

Luana da Silva Miranda

Oscilador Anarmônico Euclidiano Desordenado

Rio de Janeiro, Brasil

28 de abril de 2021

Luana da Silva Miranda

Oscilador Anarmônico Euclidiano Desordenado

Dissertação de mestrado apresentada ao curso de pós-graduação do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Orientador: Dr. Nami F. Svaiter

Rio de Janeiro, Brasil

28 de abril de 2021

Miranda, Luana da Silva

P654r Oscilador Anarmônico Euclidiano Desordenado/ Luana da Silva Miranda. – Rio de Janeiro, Brasil, 28 de abril de 2021-

53 p. : 3 il. (color.); 30 cm.

Orientador: Dr. Nami F. Svaiter

Dissertação de Mestrado – Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 28 de abril de 2021.

1. Teoria de campos estatística. 2. Sistemas desordenados. 3. Método da função zeta distribucional. I. Svaiter, Nami Fux, orient. II. Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas. III. Coordenação de Física Teórica. IV. Oscilador Anarmônico Euclidiano Desordenado

Luana da Silva Miranda

Oscilador Anarmônico Euclidiano Desordenado

Dissertação de mestrado apresentada ao curso de pós-graduação do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Dr. Nami F. Svaiter

Dr. Nami F. Svaiter (Orientador)
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
(CBPF)/ Departamento de Física Teórica

Dr. Raúl Oscar Vallejos
Centro Brasileiro de Pesquisas
Físicas(CBPF)/ Departamento de Física
Teórica

Dr. Rudnei de Oliveira Ramos
Instituto de Física da Universidade do
Estado do Rio de Janeiro (UERJ)/
Departamento de Física Teórica

Rio de Janeiro, Brasil
28 de abril de 2021

À memória do meu pai, Luiz Antônio Miranda (1949-2019).

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a toda minha família por me apoiar nesta longa jornada que é a carreira científica. Principalmente, aos meus pais por sempre acreditarem em mim e me apoiarem durante todos esses anos. Em especial, à minha querida irmã, *Luma*, que sempre foi e será o modelo de pessoa que quero me tornar. Obrigada por me ensinar ser uma pessoa responsável que sempre honra seus compromissos.

Muito obrigada por todo o tipo de apoio que recebi desde o início ao final da minha caminhada no mestrado. Ao meu marido, *Marlon*, pelo incentivo e pela compreensão durante todos esses anos. Aos meus gatos, por trazerem momentos de descontração nos meus dias. Aos meus amigos, *Caio, Mariana, Andreza, Diogo, Jeferson, Benvindo e Karen*, que faziam meus finais de semanas mais divertidos, e pela amizade mantida nesses anos.

Meus agradecimentos a todos meus amigos do CBPF que participaram de alguma maneira, ajudando com um apoio, uma palavra de ânimo, um sorriso encorajador ou pelas conversas no corredor. Em especial, a todas as mulheres que fizeram disciplinas comigo, a presença de vocês foi muito encorajadora e importante para mim. Por último e não menos importantes, aos meus amigos de sala, *Lucas, Matheus e Jaime*, pelo companheirismo, pelas risadas, pela companhia nos cafés vespertinos.

Eu gostaria de agradecer a todos os professores e funcionários do CBPF que contribuíram, efetivamente, na minha formação nos aspectos técnicos, didáticos e morais. Principalmente, meu orientador, *Nami Fux Svaite*, obrigada pela paciência, pelas discussões e por sempre estar disposto a me ajudar nesse período atípico. Além de ser o modelo de pesquisador que eu desejo ser, juntamente, com os professores *Gabriel Santos Menezes* e *Carlos Augusto Domingues Zarro* que também são as minhas inspirações.

Agradeço a CAPES por ajudar a manter o programa de pós-graduação do CBPF e pelo suporte financeiro durante esses anos.

Resumo

Nesta dissertação, analisamos o sistema do oscilador anarmônico com desordem no espaço Euclidiano, usando o método da função zeta distribucional. Esse método promove a solução da média energia livre através de uma série com as réplicas da função de partição do modelo. Ao usar a equação do ponto de sela e o ansatz de simetria de réplicas, em cada réplica da função de partição, mostramos a presença de um mecanismo de quebra espontânea de simetria no modelo desordenado.

Palavras-Chave: Teoria estatística de campos, métodos funcionais em teoria quântica de campos Euclidiana, método da função zeta distribucional, ruído *quenched*.

Abstract

In this master thesis, we analyzed the anharmonic oscillator system with disorder in Euclidian space using the distributional zeta-function method. This method provides the solution of the average free energy of this system which is written as a series of the replica partition functions of the model. By using the saddle-point equations and imposing the replica symmetric ansatz, in each replica partition function, we show the presence of a spontaneous symmetry breaking mechanism in the disordered model.

Keywords: Statistical field theory, functional methods in Euclidean quantum field theory, zeta distributional method, quenched noise.

Sumário

	Sumário	viii
1	INTRODUÇÃO	1
2	MÉTODOS FUNCIONAIS E INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA	5
2.1	O propagador	5
2.1.1	Operador de evolução temporal	5
2.1.2	Integrais de trajetória	10
2.2	Propagadores na teoria quântica de campos	14
3	SISTEMAS OSCILANTES À TEMPERATURA FINITA	18
3.1	Mecânica estatística e integrais de trajetória	18
3.2	Função de partição do oscilador harmônico simples	22
3.3	Função de partição do oscilador anarmônico com desordem	27
4	MÉTODO DA FUNÇÃO ZETA DISTRIBUCIONAL	31
4.1	Energia média livre do oscilador anarmônico com desordem	35
5	CONCLUSÃO	41
A	ELEMENTOS DA TEORIA DE PROBABILIDADE	43
A.1	Definições básicas de Teoria das Probabilidades	43
A.1.1	Espaço de Probabilidade	43
A.1.2	Variáveis Aleatórias	47
A.1.3	Função de distribuição e densidade de probabilidade	48
A.2	Momentos da distribuição	49
A.2.1	Integral de Stieltjes	49
A.2.2	Momentos da distribuição	50
A.2.3	Cumulantes	52

A.3	Uma aplicação: teoria de campos em $d = 0$	52
	Referências	55

1 Introdução

Em diversas áreas da física, o comportamento dos sistemas desordenados tem sido amplamente investigado. Esses sistemas com desordem se aproximam dos processos reais, no sentido de que ocorrem na natureza, assim se afastam das idealizações dos sistemas puros. Por exemplo, ao analisar qualquer material, natural ou feito em laboratório, verifica-se que dificilmente ele é completamente homogêneo. Pode-se observar diversas impurezas que estão presentes e distribuídas aleatoriamente em amostras desse material. Conseqüentemente, o interesse em entender a física dos sistemas desordenados foi colocado na ordem do dia da grande parte da comunidade científica. Algumas áreas da física se destacam no estudo de desordem, a saber: a mecânica estatística e física da matéria condensada.

A presença dessas impurezas afetam o sistema ao submetê-lo em determinadas condições, como uma variação de temperatura, variação de pressão, ação de uma força externa, entre outros. O efeito mais comum observado no estudo desses sistemas com desordem é que eles têm o comportamento crítico modificado. Em outras palavras, é importante entender como às transições de fase de sistemas puros se modificam em relação as transições de fase com desordem. Isso pode ser feito de forma artificial, isto é, adicionado em modelos puros e controlando a intensidade da desordem em laboratório. [1].

Os sistemas com desordem se dividem em dois grupos: desordem *annealed* e *quenched*. A primeira delas, a desordem *annealed*, é caracterizada pelo equilíbrio térmico entre a amostra e as impurezas. Assim, o tratamento estatístico é feito através do cálculo da função de partição do sistema completo, o qual se leva em consideração os componentes originais e as impurezas. Já na desordem *quenched*, o equilíbrio térmico não é atingido durante o tempo do experimento. As impurezas, localizadas em posições fixas aleatórias, possuem um tempo de relaxação bastante longo, por isso esse tipo de desordem também conhecido como *frozen-in* desordem.

A desordem *quenched* é mais interessante de ser estudada, uma vez que novos métodos

precisam ser desenvolvidos para conseguir descrever esses sistemas. A presença dessa desordem pode ser na forma de interações aleatórias, como o *spin-glass*, ou campos desordenados acoplados a um parâmetro de ordem. Não é difícil perceber que a desordem quebra a homogeneidade espacial e torna as amostras heterogêneas. A invariância translacional é recuperada ao realizar uma média de todas as realizações possíveis da desordem. [2].

Como enfatizamos, um exemplo de um sistema com esse tipo de desordem é o *spin-glass*. Na natureza, eles se realizam da seguinte forma: são ligas magnéticas nas quais as impurezas magnéticas são substituídas em um hospedeiro magneticamente inerte. As impurezas ocupam posições aleatórias e não mudam de posição, ou seja, elas ficam estáticas dentro da amostra durante o experimento. As interações entre as impurezas dependem da distância entre elas, como são aleatórias, as próprias interações assumem valores aleatórios que mudam de sinal dependendo dos pares de spin em questão. Existe uma temperatura de transição T_g quando os procedimentos usuais de taxa de resfriamento são utilizados, os quais fazem os *spin-glass* ficarem fora do equilíbrio. Essa transição é alvo de estudos atualmente e acredita-se que exista uma transição de fase entre a fase paramagnética e a fase de *spin-glass*. Edwards e Anderson [3] propuseram um modelo simplificado para *spin-glass* em que se representam as impurezas magnéticas com spins de Ising colocados nos vértices de uma rede cúbica tridimensional. A natureza aleatória das interações é imitada com as primeiras interações aleatórias dos vizinhos entre os spins retirados de uma distribuição de probabilidade gaussiana ou bimodal. [2].

Outro exemplo, bastante instrutivo de sistemas desordenados, é a propagação de ondas em meios aleatórios. O objeto de estudo agora é as interferências dessas ondas em meios que possuem impurezas. Por exemplo, nos metais, os elétrons, ao invés de estarem livres, estão sujeitos a um potencial aleatório devido a rede periódica. A hamiltoniana desse sistema pode ser expressa através de autoestados de base dos orbitais atômicos e a desordem aparece como uma energia aleatória para cada sítio. A presença da desordem pode gerar um efeito chamado de *Localização de Anderson* [4] que consiste na existência de um valor crítico da desordem para uma determinada dimensão na qual o sistema muda sua natureza qualitativamente de difusivo, em que as funções de onda são espacialmente espalhadas,

para localizadas, cujas funções de onda são espacialmente localizadas. [5].

Um ponto crucial para o estudo da termodinâmica de sistemas desordenados é que a média sobre a desordem deve ser feita sobre a energia livre. Lembremos que, para o caso *annealed*, integramos sobre o grau de liberdade do sistema; em seguida, é feita média sobre a desordem e só após esse dois procedimentos o logaritmo é aplicado e a energia livre é definida como

$$F_{\beta,\Lambda}^{annealed} \equiv \beta^{-1} \ln \mathbb{E}_x Z_{\beta,\Lambda}(x). \quad (1.1)$$

Sendo $Z(x)$ a função de partição, x representa a desordem, \mathbb{E}_x representa a média sobre a desordem, β e Λ são fatores que a função de partição pode depender. No caso *quenched*, a média da desordem é feita sobre o logaritmo da função de partição

$$F_{\beta,\Lambda}^{quenched} \equiv \beta^{-1} \mathbb{E}_x \ln Z_{\beta,\Lambda}(x). \quad (1.2)$$

Diferentes técnicas foram desenvolvidas para calcular a média *quenched*. O método da função zeta distribucional desenvolvido por Svaiter e Svaiter [6] é um deles. Esse método traz uma abordagem probabilística, visto que a zeta é definida utilizando uma distribuição de probabilidade. Esses autores mostraram que a derivada dessa função na origem produz uma expressão para a energia livre média *quenched* de um sistema desordenado. Portanto, essa é a abordagem que usaremos para estudar um modelo do oscilador anarmônico com desordem a fim de discutir as consequências físicas desse sistema. Além disso, verificaremos a funcionalidade desse método.

Esta dissertação está organizada da seguinte maneira: após a introdução, o capítulo 2 apresenta a construção do formalismo das integrais de trajetória, no qual os métodos funcionais são introduzidos. Toda essa construção é feita através da amplitude de probabilidade, também conhecida como propagador, usando as propriedades do operador evolução temporal. Através desse formalismo, é possível fazer uma conexão entre a mecânica quântica e a teoria quântica de campos. Visto que, ao adicionar uma fonte fictícia no propagador, transforma-o em um gerador funcional. Assim, realizando derivadas funcionais nesse objeto, é possível construir valor esperado no vácuo do produto dos operadores posição ordenados temporalmente.

No capítulo 3, a função de partição é escrita pelo formalismo das integrais de trajetória ao fazer uma extensão analítica do tempo real para o tempo imaginário. Além disso, a sua conexão entre a mecânica estatística e a teoria quântica de campos à temperatura finita é exibida ao comparar as funções de correlação de n -pontos com o funcional gerador das funções de Green de uma teoria quântica de campo. Esse capítulo também se propõe calcular a função de partição do oscilador harmônico puro, em que o método da zeta espectral é utilizado para sua solução. Após isso, a função de partição do sistema desordenado é apresentado, no qual um ruído multiplicativo é acoplado ao termo quadrático do campo.

No capítulo 4, o método da função zeta distribucional é apresentado para solucionar a função de partição do sistema desordenado. Além disso, uma análise da energia livre média *quenched* é feita e a estrutura dos campos é estudada. Por fim, o capítulo 5 apresenta as conclusões, considerações finais e perspectivas do desenvolvimento desta pesquisa.

2 Métodos funcionais e integrais de trajetória

Neste capítulo, será apresentado o formalismo das integrais de trajetória, também conhecida como integrais de caminho. O formalismo das integrais de trajetória e dos métodos funcionais são técnicas essenciais no estudo da mecânica quântica e na teoria quântica de campos. Visto que a formulação da mecânica quântica baseada em integrais de caminho é bem adaptada a sistemas com muitos graus de liberdade, em que um formalismo do tipo Schrödinger é pouco usual. Portanto, permite uma transição da mecânica quântica para a teoria quântica de campos ou para a física estatística. Essa relação com a teoria quântica de campos é feita através do gerador funcional que neste capítulo será abordado.

2.1 O propagador

O propagador desempenha um papel fundamental na formulação de integrais de caminho de Feynman. Na mecânica quântica, o propagador está relacionado com a amplitude de probabilidade, que é o objeto que possui toda a informação sobre a evolução temporal do sistema. Além da mecânica quântica, o propagador tem importância em outras áreas na física, como na teoria quântica de campos e na mecânica estatística, sobre a qual mais adiante vamos explicitar essa conexão. Antes de definir o propagador e explicar como ele está inserido na mecânica quântica, vamos nos lembrar algumas propriedades do operador evolução temporal e como ele age tanto na perspectiva de Schrödinger quanto na perspectiva de Heisenberg.

2.1.1 Operador de evolução temporal

Seja um vetor de estado, que pertence ao espaço de Hilbert \mathcal{H} , na representação de Schrödinger $|\psi(t_0)\rangle$ no instante inicial t_0 e em um tempo posterior t , encontra-se no estado $|\psi(t)\rangle$, a relação entre esses dois estados é dado por

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (2.1)$$

onde $\mathcal{U}(t, t_0)$ é o operador de evolução temporal, responsável em transformar um estado em um tempo t_0 para um tempo futuro t . Ele possui as seguintes propriedades:

1. Unitariedade,

$$\mathcal{U}^\dagger(t, t_0)\mathcal{U}(t, t_0) = 1, \quad (2.2)$$

em que $\mathcal{U}^\dagger(t, t_0)$ é o complexo conjugado do operador $\mathcal{U}(t, t_0)$. Essa propriedade é fundamental, pois está implícita a conservação da probabilidade.

2. Composição

$$\mathcal{U}(t_2, t_0) = \mathcal{U}(t_2, t_1)\mathcal{U}(t_1, t_0), \quad (t_2 > t_1 > t_0). \quad (2.3)$$

Essa propriedade nos diz que a evolução temporal de t_0 a t_2 promove o mesmo resultado se a evolução temporal do estado for de t_0 a t_1 primeiro e, posteriormente, o mesmo estado faça uma evolução temporal de t_1 a t_2 .

