

**CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS**

**Rua Dr. Xavier Sigaud,150,Urca**

**Rio de Janeiro-RJ, Brasil**

**TESE DE DOUTORADO**

**Álgebras de Heisenberg Generalizadas: Partículas Compostas  
e Estados de Quase-Equilíbrio.**

*Nemésio Matos de Oliveira Neto*

*nmon@cbpf.br*

Orientador: Evaldo M. F. Curado

Co-Orientador: Marco Aurélio R. Monteiro

Julho - 2006

A minha família.

# Agradecimentos

A minha família e meus amigos. Aos meus orientadores Evaldo M. F. Curado e Marco Aurélio Rego Monteiro pela oportunidade. Ao grupo de Mecânica Estatística do CBPF: Constantino Tsallis, Fernando D. Nobre, Jeferson (*forest*; o caçador de paper), Cesar (*marinheiro*), Silvio, Fulvio, Ernesto, Edgardo, Luis, Garin, Ervin. Aos pesquisadores professores que contribuíram para minha formação: Helayel, Nelson Pinto, Silvio Sorella (UERJ), Alberto P. Guimarães, Alexander Smith, Maria Eulália; em particular agradeço ao Sebastião A. Dias (*tião*, fã do Obina) por ter ministrado o melhor curso que fiz (topologia). Agradeço também aos pesquisadores Pós-Graduandos: a galera do DCP: Tales, Álvaro (o cabeça), Leonardo (com sua permissão *coronel*), Gabriel, Ricardo, Wesley, Umberto Belich. Também agradeço a galera da *geral*: *os galinaços medievais* (Erico e Rômulo), André, Buiuna, Rafael, Fabrício (evangelico) e etc. A todos os servidores do CBPF: Vanda, Luzia, Regininha, Miryam, Ricardo (muito *loco*), Nilton (pessoal do CAT) e aos seguranças. Aos professores do Departamento de Física da Universidade Federal de Viçosa- UFV-MG, pela cobrança exagerada; em particular ao Prof. José Arnaldo Redinz por ter lido esta tese. Aos amigos do PVNC-Jacarezinho. Aqueles que não cito aqui minhas desculpas e meus agradecimentos. Agradeço também ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico Tecnológico-CNPq pela bolsa de estudos (de doutorado) que me foi concedida.



# Resumo

Nesta tese, abordaremos duas estruturas algébricas, conhecidas como Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG) e Álgebra do  $sl(2)$  Generalizada ( $sl(2)$ -G), que contém, respectivamente, as álgebras de Heisenberg e  $sl(2)$  como casos especiais. Cada álgebra generalizada é construída através de uma função característica de um dos seus geradores. Primeiramente exploramos uma interpretação fenomenológica, em termos de partículas compostas, da AHG. Considerando a AHG com uma função característica linear, investigamos as propriedades “termodinâmicas” de um sistema formado por um conjunto de “partículas compostas” não interagente ( $q$ -gás ideal). Mostramos que a função de partição de Boltzmann-Gibbs (BG) do sistema é divergente, refletindo o fato de que tais sistemas compostos ligados, sempre se ionizam para qualquer temperatura finita. Estudamos então, este  $q$ -gás ideal, tanto numericamente, através de simulações computacionais utilizando o Método de Monte Carlo, quanto analiticamente, através de uma função de partição regularizada ( $Z'$ ); esta por sua vez é obtida por uma regularização que realizamos na função de partição de BG. As nossas simulações computacionais utilizando o MMC mostram que o  $q$ -gás ideal permanece em um Estado de Quase-Equilíbrio (EQE) termodinâmico, antes da ionização, a baixas temperaturas (medidas em relação a energia de ionização). Mostramos que neste mesmo intervalo de temperatura os resultados analíticos para as quantidades físicas médias calculados através de  $Z'$ , coincidem com aqueles obtidos numericamente calculados no EQE. Mostramos também que o EQE possui um tempo de duração que segue uma lei de Arrhenius com a temperatura, típica de problemas em reações químicas conhecidos como escape de Kramers, bem como o fenômeno de envelhecimento do sistema neste EQE. Argumentamos que estes resultados se estendem para uma família gases ideais

formados por partículas compostas ligadas, que possuem um espectro de energia com infinitos níveis e limitados superiormente. Esta família sempre se encontram, a baixas temperaturas, em um EQE, durante um certo tempo, que precede a ionização; como exemplo, mostramos explicitamente que todos os resultados mencionados acima para o  $q$ -oscilador, i. e., a existência de uma função de partição regularizada fornecendo as funções "termodinâmicas" do EQE e o tempo de duração desse estado seguindo uma lei de Arrhenius, valem para o caso de um gás ideal de átomos de hidrogênio. Para este, mostramos também que todas as propriedades físicas do seu EQE podem ser aproximadas, a baixas temperaturas, pelo  $q$ -gás ideal com  $q = 0.25$ .

Por fim, estudamos a Álgebra do  $sl(2)$  Generalizada ( $sl(2)$ -G) com uma função característica não-linear. Para este caso, mostramos através de um mapa de Jordan-Schwinger (JS) generalizado que podemos mapear os geradores da álgebra do  $sl(2)$ -G nos geradores da AHG. Finalmente, argumentamos uma futura utilidade deste mapa de JS generalizado para entendermos o conteúdo físico da álgebra do  $sl(2)$ -G.

