Complexity, Entropy and the Physics of Information: proceedings volume in the Santa Fe Institute in the sciences of complexity* (Addison-Wesley Publishing Company 1990); Kullback and Solomon, *Information Theory And Statistics* (Dover Publications, Inc, New York, 1968).
- [103] A. Renyi, *Wahrscheinlichkeitsrechnung* (Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1966); A. Wehrl, *Rev. Mod. Phys.* **50**, 221 (1978).
- [104] A. K. Rajagopal and S. Abe, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1711 (1999).
- [105] A. R. R. Papa, *J. Phys. A* **31**, 5271 (1998); C. Anteneodo and A. R. Plastino, *J. Phys. A* **32**, 1089 (1999).
- [106] S. Abe, *Phys. Lett. A* **224**, 326 (1997).
- [107] E. P. Borges and I. Roditi, *Phys. Lett. A* **246**, 399 (1998).
- [108] C. Beck and F. Schlögl, *Thermodynamics of chaotic systems: an introduction* (Cambridge University Press, Great Britain, 1993).

- [109] A. I. Khinchin, *Mathematical Foundations of Information Theory* (Dover, New York, 1957).
- [110] E. M. F. Curado, *Braz. Jour. Phys.* 29 (1999) 36; this work is available at http://www.sbf.if.usp.br/WWW_pages/public.htm .
- [111] A. R. Plastino, A. Plastino and C. Tsallis, *J. Phys. A* 27, 5707 (1994).
- [112] S. Abe, *Physica A* 269, 403 (1999).
- [113] L. P. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (W. A. Benjamin, Inc., New York, 1962).
- [114] S. Abe, *Eur. Phys. J. B.* 9, 679 (1999).
- [115] F. Büyükkilç and D. Demirhan, *Phys. Lett. A* 181 24 (1993); F. Büyükkilç and D. Demirhan, *Phys. Lett. A* 197 209 (1995); Q. -A. Wang and Le Mehaute, *Phys. Lett. A* 235, 222 (1997).
- [116] S. W. Lovesey, *Condensaded Matter Physics* (The Benjamin/Cummings Publishing Company, Massachusetts, 1980).
- [117] Uma discussão detalhada sobre este assunto pode ser encontrada em [118, 119].
- [118] A. K. Rajagopal, in *Nonextensive Statistical Mechanics and Its Applications*, eds. S. Abe and Y. Okamoto (Springer-Verlag, New York, 2001).
- [119] K. Sasaki and M. Hotta, *J. Phys. Soc. Japan* 69, 3830 (2000).

- [120] E. K. Lenzi, L. C. Malacarne e R. S. Mendes, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **19**, 201 (1997).
- [121] A. Ott, J.P. Bouchaud, D. Langevin and W. Urbach, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2201 (1990); J.P. Bouchaud, A. Ott, D. Langevin and W. Urbach, *J. Phys. II France* **1**, 1465 (1991).
- [122] C. -K. Peng, J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Havlin, H. E. Stanley and A. L. Goldberger, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1343 (1993).
- [123] H. Spohn, *J. Phys. I France* **3**, 69 (1993).
- [124] T. H. Solomon, E. R. Weeks and H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3975 (1993).
- [125] J. Klafter and G. Zumofen, *Phys. Rev. E* **49**, 4873 (1994).
- [126] M. F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky and U. Frisch, *Lévy Flights and Related Topics in Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [127] R. Metzler and J. Klafter, *Phys. Rep.* **339**, 1 (2000).
- [128] N. Goldenfeld, *Lectures On Phase Transitions and The Renormalization Group*, (Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, 1992).
- [129] S. Abe and Y. Okamoto, *Nonextensive Statistical Mechanics and Its Applications*, Lecture Notes in Physics (Springer-Verlag, Heidelberg, 2001).
- [130] R. Hilfer, *Applications of Fractional Calculus in Physics* (World Scientific, Singapore, 2000).

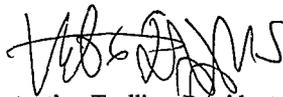
- [131] M. Bologna, C. Tsallis and P. Grigolini. *Phys. Rev. E* **62**, 2213 (2000).
- [132] M. Muskat, *The Flow of Homogeneous Fluid Through Porous Media* (McGraw-Hill, New York, 1937).
- [133] P. Y. Polubarinova-Kochina, *Theory of Ground Water Movement* (Princeton University Press, Princeton, 1962).
- [134] S. S. Plotkin and P. G. Wolynes, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5015 (1998).
- [135] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, (Springer, New York, 1984).
- [136] C. Tsallis, *Physica A* **221**, 227 (1995).
- [137] B. Shaughnessy and I. Procaccia, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 455 (1985).
- [138] K. B. Oldham and J. Spanier, *The Fractional Calculus*, (Academic Press, New York, 1974).
- [139] B. McNamara, K. Wiesenfeld and R. Roy, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2626 (1988).
- [140] L.E. Reichl and P. Alpatov, *Phys. Rev. E* **52**, 4516 (1995).
- [141] M. Millonas (Ed.) *Fluctuations and Order: The New Synthesis*, (Springer, New York, 1996).
- [142] C. W. Gardiner, *Handbook of stochastic methods*, 2nd ed. (Springer, Berlin, 1994).

- [143] M. S. Reis, J. C. C. Freitas, M. T. D. Orlando, E. K. Lenzi and I. S. Oliveira, *Evidences for Tsallis non-extensivity on CMR manganites*, aceito para publicação no Eur. Phys. Lett. (2002).
- [144] E. K. Lenzi, E. Lenzi, R. S. Mendes and L. C. Malacarne, *Anomalous diffusion and anisotropic nonlinear Fokker-Planck equation*, em redação (2002).
- [145] M. S. Reis, E.K. Lenzi, I. S. Oliveira and V. Amaral, *Paramagnetic behavior of a nonextensive S spin system: possible connections to manganites*, em redação (2002).

**“MECÂNICA ESTATÍSTICA NÃO EXTENSIVA:
APLICAÇÕES A PROPRIEDADES DE TRANSPORTE”**

Ervin Kaminski Lenzi

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



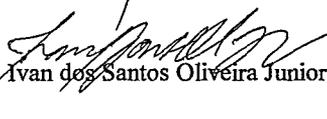
Constantino Tsallis – Presidente



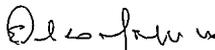
Renio dos Santos Mendes



Silvio Roberto de Azevedo Salinas



Ivan dos Santos Oliveira Junior



Evaldo Mendonça Fleury Curado

Rio de Janeiro, 22 de março de 2002