Devido às suas propriedades, o operador evolução temporal $\mathcal{U}(t, t_0)$ satisfaz a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \hat{H} \mathcal{U}(t, t_0), \quad (2.4)$$

sendo \hat{H} o operador Hamiltoniano do sistema. Para um vetor de estado $|\alpha(t_0)\rangle$, que não depende do tempo t , aplicado em (2.4) e usando a lei de formação (2.1) obtemos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha(t_0)\rangle &= \hat{H} \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha(t_0)\rangle \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha(t)\rangle &= \hat{H} |\alpha(t)\rangle. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Se o operador hamiltoniano é independente do tempo, ao resolver a equação (2.4) para $t > t_0$, o seguinte resultado é obtido

$$\mathcal{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}. \quad (2.6)$$

Também pode ser escrita desta forma

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \theta(t - t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}, \quad (2.7)$$

ao explicitar a ordem cronológica através da função de Heaviside.

Fazendo $t_0 = 0$, por simplicidade, o operador de evolução temporal se torna

$$\mathcal{U}(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}. \quad (2.8)$$

Caso o operador Hamiltoniano do sistema seja dependente do tempo, então o operador de evolução temporal possui a forma

$$\mathcal{U}(t, 0) = T \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt \hat{H}(t)} \right\}. \quad (2.9)$$

Onde T representa o ordenamento temporal, o qual ordena, sequencialmente, os operadores de acordo com o tempo, com o último à esquerda e o primeiro à direita, ao expandir a exponencial em (2.9).

Além disso, podemos observar que o operador de evolução temporal é uma função de Green da equação de Schrödinger dependente do tempo

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \mathcal{U}(t, t_0) = i\hbar \delta(t - t_0). \quad (2.10)$$

Sempre que a hamiltoniana de um sistema não depende do tempo, podemos representar o operador evolução temporal em termos de um conjunto ortonormal completo de estados estacionários, ou seja, os autoestados de energia cujos autovalores satisfazem a equação

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle. \quad (2.11)$$

Expandindo o operador evolução temporal (2.8) em termo dos autoestados de \hat{H}

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t, 0) &= \sum_{n,m} |\psi_m\rangle \langle \psi_m| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \\ &= \sum_{n,m} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\psi_m\rangle \langle \psi_m|\psi_n\rangle \langle \psi_n|, \quad \langle \psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn} \\ &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\psi_n\rangle \langle \psi_n|. \end{aligned} \quad (2.12)$$

A equação (2.12) é representação espectral de \mathcal{U} , supondo que o espectro seja discreto.

Até o momento, estamos mostrando o operador de evolução temporal na representação de Schrödinger, porém também podemos apresentá-lo através da representação de Heisenberg. Na representação de Schrödinger, os estados carregam a dependência temporal e os operadores correspondem a observáveis que são fixos no tempo. Já na

representação de Heisenberg, os estados são independentes do tempo e os operadores que evoluem temporalmente [7]. Portanto, a diferença entre as representações é dada em qual objeto o operador ou vetor de estado porta a dependência temporal.

A relação entre as duas representações pode ser obtida usando o operador evolução temporal (2.8), em que $t_0 = 0$, e considerando um observável A

$$\hat{A}_H(t) = \mathcal{U}^\dagger(t) \hat{A}_S \mathcal{U}(t). \quad (2.13)$$

Os índices subscritos indicam a abordagem, H para Heisenberg e S para Schrödinger. Quando $t = 0$, o observável nas duas representações coincidem

$$\hat{A}_H(0) = \hat{A}_S. \quad (2.14)$$

O mesmo ocorre para os vetores de estado em $t = 0$

$$|\psi, t = 0\rangle_H = |\psi\rangle_S. \quad (2.15)$$

Já os vetores de estado na perspectiva de Heisenberg, é equivalente a representação de Schrödinger da seguinte forma

$$|\psi, t\rangle_H = e^{\frac{i}{\hbar}t\hat{H}} |\psi\rangle_S = \mathcal{U}^\dagger(t) |\psi\rangle_S. \quad (2.16)$$

Independentemente da abordagem, o valor esperado de um observável é o mesmo

$$\langle \hat{A} \rangle =_H \langle \psi, t | \hat{A}_H | \psi, t \rangle_H =_S \langle \psi | \mathcal{U} \hat{A}_H \mathcal{U}^\dagger | \psi \rangle_S =_S \langle \psi | \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger \hat{A}_S \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger | \psi \rangle_S =_S \langle \psi | \hat{A}_S | \psi \rangle_S \quad (2.17)$$

Por escolha estética, os índices subscritos referentes às representações serão omitidos daqui em diante. Dessa forma, na perspectiva de Schrödinger, o vetor de estado será representado por $|\psi\rangle$ e o operador por \hat{A} . Na perspectiva de Heisenberg, o operador será $\hat{A}(t)$ e o vetor de estado será representado como $|\psi, t\rangle$.

A amplitude de transição que um sistema que tem o estado $|\psi_a, t_a\rangle$ no tempo t_a de ser encontrado, tendo o valor $|\psi_b, t_b\rangle$ no tempo t_b é dado por

$$\begin{aligned} \langle \psi_b, t_b | \psi_a, t_a \rangle &= \langle \psi_b | e^{-\frac{i}{\hbar}t_b\hat{H}} e^{\frac{i}{\hbar}t_a\hat{H}} | \psi_a \rangle \\ &= \langle \psi_b | e^{-\frac{i}{\hbar}(t_b-t_a)\hat{H}} | \psi_a \rangle \\ &= \langle \psi_b | \mathcal{U}(t_b, t_a) | \psi_a \rangle. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Isso mostra que os elementos de matriz do operador evolução temporal é a amplitude de transição entre os vetores de base na representação de Heisenberg [8].

Neste momento, vamos considerar um sistema descrito pela coordenada generalizada Q e o momento generalizado P , que correspondem aos operadores \hat{Q} e \hat{P} . O estado $|q, t\rangle$ é um autoestado do operador $\hat{Q}(t)$ de forma que

$$\hat{Q}(t) |q, t\rangle = q |q, t\rangle. \quad (2.19)$$

Já o estado $|p, t\rangle$, é um autoestado do operador $\hat{P}(t)$ de forma que gera o seguinte autovalor

$$\hat{P}(t) |p, t\rangle = p |p, t\rangle. \quad (2.20)$$

Considere que ambos observáveis \hat{Q} e \hat{P} possuem autovalores contínuos, uma vez que seus autovalores q e p podem assumir quaisquer valores entre $-\infty$ e $+\infty$. Como foi explicitado em (2.13) e (2.16) como passar da representação de Heisenberg para de Schrödinger, as equações possuem a mesma forma na perspectiva de Schrödinger. Em ambas representações, os estados $|q, t\rangle$ são completos, ou seja,

$$\int dq |q, t\rangle \langle q, t| = \int dq e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} |q\rangle \langle q| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} = \int dq |q\rangle \langle q| = 1. \quad (2.21)$$

Obtemos a função de onda no espaço de configurações ao combinar (2.1) e (2.21)

$$\begin{aligned} \langle q | \psi(t) \rangle &= \int \langle q | \mathcal{U}(t, t_0) | q_0 \rangle \langle q_0 | \psi(t_0) \rangle dq_0 \\ \psi(q, t) &= \int K(q_0, t_0; q, t) \psi(q_0, t_0) dq_0, \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde $K(q_0, t_0; q, t)$ é a amplitude de transição, como em (2.18), de uma partícula inicialmente em q_0 no instante de tempo t_0 seja encontrada em q no instante t . Ou seja, esse objeto contém toda informação sobre o desenvolvimento do sistema no tempo. Por esse motivo, ele também é conhecido como o propagador [9].

Por exemplo, no sistema de um ponto de massa livre em uma dimensão cuja a hamiltoniana é $\hat{H} = p^2/2m$, a amplitude de transição desse sistema pode ser escrita como

$$K(q_b, t_b; q_a, t_a) = \langle q_b | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_b - t_a)} | q_a \rangle. \quad (2.23)$$

Usando a completeza dos autoestados $|p\rangle$ em (2.23)

$$\begin{aligned} K(q_b, t_b; q_a, t_a) &= \int dp \langle q_b | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_b - t_a)} | p \rangle \langle p | q_a \rangle \\ &= \int dp e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)} \langle q_b | p \rangle \langle p | q_a \rangle. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Podemos usar a função transformação da representação q para p já normalizada na última linha

$$\langle q_b | p \rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p q_b}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad \text{e} \quad \langle p | q_a \rangle = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} p q_a}}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (2.25)$$

Assim, substituindo a relação anterior (2.25) em (2.24), temos a seguinte amplitude de transição

$$K(q_b, t_b; q_a, t_a) = \int dp e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t_b - t_a) + \frac{i}{\hbar} p(q_b - q_a)} \quad (2.26)$$

Note que (2.26) tem a forma de uma integral gaussiana e, ao completar o quadrado do expoente, sua solução é trivial

$$\begin{aligned} K(q_b, t_b; q_a, t_a) &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{(t_b - t_a)}{2m} \left(p - \frac{(q_b - q_a)m}{(t_b - t_a)} \right)^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{(q_b - q_a)^2 m}{2(t_b - t_a)}} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m\hbar\pi}{i(t_b - t_a)}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{(q_b - q_a)^2 m}{2(t_b - t_a)}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{(q_b - q_a)^2 m}{2(t_b - t_a)}}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Portanto, (2.27) é o propagador do sistema de uma partícula livre. Se temos a informação da função de onda inicial, a função de onda do sistema em um tempo posterior é completamente determinada.

Na próxima seção, veremos como o propagador pode ser expresso com formulação de integral de caminho de Feynman, usando as propriedades do operador de evolução temporal.

2.1.2 Integrais de trajetória

O conceito de integral de trajetória foi introduzido por Richard Feynman, em que ele obteve uma nova formulação da mecânica quântica, equivalente à de Schrödinger e de Heisenberg [10]. Para a construção desse formalismo, os seguintes passos têm que ser seguidos. Primeiro, uma hamiltoniana que seja independente do tempo $H = \hat{H}(p_i, q_i)$ é selecionada, por exemplo, uma hamiltoniana do tipo $H = P^2/2m + V(Q)$. O segundo passo é considerar o intervalo de tempo $t - t_0$, que será dividido em N segmentos com

igual duração de comprimento $\epsilon = \frac{(t-t_0)}{N}$. Ou seja, o intervalo de tempo é discretizado, $t_n = t_0 + n\epsilon$, no qual o limite ϵ tende a zero e N ao infinito. Assim, aplicando $N - 1$ passos na amplitude de transição (2.18) de um estado inicialmente em q_a no instante t_a para o estado q_b no instante posterior t_b

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int dq_1 \dots dq_{N-1} \langle q, t | q_{N-1}, t_{N-1} \rangle \langle q_{N-1}, t_{N-1} | \dots | q_1, t_1 \rangle \langle q_1, t_1 | q_0, t_0 \rangle. \quad (2.28)$$

Dessa forma, (2.28) se transforma em N elementos de transições. Podemos analisar cada uma dessas transições separadamente, sendo ϵ a diferença temporal entre os dois estados

$$\langle q_{j+1}, t_{j+1} | q_j, t_j \rangle = \langle q_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}} | q_j \rangle. \quad (2.29)$$

Para que essa evolução seja feita, é necessário escolher a ordem dos operadores, uma vez que, quando os observáveis são promovidos para operadores na Mecânica Quântica, eles podem ou não comutar. Assim, é necessário escolher a ordem do produto entre operadores. Existem dois tipos de ordem que são, frequentemente, usados: a *normal ordering* e a *Weyl ordering*. Na *normal ordering*, dado um produto de operadores posição e momento, o operador momento sempre vem à esquerda do operador posição. Já na *Weyl ordering*, uma simetrização é feita entre os operadores, de forma que os operadores possuem igual valor. Porém, independente da ordem, o formalismo da integral de caminho é derivado. No nosso caso, vamos utilizar a *normal ordering*.

Ao evoluir a exponencial (2.29), dependendo da forma da hamiltoniana, o teorema de Baker-Campbell-Hausdorff é utilizado, sendo que ordens superiores $O(\epsilon^2)$ do limite $\epsilon \rightarrow 0$ são irrelevantes. Essas condições podem ser resumidas utilizando a formula do produto de Trotter, sendo \hat{A} e \hat{B} dois operadores

$$e^{t(\hat{A}+\hat{B})} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[e^{\frac{t}{n}\hat{A}} e^{\frac{t}{n}\hat{B}} \right]^n. \quad (2.30)$$

Para ϵ próximo de zero e uma determinada hamiltoniana, temos

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}} | q_j \rangle &= \int dp_j \langle q_{j+1} | p_j \rangle \langle p_j | e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}} | q_j \rangle \\ &= \int dp_j e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(p_j, q_j)} \langle q_{j+1} | p_j \rangle \langle p_j | q_j \rangle \\ &= \int dp_j e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(p_j, q_j)} \langle q_{j+1} | p_j \rangle \langle p_j | q_j \rangle, \end{aligned} \quad (2.31)$$

em que podemos identificar o termo

$$\langle q_{j+1}|p_j\rangle \langle p_j|q_j\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p_j(q_{j+1}-q_j)}. \quad (2.32)$$

Assim, colocando ϵ em evidência em (2.31) e substituindo a relação anterior da função transformação representação q e p

$$\langle q_{j+1}|e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}}|q_j\rangle = \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\left(H(p_j,q_j)-p_j\frac{(q_{j+1}-q_j)}{\epsilon}\right)}. \quad (2.33)$$

Como q_j é a coordenada associada ao tempo t_j , ao realizar o limite do ϵ tendendo a zero no expoente de (2.33), identificamos que essa expressão como a derivada de q_j

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{(q_{j+1} - q_j)}{\epsilon} = \frac{dq_j}{dt} = \dot{q}_j. \quad (2.34)$$

Dessa forma,

$$\langle q_{j+1}|e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}}|q_j\rangle = \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon(H(p_j,q_j)-p_j\dot{q}_j)} = \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon L(p_j,q_j)}, \quad (2.35)$$

onde $L(p_j, q_j) = p_j\dot{q}_j - H(p_j, q_j)$ é a densidade de lagrangiana na formulação clássica.

Substituindo esse resultado em (2.35) e considerando $q_0 = q_a$ e $q_b = q_N$, a amplitude é escrita como

$$\begin{aligned} \langle q_b, t_b|q_a, t_a\rangle &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \cdots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} dq_1 \cdots dq_{N-1} e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1} \epsilon(H(p_j,q_j)-p_j\dot{q}_j)} \\ &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \cdots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} dq_1 \cdots dq_{N-1} e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1} \epsilon L(p_j,q_j)}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Note que o argumento da exponencial tem a forma de uma soma de Riemann. Isto é,

$$\lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \sum_{j=0}^{N-1} \epsilon L(p_j, q_j) = \int_{t_a}^{t_b} dt L(p(t), q(t)) = S(p, q). \quad (2.37)$$

Na expressão acima, $S(p, q)$ é a ação clássica. Podemos escrever as medidas de integração como sendo

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \cdots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} dq_1 \cdots dq_{N-1} = \mathcal{D}q \mathcal{D}p. \quad (2.38)$$

Por fim, a amplitude de transição pode ser expressa como uma integral de caminho

$$\langle q_b, t_b|q_a, t_a\rangle = \int_{q_a}^{q_b} \mathcal{D}q \mathcal{D}p e^{\frac{i}{\hbar}S(p,q)}, \quad (2.39)$$

em que os limites de integração estão presentes para lembrar das condições de contorno adotadas onde $q_0 = q_a$ e $q_b = q_N$. A amplitude de transição expressa pela equação acima (2.39) pode ser interpretada como uma superposição de amplitudes de probabilidade correspondentes a todas as trajetórias possíveis de ir de q_a até q_b . A fase associada a cada trajetória, que determina os efeitos de interferência, é dada pela integral da ação calculada ao longo da trajetória [10].