# Abstract

Herein, we are going to discuss two classes of algebraic structures called Generalised Heisenberg Algebra (GHA) and Generalised  $sl(2)$  Algebra, that include, respectively, the Heisenberg algebra and the  $sl(2)$  algebra as particular cases. Each generalised algebra is constructed with a characteristic function of one of the its generators. First of all, we study a phenomenological approach, in terms of composite particles, using some of the algebras within the class of algebras called GHA. Considering the GHA with a linear characteristic function, we investigate the “thermodynamics” properties of a system formed by a set of noninteracting “composite particles” (ideal  $q$ -gas). We show that the Boltzmann-Gibbs (BG) partition function of the system is divergent, reflecting the fact that such a system allways undergoes ionisation for any finite temperature. We have studied this ideal  $q$ -gas numerically, using the Monte Carlo Method (MMC), and analytically, using a regularized partition function that is obtained of a regularization of the BG partition function. Our numerical results show that the ideal  $q$ -gas lives on a Quase Equilibrium State (QES), for low temperatures, before approaching ionisation. For low temperatures, the physical properties of the QES calculated via analytical procedure are in agreement with those obtained numerically. We also show that the duration time of the QES follows an Arrhenius law with the temperature, typically of Kramers’s problem in chemical reaction; while the system lives in this QES, it presents the aging phenomena. We argue that this results can be found in a family of ideal gases formed by composite perticles wich present a energy spectrum with infinte levels bounded. All single elements of this family of such systems, for low temperatures, always live in a QES, during a certain time, before approaching ionisation; as a example, we show explicitly the case of the

ideal gas formed by a hydrogen atoms. For this system all results mentioned above for  $q$ -oscillator are also valid for the hydrogen atom, i. e., a regularized partition function describing the “thermodynamics” properties in the QES and the duration time of the QES following an Arrhenius law with the temperature. Moreover, we show that all physical properties of the QES of the hydrogen ideal gas can be approximated, for low temperatures, by the ideal  $q$ -gas with  $q = 0.25$ .

Finally, we study a Generalised  $sl(2)$  ( $G-sl(2)$ ) Algebra with a non-linear characteristic function. For this case, we show via generalised Jordan-Schwinger (JS) map that we can to map the generators of the  $G-sl(2)$  algebra into the generators of the GHA. At the end, we argue possible future utility of this generalised JS map.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Uma classe de álgebras de Heisenberg generalizadas</b>	<b>9</b>
2.1	As Álgebras de Heisenberg e dos $q$ -Osciladores . . . . .	9
2.2	Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG) . . . . .	16
2.2.1	A AHG para uma função característica linear . . . . .	20
2.2.2	A AHG para uma função característica não-linear . . . . .	26
<b>3</b>	<b>Simulação computacional</b>	<b>35</b>
3.1	O Método de Monte Carlo (MMC) . . . . .	36
3.1.1	Equação mestra e a condição de balanço detalhado . . . . .	39
3.1.2	O algoritmo do MMC . . . . .	41
3.2	O oscilador harmônico via simulação de Monte Carlo . . . . .	43
<b>4</b>	<b>Gás ideal de <math>q</math>-osciladores: <math>q</math>-Gás</b>	<b>53</b>
4.1	A divergência da função de partição do $q$ -gás . . . . .	54
4.2	$q$ -Gás ideal via o MMC . . . . .	58
4.3	$q$ -Gás ideal via o MMC modificado . . . . .	65
4.4	Propriedades “termodinâmicas” do EQE. . . . .	77
<b>5</b>	<b>Gás ideal de átomos de hidrogênio</b>	<b>85</b>
5.1	Equação de Schrödinger e o átomo de hidrogênio . . . . .	86
5.2	Divergência e regularização da função de partição . . . . .	90
5.3	O “experimento computacional” para o átomo de hidrogênio . . . . .	92

5.4	Propriedades termodinâmicas via o formalismo modificado . . . . .	100
5.5	Possível realização física . . . . .	109
5.5.1	Gás de átomos de hidrogênio . . . . .	110
5.5.2	Átomos de hidrogênio em um banho de fótons . . . . .	111
<b>6</b>	<b>Mapa de Jordan-Schwinger generalizado</b>	<b>115</b>
6.1	Realização do $su(2)$ e do $su_q(2)$ via mapa de JS . . . . .	116
6.2	Álgebra do $sl(2)$ generalizada . . . . .	122
6.2.1	Funções características lineares: $sl(2)$ e $sl_q(2)$ . . . . .	127
6.2.2	Função característica não-linear (quadrática) . . . . .	133
6.3	Na direção de um mapa de JS generalizado . . . . .	136
<b>7</b>	<b>Conclusão</b>	<b>143</b>

# Lista de Figuras

2.1	Representação gráfica da álgebra de Heisenberg . . . . .	24
2.2	Iterações de $\alpha_0$ através de uma $f$ linear ( $q < 1$ ) . . . . .	25
2.3	Iterações de $\alpha_0$ através de uma $f$ linear ( $q > 1$ ) . . . . .	26
2.4	Iterações de $\alpha_0$ através de uma $f$ quadrática ( $\Delta < 0$ ) . . . . .	28
2.5	Iterações de $\alpha_0$ através de uma $f$ quadrática ( $\Delta = 0$ ) . . . . .	28
2.6	Iterações de $\alpha_0$ através de uma $f$ quadrática ( $\Delta > 0$ ) . . . . .	30
2.7	Comparação entre os espectros algébricos para $f$ linear e quadrático . .	32
3.1	Energia média do oscilador versus tempo ( $\theta = 1.0$ , $\theta = 10.0$ e $n_0 = 3$ ) .	45
3.2	Energia média do oscilador harmônico versus temperatura . . . . .	46
3.3	Calor específico do oscilador versus temperatura . . . . .	47
3.4	Distribuição das energias do oscilador harmônico . . . . .	49
3.5	Logaritmo da distribuição das energias do oscilador harmônico . . . . .	49
3.6	Comparação entre as dinâmicas de Metropolis e Glauber . . . . .	50
4.1	Espectros de energia do $q$ -oscilador ( $q = 0.80$ ) e do oscilador harmônico	55
4.2	Energia média do $q$ -gás ( $q = 0.80$ ) versus tempo . . . . .	60
4.3	Energia média versus tempo para o oscilador e o $q$ -osciladores ( $q = 0.80$ ).	61
4.4	Função de correlação para o oscilador harmônico versus tempo . . . . .	62
4.5	Figura 4.4 em escala Log-Linear . . . . .	64
4.6	Função de correlação para o $q$ -oscilador . . . . .	64
4.7	Comparação entre o MMC usual e o modificado para o $q$ -gás ( $q = 0.80$ )	67
4.8	Tempo de duração do EQE para o $q$ -gás ( $q=0.80$ ) . . . . .	68