Em algumas aplicações, a medida de integração $\mathcal{D}p$ não aparece, pois, em uma grande classe de lagrangiana, a integração em relação ao momento p é facilmente obtida. Por exemplo, vamos calcular a integral de caminho usando (2.36) de uma partícula livre cuja a hamiltoniana é $\hat{H} = \hat{P}^2/2m$

$$\begin{aligned} \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} dq_1 \dots dq_{N-1} e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \epsilon (H(p_j, q_j) - p_j \dot{q}_j)} \\ &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} dq_1 \dots dq_{N-1} e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \epsilon \left(\frac{p_j^2}{2m} - p_j \dot{q}_j \right)}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Ao completar o quadrado do expoente, é possível realizar as integrais em relação ao momento primeiro. Assim, temos N integrais gaussianas

$$\int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar 2m} (p_j^2 - m\dot{q}_j)^2 + \frac{i\epsilon}{2\hbar} m\dot{q}_j^2} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{1/2} e^{\frac{i\epsilon}{2\hbar} m\dot{q}_j^2} \quad (2.41)$$

Substituindo na amplitude de transição e usando os mesmos argumentos para encontrar a expressão da integral de trajetória (2.39), temos

$$\begin{aligned} \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int dq_1 \dots dq_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{N/2} e^{\sum_{j=0}^{N-1} \frac{i\epsilon}{2\hbar} m\dot{q}_j^2} \\ &= A \int [dq] e^{\frac{i}{\hbar} \int dt \frac{m}{2} \dot{q}_j^2} \\ &= A \int [dq] e^{\frac{i}{\hbar} S[q]}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Sendo a medida de integração, pode ser denotada e identificada como

$$[dq] = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{N/2} \prod_{i=1}^{N-1} dq_i, \quad (2.43)$$

e a ação clássica de uma partícula livre $S[q]$. O propagador escrito como integral de trajetória é uma ferramenta muito importante do ponto de vista matemático, pois vem a ser um funcional. Visto que a ação $S[q]$ do caminho $q(t)$ é a integral no tempo da

lagrangiana $L[q, \dot{q}]$. Assim, ela é uma função do caminho $q(t)$, que por si só é uma função. Ou seja, revela-se um funcional. Por isso, a integral do caminho é, muitas vezes, chamada de integral funcional [11].

A interpretação da integral de trajetória é vista como sendo a soma de todos os pedaços contínuos de caminhos de q_a até q_b no intervalo de tempo $t_b - t_a$, com cada caminho recebendo um fator de ponderação dado pela exponencial da ação clássica ao longo desse caminho [9].

A próxima seção vai mostrar a conexão entre a integral de caminho e a teoria quântica de campos. Essa conexão é feita ao adicionar uma fonte fictícia ao propagador, tornando-o em um gerador funcional e, ao realizar derivadas funcionais nesse novo objeto, é possível obter o produto ordenado dos operadores posição.

2.2 Propagadores na teoria quântica de campos

Uma importante estrutura na teoria quântica de campos é o valor esperado no vácuo dos produtos operadores ordenados temporalmente. O estado de vácuo é o estado de menor energia do sistema, também é comum ser chamado de estado fundamental, no qual admite que seja não degenerado e pode ser denotado como $|0\rangle$ [12]. Para encontrarmos tal relação, suponha que o sistema até então apresentado seja perturbado por uma força externa ou uma fonte externa dependente do tempo, o qual existe somente em um determinado intervalo de tempo. Dessa forma, o termo $J(t)q$ é adicionado na hamiltoniana e a amplitude de transição se torna

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle^J = \int_{q_a}^{q_b} \mathcal{D}q \mathcal{D}p e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt (p\dot{q} - H(p, q) + Jq)}. \quad (2.44)$$

Note que $H(p, q)$ é a hamiltoniana para a fonte $J = 0$. A amplitude de transição na presença de uma fonte no estado fundamental tem uma função central na teoria quântica de campos. Para demonstrar isso, vamos começar fazendo $J(t)$ igual a zero para os tempos menor que t_- e maior que t_+ . Usando a relação da completeza para os autovetores desses tempos correspondentes, em que $t_b > t_+ > t_- > t_a$, temos

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle^J = \int dq_+ \int dq_- \langle q_b, t_b | q_+, t_+ \rangle \langle q_+, t_+ | q_-, t_- \rangle^J \langle q_-, t_- | q_a, t_a \rangle. \quad (2.45)$$

Considerando que $|\psi_n\rangle$ seja os autoestados de energia, como em (2.11). Podemos construir as funções de onda ao combinar esses autoestados de energia com $\langle q_b, t_b | q_+, t_+ \rangle$ desta forma

$$\langle q_b, t_b | q_+, t_+ \rangle = \sum_n \langle q_b, t_b | \psi_n \rangle \langle \psi_n | q_+, t_+ \rangle = \sum_n \psi_n(q_b, t_b) \psi_n^*(q_+, t_+) \quad (2.46)$$

e

$$\langle q_-, t_- | q_a, t_a \rangle = \sum_n \langle q_-, t_- | \psi_n \rangle \langle \psi_n | q_a, t_a \rangle = \sum_n \psi_n(q_-, t_-) \psi_n^*(q_a, t_a). \quad (2.47)$$

A conexão com a amplitude de transição no estado fundamental é obtida fazendo o limite dos tempos t_a e t_b no eixo imaginário, ou seja, $t_a \rightarrow i\infty$ e $t_b \rightarrow +i\infty$. Esses limites selecionam o estado fundamental, desde que a condição imposta seja que as trajetórias q_a e q_b não vão para o infinito. Assim, pode-se impor que as trajetórias tentem a uma constante nesse limite, o que garante que a função de onda tende a limites finitos. Com essas considerações, temos

$$\lim_{t_b \rightarrow -i\infty} \langle q_b, t_b | q_+, t_+ \rangle = \lim_{t_b \rightarrow -i\infty} \psi_0(q_b, t_b) \psi_0^*(q_+, t_+) \quad (2.48)$$

e

$$\lim_{t_b \rightarrow i\infty} \langle q_-, t_- | q_a, t_a \rangle = \lim_{t_b \rightarrow i\infty} \psi_0(q_-, t_-) \psi_0^*(q_a, t_a), \quad (2.49)$$

onde as expressões, como essa $\psi_0(q_-, t_-) = \langle q_-, t_- | 0 \rangle$, são as funções de onda no estado fundamental. Substituindo essas considerações acima em (2.45), o gerador funcional $W(J)$ é definido

$$\begin{aligned} W(J) &\equiv \int dq_+ \int dq_- \psi_0^*(q_+, t_+) \langle q_+, t_+ | q_-, t_- \rangle^J \psi_0(q_-, t_-) \\ &= \lim_{\substack{t_b \rightarrow i\infty \\ t_a \rightarrow -i\infty}} \frac{\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle^J}{\psi_0(q_b, t_b) \psi_0^*(q_a, t_a)} \end{aligned} \quad (2.50)$$

Podemos interpretar o gerador funcional como a amplitude de probabilidade de encontrar o sistema no estado fundamental em t_+ dado que ele estava no estado fundamental no tempo t_- . Ou seja, o gerador funcional é uma amplitude de transição vácuo-vácuo.

Nosso objeto de interesse é o valor esperado do produto dos operadores posição ordenados temporalmente. Podemos ver que agora podem ser obtidos através de derivadas funcionais em relação à fonte J . Para visualizar isso, vamos considerar o caso em que os produtos só envolvem dois operadores. Isto é, vamos analisar o seguinte elemento

$$\langle q_b, t_b | \hat{Q}(t_2) \hat{Q}(t_1) | q_a, t_a \rangle, \quad (2.51)$$

com $t_2 > t_1$. Podemos dividir o tempo entre t_a e t_b em pequenos passos começando em t_a, t_1, \dots, t_N , como foi discutido na seção anterior com o propagador. Usando a completeza dos estados em (2.51), obtém-se

$$\begin{aligned} \langle q_b, t_b | \hat{Q}(t_2) \hat{Q}(t_1) | q_a, t_a \rangle &= \prod_{j=1}^N \int dq_j \langle q_b, t_b | q_N, t_N \rangle \langle q_N, t_N | q_{N-1}, t_{N-1} \rangle \dots \\ &\dots \langle q_3, t_3 | \hat{Q}(t_2) | q_2, t_2 \rangle \langle q_2, t_2 | \hat{Q}(t_1) | q_1, t_1 \rangle \langle q_1, t_1 | q_a, t_a \rangle \\ &= \prod_{j=1}^N \int dq_j q_2 q_1 \langle q_b, t_b | q_N, t_N \rangle \langle q_N, t_N | q_{N-1} \rangle \dots \langle q_1, t_1 | q_a, t_a \rangle. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Usando os mesmos argumentos para o desenvolvimento da integral de trajetória, obtemos

$$\langle q_b, t_b | \hat{Q}(t_2) \hat{Q}(t_1) | q_a, t_a \rangle = \int \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p q(t_2) q(t_1) e^{\frac{i}{\hbar} \int dt (p\dot{q} - H(p, q))}, \quad (2.53)$$

para $t_2 > t_1$. Entretanto, se tivéssemos assumido que $t_1 > t_2$, obteríamos o mesmo resultado (2.53), uma vez que os operadores posição comutam. Dessa forma, para que essa informação da cronologia dos operadores posição esteja sempre à disposição, utiliza-se o produto de ordenamento temporal T , que é definido por

$$T\{\hat{Q}(t_2)\hat{Q}(t_1)\} = \begin{cases} \hat{Q}(t_2)\hat{Q}(t_1), & t_2 > t_1 \\ \hat{Q}(t_1)\hat{Q}(t_2), & t_1 > t_2 \end{cases}. \quad (2.54)$$

Note que T coloca os operadores em ordem cronológica, de forma que os operadores com tempo maior sempre estão à esquerda dos operadores com menor tempo. Pode-se generalizar para o produto de n operadores utilizando o produto do ordenamento temporal

$$\langle q_b, t_b | T\{\hat{Q}(t_n) \dots \hat{Q}(t_2) \hat{Q}(t_1)\} | q_a, t_a \rangle = \int \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p q(t_n) \dots q(t_2) q(t_1) e^{\frac{i}{\hbar} \int dt (p\dot{q} - H(p, q))}. \quad (2.55)$$

Para fazer a conexão com os valores esperados do vácuo, aplica-se os limites e obtemos os valores esperados. Os valores esperados do vácuo do produto dos operadores são identificados com a derivada funcional com respeito à fonte J

$$\langle 0 | T\{\hat{Q}(t_n) \dots \hat{Q}(t_2) \hat{Q}(t_1)\} | 0 \rangle = \frac{(-i)^n \delta^n W(J)}{W(0) \delta J(t_n) \dots \delta J(t_1)} \Big|_{J=0}. \quad (2.56)$$

Note que, uma vez que a amplitude do vácuo-vácuo é conhecida, todos os valores esperados do produto ordenado dos operadores posição podem ser gerados. Por essa razão, $W(J)$ é

conhecido como gerador funcional. Essa amplitude, na teoria quântica de campos, é usada para gerar as funções de Green da teoria. Além disso, esse mesmo formalismo na mecânica estatística está relacionado às funções de correlação, que será visto no próximo capítulo.

3 Sistemas oscilantes à temperatura finita

Neste capítulo, vamos calcular a função de partição do oscilador harmônico puro e do oscilador anarmônico na presença de desordem, utilizando os métodos funcionais, que foi discutido no capítulo anterior. O oscilador harmônico é um sistema clássico da física que possui inúmeras aplicações, por exemplo, ele é um caso natural de uma teoria quântica de campos em zero dimensões espaciais. Como estamos interessados em estudar esse sistema em temperatura finita, uma extensão analítica do tempo real para o imaginário tem que ser feita, isto é, $t \rightarrow i\tau$ onde $\tau \in \mathbb{R}$. Para uma teoria de campos, esse procedimento significa passar do espaço-tempo de Minkowski para o espaço Euclidiano, ou seja,

$$t^2 - \vec{x}^2 \rightarrow -(\tau^2 + \vec{x}^2). \quad (3.1)$$

Ao trabalhar no espaço Euclidiano, o formalismo das integrais de trajetória enfatiza a conexão entre a teoria quântica de campos e a física estatística de sistemas críticos e transições de fase. Por isso, vamos recordar algumas propriedades da mecânica estatística e explicitar essas conexões.

3.1 Mecânica estatística e integrais de trajetória

Existe uma relação entre a amplitude de probabilidade, escrita como integral de caminho, e a função de partição da mecânica estatística. Desta forma, o comportamento térmico de um sistema pode ser derivado da amplitude de transição [9]. Lembrando que a função de partição de um sistema em equilíbrio térmico e considerando que a hamiltoniana não depende do tempo, é definida por

$$Z_\beta = \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\}, \quad (3.2)$$

sendo $\beta = (Tk_B)^{-1}$, em que k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura. Daqui em diante, o sistema de unidades naturais, em que a constante de Boltzmann e a constante de Planck são $k_B = \hbar = 1$, será utilizado. Dessa forma, a temperatura é equivalente a

$T = \beta^{-1}$. Uma vez que a hamiltoniana é independente do tempo, pode-se escrever ela com autoestados completos

$$Z_\beta = \sum_n \langle \psi_n | e^{-\beta \hat{H}} | \psi_n \rangle = \sum_n e^{-\beta E_n}. \quad (3.3)$$

A função de partição pode ser usada para definir os valores esperados de variáveis termodinâmicas, como a energia do sistema

$$\langle \hat{U} \rangle \equiv -\frac{\partial \ln Z_\beta}{\partial \beta}. \quad (3.4)$$

A energia livre de Helmholtz é definida

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z_\beta. \quad (3.5)$$

A partir da energia livre e considerando V o volume do sistema, podemos definir a entropia e a pressão

$$S = \beta^2 \frac{\partial F}{\partial \beta} \quad \text{e} \quad P = -\frac{\partial F}{\partial V} \quad (3.6)$$

Portanto, a partir da energia livre do sistema, as quantidades termodinâmicas, como a entropia e pressão, podem ser derivadas. Visto que a energia livre depende do logaritmo da função de partição (3.5), ao conhecer a função de partição, é possível ter um entendimento amplo do comportamento térmico do sistema. Por vantagem matemática, é possível escrever a função de partição utilizando o formalismo das integrais de trajetória. Sendo a definição do propagador dada por (2.23), no entanto em unidades naturais, possui a seguinte expressão

$$K(q_b, t_b; q_a, t_a) = \langle q_b | e^{-i\hat{H}(t_b - t_a)} | q_a \rangle. \quad (3.7)$$

A relação entre a integral de trajetória e a mecânica estatística é feita através da extensão analítica do tempo real para o tempo imaginário $t_b - t_a = -i\beta$. Em outras palavras, efetua-se uma rotação de Wick. Além disso, aplica-se $q_a = q_b$ na amplitude de transição em unidades naturais (3.7)

$$K(q_a) = \langle q_a | e^{-\beta \hat{H}} | q_a \rangle. \quad (3.8)$$

Assumindo que $|q_a\rangle$ é autoestado completo, ao integrar (3.8), obtemos a (3.2)

$$\int K(q_a) dq_a = \int dq_a \langle q_a | e^{-\beta \hat{H}} | q_a \rangle = \text{Tr} \{ e^{-\beta \hat{H}} \} = Z_\beta. \quad (3.9)$$

Assim, $e^{-\beta H}$ pode ser interpretado como um operador evolução com o tempo imaginário. Desse modo, a função de partição pode ser expressa como a integral de trajetória com o tempo Euclidiano. Isto é, $\tau = it_b = \beta$ é posto e o tempo é escolhido de forma $t_a = 0$

$$Z_\beta = \int dq_a \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q e^{-\int_0^\beta d\tau [H(p,q) - ip\dot{q}]}. \quad (3.10)$$

Sendo \dot{q} a derivada de q em respeito ao tempo euclidiano τ . A energia livre também pode ser expressa como uma integral funcional devido a sua definição (3.5)

$$F_\beta = -\frac{1}{\beta} \ln \int dq_a \int_{q(0)}^{q(\beta)} \mathcal{D}q \mathcal{D}p e^{-\int_0^\beta d\tau [H(q,p) - ip\dot{q}]}. \quad (3.11)$$

No caso da partícula livre com um potencial qualquer, a função de partição pode ser escrita como

$$Z_\beta = \int dq_a \int \mathcal{D}q e^{-\int_0^\beta d\tau (\frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V(q))} = \int dq_a \int \mathcal{D}q e^{-S_E} = \int [dq] e^{-S_E}. \quad (3.12)$$