4.9	Energia média por partícula versus tempo para $q$ -gás ( $q = 0.25$ ) . . . . .	69
4.10	Tempo de duração do EQE para o $q$ -gás para vários $q$ . . . . .	70
4.11	Coeficiente da lei de crescimento do EQE versus $q$ . . . . .	71
4.12	Coeficiente da lei de crescimento do EQE multiplicado por $\varepsilon^*$ versus $q$ .	72
4.13	Logaritmo da distribuição de energia no EQE para o $q$ -gás ( $q = 0.80$ ) .	74
4.14	Distribuição dos níveis de energias versus $n$ para o $q$ -gás ( $q = 0.25$ ) . .	75
4.15	Energia média versus tempo para o $q$ -gás ( $q = 0.80, n_0 = 0, n_0 = 1$ ) . . .	76
4.16	Energia média versus tempo para o $q$ -gás ( $q = 0.40, n_0 \in (0, 1)$ ) . . . .	77
4.17	$q$ -gás ( $q = 0.80$ ) comparando as dinâmicas de Glauber e Metrópolis. .	78
4.18	Energia média para o $q$ -gás ( $q = 0.80$ ) em função de $\theta$ . . . . .	79
4.19	Calor específico do $q$ -gás ( $q = 0.80$ ) em função de $\theta$ . . . . .	80
4.20	Energia do $q$ -gás calculada analítica e numericamente em função de $\theta$ .	81
4.21	Energia calculada analítica e numericamente para o $q$ -gás ( $q=0.80$ ) . .	82
4.22	Figura 4.21 para $q = 0.60$ . . . . .	83
4.23	Calor específico para o $q$ -gás ( $q = 0.80$ ) em função de $\theta$ . . . . .	83
5.1	$P_{nl}(r)/(1/a_0)$ do átomo de hidrogênio versus $r/a_0$ ( $n = 2$ e $l = 0$ ) . . .	88
5.2	$P_{nl}(r)/(1/a_0)$ do átomo de hidrogênio versus $r/a_0$ ( $n = 2$ e $l = 1$ ) . . .	89
5.3	$P_{nl}(r)/(1/a_0)$ do átomo de hidrogênio versus $r/a_0$ ( $n = 1$ e $l = 0$ ) . . .	89
5.4	Energia versus tempo para o gás ideal de átomos de hidrogênio . . . . .	93
5.5	Figura 5.4 com as dinâmicas de Glauber e Metropolis. . . . .	95
5.6	$P(n)$ versus $n$ para o átomo de hidrogênio ( $\theta = 0.07$ e $t \in (10^2, 10^4)$ ) . .	96
5.7	$P(n)$ versus $n$ para o átomo de hidrogênio ( $\theta = 0.15$ , $t = 10$ e $t = 10^4$ ) .	97
5.8	$C(t + t_w, t_w)$ versus $t$ para gás ideal de átomos de hidrogênio ( $\theta = 0.07$ )	98
5.9	$\langle E \rangle$ (em $eV$ ) por átomo de hidrogênio versus $T$ (em Kelvin) . . . . .	99
5.10	$c/k_B$ por átomo de hidrogênio versus $T$ (em Kelvins) . . . . .	99
5.11	$\langle \varepsilon(t) \rangle$ por átomo de hidrogênio versus $t$ (dinâmica modificada) . . .	101
5.12	$\langle \varepsilon(t) \rangle$ versus $t$ (dinâmicas usual e modificada; átomo de hidrogênio)	102
5.13	$\langle E \rangle$ (eV) analítico e numérico por átomo de hidrogênio . . . . .	103
5.14	$c/k_B$ analítico e numérico por átomo de hidrogênio versus $T$ (Kelvin) .	103
5.15	$\tau(\theta)$ versus $1/\theta$ para o gás ideal de átomos de hidrogênio . . . . .	105

5.16	$h'(q)$ ( $q$ -oscilador) e $b'$ (átomo de hidrogênio) versus $E_1/E^*$ . . . . .	106
5.17	$\langle \varepsilon(t) \rangle$ versus $t$ para o $q$ -oscilador ( $q=0.25$ ) e o átomo de hidrogênio .	107
5.18	$\langle E \rangle$ (eV) versus $T$ (Kelvin) via $Z'$ e $Z'_{deg}$ (átomo de hidrogênio) . . .	109
6.1	Análise gráfica da álgebra do $sl(2)$ . . . . .	129
6.2	Análise gráfica da álgebra $sl_q(2)$ ( $q < 1$ ) . . . . .	131
6.3	Análise gráfica da álgebra $sl_q(2)$ para $ q  < 1$ . . . . .	132
6.4	Análise gráfica da álgebra do $sl(2)$ generalizada ( $g$ quadrática e $\Delta = 0$ )	135
6.5	Análise gráfica da álgebra do $sl(2)$ generalizada ( $g$ quadrática e $\Delta = 0$ )	136
6.6	Análise gráfica das álgebras do $sl(2)$ generalizada e da AHG ( $\Delta = 0$ ) .	141

# Capítulo 1

## Introdução

Álgebras quânticas (*quantum algebras*) ([1]-[5]), ou grupos quânticos (*quantum groups*) são versões deformadas da álgebra de Lie, as quais se reduzem, em geral, à álgebra de Lie padrão quando o parâmetro de deformação é igual a unidade [6]. Do ponto de vista matemático, as álgebras quânticas são álgebras de Hopf quase-triangulares ([7]-[14]). A álgebra quântica  $su_q(2)$  foi descoberta quando se estudava a cadeia quântica de spin XXZ ([2],[15]-[16]) pelo método do espalhamento quântico inverso. Desde então, foram encontradas aplicações dessa álgebra deformada em diversas áreas da física como em ótica quântica ([17]-[21]), espectroscopia e teorias conformes [6] e anions (*anyons*) ([22]-[24]). O uso das álgebras quânticas em física tornou-se bastante difundido com o uso da álgebra dos  $q$ -osciladores, que pode ser obtida através da realização da álgebra do  $su_q(2)$  pelo mapa de Jordan-Schwinger (JS) ([25]-[26]), apesar de, historicamente, uma outra versão de  $q$ -osciladores ter sido introduzida muito antes por Arik e Coon [27]. A álgebra dos  $q$ -osciladores pode ser vista como uma deformação da Álgebra de Heisenberg (AH), ou álgebra do oscilador harmônico [28]. Esta deformação é realizada através da introdução de um parâmetro  $q$ , e a AH é recuperada no limite em que  $q$  tende a um.