Podemos identificar o termo S_E como a ação euclidiana, a qual é equivalente a hamiltoniana do sistema. A medida de integração está escrita de forma mais compacta e os limites de integração obedecem às condições de contorno $q(\beta) = q(0)$. A função de partição escrita dessa forma indica que somente as trajetórias periódicas aparecem, pois ela começa e termina em q_a e o período dessas trajetórias é β . Isso leva à condição Kubo-Martin-Schwinger (KMS), no qual diz que todos os valores esperados de observáveis da rotação de Wick são periódicos com período β [9]. A definição da média térmica de um operador de Heisenberg corrobora com esta condição

$$\langle \hat{O}(t) \rangle_\beta = \sum_n \langle \psi_n | \hat{O}(t) e^{-\beta \hat{H}} | \psi_n \rangle, \quad (3.13)$$

onde podemos usar (2.13)

$$\hat{O}(t - i\beta) = e^{-i(i\beta\hat{H})} \hat{O}(t) e^{i(i\beta\hat{H})}. \quad (3.14)$$

Dessa forma, a média térmica

$$\langle \hat{O}(t) \rangle_\beta = \sum \langle \psi_n | e^{-i(i\beta\hat{H})} \hat{O}(t) e^{i(i\beta\hat{H})} e^{-\beta H} | \psi_n \rangle = \sum \langle \psi_n | \hat{O}(t - i\beta) e^{-\beta \hat{H}} | \psi_n \rangle = \langle O(t - i\beta) \rangle. \quad (3.15)$$

Sobre uma rotação de Wick puramente imaginária essa periodicidade também ocorre

$$\langle \hat{O}(\tau) \rangle = \langle \hat{O}(\tau + \beta) \rangle. \quad (3.16)$$

Lembrando que a média térmica do operador \hat{A} no tempo euclidiano τ é dado por

$$\langle \hat{A} \rangle_\beta = \frac{1}{Z_\beta} \text{Tr} \{ \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} \}. \quad (3.17)$$

Assim, a média térmica dos produtos ordenados dos operadores posição, também conhecida como função de correlação de dois pontos, é definida por

$$\begin{aligned} \langle T[\hat{Q}(\tau_1)\hat{Q}(\tau_2)] \rangle &= \frac{1}{Z_\beta} \text{Tr} \{ T[\hat{Q}(\tau_1)\hat{Q}(\tau_2)] e^{-\beta \hat{H}} \} \\ &= \frac{1}{Z_\beta} \int [dq] q(\tau_1)q(\tau_2) e^{-S_E}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Esses produtos obedecem à condição de periodicidade (3.16). A média térmica também pode ser expressa pela derivada funcional da função de partição na presença de uma fonte $Z(\beta, J)$. Para definir o funcional gerador para os valores esperados do vácuo do produto ordenado, é preciso fazer a projeção sobre o estado fundamental. Os limites $\tau_a \rightarrow \infty$ e $\tau_b \rightarrow \infty$ são tomados na função de partição de (3.11)

$$Z_\beta(j) = \mathcal{N} \int [dq] e^{-\int (\frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V(q) - j(\tau)q(\tau)) d\tau}. \quad (3.19)$$

Com as condições de contorno em que $q(\tau_a)$ e $q(\tau_b)$ são constantes nesses limites. Para projetar no estado fundamental do sistema, é preciso respeitar o limite em baixas temperaturas, ou seja, $\beta \rightarrow \infty$. Fazendo uma derivada funcional com respeito à fonte j , obtém-se a extensão analítica do valor esperado do vácuo do produto ordenado (2.56)

$$\frac{(-i)^n}{W(0)} \frac{\delta^n W(J)}{\delta J(t_n) \dots \delta J(t_1)} \Big|_{J=0} = \frac{1}{Z_\beta} \frac{\delta^n Z_\beta(j)}{\delta j(t_n) \dots \delta j(t_1)} \Big|_{J=0}. \quad (3.20)$$

Portanto, a equação (3.20) nos diz que as funções de correlação da mecânica estatística podem ser extraídas diferenciando a função de partição $Z_\beta(j)$ em relação à fonte j . Além disso, ela é equivalente às funções de Green da teoria quântica de campo, que podem ser extraídas do gerador funcional $W(J)$.

Na próximas seções, o comportamento térmico do oscilador harmônico e do oscilador anarmônico com desordem será analisado, utilizando os métodos funcionais apresentados até agora. E será mostrado que para entender o oscilador anarmônico com desordem, outros métodos têm que ser aplicados para entender seu comportamento.

3.2 Função de partição do oscilador harmônico simples

O sistema escolhido para ser analisado, utilizando métodos funcionais, é o oscilador harmônico simples em contato com reservatório térmico. Seja (3.12) a função de partição em unidades naturais com o tempo euclidiano, $\tau = it = \beta$, temos

$$Z_\beta = \int [dx(\tau)] e^{-\int_0^\beta d\tau \left(\frac{m\dot{x}^2(\tau)}{2} + V(x(\tau)) \right)}. \quad (3.21)$$

Substituindo o potencial $V(x(\tau))$ da equação anterior pelo potencial do oscilador harmônico $V(x(\tau)) = \omega_0^2 x^2(\tau)/2$, considerando $m = 1$, temos

$$Z_\beta = \int [dx(\tau)] e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau (\dot{x}^2(\tau) + \omega_0^2 x^2(\tau))}. \quad (3.22)$$

Analisando o expoente, note que pode-se fazer uma integração por partes no primeiro termo e utilizando condições de contorno em que $x(0) = x(\beta)$, que pode ser igual a qualquer número arbitrário, obtemos a seguinte expressão

$$\int_0^\beta d\tau (\dot{x}^2(\tau) + \omega^2 x^2(\tau)) = \int_0^\beta d\tau x(\tau) \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2 \right) x(\tau). \quad (3.23)$$

Vamos discutir, rapidamente, o operador $\Omega = \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2 \right)$. Ele é um operador elíptico e possui um conjunto ortonormal de autofunções $x_n(\tau)$ associado a autovalores λ_n , de forma que

$$\left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2 \right) x_n(\tau) = \lambda_n x_n(\tau), \quad (3.24)$$

com as condições de contorno e

$$\int_0^\beta d\tau x_m(\tau) x_n(\tau) = \delta_{mn}, \quad (3.25)$$

as soluções possíveis das funções de $x_n(\tau)$ são do tipo

$$x_n(\tau) = \begin{cases} A \sin(\alpha\tau) \\ A \cos(\alpha\tau) \end{cases}. \quad (3.26)$$

Ao impor as condições de contorno $x(0) = x(\beta)$ em (3.26), α é obtido igual

$$\begin{aligned} A \sin(0) &= A \sin(\alpha\beta) = 0 \\ A \cos(0) &= A \cos(\alpha\beta) = 1 \\ \alpha\beta &= 2n\pi \\ \alpha &= \frac{2n\pi}{\beta}, \quad n \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Para determinar a constante A , usa-se a condição de ortogonalidade das autofunções (3.25), onde $m = n$, e propriedades das funções trigonométricas

$$\begin{aligned}
 A^2 \int_0^\beta \sin^2(\alpha\tau) d\tau &= 1 \\
 A^2 \int_0^\beta \frac{1 - \cos(2\alpha\tau)}{2} d\tau &= \frac{A^2\tau}{2} \Big|_0^\beta - \frac{\sin(2\alpha\tau)}{4} \Big|_0^\beta = 1 \\
 \frac{A^2\tau}{2} \Big|_0^\beta - \left(\frac{\sin(4n\pi)}{4} - \frac{\sin(0)}{4} \right) &= 1, \text{ onde } \sin(0) = \sin(4n\pi) = 0 \\
 \frac{A^2\beta}{2} &= 1 \\
 A &= \sqrt{\frac{2}{\beta}}.
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

Assim, as possíveis soluções (3.26) se tornam

$$x_n(\tau) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\beta}} \sin\left(\frac{2\pi n\tau}{\beta}\right) \\ \sqrt{\frac{2}{\beta}} \cos\left(\frac{2\pi n\tau}{\beta}\right) \end{cases}. \tag{3.29}$$

Substituindo (3.29) em (3.24), temos

$$\lambda_n = \left[\left(\frac{2\pi n}{\beta} \right)^2 + \omega^2 \right]. \tag{3.30}$$

Neste instante, aproximando $x(\tau)$ em um número finito de funções de base

$$\bar{x}(\tau) = \sum_{n=1}^N a_n x_n(\tau) \quad \text{e} \quad a_n = \int_0^\beta d\tau x_n(\tau) \bar{x}(\tau). \tag{3.31}$$

Ao fazer uma substituição $x(\tau) \rightarrow \bar{x}(\tau)$ no expoente de (3.22) e utilizar as relações (3.31), juntamente, com a equação de autovalor $\Omega x_n(\tau) = \lambda_n x_n(\tau)$ dada por (3.24), temos que a ação resulta em

$$\begin{aligned}
 S[\bar{x}(\tau)] &= \frac{1}{2} \int d\tau \bar{x}(\tau) \Omega \bar{x}(\tau) \\
 S[\bar{x}(\tau)] &= \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_{n,m} a_n a_m x_m(\tau) \Omega x_n(\tau) \\
 S[\bar{x}(\tau)] &= \frac{1}{2} \sum_{n,m} a_n a_m \int_0^\beta d\tau x_m(\tau) \lambda_n x_n(\tau) \\
 S[\bar{x}(\tau)] &= \frac{1}{2} \sum_{n,m} \lambda_n a_n a_m \delta_{mn} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \lambda_n a_n^2,
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

onde

$$\int da_1 \dots \int da_N e^{S[\bar{x}(\tau)]} = \int da_1 \dots \int da_N e^{-\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \lambda_n a_n^2}. \tag{3.33}$$

Observa-se que temos o produto N integrais gaussianas, cuja solução de cada uma dessas integrais é

$$\int da_i e^{\frac{1}{2}\lambda_i a_i^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_i}}. \quad (3.34)$$

Portanto,

$$\int da_1 \dots \int da_N e^{S[\bar{x}(\tau)]} = (2\pi)^{N/2} \left(\prod_{n=1}^N \frac{1}{\lambda_n} \right)^{1/2}. \quad (3.35)$$

Ao fazer uma mudança de variável $da_n \rightarrow da_n(2\pi)^{1/2}$ e o limite de N tendendo ao infinito, obtemos a função de partição

$$Z = \int [dx(\tau)] e^{-S[\bar{x}(\tau)]} = \frac{1}{\sqrt{\det\{\Omega\}}}. \quad (3.36)$$

Note que a propriedade $\det\{\Omega\} = \prod_n \lambda_n$ foi usada devido à analogia entre matrizes e funções. Existem diversas maneiras de calcular esse determinante, por exemplo, usando o método da transformada Fourier que pode ser encontrado em [8]. Contudo, para calcular esse determinante, usaremos o método da função zeta espectral como na referência [13].

Seja \hat{A} um operador positivo real com autovalores λ_n e autofunções f_n que satisfazem $\hat{A}f_n(x) = \lambda_n f_n(x)$. Vamos definir a função zeta espectral do operador \hat{A} para real de $s > 0$

$$\zeta(s) = \sum_n \frac{1}{\lambda_n^s}. \quad (3.37)$$

Essa soma deve ser feita sobre todos os autovalores e $s \in \mathbb{C}$.

Manipulando as expressões, podemos escrever

$$\lambda_n^{-s} = e^{\ln \lambda_n^{-s}} = e^{-s \ln \lambda_n}. \quad (3.38)$$

Assim, a função zeta (3.37) é equivalente a

$$\zeta(s) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-s \ln \lambda_n}. \quad (3.39)$$

Ao derivar a equação anterior(3.39) em relação a s no ponto em que $s = 0$, temos

$$\begin{aligned} \zeta'(s)|_{s=0} &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-s \ln \lambda_n} (-\ln \lambda_n) \Big|_{s=0} \\ \zeta'(0) &= -\sum_{n=0}^{\infty} \ln \lambda_n. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Visto que

$$\begin{aligned}
 \det\{\hat{A}\} &= \prod_{n=0}^{\infty} \lambda_n, \\
 \det\{\hat{A}\} &= e^{\ln \prod_{n=0}^{\infty} \lambda_n} \\
 \det\{\hat{A}\} &= e^{\sum_{n=0}^{\infty} \ln \lambda_n} \\
 \det\{\hat{A}\} &= e^{-\zeta'(0)}.
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

Com essas manipulações, podemos escrever o determinante de um operador como sendo a exponencial da derivada da função zeta de Riemann em relação s no ponto $s = 0$ ou

$$\ln \det\{\hat{A}\} = -\zeta'(0). \tag{3.42}$$

Conforme (3.36), temos a função de partição $Z = (\det\{\Omega\})^{-1/2}$ e, ao aplicar o logaritmo em ambos os lados e identificando $\hat{A} = \Omega$, podemos escrever

$$\begin{aligned}
 \ln Z &= -\frac{1}{2} \ln(\det\{\Omega\}) \\
 \ln Z &= -\frac{1}{2} \ln \prod \lambda_n \\
 \ln Z &= -\frac{1}{2} \sum_n \ln \lambda_n \\
 \ln Z &= \frac{1}{2} \zeta'_{\Omega}(0),
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

onde $\zeta_{\Omega}(s) = \sum_{n \in \mathbf{Z}} \lambda_n^{-s}$ é a função zeta associada ao operador Ω que obedece à equação de autovalor (3.24), cujos autovalores associados são $\lambda_n = \left[\left(\frac{2\pi n}{\beta} \right)^2 + \omega^2 \right]$. Dessa maneira, podemos escrever $\zeta_{\Omega}(s)$ da seguinte forma

$$\zeta_{\Omega}(s) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left(\frac{2\pi n}{\beta} \right)^2 + \omega^2 \right]^{-s} = \left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{2s} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[n^2 + \left(\frac{\omega\beta}{2\pi} \right)^2 \right]^{-s} = \left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{2s} \zeta(s, \nu), \tag{3.44}$$

onde $\nu = \left(\frac{\omega\beta}{2\pi} \right)$ e $\zeta(s, \nu)$ é a generalização da zeta de Riemann

$$\zeta(s, \nu) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [n^2 + \nu^2]^{-s}. \tag{3.45}$$

Para real de s suficientemente grande, essa série é convergente. Usando o princípio da extensão analítica podemos estendê-la em todo plano complexo. Dessa forma, a zeta define-se em uma função meromórfica, bem definida em $s = 0$, onde

$$\zeta(0, \nu) = 0, \tag{3.46}$$

o que resulta em $\zeta_{\Omega}(0) = 0$. Para determinar (3.43), vamos usar a seguinte propriedade da zeta generalizada

$$\zeta_{\mu\Omega}(s) = \sum_n (\mu\lambda_n)^{-s} = \mu^{-s} \sum_n \lambda_n^{-s} = \mu^{-s} \zeta(s) = e^{-s \ln \mu} \zeta(s). \quad (3.47)$$

Assim, a derivada em relação a s

$$\zeta'_{\mu\Omega}(s) = \frac{d}{ds} \left(e^{-s \ln \mu} \zeta(s) \right) = -\ln \mu e^{-s \ln \mu} \zeta(s) + e^{-s \ln \mu} \zeta'(s). \quad (3.48)$$

Ao fazer $s = 0$, temos que ambas derivadas das zetas possuem o mesmo valor

$$\zeta'_{\mu\Omega}(0) = \zeta'(0). \quad (3.49)$$

Usando essas propriedades citadas acima, temos que (3.44)

$$\begin{aligned} \zeta'_{\Omega}(0) &= \frac{d}{ds} \left(\left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{2s} \zeta(s, \nu) \right) \Big|_{s=0} \\ &= \frac{d}{ds} \left(\left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{2s} \right) \Big|_{s=0} \zeta(0, \nu) + \left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{2s} \frac{d}{ds} \zeta(s, \nu) \Big|_{s=0} \\ &= \frac{d}{ds} \zeta(s, \nu) \Big|_{s=0} \\ &= \zeta'(0, \nu). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Desta forma, basta encontrarmos a derivada de $\zeta(s, \nu)$ no ponto $s = 0$ para determinar a função de partição. Usando as propriedades da zeta de Hurwitz [13], sua derivada é equivalente a

$$\frac{d}{ds} \zeta(s, \nu) \Big|_{s=0} = -2 \ln 2 \sinh \pi \nu. \quad (3.51)$$

Portanto, usando as propriedades (3.51) e (3.49) em (3.43), temos

$$\ln Z = \frac{1}{2} \zeta'_{\Omega}(0) = -\ln 2 \sinh \pi \nu = \ln (2 \sinh \pi \nu)^{-1}. \quad (3.52)$$

Ao exponenciar a equação (3.52) e lembrando que $\nu = \frac{\omega\beta}{2\pi}$, a função de partição do oscilador harmônico é

$$Z = \left(2 \sinh \frac{\omega\beta}{2} \right)^{-1}. \quad (3.53)$$

Como vimos na seção anterior, dada a função de partição, é possível calcular as variáveis termodinâmicas, como a energia livre, e ter compreensão do comportamento térmico do sistema.