Devido a importância da Álgebra de Heisenberg em diversas partes da física, suas versões deformadas, ou generalizadas, têm atraído muita atenção desde sua descoberta devido a possíveis aplicações em física, bem como no interesse em sua interessante estrutura matemática ([29]-[31]).

No capítulo 2 introduziremos a álgebra de Heisenberg e uma versão deformada, conhecida como  $q$ -osciladores ([25]-[26]), que contém a álgebra de Heisenberg como caso especial. Abordaremos também uma classe de Álgebras Generalizadas de Heisenberg (AHG), que foi recentemente proposta [32]; essa álgebra é uma álgebra do tipo Heisenberg, tendo como geradores operadores de criação, aniquilação e um operador Hermitiano,  $J_0$ . Nesta AHG podemos encontrar como casos particulares a álgebra de Heisenberg usual (não-deformada) e outros tipos de álgebras de Heisenberg deformada como a multiparamétrica. As relações de comutações entre os geradores da AHG contém uma função característica, analítica, de um dos seus geradores  $f(J_0)$ . Quando esta função característica é a função linear com inclinação um, i.e.  $f(J_0) = J_0 + 1$ , as relações algébricas da AHG tornam-se aquelas da álgebra de Heisenberg. No caso de uma função característica linear com inclinação  $q$ , i.e.  $f(J_0) = qJ_0 + 1$ , a AHG corresponde a álgebra de Heisenberg deformada a um parâmetro; para este caso, podemos exibir um mapa que conecta os geradores desta álgebra deformada a um parâmetro com os geradores da álgebra dos  $q$ -osciladores [32]. Considerando uma função característica não-linear, a AHG possui uma estrutura algébrica mais geral do que os casos supracitados.

Para uma dada função analítica  $f$ , foi mostrado [32] que dois auto-valores sucessivos quaisquer de  $J_0$ ,  $\varepsilon_n$  e  $\varepsilon_{n-1}$ , estão relacionados por  $\varepsilon_n = f(\varepsilon_{n-1})$  sendo  $f$  a função característica escolhida para a álgebra e  $\varepsilon_n$  o auto-valor de  $J_0$  associado ao estado geral  $|n\rangle$ . Interpretando o operador  $J_0$  como sendo o operador Hamiltoniano, foi mostrado também que esta classe de álgebras do tipo Heisenberg generalizadas pode ser relacionada a uma família de sistemas quânticos possuindo dois níveis de energia sucessivos quaisquer satisfazendo a relação  $\varepsilon_n = f(\varepsilon_{n-1})$  [33].

Como os auto-valores de  $J_0$  estão relacionados por  $\varepsilon_n = f(\varepsilon_{n-1})$ , as representações da AHG são construídas usando conceitos de sistemas dinâmicos como atratores e estabilidades [34], com os quais o comportamento dos autovalores de  $J_0$  estarão intimamente ligados. Assim, dependendo da função característica  $f$ , os espectros oriundos da AHG podem apresentar vários tipos de comportamentos e podem descrever em particular, espectros típicos de átomos e moléculas, os quais possuem, em geral, um

limite superior precedido por uma quase-contínuo de níveis de energia. De fato, na Ref. [29] foi construído um tratamento algébrico e fenomenológico baseados na AHG para a descrição de espectros vibracionais de sistemas moleculares diatômicos.

Uma outra interpretação da AHG é possível considerando o formalismo da segunda quantização para partículas compostas ([35]-[36]), no qual os operadores de criação e aniquilação são interpretados como operadores de criação e aniquilação, respectivamente, de partículas com estrutura. É importante frisar que tanto para uma função característica linear  $f$  quanto para uma não-linear é possível construir uma Teoria Quântica de Campos baseada na AHG ([35]-[36],[37]) que descreveria, fenomenologicamente, a interação entre partículas compostas.

Uma vez apresentada a AHG e discutido sobre sua interpretação, investigaremos a mesma no capítulo 4, no qual estudaremos as propriedades termodinâmicas de um gás ideal de AHG com  $f(J_0) = qJ_0 + 1$  (que corresponde aos  $q$ -osciladores):  $q$ -gás ideal ([30],[38]). Veremos que a função de partição de um único  $q$ -oscilador é divergente e portanto a de todo o sistema o é. Isto reflete o fato de que para qualquer temperatura finita o sistema sempre se ioniza. A divergência ocorre no caso  $0 < q < 1$  para a versão algébrica usada aqui do  $q$ -oscilador em que o número de Gauss é dado por  $[n] = (1 - q^n)/(1 - q)$ . Para estes valores do parâmetro  $q$ , o  $q$ -oscilador apresenta um espectro de energia com infinitos níveis de energia limitados pela energia de “ionização”  $E^*$ , precedido por um quase-contínuo de níveis de energia. A divergência surge pelo fato de existir um número infinito de níveis, neste quase-contínuo de energia, que contribui com aproximadamente  $exp(-\beta E^*)$ , sendo  $\beta$  o inverso da temperatura, para a função de partição  $Z_{BG}$  calculada usando o formalismo de Boltzmann-Gibbs (BG). Este problema em se obter as propriedades termodinâmicas do  $q$ -oscilador será estudado a partir dos “experimentos computacionais” utilizando o Método de Monte Carlo (MMC). Esta técnica será introduzida no capítulo 3, a qual será aplicada ao gás ideal de osciladores harmônicos, o que será útil já que poderemos comparar nossos resultados com aqueles calculados analiticamente via o formalismo da mecânica estatística de BG.