3.3 Função de partição do oscilador anarmônico com desordem

Nesta seção, vamos fazer um tratamento estatístico do sistema oscilante com desordem. A função de partição do nosso sistema possui a seguinte forma

$$Z_\beta = \int [dx(\tau)] e^{-S(x)}, \quad (3.54)$$

onde a ação euclidiana é igual a $S(x) = S_0(x) + S_I(x)$. Ela possui um parte referente ao sistema puro S_0 e a outra parte com uma autointeração do tipo $\lambda x^4 + \rho x^6$, similar ao modelo na teoria de campos da lagrangiana de Landau-Ginzburg. Os termos com anarmonicidade aparecem para manter a estabilidade do sistema, que mais a frente será visto. A parte S_0 , como vimos em (3.23), corresponde ao oscilador harmônico sem fonte

$$S_0 = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau (\dot{x}^2(\tau) + \omega^2 x^2(\tau)) = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau x(\tau) \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2 \right) x(\tau). \quad (3.55)$$

Já a parte interagente S_I , é representada por

$$S_I = \int d\tau \frac{\lambda}{4} x^4(\tau) + \frac{\rho}{6} x^6(\tau). \quad (3.56)$$

Para evitar divergências e garantir que teremos um estado limitado por baixo, os termos de autointeração foram introduzidos.

Ao adicionar uma fonte fictícia, (3.54) se torna o seguinte gerador funcional

$$Z_\beta(j) = \int [dx(\tau)] e^{-S(x) + \int d\tau j(\tau) x(\tau)}. \quad (3.57)$$

Podemos escrever a função de correlação de n-pontos como derivadas funcionais desse gerador funcional (3.57) em relação à fonte $j(\tau)$

$$\langle x(\tau_i) \dots x(\tau_k) \rangle = \frac{1}{Z_\beta} \frac{\delta Z_\beta(j)}{\delta j(\tau_i) \dots \delta j(\tau_k)} \Big|_{j=0}, \quad (3.58)$$

onde Z_β representa a função de partição sem a fonte $Z_\beta = Z_\beta(j=0)$. Essa expressão também é equivalente a

$$\langle x(\tau_i) \dots x(\tau_k) \rangle = \frac{1}{Z_\beta} \int [dx(\tau)] \prod_{i=1}^k x(\tau_i) e^{-S(x)}. \quad (3.59)$$

Na teoria de campos, as funções de correlações correspondem a soma de todos os diagramas k -linhas externas, incluindo os pontos desconexos, com exceção dos diagramas de vácuo.

O gerador funcional de n-pontos também pode ser obtido, definindo $W(j) = \ln Z_\beta(j)$. A ordem de parâmetro do modelo sem desordem é

$$\langle x(\tau) \rangle = \frac{1}{Z_\beta(j)} \frac{\delta Z_\beta(j)}{\delta j(\tau)} \Big|_{j=0} = \frac{\delta(\ln Z_\beta(j))}{\delta j(\tau)} \Big|_{j=0} = \frac{\delta W(j)}{\delta j(\tau)} \Big|_{j=0}. \quad (3.60)$$

Considerando o seguinte modelo de desordem do tipo $\omega^2 = \omega_0^2 + \delta\omega^2$, também conhecido como ruído multiplicativo. A função de partição na presença dessa desordem, escreve-se

$$Z(\delta\omega^2, j) = \int [dx(\tau)] e^{-S(x, \delta\omega^2)}, \quad (3.61)$$

onde $S(x, \delta\omega^2)$ é a ação, no qual $\omega^2 = \omega_0^2 + \delta\omega^2$ é adicionada em (3.55), possui a seguinte expressão

$$\begin{aligned} S(x, \delta\omega^2) &= \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau x(\tau) \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega_0^2 + \delta\omega^2 \right) x(\tau) + S_I \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau x(\tau) \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega_0^2 \right) x(\tau) + \delta\omega^2 x^2(\tau) + S_I \\ &= S_0 + S_I + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \delta\omega^2 x^2(\tau) \\ &= S(x) + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \delta\omega^2 x^2(\tau). \end{aligned} \quad (3.62)$$

A fim de gerar as funções de correlação desse modelo, uma fonte em (3.61) é adicionada, tornando-a um gerador funcional na presença da desordem

$$Z(\delta\omega^2, j) = \int [dx(\tau)] e^{-S(x, \delta\omega^2) + \int d\tau j(\tau)x(\tau)}. \quad (3.63)$$

Dessa forma, as funções de correlação desse sistema são obtidas através das derivadas funcionais em relação à fonte

$$\langle x(\tau_i) \dots x(\tau_n) \rangle_{\delta\omega^2} = \frac{1}{Z(\delta\omega^2)} \int [dx(\tau)] \prod_{i=1}^n x(\tau_i) e^{-S(x, \delta\omega^2)}. \quad (3.64)$$

Assim como na presença de uma fonte, podemos escrever um outro gerador funcional com termo de desordem

$$W_1(\delta\omega^2, j) = \ln Z(\delta\omega^2, j). \quad (3.65)$$

A média da função de correlação de n-pontos do modelo desordenado pode ser expresso por

$$\mathbb{E}[\langle x(\tau_i) \dots x(\tau_n) \rangle_{\delta\omega^2}] = \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \langle x(\tau_i) \dots x(\tau_n) \rangle_{\delta\omega^2}, \quad (3.66)$$

onde \mathbb{E} é a medida sobre os ensembles de todas as realizações da desordem, também conhecida como momentos de uma distribuição segundo a teoria da probabilidade, que pode ser revisto no anexo (A); $[d\delta\omega^2]$ é a medida de integração e a distribuição de probabilidade é escrito como $[d\delta\omega^2]P(\delta\omega^2)$. A probabilidade é, geralmente, escrita como uma função gaussiana em relação à desordem

$$P(\delta\omega^2) = p_0 \exp\left\{\frac{-1}{4\sigma} \int d\tau (\delta\omega^2(\tau))^2\right\}, \quad (3.67)$$

onde p_0 é uma constante de normalização e σ é um parâmetro positivo associado com a desordem.

Há duas formas diferentes de realizar médias desordenadas. A primeira é a média *annealed*, em que definimos a média da função de partição primeiro e, em seguida, aplica-se o logaritmo. Assim, a energia livre média *annealed* é definida como sendo

$$F^a = -\frac{1}{\beta} \ln \mathbb{E}[Z(\delta\omega^2, j)]. \quad (3.68)$$

A segunda maneira de realizar médias de desordem são as médias *quenched*, em que se define para uma realização de desordem $W_1(\delta\omega^2, j) = \ln Z(\delta\omega^2, j)$ e, depois disso, calcula-se a média de todas as realizações de desordem. Dessa forma, a energia livre média é descrita por

$$F^q = -\frac{1}{\beta} \mathbb{E}[\ln Z(\delta\omega^2, j)]. \quad (3.69)$$

Como estamos interessados em calcular a média *quenched* da energia livre, vamos definir um gerador funcional das médias das funções de correlação conexas $W_2(j) = \mathbb{E}[W_1(\delta\omega^2, j)]$. Assim, ele pode ser escrito como

$$W_2(j) = \mathbb{E}[\ln Z(\delta\omega^2, j)] = \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \ln Z(\delta\omega^2, j). \quad (3.70)$$

Para solucionar a equação (3.70), o método das réplicas poderia ser usado. O método das réplicas é uma técnica matemática na qual consiste em construir a k-ésima potência da função de partição $Z^k(\delta\omega^2)$. Isso pode ser interpretado como a função de partição de um novo sistema formado por k cópias estatisticamente independentes do sistema original. Em seguida, a média sobre a desordem desse novo objeto é calculada $\mathbb{E}[Z^k(\delta\omega^2)]$. Dessa

forma, a média da energia livre é obtida através da seguinte fórmula

$$\mathbb{E} [\ln Z^k(\delta\omega^2)] = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\mathbb{E} [Z^k(\delta\omega^2)] - 1}{k}. \quad (3.71)$$

Em que $Z^k(\delta\omega^2)$ para $0 < k < 1$ é a derivada de seus valores para k inteiros. Observe que, em $Z^k(\delta\omega^2)$, a integração sobre a desordem produz um sistema definido por k réplicas que não são mais estatisticamente independentes. O valor médio da energia livre, na presença da desordem *quenched*, é então obtido no limite de uma teoria de campo de componente zero, tomando o limite $k \rightarrow 0$.

Esse método é bem útil, pois é mais fácil evoluir $\mathbb{E} [Z^k(\delta\omega^2)]$ do que $\mathbb{E} [\ln Z^k(\delta\omega^2)]$. Porém há um problema nos cálculos das réplicas, porque ao evoluir $Z^k(\delta\omega^2)$ com k positivo em mente extrapola o resultado para o limite $k \rightarrow 0$. Portanto, devemos ter o cuidado de discutir a importância dos resultados dos cálculos gerados pelo método das réplicas [14].

Contudo, outra forma de calcular essa média (3.70) é através do método da função zeta distribucional que será apresentado no próximo capítulo.

4 Método da função zeta distribucional

Nesta seção, apresentaremos o método da função zeta distribucional para a solução do sistema apresentado na seção anterior, que foi desenvolvido por Svaiter e Svaiter [6] e, posteriormente, utilizado em [15, 16, 17, 18, 19]. Como no truque da réplica, o objetivo do método é obter a média da energia *quenched*. O método consiste no uso de uma generalização da função zeta de Riemann que se chama função zeta distribucional, que será definida a seguir. Primeiro, utilizaremos uma generalização da função zeta de Riemann, chamada função zeta generalizada, [20] a partir de uma integral de Lebesgue como

$$\zeta_{\mu,f}(s) = \int_{\Omega} f(x)^{-s} d\mu(x), \quad (4.1)$$

considerando (X, \mathcal{A}, μ) um espaço de medida e $f : \rightarrow (0, \infty)$ uma função mensurável, $s \in \mathbb{C}$ e $f^{-s} \in L^1(\mu)$, essa definição geral incorpora a função zeta de Riemann se $X = \mathbb{N}$ e μ for uma medida de contagem [21]. Tendo em vista o interesse no cálculo da média *quenched* da energia livre, Svaiter e Svaiter definiram a função zeta distribucional como

$$\Phi(s; j) = \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) [Z(\delta\omega^2, j)]^{-s}, \quad (4.2)$$

para $s \in \mathbb{C}$, e essa função sendo definida sobre toda região onde a integral converge. Para esse caso, $f = Z[\delta\omega^2]$ e $d\mu = [d\delta\omega^2]P(\delta\omega^2)$. Note que $\Phi(s; j)$ é um funcional de s e também da fonte externa $j(x)$, inserida por conveniência. Utilizaremos agora a identidade $Z^{-s} = e^{-s \log Z}$ para provar a seguinte igualdade

$$\frac{d}{ds} \lim_{s \rightarrow 0^+} e^{-s \log Z} = \lim_{s \rightarrow 0^+} [-\log Z] e^{-s \log Z} = -\log Z. \quad (4.3)$$

Dessa forma, a média do funcional gerador das funções conexas $W(j)$ pode então ser escrita como

$$W(j) = -(d/ds)\Phi(s; j)|_{s=0^+}, \quad \text{Re}(s) \geq 0, \quad (4.4)$$

onde $\Phi(s; j)$ é bem definido. Para prosseguir, utilizaremos a representação integral de Euler para a função gamma, dada por

$$\Gamma(s) = \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{s-1}. \quad (4.5)$$

Ao fazer a seguinte mudança de variável $t \rightarrow Z(\delta\omega^2, j)t$ e aplicando em (4.5), temos

$$\begin{aligned}\Gamma(s) &= \int_0^\infty Z(\delta\omega^2, j) dt e^{-Z(\delta\omega^2, j)t} \left(Z(\delta\omega^2, j)t \right)^{s-1} \\ \Gamma(s) &= \int_0^\infty Z(\delta\omega^2, j)^s dt e^{-Z(\delta\omega^2, j)t} t^{s-1},\end{aligned}\tag{4.6}$$

como $Z(\delta\omega^2, j)$ não depende de t

$$\frac{1}{Z(\delta\omega^2, j)^s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-Z(\delta\omega^2, j)t}, \quad \text{Re}(s) > 0.\tag{4.7}$$

Apesar da integral acima convergir apenas para $\text{Re}(s) > 0$, pois $Z(\delta\omega^2, j) > 0$, mostraremos como obter uma forma para o funcional gerador para $\text{Re}(s) \geq 0$. Substituindo a equação (4.7) na equação (4.2), temos

$$\tilde{\Phi}(s; j) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-Z(\delta\omega^2, j)t}.\tag{4.8}$$

Já sabemos que a função zeta distribucional $\Phi(s; j)$ é definida para $\text{Re}(s) \geq 0$. Utilizaremos a expressão acima para calcular sua derivada em $s = 0^+$ a partir de ferramentas analíticas. Caso necessário, assumimos a comutação dos operadores média na desordem, derivação e integração.

Para prosseguir, assumamos $a > 0$ e que a função zeta distribucional possa ser escrita como a seguinte soma $\Phi = \Phi_1 + \Phi_2$, onde

$$\Phi_1(s; j) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \int_0^a dt t^{s-1} e^{-Z(\delta\omega^2, j)t}\tag{4.9}$$

e

$$\Phi_2(s; j) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \int_a^\infty dt t^{s-1} e^{-Z(\delta\omega^2, j)t},\tag{4.10}$$

onde a é um parâmetro adimensional e sua interpretação será discutida posteriormente. Segundo a equação (4.4), o funcional gerador médio pode ser então escrito como

$$W(j) = - \left. \frac{d}{ds} \Phi_1(s; j) \right|_{s=0^+} - \left. \frac{d}{ds} \Phi_2(s; j) \right|_{s=0}.\tag{4.11}$$

Analisando a equação (4.9), percebe-se que o último termo pode ser escrito como a série de Maclaurin da função e^{-x}

$$e^{-x} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k!}.\tag{4.12}$$

Sendo x substituído por $Z(\delta\omega^2, j)t$. Desta forma, equação (4.9) fica igual a

$$\begin{aligned}\Phi_1(s; j) &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \int_0^a dt t^{s-1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-Z(\delta\omega^2, j)t)^k}{k!} \\ &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \int_0^a dt t^{s-1+k} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (Z(\delta\omega^2, j))^k.\end{aligned}\quad (4.13)$$

Uma vez que a série converge, pode-se trocar a ordem do somatório pela integral. Então,

$$\Phi_1(s; j) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (Z(\delta\omega^2, j))^k \int_0^a dt t^{s-1+k}.\quad (4.14)$$

Resolvendo a integral em relação a t da equação anterior (4.14)

$$\int_0^a dt t^{s-1+k} = \left. \frac{t^{s+k}}{s+k} \right|_0^a = \frac{a^{s+k}}{s+k}.\quad (4.15)$$

Então,

$$\Phi_1(s; j) = \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k a^{s+k}}{k!(s+k)} (Z(\delta\omega^2, j))^k.\quad (4.16)$$

Nesse instante, abre-se o primeiro termo da soma. Assim,

$$\Phi_1(s; j) = \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \left[\frac{a^s}{\Gamma(s)s} + \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k a^{s+k}}{k!(s+k)} (Z(\delta\omega^2, j))^k \right].\quad (4.17)$$

Perceba que temos uma singularidade em $s = 0$, porém podemos contornar essa questão usando a propriedade da função gamma: $\Gamma(s)s = \Gamma(s+1)$. Dessa forma,

$$\Phi_1(s; j) = \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \left[\frac{a^s}{\Gamma(s+1)} + \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k a^{s+k}}{k!(s+k)} (Z(\delta\omega^2, j))^k \right].\quad (4.18)$$

Resolvendo essa primeira integral da equação anterior (4.18) e trocando novamente a ordem do somatório com a integral, temos

$$\Phi_1(s; j) = \frac{a^s}{\Gamma(s+1)} + \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k a^{s+k}}{k!(s+k)} \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) (Z(\delta\omega^2, j))^k.\quad (4.19)$$

Vamos definir o momento inteiro do funcional gerador como $\mathbb{E}[(Z(\delta\omega^2, j))^k] \equiv \mathbb{E}[Z^k]$, onde

$$\mathbb{E}[(Z(\delta\omega^2, j))^k] = \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) (Z(\delta\omega^2, j))^k.\quad (4.20)$$

A contribuição de $\Phi_1(s; j)$ resulta em

$$\Phi_1(s; j) = \frac{a^s}{\Gamma(s+1)} + \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k a^{k+s}}{k!(k+s)} \mathbb{E}[Z^k],\quad (4.21)$$

que é uma expressão válida para $\text{Re}(s) \geq 0$. A função $\Gamma(s)$ tem um polo em $s = 0$ com resíduo 1. Portanto, a sua derivada em relação a s é equivalente a

$$\left. \frac{d}{ds} \Phi_1(s; j) \right|_{s=0^+} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k a^k}{k! k} \mathbb{E}[Z^k] + f(a), \quad (4.22)$$

onde

$$f(a) = \left. \frac{d}{ds} \left(\frac{a^s}{\Gamma(s+1)} \right) \right|_{s=0} = (\log a + \gamma). \quad (4.23)$$

Sendo o fator $\gamma = 0,577 \dots$ é conhecido como a constante de Euler.

A integral $\Phi_2(s, j)$ define uma função analítica definida em todo plano complexo. Logo, a derivada de Φ_2 na equação (4.10) é dada por

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{ds} \Phi_2(s; j) \right|_{s=0} &= \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) \int_a^{\infty} \frac{dt}{t} e^{-Z(\delta\omega^2, j)t} \\ &= -R(a, j). \end{aligned} \quad (4.24)$$

Consequentemente, usando ferramentas analíticas e integrando sobre a desordem, obtemos uma nova representação para funcional do gerador da média da desordem $W(j)$, dada por

$$W(j) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} a^k}{k! k} \mathbb{E}[Z^k] - \log a - \gamma + R(a, j). \quad (4.25)$$

Note que $R(a, j)$ tende a zero a medida que $a \rightarrow \infty$. A seguir, discutiremos o comportamento assintótico de $R(a)$, que está relacionada com a função gamma incompleta [22] definida como

$$\Gamma(\alpha, x) = \int_x^{\infty} e^{-t} t^{\alpha-1} dt. \quad (4.26)$$

A representação assintótica de $|x| \rightarrow \infty$ e $-\pi/2 < \arg x < \pi/2$ fica

$$\Gamma(\alpha, x) \sim x^{\alpha-1} e^{-x} \left[1 + \frac{\alpha-1}{x} + \mathcal{O}(x^{-2}) + \dots \right]. \quad (4.27)$$

Por simplicidade, podemos assumir que o parâmetro a é grande. Portanto, essa contribuição pode ser absorvida na medida funcional de cada momento inteiro do funcional gerador de todas as funções correlação. A seguir, vamos utilizar esse método para calcular a média da energia livre do nosso sistema desordenado.

4.1 Energia média livre do oscilador anarmônico com desordem

Nesta seção, vamos utilizar o método da função zeta distribucional para calcular a média da energia livre do nosso sistema. Como vimos, a energia livre média *quenched* (3.69) é dada pela fórmula

$$F^q = -\frac{1}{\beta} \mathbb{E}[\ln Z(\delta\omega^2, j)], \quad (4.28)$$

onde a média do logaritmo da função de partição $W_2(j) = \mathbb{E}[\ln Z(\delta\omega^2, j)]$, dado pela equação (3.70), precisa ser calculada. O método da função zeta distribucional promove a solução desse problema através de série (4.25)

$$W(j) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} a^k}{k! k} \mathbb{E}[Z^k] - \log a + \gamma - R(a, j). \quad (4.29)$$

Ao multiplicar (4.25) por $-\beta^{-1}$, temos a expressão da média da energia livre *quenched*

$$F^q = \frac{1}{\beta} \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k a^k}{k! k} \mathbb{E}[Z^k] + \log a + \gamma + R(a, j) \right\}. \quad (4.30)$$

Portanto, para determinar a média da energia livre, primeiramente, temos que calcular o k -momento da distribuição $\mathbb{E}[Z^k]$, que são as funções de correlações conexas. Sendo $Z^k = Z \times Z \times \dots \times Z$, as cópias da função de partição desordenada igual a

$$Z^k = \int \prod_{i=1}^k [dx_i] \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \sum_{i=1}^k \left[\frac{1}{2} x_i(\tau) \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega_0^2 + \delta\omega^2 \right) x_i(\tau) + \frac{\lambda}{4} x_i^4(\tau) + \frac{\rho}{6} x_i^6(\tau) \right] \right\}. \quad (4.31)$$

Usando a distribuição de probabilidade (3.67) para a desordem e calculando a média $\mathbb{E}[Z^k]$. Observe que podemos separar essa integral em duas partes, uma que não depende da desordem e outra em que depende

$$\mathbb{E}[Z^k] = \int \prod_{i=1}^k [dx_i] e^{-S(x)} \int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) e^{-S(\delta\omega^2)}. \quad (4.32)$$

Sendo a solução dessa integral que depende da desordem é tipo uma gaussiana, temos

$$\int [d\delta\omega^2] P(\delta\omega^2) e^{-S(\delta\omega^2; x)} = N \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \frac{\sigma}{4} \sum_{i,j=1}^k x_i^2(\tau) x_j^2(\tau) \right\}. \quad (4.33)$$

Com isso, temos o seguinte resultado

$$\mathbb{E}[Z^k] = \int \prod_{i=1}^k [dx_i] e^{-S_{ef}(x_i)}, \quad (4.34)$$

onde a ação efetiva é escrita como

$$S_{ef}(x_i) = \int d\tau \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^k x_i(\tau) \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega_0^2 \right) x_i(\tau) + \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^k g_{ij} x_i^2(\tau) x_j^2(\tau) + \frac{\rho}{6} \sum_i^k x_i^6(\tau) \right], \quad (4.35)$$

onde g_{ij} são as constantes de acoplamento dadas por $g_{i,j} = (\lambda\delta_{ij} - \sigma)$. As configurações do estado fundamental de $x_i(\tau)$ são definidas pelas equações de ponto de sela. As equações de ponto de sela são derivadas em relação a $x_i(\tau)$ na ação de cada função de partição e é dada por

$$\left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega_0^2 \right) x_i(\tau) + \lambda x_i^3(\tau) - \sigma x_i(\tau) \sum_{j=1}^k x_j^2(\tau) + \rho x_i^5. \quad (4.36)$$

De acordo com o método da função zeta distribucional, a média da energia livre é escrita como uma série dos momentos inteiros da função de partição desordenada. Portanto, usa-se o ansatz $x_i(\tau) = x_j(\tau)$, em que é imposto que os campos $x(\tau)$ não possuem distinção. Aplicando o ansatz na equação acima, temos

$$\left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega_0^2 \right) x_i(\tau) + (\lambda - k\sigma)x_i^3(\tau) + \rho_0 x_i^5(\tau) = 0. \quad (4.37)$$

Analisando o termo $(\lambda - k\sigma)$ e considerando $\lambda > 0$ e $\sigma > 0$, vamos definir um k_c crítico, no qual $k_c = \lfloor \lambda/\sigma \rfloor$, onde $\lfloor y \rfloor$ significa a parte inteira de y . Para $(\lambda - k\sigma) > 0$, é satisfeito que $k \leq k_c$. Neste caso, a configuração de cada réplica flutua em torno do valor zero, produzindo um estado de equilíbrio estável. Essa situação é bastante diferente quando a contribuição para a energia livre média vem das funções de partição de réplica onde $k > k_c$. Nesse cenário, não temos mais um estado de equilíbrio estável na origem. Na estrutura dos operadores de campo, isso significa que o valor esperado do vácuo de tais campos não desaparece. É exatamente nessa circunstância que surge uma quebra espontânea de simetria.

Observe que, com essa abordagem, deve-se levar em conta todas as cópias das funções de partição. Desta forma, todas as cópias contribuem para a energia livre. Isto é, todos os k valores devem ser considerados. No método da réplica, o limite $k \rightarrow 0$ é aplicado na função de partição. Depois, o ansatz de simetria de réplicas é empregado, assim obtendo as equações do ponto de sela de sistemas sem desordem.

No formalismo da função zeta distribucional para cada réplica, a equação do ponto de sela é empregada e depois o ansatz de simetria de réplicas é imposto e obtemos o ponto crítico k_c . Desta maneira, impondo o ansatz de simetria de réplicas nas cópias da função de partição, temos

$$\mathbb{E}[Z^k] = \frac{1}{k!} \int \prod_{i=1}^k [dx_i^k] e^{-S_{ef}(x_i^k)}, \quad (4.38)$$

onde a ação efetiva S_{ef} é escrita como

$$S_{ef}(x_i^k) = \int d\tau \sum_{i=1}^k \left[\frac{1}{2} x_i^k(\tau) \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega_0^2 \right) x_i^k(\tau) + \frac{1}{4} (\lambda - k\sigma) \left(x_i^k(\tau) \right)^4 + \frac{\rho}{6} \left(x_i^k(\tau) \right)^6 \right]. \quad (4.39)$$

Note que cada fator $1/k!$ foi absorvido por $\mathbb{E}[Z^k]$, que pode ser interpretado para representar um ensemble de campos de réplica idênticos. O índice sobrescrito k nos campos indica que o ansatz foi imposto até k -ésima função de partição. Além disso, ao evoluir a série (4.25), o termo $(\lambda - k\sigma)$ se torna cada vez mais distinto. Com isso, cada réplica da função de partição se torna diferente.

O ponto que desejamos enfatizar é que, nas equações das cópias da funções de partição, tais que $k > k_c$, acontecem um mecanismo de quebra espontânea de simetria. Para continuar, vamos investigar algumas opções no espaço da réplica. Considere um termo genérico da série dada pela equação (4.25) com a função de partição de réplica dada por $\mathbb{E}[Z^l]$. Uma escolha, na estrutura dos campos em cada função de partição de réplica, é dada por

$$\begin{cases} x_i^l(\tau) = x^l(\tau), & l = 1, \dots, k_c \\ x_i^l(\tau) = 0, & l > k_c \end{cases}. \quad (4.40)$$

Portanto, a série (4.25) é truncada. Porém essa escolha, como vimos anteriormente, não é consistente com método da função zeta distribucional, uma vez que só leva em consideração as funções de partição que possuem um único mínimo em torno da origem. Nesse caso, a energia livre média é escrita da seguinte forma

$$F_1 = \frac{1}{\beta} \sum_{k=1}^{k_c} \frac{(-1)^k a^k}{k! k} \mathbb{E}[Z^k] + \dots \quad (4.41)$$

A fim de conceber mais termos nessa série, consideramos um $N > k_c$, onde $(\lambda - k\sigma) < 0$ possui valores negativos para $N > k > k_c$. Para prosseguir, devemos estudar em cada

réplica da função de partição a estrutura de vácuo que surge em nosso cenário. Nesta situação, devemos considerar a seguinte estrutura do espaço de réplica

$$\begin{cases} x_i^l(\tau) = x(\tau), & l = 1, \dots, k_c \quad \text{e} \quad i = 1, \dots, l \\ x_i^l(\tau) = X(\tau), & l = k_c + 1, \dots, N \quad \text{e} \quad i = 1, \dots, l \\ x_i^l(\tau) = 0, & l > N \end{cases} \quad (4.42)$$

Portanto, a média da energia livre nesse cenário pode ser escrita como

$$F^q = \frac{1}{\beta} \sum_{k=1}^N \frac{(-1)^k a^k}{k! k} \mathbb{E} [Z^k] + \dots \quad (4.43)$$

Note que em (4.30) a energia livre é independente de a . Contudo, toda a abordagem depende do fato que a pode ser escolhido grande o suficiente para que $R(a)$ possa ser desprezado na prática.

Para determinar as configurações $X(\tau)$, a presença de muitos mínimos locais diferentes, na ordem do modelo original, surgem. Para encontrar essas configurações que geram esses mínimos, usa-se os argumentos da quebra de simetria padrão [23]. Por isso, vamos analisar o potencial da ação efetiva (4.39) que se escreve como

$$V(x_i^l) = \sum_{i=1}^l \left[\frac{1}{2} \omega_0^2 (x_i^l(\tau))^2 + \frac{1}{4} (\lambda - k\sigma) (x_i^l(\tau))^4 + \frac{\rho}{6} (x_i^l(\tau))^6 \right]. \quad (4.44)$$

Repare que esse potencial é similar, na teoria do campo médio, ao da lagrangiana de Landau-Ginzburg com o termo x^6 , selecionando uma das configurações genérica do potencial. Ao minimizá-lo, temos

$$\begin{aligned} \omega_0^2 x(\tau) + (\lambda - k\sigma) x^3(\tau) + \rho x^5(\tau) &= 0 \\ x(\tau) \left(\omega_0^2 + (\lambda - k\sigma) x^2(\tau) + \rho x^4(\tau) \right) &= 0. \end{aligned} \quad (4.45)$$

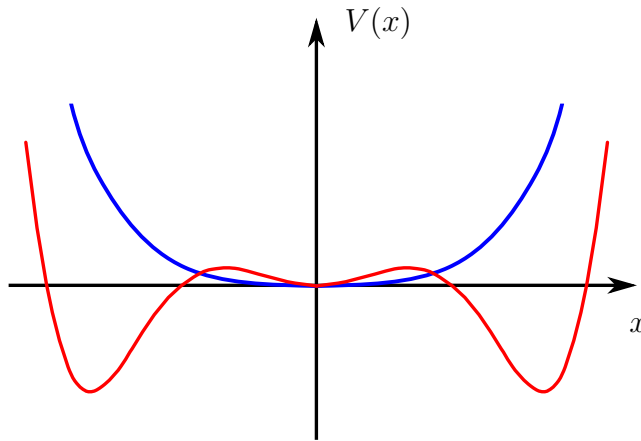
Com isso, a origem sempre é um dos mínimos $x = 0$ e assim, resolvendo essa equação biquadrada, os outros mínimos do potencial são

$$\begin{aligned} x_+^2 &= \frac{-(\lambda - k\sigma) + \sqrt{(\lambda - k\sigma)^2 - 4\omega_0^2 \rho}}{2\rho} \\ x_-^2 &= \frac{-(\lambda - k\sigma) - \sqrt{(\lambda - k\sigma)^2 - 4\omega_0^2 \rho}}{2\rho} \end{aligned} \quad (4.46)$$

Portanto, ambas as soluções x_{\pm} são válidas ao considerar $(\lambda - k\sigma)^2 - 4\omega_0^2 \rho > 0$. Ou seja, $(\lambda - k\sigma)^2 > 4\omega_0^2 \rho$. Lembrando que estamos considerando que todas as constantes $\lambda, \sigma,$

ω_0^2 e ρ são positivas. Observe que o termo ρ sendo positivo garante que o potencial seja limitado por baixo. Desta forma, a configuração dos campos em $N > k > k_c$ é dado por $X(\tau) = x(\tau) + x_{\pm}$. Ao fazer esse deslocamento no potencial (4.44), os termos como $x^3(\tau)$ e $x^5(\tau)$ aparecem. Assim, ocorre a quebra espontânea de simetria para um N finito. Expressando esse potencial graficamente, temos:

Figura 1 – gráfico do potencial pela posição.



O gráfico em azul representa o potencial no cenário em que fator k está abaixo do valor crítico, ou seja $k < k_c$. Podemos observar que o valor mínimo é somente o ponto zero, como previsto com os valores dos mínimos dado pela equação 4.46. Já o gráfico em vermelho, representa o potencial em que o fator $k > k_c$. Desta forma, apresentando esses valores de múltiplos mínimos locais.

Portanto, nesse cenário (4.42), a função de partição pode ser dividida da seguinte forma

$$F^q = \frac{1}{\beta} \left[F_1 + \sum_{k=k_c+1}^N \frac{(-1)^k a^k}{k! k} \mathbb{E} [Z^k] + \dots \right], \quad (4.47)$$

onde F_1 é o somatório da equação (4.41), representa o caso $k \leq k_c$, e é a contribuição para a energia livre média para campos de réplica que oscilam em torno do vácuo verdadeiro. A segunda parte do somatório possui a presença de muitos mínimos locais diferentes, ou seja, a parte que ocorre o mecanismo de quebra espontânea de simetria.