Nas simulações computacionais, a energia média por  $q$ -oscilador do  $q$ -gás ideal

sempre alcança o valor da energia de ionização  $E^*$  devido ao fato de que para qualquer temperatura finita o sistema sempre se ioniza. O comportamento novo é que a energia média apresenta um patamar (*plateau*) na energia, para temperaturas menores que 10% da energia de ionização e apresenta uma dinâmica lenta, imitando um sistema que se encontra em um estado de equilíbrio. Durante este *Estado de Quase-Equilíbrio* (EQE) o sistema apresenta envelhecimento (*aging*) caracterizando que o sistema se encontra em um estado fora do equilíbrio termodinâmico. Este EQE tem um tempo de duração que cresce exponencialmente com o inverso da temperatura e, assim, segue uma lei de Arrhenius, típica de problemas de Kramers em reações químicas ([38],[39],[40]). Enquanto o sistema permanece no EQE podemos calcular as propriedades físicas médias do  $q$ -gás como calor específico e energia por partícula.

Mostraremos que a função de partição  $Z_{BG}$  pode ser regularizada produzindo uma função de partição modificada,  $Z'$ , finita. Induzidos por esta, proporemos um MMC modificado, o qual produzirá resultados em boa concordância com relação aos obtidos com o MMC usual até temperaturas equivalentes a 10% da energia de ionização ( $E^* = (\hbar\omega)/(1 - q)$ ), tipicamente dentro da faixa de temperatura na qual surge o EQE. O intervalo de temperatura em que esta concordância é válida depende do parâmetro  $q$  e a lei de crescimento do EQE segue ainda uma lei de Arrhenius. Considerando o EQE como um estado de equilíbrio efetivo, o que é uma hipótese razoável à baixas temperaturas devido ao crescimento exponencial do tempo de duração do EQE com o inverso da temperatura, mostramos que todas as propriedades termodinâmicas do EQE podem ser obtidas através da função de partição regularizada  $Z'$ , já que o MMC modificado, baseado nesta função de partição, produz as mesmas quantidades físicas médias do MMC usual dentro do EQE.

Por outro lado, o átomo de hidrogênio também possui um espectro com infinitos níveis de energia limitados superiormente. Uma família de sistemas reais, como átomos e moléculas, também apresentam este tipo de espectro. Assim, para estes, a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (BG) é incapaz de prever quantidades físicas médias para qualquer temperatura finita, desde que a mesma sempre prediz que o sistema está ionizado (que é a situação de equilíbrio) ([41],[42]).

O mesmo tratamento realizado para o  $q$ -gás ideal será utilizado no capítulo 5 para estudar um gás ideal de átomos de hidrogênio ([41],[43]), onde, por simplicidade, não consideraremos a sua degenerescência. Através dos “experimentos computacionais” utilizando o MMC, veremos que o sistema, quando submetido a temperaturas menores que 10% da temperatura correspondente a sua energia de ionização, permanece em um *Estado de Quase-Equilíbrio*, por um certo tempo, antes de alcançar o estado de ionização previsto pelo formalismo de BG.

Através de uma manipulação da função de partição divergente  $Z_{BG}$ , obtida usando o formalismo de BG, propomos uma função de partição regularizada para os estados ligados do átomo de hidrogênio. Devido a isto, esperamos que as grandezas calculadas usando esta função de partição sejam capaz de predizer, à baixas temperaturas, as propriedades do EQE do átomo. Motivado por esta função de partição regularizada, propomos um MMC modificado e de fato veremos que os resultados obtidos com este método modificado coincidem com aquele MMC usual para temperaturas até próximas de  $10^4 K$ . Assim, a função de partição regularizada descreverá as propriedades termodinâmicas do gás ideal de átomos de hidrogênio, até temperaturas próximas de  $10^4 K$ , no EQE. O tempo de duração deste EQE aumenta exponencialmente com o inverso da temperatura seguindo uma lei de Arrhenius. A existência do EQE bem como o fato de que o tempo de duração deste estado seguir uma lei de Arrhenius são as primeiras características em comum entre nossa partícula composta,  $q$ -oscilador, e um sistema real, o átomo de hidrogênio. Estes são resultados que sustentam a interpretação da AHG em termos de partículas compostas quando comparadas com átomos e moléculas.

No caso particular do átomo de hidrogênio, observamos também que a taxa de crescimento do tempo de duração do EQE coincide, dentro da barra de erro, com a do  $q$ -oscilador quando utilizamos  $q = 0.25$ ; este resultado sugere que diversas propriedades físicas de um gás ideal de átomos de hidrogênio podem ser aproximadas, à baixas temperaturas, pelo  $q$ -gás ideal ( $q = 0.25$ ). De fato, quando comparamos a energia média por partícula, em função do tempo, tanto para o gás ideal de hidrogênio quanto para o gás ideal de  $q$ -osciladores ( $q = 0.25$ ) observamos uma excelente concordância

entre os resultados. Isto implica que o átomo de hidrogênio à baixas temperaturas pode ter sua dinâmica imitada pelo  $q$ -oscilador com  $q = 0.25$ . Como veremos, esta característica comum se deve ao fato de que os dois sistemas apresentam uma energia do primeiro nível excitado que corresponde a 75% da energia de ionização de cada sistema.

Por fim, propomos duas possíveis realizações experimentais nas quais o átomo de hidrogênio estaria no então chamado EQE. Destas, faremos hipóteses razoáveis discutindo relações entre o tempo de Monte Carlo e o tempo real e veremos que o tempo de duração do EQE pode assumir valores muito grandes para temperaturas bem acima da temperatura ambiente. Assim sendo, em temperaturas suficientemente baixas, o EQE pode ser considerado com um estado de equilíbrio efetivo, descrito pela função de partição regularizada.

Estes resultados obtidos com as simulações computacionais, foram realizados sem considerar a degenerescência no espectro de energia do átomo. O que mostraremos é que podemos regularizar a função de partição de maneira análoga ao feito sem considerar a degenerescência. Os resultados analíticos obtidos com esta nova função de partição regularizada têm quantidades físicas médias em que os estados excitados apresentam uma maior contribuição, como era de se esperar. Resultados analíticos sugerem que se realizarmos simulações considerando o espectro degenerado do átomo, os resultados serão obtidos através daqueles obtidos com o espectro não-degenerado.

No capítulo 6, voltaremos a discutir mais sobre álgebras quânticas. Em especial abordaremos as álgebra do  $su(2)$  [44],  $su_q(2)$  ([5],[45]-[49]) e uma classe de álgebra do  $sl(2)$  generalizada [34]. Esta última é gerada por três operadores  $S_0$ ,  $J_+$  e  $J_-$  onde, suas relações de comutação, possui uma função característica,  $g$ , do operador diagonal, e Hermitiano,  $S_0$ . Para uma função  $g(S_0) = S_0 - 1$  e  $g(S_0) = qS_0 - 1$  obtemos a álgebra do  $sl(2)$  e a álgebra do  $sl(2)$  deformada a um parâmetro (cujos geradores podem ser mapeados nos geradores da álgebra do  $sl_q(2)$ ), respectivamente. Para uma dada função característica  $g$ , o auto-valor de um autoestado geral  $|\alpha_j; j-m\rangle$  do operador  $S_0$  é dado por  $\alpha_{j-m} = g^m(\alpha_j)$  onde,  $\alpha_j$  é o auto-valor associado ao auto-estado de maior peso da representação algébrica e  $g^m(\alpha_j)$  é a  $m$ -ésima iteração de  $g$  em

---

$\alpha_j$ . Assim, de maneira análoga ao caso da AHG, as representações são estudadas pela análise da estabilidade dos pontos fixos da função característica  $g$  e de suas funções compostas [34].

Uma vez apresentado e discutido a álgebra do  $sl(2)$  generalizado, veremos que é possível realizá-la através da composição de duas AHG independentes (desacopladas) e, em particular, mostaremos no caso em que as funções características,  $f$  e  $g$ , das álgebras generalizadas forem quadráticas [50]. Esta realização será feita através de um mapa de Jordan-Schwinger (JS) generalizado que inclui, como caso especial, o mapa de JS padrão ([51]-[52]). Apesar de ser uma generalização do mapa de JS usual, veremos que tal mapa generalizado possui uma forma simples e compacta, podendo inclusive ser simplificado para escolhas particulares das funções características,  $f$  e  $g$ , de cada álgebra generalizada.

É importante mencionar que o método de JS é útil não apenas como uma ferramenta matemática, mas também possui suas aplicações na física ([6],[53]-[57]), inclusive a sua versão generalizada ([58]-[60]). Esperamos, em particular, que este mapa de JS generalizado nos guie de maneira a sugerir uma possível interpretação para a álgebra do  $sl(2)$  generalizada, o qual será objeto de estudo posterior.



# Capítulo 2

## Uma classe de álgebras de Heisenberg generalizadas

Neste capítulo introduziremos as Álgebras de Heisenberg e dos  $q$ -osciladores, bem como uma classe de álgebras de Heisenberg generalizadas proposta recentemente [32] onde podemos encontrar a álgebra de Heisenberg e a álgebra dos  $q$ -osciladores como casos especiais.

Esta classe de álgebras de Heisenberg generalizadas (AHG) pode ser associada uma família de sistemas quânticos unidimensionais onde dois níveis de energia sucessivos quaisquer estão relacionados pela equação  $\varepsilon_n = f(\varepsilon_{n-1})$ .  $f$  é chamada de função característica usada para construir a álgebra [33].

Na seção 2.1 abordaremos a álgebra de Heisenberg e a álgebra dos  $q$ -osciladores. Na seção 2.2 apresentaremos a AHG para os casos em que a função característica for linear e não-linear. Por fim, discutiremos a interpretação que é dada para a AHG.

### 2.1 As Álgebras de Heisenberg e dos $q$ -Osciladores

Iniciaremos nossa discussão, para introduzir a álgebra de Heisenberg, com o método do operador de Dirac, para obtermos os autovalores e autovetores do oscilador harmônico simples [44].

A hamiltoniana do oscilador harmônico é dada por

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (2.1)$$

sendo  $\omega$  a frequência angular do oscilador clássico,  $x$  e  $p$  são os operadores hermitianos momento e posição que satisfazem à seguinte relação de comutação:

$$[x, p] = i\hbar. \quad (2.2)$$

Define-se dois operadores não-hermitianos  $a$  e  $a^\dagger$  como,

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + \frac{ip}{m\omega} \right) \quad (2.3)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x - \frac{ip}{m\omega} \right). \quad (2.4)$$

Usando a relação de comutação da eq.(2.2), obtemos,

$$[a, a^\dagger] = \left( \frac{1}{2\hbar} \right) (-i[x, p] + i[p, x]) = 1. \quad (2.5)$$

Definindo agora o operador número,

$$N \equiv a^\dagger a, \quad (2.6)$$

obtemos uma relação importante entre o operador número e o operador hamiltoniano

$$H = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right). \quad (2.7)$$

Chamando um autoestado de  $N$  como  $|n\rangle$ , sendo  $n$  o autovalor associado, obtemos:

$$H|n\rangle = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega |n\rangle, \quad (2.8)$$

e assim os autovalores de  $H$  do OH são dados por

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.9)$$

Da definição de  $N$  podemos ver que

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] \quad (2.10)$$

$$= a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a \quad (2.11)$$

$$= -a. \quad (2.12)$$

Analogamente:

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (2.13)$$

Assim, os operadores  $a^\dagger$ ,  $a$  e  $N$  geram uma álgebra descritas pela seguintes relações de comutação:

$$[N, a] = -a \quad (2.14)$$

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger \quad (2.15)$$

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad (2.16)$$

que é conhecida como álgebra de Heisenberg, ou álgebra do oscilador harmônico.

Agora, procuraremos uma representação da álgebra descrita pelas relações de comutação dadas pelas eqs. (2.14- 2.16). Da eq.(2.15) podemos ver que,

$$Na^\dagger = a^\dagger(N + 1). \quad (2.17)$$

Aplicando a eq.(2.17) a um autoestado  $|n\rangle$  de  $N$  obtemos,

$$N(a^\dagger|n\rangle) = a^\dagger(N + 1)|n\rangle = (n + 1)(a^\dagger|n\rangle). \quad (2.18)$$

Podemos notar que  $a^\dagger|n\rangle$  é também um autoestado do operador  $N$  com um autovalor acrescido de uma unidade em relação ao autovalor de  $|n\rangle$ . Por esse motivo o operador  $a^\dagger$  é chamado de operador levantamento. Analogamente, o operador  $a$  é conhecido como operador abaixamento.