A quebra espontânea de simetria está, intimamente, relacionada com o fenômeno de transições de fase. No nosso cotidiano, podemos vivenciar esse fenômeno quando observamos um fluido, como a água, passar do estado líquido para estado gasoso ao variar a temperatura. Temos que o sistema apresenta duas fases com propriedades de simetria completamente distintas. O diagrama de fase da temperatura e a densidade desse sistema possuem um ponto crítico, considerando a pressão fixa, temos uma temperatura crítica T_c . Em que abaixo desse ponto, conforme a densidade aumenta à temperatura fixa, não é possível passar de uma fase gasosa para uma fase líquida sem passar por um regime em que o recipiente do fluido contém uma mistura de gás e líquido. Acima do ponto crítico, é possível passar, continuamente, de um gás para um líquido à medida que a densidade aumenta a temperatura constante. Nesse caso, não há densidade na qual haja uma mistura coexistente de líquido e gás no recipiente [24].

A transição de fase pode ser classificada em dois tipos: de primeira ordem ou contínua. A transição de fase de primeira ordem ocorre quando há uma descontinuidade na primeira derivada da função de partição em relação aos seus parâmetros. Já a transição de fase contínua, também chamada de transição de fase de segunda ordem, ocorre quando a descontinuidade é dada pela segunda derivada da função de partição em relação aos seus parâmetros. Esse tipo de transição gera fenômenos interessantes, como a superfluididez. Em que O hélio líquido (He^4) sofre uma transição de fase para um superfluido na temperatura de $2K$, para uma pressão no intervalo de $0 - 25 atm$. Essa transição também é conhecida como transição Lambda, devido a curva no gráfico do calor específico. Nesse estado superfluido, o hélio líquido exhibe propriedades bem incomuns, como o fluxo sem dissipação através de tubos capilares finos [24].

5 Conclusão

Nesta dissertação, estudamos o método da função zeta distribucional para solucionar o problema do oscilador anarmônico na presença de uma desordem. Considerando esse sistema no espaço Euclidiano, ele representa uma teoria de campo clássico em zero dimensões espaciais. Com isso, as trajetórias $x(\tau)$ podem ser consideradas campos que atuam na dimensão temporal. O método da função zeta distribucional promove a solução para a média da energia livre *quenched* através da série (4.30) que possui as réplicas das funções de partição do modelo original.

Ao investigar o sistema do oscilador anarmônico desordenado, utilizando a equação do ponto de sela e o ansatz de simetria réplica, encontra-se um ponto crítico k_c nas equações de campo nas réplicas da função de partição. Percebe-se que o comportamento da energia livre acima desse ponto é completamente diferente, pois as cópias das funções de partição apresentam a presença de muitos mínimos locais. Assim, a energia livre do sistema representa um sistema com diferentes ordens de parâmetros. A partir desse momento, uma análise sobre a estrutura desse espaço de réplicas foi desenvolvida devido à presença desses mínimos, no qual gera essa quebra de simetria das réplicas da função de partição. Observa-se, no intervalo em que o fator k está entre $N > k > k_c$ mais negativo torna-se o termo do campo x^4 na ação efetiva. Essa parte na série da energia livre apresenta uma estrutura com múltiplos estados fundamentais. Portanto, podemos afirmar que a presença da desordem, nesse sistema, modifica os parâmetros do sistema original, gerando uma descontinuidade na função de partição. Podendo separar a série em uma parte que há uma simetria e na outra parte essa simetria é quebrada. Esse resultado surge naturalmente ao utilizar o método da função zeta distribucional.

Como citado anteriormente, um exemplo de uma desordem *quenched* é o *spin-glass*. Podemos perceber que esse modelo possui algumas características com nosso problema. Uma delas é que pelo modelo Edwards-Anderson para *spin-glass* a distribuição de probabilidade também pode ser escrita como uma gaussiana. Além disso, na fase de *spin-glass*,

múltiplos estados de vácuo também aparecem no modelo Sherrington-Kirkpatrick (SK). No entanto, um outro modelo mais simples para explicar sistemas desordenados, como o *spin-glass*, é o Random-Energy model (REM) [25]. Esse modelo descreve um sistema no qual os níveis de energia são independentes das variáveis aleatórias. Além disso, o modelo pode ser definido sem uma hamiltoniana específica. Ou seja, esse modelo é similar aos nossos resultados encontrados. No artigo [26], ele se propõem revolver um sistema desordenado e utilizando o método das réplicas. Porém o método das réplicas não promove um resultado satisfatório justamente pelo limite em que as réplicas tendem a zero. Como sabemos, a função zeta distribucional é um método alternativo para solucionar esses sistemas desordenados, e seus resultados autênticos são consistentes com a literatura usual, em que os sistemas com desordem possui a presença de diversos mínimos em sua energia livre [14]. Nossas perspectivas são de analisar esse e outros sistemas usando o método da função zeta distribucional.

A Elementos da Teoria de Probabilidade

Este apêndice apresenta as noções fundamentais para descrever variáveis aleatórias por uma distribuição de probabilidade. Além disso, mostra a função geradora de momento e função geradora cumulante e suas relações. Através dessa abordagem probabilística, é possível construir uma teoria de campos em zero dimensões espaço-temporais [27].

A.1 Definições básicas de Teoria das Probabilidades

A.1.1 Espaço de Probabilidade

Dado um experimento, ao descrevermos um modelo probabilístico, Ω é o conjunto dos resultados possíveis deste experimento. Ω é chamado de espaço amostral do experimento. Por exemplo, em um dado não viciado, o espaço amostral é $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$.

Na definição de um espaço amostral, temos que Ω deve conter todos os resultados possíveis [28]. Supondo que:

- i) todo resultado possível, corresponde a um, e somente um, ponto $\omega \in \Omega$ e,
- ii) resultados distintos correspondem a pontos distintos de Ω .

Note que, no espaço amostral do exemplo citado acima, não contém a informação se o resultado é ímpar ou par, pois não é um resultado elementar. Para informar isso, o conceito de evento é introduzido. Por exemplo, em um jogo de dados, pode ter os seguintes eventos: $A = \text{"observar um número par"}$, $B = \text{"observar o número 2"}$, $C = \text{"observar um número maior que 4"}$. Desta forma, um evento é um subconjunto do espaço amostral Ω . No exemplo anterior, os eventos explicitamente são $A = \{2, 4, 6\}$, $B = \{2\}$ e $C = \{5, 6\}$. Podem ocorrer eventos impossíveis, como o escolha de um ponto ao acaso de disco unitário de raio 1 centrado na origem tal que a distância deste ponto à origem seja maior ou igual a 15 [28]. Todo evento associado a este experimento pode ser considerado um subconjunto do espaço amostral Ω .

Definindo o espaço amostral mais formalmente [29],

- 1.1) seja Ω o espaço amostral do experimento: todo subconjunto $A \subset \Omega$, será chamado de evento. Ω é o evento certo, e o \emptyset , o evento impossível. Se $\omega \in \Omega$, o evento $\{\omega\}$ é dito elementar ou simples.

Identificando o evento como $\{\omega\}$, que significa que o resultado do experimento é ω e o ponto como ω .

A probabilidade atribuída ao um dado evento é definida como sendo a razão entre o número de resultados favoráveis ao dado evento sobre o número de resultados possíveis, ou seja, dado um evento A a sua probabilidade será

$$P(A) = \frac{A}{\Omega}. \quad (\text{A.1})$$

Utilizando o exemplo dos dados, o espaço amostral $\Omega = 6$ e o evento observar um número par é o conjunto $A = \{2, 4, 6\}$. A probabilidade associada a esse evento é igual a

$$P(A) = \frac{3}{6} = \frac{1}{2}. \quad (\text{A.2})$$

Temos que a equação (A.1) é a definição clássica da probabilidade, quando Ω é finito. Quando Ω é infinito, podemos ter eventos aos quais não se pode definir a probabilidade deste evento $P(A)$. No exemplo do disco, temos que o espaço amostra é infinito e se pode ter eventos em que a área não é bem definida.

A segunda definição relevante, na teoria das probabilidades, é a respeito de eventos aleatório, diz que

- 1.2) um evento A ao qual atribuímos uma probabilidade será chamado de aleatório.

Os eventos aleatórios devem satisfazer algumas propriedades que são bastantes intuitivas. Seja \mathcal{A} a classe de eventos aleatórios, ele deve satisfazer:

1. $\Omega \in \mathcal{A}$, então $P(\Omega) = 1$
2. Se $A \in \mathcal{A}$, conseqüentemente, $A^c \in \mathcal{A}$. Neste caso, a probabilidade do complementar é $P(A^c) = P(\Omega - A) = 1 - P(A)$

3. Se $A, B \in \mathcal{A}$, então $A \cup B \in \mathcal{A}$. Atribuindo probabilidade a A e a B , então atribuiremos probabilidade a A ou a B .

Com essas propriedades, podemos ir a terceira definição, que diz:

- 1.3) seja $\Omega \neq \emptyset$ uma classe de subconjunto de ω , satisfazendo as propriedades citadas acima sobre eventos aleatórios, é chamada de álgebra de subconjunto de Ω .

Proposição (1.1): seja \mathcal{A} uma álgebra de subconjuntos de Ω valem as seguintes propriedades

4. $\emptyset \in \mathcal{A}$
5. \forall_n , temos $\cup_{i=1}^n A_i \in \mathcal{A}$ e $\cap_{i=1}^n A_i \in \mathcal{A}$

A proposição (1.1) diz que uma álgebra é fechada para um número finito de operações \cup, \cap e c . Além disso, essa classe de eventos aleatórios satisfazem:

- 3*) se $A_n \in \mathcal{A}$, onde $n = 1, 2, 3 \dots$. Então, $\cup_{i=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{A}$

Quarta definição:

- 1.4) uma classe \mathcal{A} de subconjuntos de um conjunto não vazio Ω , satisfazendo as propriedades 1, 2, 3*, é chamada de σ -álgebra de subconjuntos de Ω .

Proposição (1.2): seja \mathcal{A} um σ -álgebra de subconjuntos de Ω se $A_1, A_2, A_3, \dots \in \mathcal{A} \rightarrow \cap_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{A}$. Cuja a demonstração

$$\bigcap_{n=1}^{\infty} A_n = \left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n^c \right)^c \quad (\text{A.3})$$

Uma σ -álgebra é fechada para um número enumerável de aplicações \cup, \cap e c .

Existe uma outra forma de definir a probabilidade que é através da frequência relativa. Por isso, é denominada a definição frequentista ou estatística de probabilidade. Assim, $P(A)$ é definida como o limite da frequência relativa da ocorrência, ou seja,

$$P(A) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n}, \quad (\text{A.4})$$

cujo o significado é o número de ocorrências de A em " n ensaios" independentes do experimento. Não é preciso definir a probabilidade para cada experimento, pois se admite que existem probabilidades para uma certa σ -álgebra \mathcal{A} de eventos chamados de aleatórios.

Vamos supor $\forall A \in \mathcal{A}, \exists P(A) \in \mathbb{R}$, onde $P(A)$ é denominado probabilidade de A , que deve satisfazer os seguintes axiomas:

1. $P(A) \geq 0$
2. $P(\Omega) = 1$
3. Se A_1, \dots, A_n são disjuntos, isto é, $A_i \cap A_j = \emptyset$ ($i \neq j$), então $P(\bigcup_{k=1}^n A_k) = \sum_{k=1}^n P(A_k)$.

Se uma função P satisfaz os axiomas 1, 2 e 3, é dito que P é uma probabilidade finitamente aditiva. Considere o axioma 3 modificado

- 3'. se A_1, \dots, A_n são disjuntos, isto é, $A_i \cap A_j = \emptyset$ ($i \neq j$), então $P(\bigcup_{k=1}^{\infty} A_k) = \sum_{k=1}^{\infty} P(A_k)$.

Se olharmos para o axioma 3' e ele é satisfeito, dizemos que P é uma probabilidade σ -aditiva.

A próxima definição diz que

- 1.5) uma função P definida em uma σ -álgebra \mathcal{A} e, satisfazendo os axiomas 1, 2 e 3' é chamada de medida de probabilidade em \mathcal{A} , ou, simplesmente, probabilidade em \mathcal{A} .

Esse método axiomático foi proposto por A.N.Kolmogorov [30] e colocou a teoria da probabilidade numa base matemática bem estabelecida.

Vamos citar agora algumas propriedades da probabilidade

P1. $P(A^c) = 1 - P(A)$, se $P(\emptyset) = 0$ e $P(\Omega) = 1$.

P2. $0 \leq P(A) \leq 1$, usando o axioma 1 e P1.

P3. Se $A_1 \subset A_2$, então $P(A_1) \leq P(A_2)$, pela aditividade finita.

P4. $P(\bigcup_{i=1}^n A_i) \leq \sum_{i=1}^n P(A_i)$.

$$P5. P(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i) \leq \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i).$$

Um modelo matemático para um experimento ou modelo probabilístico consta de

- a) $\Omega \neq \emptyset$, de resultados possíveis, o espaço amostral;
- b) uma σ -álgebra \mathcal{A} de eventos aleatórios;
- c) uma probabilidade P definida em \mathcal{A} .

Citando a última definição:

1.6) um espaço de probabilidade é o trio (Ω, \mathcal{A}, P) .

O modelo probabilístico é um espaço de probabilidade. Reciprocamente, (Ω, \mathcal{A}, P) pode ser considerado um modelo para um experimento em que relacionamos um ponto de Ω com probabilidade P .

A.1.2 Variáveis Aleatórias

Informalmente, uma variável aleatória é uma característica numérica do resultado de um experimento. Por exemplo, lançar uma moeda n vezes e observar a quantidade de caras (c) e coroas (\bar{c}) [28]. O espaço amostral é dado por $\Omega = \{(\omega_1, \dots, \omega_n)\}$, onde $\omega_i = c$ ou \bar{c} . Definimos um X , que é igual ao número de caras observadas. Sendo $X(\omega)$ o número de caras em $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_n) = \{i : \omega_i = c, 1 \leq i \leq n\}$

Definição:

2.1) uma variável aleatória X , em um espaço de probabilidade (Ω, \mathcal{A}, P) , é uma função real definida no espaço Ω tal que $[X \leq x]$ é o evento aleatório $\forall x \in \mathbb{R}$.

Ou seja, $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ é uma variável aleatória se $[X \leq x] \in \mathcal{A} \forall x \in \mathbb{R}$. Em teoria da medida, diz-se que X é uma função mensurável em \mathcal{A} .

$$[X \leq x] := \{\omega \in \Omega : X(\omega) \leq x\} \tag{A.5}$$

Para entender melhor essa noção, introduziremos a imagem inversa X^{-1} , neste caso

$$[X \leq x] = X^{-1}((-\infty, x]) \in \mathcal{A}, \forall x \in \mathbb{R}, \quad (\text{A.6})$$

onde X pode ser pensado como um aparato de medida, pois nem sempre Ω é acessível a uma observação direta, mas através de $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. A função de X fica então evidente à probabilidade da σ -álgebra de Borel de alguma variável aleatória $X(\Omega)$ pode ser expressa em termos da probabilidade dos eventos da σ -álgebra \mathcal{A} assim

$$X := (\Omega, \mathcal{A}, P) \rightarrow (\mathbb{R}, \mathcal{B}), \quad (\text{A.7})$$

onde \mathcal{B} é uma σ -álgebra de Borel. Uma variável aleatória X transporta a medida de probabilidade de Ω no espaço dos estado \mathcal{R} . Se B é um evento observável no espaço dos estados ($B \in \mathcal{B}$) sua probabilidade é definida como

$$P_x(B) = P(X^{-1}(B)) = P(\{\omega | X(\omega) \in B\}). \quad (\text{A.8})$$

A.1.3 Função de distribuição e densidade de probabilidade

A medida de probabilidade P_x em \mathcal{B} é introduzida pela variável aleatória e é chamada de distribuição da variável aleatória. Ela é definida da seguinte forma:

3.1 a função distribuição da variável aleatória X , representada por F_x , é definida por

$$F_x = P(\{\omega | X(\omega) \leq x\}) = P(X \leq x), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (\text{A.9})$$

A função de distribuição possui as seguintes propriedades:

1. $F_x(-\infty) = 0$;
2. $F_x(\infty) = 1$;
3. F_x é uma função crescente contínua à direita.