Supondo que exista um autovetor de “vácuo”  $|0\rangle$  tal que  $a|0\rangle = 0$ , ou  $N|0\rangle = 0$ , podemos obter uma representação da álgebra de Heisenberg dada por

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad (2.19)$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (2.20)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (2.21)$$

em que  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Podemos ver também que um autovetor  $|n\rangle$  pode ser obtido da seguinte maneira

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle, \quad (2.22)$$

para todo  $n = 0, 1, 2, \dots$ .

Neste ponto é interessante relembrar a associação proposta por M. Planck entre unidades de energias discretas e radiação de osciladores que conduziu ao nascimento dos conceitos quânticos [44]. Como mostramos, a atuação do operador  $a^\dagger$  em um vetor  $|n\rangle$  faz o sistema ir de um autovetor  $|n\rangle$  para um outro autovetor  $|n+1\rangle$ , que possui um autovalor de energia do operador hamiltoniano  $H$  acrescida de uma quantidade  $\hbar\omega$  em relação ao autovalor de  $|n\rangle$ . Assim, podemos associar o surgimento de *partículas pontuais* e independentes (*fótons*), criadas nas paredes de um corpo negro em equilíbrio a uma certa temperatura e possuindo uma energia igual a  $\hbar\omega$ , com a ação do operador  $a^\dagger$  em um espaço de Fock, que seria então um operador de *criação*, neste caso, de partículas pontuais. Analogamente, podemos ver que o operador  $a$  pode ser interpretado como um operador de *aniquilação* de partículas pontuais. Podemos notar também que uma consequência direta do fato das partículas serem independentes é que  $E_n = nE_1$ , i.e., a energia de  $n$  partículas é  $n$  vezes a energia de uma única partícula, ou seja, a energia é aditiva. Esta propriedade do espectro de energia do oscilador harmônico será discutida quando estudarmos a Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG), no que concerne à interpretação fenomenológica.

Uma vez introduzida a álgebra de Heisenberg, ou álgebra do oscilador harmônico, iremos introduzir a álgebra dos  $q$ -osciladores. É importante frisar que existem outras versões de álgebras deformadas de osciladores (veja, por exemplo [62]-[72]), mas elas são equivalentes e podem ser acomodadas dentro de uma mesma classe de

álgebra deformada de oscilador ([60],[68]).

De um ponto de vista histórico, esta álgebra foi introduzida por Arik e Coon [27]. Apesar disto, a álgebra dos  $q$ -osciladores se tornou bem difundido quando Macfarlane [25] e Biedenharn [26], onde em um cenário em que já existiam álgebras quânticas como por exemplo o  $su_q(2)$ , tentam realizar a álgebra do  $su_q(2)$  de maneira semelhante à realização da álgebra do  $su(2)$  através da álgebra de dois osciladores harmônicos independentes, como feito por Jordan e Schwinger [44]. Eles percebem que para fazer tal realização é necessário uma álgebra diferente (deformada) daquela apresentada pelos osciladores harmônicos. A discrepância entre a álgebra do oscilador (álgebra de Heisenberg) e a álgebra deformada introduzida por Macfarlane e Biedenharn, também chamada de  $q$ -osciladores, é um parâmetro de deformação  $q$  a partir do qual podemos obter a álgebra do oscilador harmônico quando  $q$  tende à unidade.

Esta álgebra deformada de Heisenberg, ou álgebra dos  $q$ -osciladores, é gerada por três operadores  $b^\dagger$ ,  $b$  e  $N$  satisfazendo as seguintes relações de comutação

$$[N, b] = -b \quad (2.23)$$

$$[N, b^\dagger] = b^\dagger \quad (2.24)$$

$$[b, b^\dagger]_{q^\pm} = q^{\mp N}, \quad (2.25)$$

sendo  $b = (b^\dagger)^\dagger$ ,  $[b, b^\dagger]_{q^\pm} \equiv bb^\dagger - q^\pm b^\dagger b$  é o  $(q^\pm)$ -comutador e  $q$  um número real chamado de parâmetro de deformação. Note que quando  $q \rightarrow 1$  as relações de comutação acima recuperam as relações de comutação da álgebra de Heisenberg, eqs.(2.14-2.16). Como uma consequência imediata da eq.(2.25), obtemos

$$b^\dagger b = [N], \quad (2.26)$$

e

$$bb^\dagger = [N + 1], \quad (2.27)$$

onde definimos

$$[x] \equiv \frac{q^x - q^{-x}}{q - q^{-1}}. \quad (2.28)$$

Podemos notar também que no limite  $q \rightarrow 1$  as relações dadas pelas eqs.(2.23-2.27) recuperam as relações usuais da álgebra do oscilador harmônico.

De maneira análoga ao feito no caso da álgebra de Heisenberg procuraremos uma representação para a álgebra dos  $q$ -osciladores. Da equação (2.24) podemos ver que

$$Nb^\dagger = b^\dagger(N + 1). \quad (2.29)$$

Aplicando a eq.(2.29) a um autoestado de  $N$  obtemos

$$N(b^\dagger|n\rangle) = b^\dagger(N + 1)|n\rangle = (n + 1)(b^\dagger|n\rangle). \quad (2.30)$$

Podemos notar também que o estado  $b^\dagger|n\rangle$  é um autoestado do operador  $N$  com um autovalor acrescido de uma unidade em relação ao autovalor de  $|n\rangle$ . Assim o operador  $b^\dagger$  é o operador levantamento da álgebra dos  $q$ -osciladores. Analogamente, o operador  $b$  é o operador abaixamento. Da eq.(2.30) podemos escrever que  $b^\dagger|n\rangle = c|n + 1\rangle$ . A constante  $c$  pode ser calculada impondo que os autoestados de  $N$  sejam normalizados, i.e.,

$$|c|^2 \langle n + 1|n + 1\rangle = |c|^2 = \langle n|bb^\dagger|n\rangle \quad (2.31)$$

e utilizando a eq.(2.27) obtemos, para valores de  $c$  positivos,  $c = \sqrt{[n + 1]}$ . De maneira similar podemos deduzir como o operador  $b$  atua nos autoestados de  $N$ .