A próxima definição:

- a. uma variável aleatória X é discreta e se torna um número finito ou enumerável de valores matematicamente se existe $\{x_1, x_2, \dots\} \subset \mathbb{R}$ tal que $X(\omega) \in \{x_1, x_2, \dots\} \forall \omega \in \Omega$. A função

$$p(x_i) = P(X = x_i) \quad (i = 1, 2, \dots) \quad (\text{A.10})$$

é chamada de função probabilidade ou frequência de X ;

- b. a variável aleatória X é absolutamente contínua se existe uma função $p(x) \geq 0$ tal que

$$F_x(x) = \int_{-\infty}^{\infty} p(t) dt. \quad (\text{A.11})$$

Dizemos que p é a função densidade de probabilidade de X ou simplesmente densidade de x . Bem como se pode dizer que

$$p(x) = F'_x(x). \quad (\text{A.12})$$

Neste caso, $p(x) dx$ é interpretada como a probabilidade de que $X(\omega)$ torne um valor numa vizinhança infinitesimal de x .

$$p(x) dx = P(\{\omega | X\omega \in (x, x + dx)\}) = P(X \in (\bar{x}, x + dx)) = P(d\omega). \quad (\text{A.13})$$

A.2 Momentos da distribuição

A.2.1 Integral de Stieltjes

Para definir o momento da distribuição, é preciso definir o integral de Stieltjes. Seja ϕ uma função contínua definida num intervalo $[a, b]$, F é uma função distribuição [28]. O integral de Riemann Stieltjes de ϕ ponderada por F através da soma

$$\sum_{i=1}^n \phi(j_i)[F(x_{i+1}) - F(x_i)], \quad (\text{A.14})$$

onde $a < x_1 < x_2 \dots < x_n = b$ e j_i é um ponto aleatório de $[x_i, x_{i+1}]$. Assim, a integral é dada pelo limite da soma de n indo a infinito

$$\int_a^b \phi(c) dF(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \phi(j_i)[F(x_{i+1}) - F(x_i)], \quad (\text{A.15})$$

onde $\phi(x)$ é o integrando e $dF(x)$ o integrador. Segue agora algumas observações importantes:

1.

$$\int_a^b \phi dF = \int_a^b \phi(x) dF(x); \quad (\text{A.16})$$

2.

$$\int_a^b \phi dF = F(b) - F(a); \quad (\text{A.17})$$

3. o integral de Stieltjes é linear tanto no integrando quanto no integrador. Ou seja, se $\phi(x) = \alpha f(x) + \beta g(x)$, então

$$\int_a^b \phi dF = \alpha \int_a^b f(x) dF(x) + \beta \int_a^b g(x) dF(x). \quad (\text{A.18})$$

E se $F = \gamma G + \delta H$, então

$$\int_a^b \phi dF = \gamma \int_a^b \phi dG + \delta \int_a^b \phi dH. \quad (\text{A.19})$$

A.2.2 Momentos da distribuição

Nesta seção, serão definidos os conceitos de esperança, valor esperado e a média de X [29].

$$E\{X\} = \int_{\Omega} X dP = \int_{\Omega} X(\omega) dP(\omega) = \int_{\Omega} X(\omega) P(d\omega). \quad (\text{A.20})$$

Para funções aleatórias reais, a média é calculada através da função distribuição

$$E\{x\} = m = \int_{\mathbb{R}} x dF_x(x). \quad (\text{A.21})$$

Se a função densidade de probabilidade existe, a média pode ser escrita da seguinte forma

$$E\{x\} = \int_{\mathbb{R}} x p(x) dx. \quad (\text{A.22})$$

Momentos de ordem superior podem ser definidos analogamente, com isso o r -ésimo momento é dado por

$$E\{X^r\} = \int_{\Omega} X^r dP = \int_{\Omega} X^r(\omega) dP(\omega) = \int_{\mathbb{R}} x^r dF(x) = \int_{\mathbb{R}} x^r p(x) dx. \quad (\text{A.23})$$

Note que 0-ésimo momento sempre existe, pois

$$E\{1\} = 1 = P(\Omega) = \int_{\Omega} dP(\omega) = \int_{\mathbb{R}} dF(x) = \int_{\mathbb{R}} p(x) dx. \quad (\text{A.24})$$

Mas nem sempre outros momentos existem.

Agora definindo o desvio quadrático médio, também conhecido como variância, como sendo

$$\sigma^2 = E\{(\delta x)^2\} = E\{(X - m)^2\} = \int_{\mathbb{R}} (x - m)^2 dF(x). \quad (\text{A.25})$$

Analogamente, definimos os r -ésimos momentos centrais por

$$E\{(\delta X)^r\} = E\{(X - m)^r\}. \quad (\text{A.26})$$

A variância σ^2 pode ser interpretada como a quantidade que fornece a dispersão dos valores em torno do valor médio. O terceiro momento central fornece o quão simétrica, em torno da média, é uma função densidade de probabilidade.

Uma variável aleatória é dita Gaussiana se sua densidade de probabilidade é

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x - m)^2}{2\sigma^2}}. \quad (\text{A.27})$$

Pode-se definir o valor médio de uma função de variáveis aleatórias. Seja $Y = h(x)$, onde $h(x)$ é não aleatório, pois não depende de ω . Desta forma,

$$E\{Y\} = \int_{\Omega} h(X(\omega)) dP(\omega) = \int_{\mathbb{R}} h(x) dF(x) = \int_{\mathbb{R}} h(x) p(x) dx. \quad (\text{A.28})$$

Uma outra maneira de denotar (A.28) é

$$E\{Y\} = \langle h(\zeta) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx p(x) h(x), \quad (\text{A.29})$$

onde $\langle h(\zeta) \rangle_{\zeta}$ é definida como a média sobre as realizações da quantidade aleatória.

É interessante definir a função característica

$$\Phi(v) = \langle e^{iv\zeta} \rangle_{\zeta} = \int_{-\infty}^{\infty} dz p(z) e^{ivz}. \quad (\text{A.30})$$

A função característica $\Phi(v)$ e a função densidade de probabilidade $p(z)$ são conectados por uma transformada de Fourier

$$p(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dv \Phi(v) e^{-ivx}. \quad (\text{A.31})$$

Podemos definir o n -ésimo momento como

$$M_n = \langle \zeta^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dz p(z) z^n = \left(\frac{1}{i} \frac{d}{dv} \right)^n \Phi(v) \Big|_{v=0}. \quad (\text{A.32})$$

A.2.3 Cumulantes

Os cumulantes são definidos através da função geradora $\Theta(v) = \log \Phi(v)$. Assim, os n -ésimo cumulantes são definidos como

$$K_n = \left(\frac{1}{i} \frac{d}{dv} \right)^n \Theta(v). \quad (\text{A.33})$$

A.3 Uma aplicação: teoria de campos em $d = 0$

Uma teoria de campos em $d = 0$ é uma teoria de campos definida em uma única variável aleatória ϕ [27]. Seja $p(\phi)$ a densidade de probabilidade e supondo que ela não seja normalizada, ou seja

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(\phi) d\phi \neq 1. \quad (\text{A.34})$$

Introduziremos uma função geradora $Z(j)$

$$Z(j) = \int_{-\infty}^{\infty} d\phi p(\phi) e^{j\phi}. \quad (\text{A.35})$$

Os momentos $\langle \phi^n \rangle$ dessa distribuição de probabilidade podem ser obtidos como

$$\langle \phi^n \rangle = \frac{\int d\phi \phi^n p(\phi)}{\int d\phi p(\phi)}. \quad (\text{A.36})$$

Por outro lado, usando a ideia da função geradora (A.35), temos

$$\langle \phi^n \rangle = \frac{1}{Z(0)} \frac{\partial^n Z(j)}{\partial j^n} \Big|_{j=0}. \quad (\text{A.37})$$

Olhando para (A.35), podemos expandir $Z(j)$ em série de potências

$$\begin{aligned} Z(j) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\phi p(\phi) e^{j\phi} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\phi p(\phi) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{j^n \phi^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{j^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} d\phi p(\phi) \phi^n. \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Substituindo a relação (A.36) na equação anterior

$$Z(j) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{j^n}{n!} \langle \phi^n \rangle Z(0). \quad (\text{A.39})$$

Assim,

$$\frac{Z(j)}{Z(0)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{j^n}{n!} \langle \phi^n \rangle. \quad (\text{A.40})$$

Supondo que a densidade de probabilidade seja Gaussiana

$$p(\phi) = e^{-\frac{1}{2}\phi A^{-1}\phi}. \quad (\text{A.41})$$

Substituindo em

$$\begin{aligned} Z(j) &= \int d\phi e^{-\frac{1}{2}\phi A^{-1}\phi} e^{j\phi} \\ &= \int d\phi e^{-\frac{1}{2}\phi A^{-1}\phi + j\phi} \\ &= \int d\phi e^{-\frac{1}{2}A^{-1}\phi^2 + j\phi} \\ &= \int d\phi e^{-\frac{1}{2}A^{-1}(\phi^2 + 2j\phi A + j^2 A^2 - j^2 A^2)} \\ &= \int d\phi e^{-\frac{1}{2}A^{-1}(\phi^2 + jA)^2} e^{-\frac{1}{2}j^2 A} \\ &= e^{-\frac{1}{2}jAj} \int d\phi e^{-\frac{1}{2}A^{-1}(\phi^2 + jA)^2} \\ &= e^{-\frac{1}{2}jAj} \int d\psi e^{-\frac{1}{2}A^{-1}\psi^2}, \quad \psi = \phi + jA \\ &= e^{-\frac{1}{2}jAj} \sqrt{2\pi A} = e^{-\frac{1}{2}jAj} Z(0). \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

Dessa forma,

$$\frac{Z(j)}{Z(0)} = e^{-\frac{1}{2}jAj}. \quad (\text{A.43})$$

Temos diretamente

$$\langle \phi^{2n+1} \rangle = 0 \quad \langle \phi^{2n} \rangle = \frac{\partial^{2n} e^{-\frac{1}{2}jAj}}{\partial j^{2n}}. \quad (\text{A.44})$$

$$\begin{aligned} \langle \phi^{2n} \rangle &= \frac{\partial^{2n}}{\partial j^{2n}} \left[\frac{1}{n!} \frac{1}{2^n} (jAj)^n \right] \\ \frac{2n!}{2^n n!} A^n &= (2n-1)!! A^n. \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

Se $p(\phi)$ não for gaussiano, como

$$p(j) = e^{-\frac{1}{2}\phi A^{-1}\phi + f(\phi)}, \quad (\text{A.46})$$

o procedimento tem que ser feito da seguinte forma e a função geradora pode ser escrita como

$$Z(j) = \int d\phi e^{-\frac{1}{2}\phi A^{-1}\phi + f(\phi) + j\phi}. \quad (\text{A.47})$$

Usando que

$$f\left(\frac{\partial}{\partial j}\right) e^{j\phi} = f(\phi) e^{j\phi}. \quad (\text{A.48})$$

Podemos escrever que a função geradora como

$$\begin{aligned} Z(j) &= e^{f\left(\frac{\partial}{\partial j}\right)} \int d\phi e^{-\frac{1}{2}\phi A^{-1}\phi + f(\phi)} \\ &= Z(0) e^{f\left(\frac{\partial}{\partial j}\right)} e^{\frac{1}{2}jAj} \\ \frac{Z(j)}{Z(0)} &= e^{f\left(\frac{\partial}{\partial j}\right)} e^{\frac{1}{2}jAj} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^n\left(\frac{\partial}{\partial j}\right)}{n!} e^{\frac{1}{2}jAj} \Bigg|_{j=0}. \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

Referências

- [1] Cugliandolo, Leticia F: *Dynamics of glassy systems*. arXiv preprint cond-mat/0210312, 2002.
- [2] Cugliandolo, Leticia F: *Advanced Statistical Physics: Quenched disordered systems*. 2017.
- [3] Edwards, Samuel Frederick e Phil W Anderson: *Theory of spin glasses*. Journal of Physics F: Metal Physics, 5(5):965, 1975.
- [4] Anderson, Philip W: *Absence of diffusion in certain random lattices*. Physical review, 109(5):1492, 1958.
- [5] Akkermans, Eric e Gilles Montambaux: *Mesoscopic physics of electrons and photons*. Cambridge university press, 2007.
- [6] Svaiter, B. F. e N. F. Svaiter: *The distributional zeta-function in disordered field theory*. International Journal of Modern Physics A, 31(25):1650144, 2016.
- [7] Sakurai, Jun Jon e Jim Napolitano: *Mecânica quântica moderna*. bookman, 2013.
- [8] Das, A.: *Field theory: a path integral approach*, volume 52. World Scientific, Singapura, 1993.
- [9] Swanson, Mark S: *Path integrals and quantum processes*. Courier Corporation, 2014.
- [10] Nussenzweig, HM: *Integrais de Trajetória*. Notas do Curso de Verão de Teorias de Calibre, USP, 1981.
- [11] Shankar, Ramamurti: *Quantum Field Theory and Condensed Matter: An Introduction*. Cambridge University Press, 2017.
- [12] Le Bellac, M.: *Quantum and statistical field theory*. Clarendon Press Oxford, Oxford, 1991.

-
- [13] Dittrich, Walter e Martin Reuter: *Classical and quantum dynamics*. Springer, 1994.
- [14] Nishimori, Hidetoshi: *Statistical physics of spin glasses and information processing: an introduction*. Número 111. Clarendon Press, 2001.
- [15] Svaiter, B. F. e N. F. Svaiter: *Disordered Field Theory in $d = 0$ and Distributional Zeta-Function*. ArXiv:1606.04854, 2016.
- [16] Acosta-Díaz, R., G. Menezes, N. F. Svaiter e C. A. D. Zarro: *Spontaneous symmetry breaking in replica field theory*. Physical Review D, 96(6):065012, 2017.
- [17] Soares, M. S., N. F. Svaiter e C. A. D. Zarro: *Multiplicative noise in Euclidean Schwarzschild manifold*. Classical and Quantum Gravity, 37(6):065024, 2020.
- [18] Acosta-Díaz, R., N. F. Svaiter, G. Krein e C. A. D. Zarro: *Disordered $\lambda\varphi^4 + \rho\varphi^6$ Landau-Ginzburg model*. Physical Review D, 97(6):065017, 2018.
- [19] Acosta-Díaz, R. J., C. D. Rodríguez-Camargo e N. F. Svaiter: *Directed polymers and interfaces in disordered media*. Polymers, 12(5):1066, setembro 2020.
- [20] Lemos, N. A.: *Convite à física matemática*. Editora Livraria da Física, São Paulo, 2013.
- [21] Ingham, A. E.: *The distribution of prime numbers*. Cambridge University Press, Cambridge, Inglaterra, 1990.
- [22] Abramowitz, M. e I. A. Stegun: *Handbook of mathematical functions*. Dover Publications Inc., Nova Iorque, 1972.
- [23] Itzykson, Claude e Jean Michel Drouffe: *From Brownian motion to renormalization and lattice gauge theory*. Cambridge University Press, 1989.
- [24] Goldenfeld, Nigel: *Lectures on phase transitions and the renormalization group*. CRC Press, 2018.
- [25] Derrida, Bernard: *Random-energy model: Limit of a family of disordered models*. Physical Review Letters, 45(2):79, 1980.

-
- [26] Derrida, Bernard: *Random-energy model: An exactly solvable model of disordered systems*. Physical Review B, 24(5):2613, 1981.
- [27] Svaiter, N. F. e C. A. D. Zarro: *Métodos Funcionais em Teoria de Campos com Aplicações em Sistemas Desordenados*. Notas de Curso da Escola do CBPF, Rio de Janeiro, 2019.
- [28] James, Barry R: *Probabilidade: Um Curso em Nível Intermediário, 2a. edição*. IMPA, Rio de Janeiro, 2002.
- [29] Horsthemke, W e R Lefever: *Noise-Induced Transitions: Theory and Applications in Physics, Chemistry, and Biology*, volume 15. Springer Science & Business Media, 2006.
- [30] Kolmogorov, Andreï Nikolaevich e Albert T Bharucha-Reid: *Foundations of the theory of probability: Second English Edition*. Courier Dover Publications, 2018.