A base no espaço de Fock é definida por aplicações sucessivas do operador  $b^\dagger$  no vácuo, que é aniquilado por  $b$ ,  $b|0\rangle = 0$ , da seguinte maneira:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{[n]!}}(b^\dagger)^n|0\rangle, \quad (2.32)$$

sendo  $[n]! \equiv [n][n - 1] \dots [1]$  e  $n$  um número inteiro.

Com isso, podemos exibir uma representação da álgebra dos  $q$ -osciladores como se segue

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad (2.33)$$

$$b^\dagger|n\rangle = \sqrt{[n+1]}|n+1\rangle \quad (2.34)$$

$$b|n\rangle = \sqrt{[n]}|n-1\rangle \quad (2.35)$$

em que  $n = 0, 1, 2, \dots$ .

Note que esta representação difere da representação da álgebra de Heisenberg padrão pelo fato de aparecer  $[n]$  no lugar de  $n$ . Como  $[n] \rightarrow n$  quando  $q \rightarrow 1$  a álgebra do  $q$ -oscilador pode ser deformada continuamente a partir da álgebra de Heisenberg.

É importante frisar que da eq.(2.32), se impusermos a condição de nilpotência  $(b^\dagger)^d = 0$  [28] para algum inteiro  $d$ , obtemos uma representação com um número finito de estados. Isto ocorre quando o parâmetro  $q$  for raiz da unidade  $q^d = 1$  já que neste caso teremos  $[d] = 0$ . Este caso tem sido relacionado com sistemas de ânions (*anyons*) [12].

Partindo da Hamiltoniana para o  $q$ -oscilador,

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(b^\dagger b + b b^\dagger), \quad (2.36)$$

os seus autovalores, usando as eqs.(2.33-2.35), são

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}([n] + [n+1]) = \frac{\hbar\omega}{2} \frac{[n+1/2]}{[1/2]} \quad (2.37)$$

sendo  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Podemos facilmente ver que para um dado valor de  $q$  real, o espectro de energias difere daquele dado pelo oscilador harmônico em que os níveis de energia são igualmente espaçados. Da eq.(2.28) podemos ver que para todo  $q > 0$  o espaçamento entre os níveis de energia sempre aumenta à medida em que  $n$  cresce.

Por fim, gostaríamos de frisar que muitos autores tem investigado sobre o conteúdo físico dos vários tipos de osciladores deformados construindo potenciais clássicos que reproduzem espectros de energias similares aos dos  $q$ -osciladores correspondentes ([29],[31],[73]-[77]).

Na próxima seção faremos uma introdução da AGH para os casos em que as funções características usadas para construir tal álgebra são linear e não-linear. Por fim, abordaremos as interpretações para a AHG.

## 2.2 Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG)

Considere uma álgebra, AHG, gerada por três operadores  $A^\dagger$ ,  $A$  e  $J_0$  descrita pelas seguintes relações [32]

$$J_0 A^\dagger = A^\dagger f(J_0) \quad (2.38)$$

$$A J_0 = f(J_0) A \quad (2.39)$$

$$[A, A^\dagger] = f(J_0) - J_0, \quad (2.40)$$

em que, por hipótese,  $(A^\dagger)^\dagger = A$ ,  $J_0$  é um operador hermitiano e  $f(J_0)$  é uma função analítica de  $J_0$ , sendo  $f$  conhecida como a função característica da álgebra. Usando as relações (2.38-2.40) podemos ver que o operador

$$C = A^\dagger A - J_0 = A A^\dagger - f(J_0) \quad (2.41)$$

é o operador Casimir da álgebra, ou seja,  $[C, J_0] = [C, A^\dagger] = [C, A] = 0$ . Podemos ver também que os geradores da álgebra satisfazem a identidade de Jacobi, i.e.  $[[J_0, A^\dagger], A] + [[A^\dagger, A], J_0] + [A, J_0], A^\dagger] = 0$ , para qualquer função analítica  $f$  [78].

Gostaríamos de frisar que estaremos trabalhando inicialmente com uma função característica analítica geral  $f(J_0)$ ; nas próximas sub-seções estaremos considerando os casos linear e quadrático e encontrando as representações de dimensões finita e infinita para a álgebra.

Vamos assumir que exista uma representação irredutível e de dimensão  $n$  da álgebra descrita pelas eqs.(2.38-2.40). Nosso objetivo inicial é construir esta representação e investigar as possíveis dimensões finita e infinita para a álgebra. Para isso, consideraremos um estado  $|0\rangle$  possuindo o menor autovalor de  $J_0$  tal que

$$J_0 |0\rangle = \alpha_0 |0\rangle, \quad (2.42)$$

onde  $\alpha_0$  é um número real. Seja  $|m\rangle$  um autoestado normalizado de  $J_0$  tal que

$$J_0 |m\rangle = \alpha_m |m\rangle, \quad (2.43)$$

onde  $\alpha_m$  é o auto-valor de  $J_0$  atuando em  $|m\rangle$ . Usando a eq.(2.38) em  $|m\rangle$  obtemos

$$J_0(A^\dagger|m\rangle) = A^\dagger f(J_0) |m\rangle = f(\alpha_m)(A^\dagger|m\rangle). \quad (2.44)$$

Assim vemos que  $A^\dagger|m\rangle$  é um autoestado de  $J_0$  com autovalor  $f(\alpha_m)$ . Agora, partindo do estado de vácuo  $|0\rangle$ , definido pela relação  $A|0\rangle = 0$ , e aplicando sucessivamente o operador  $A^\dagger$  em  $|0\rangle$ , criamos diferentes estados com diferentes autovalores de  $J_0$

$$J_0(A^\dagger)^m|0\rangle = f^m(\alpha_0)(A^\dagger)^m|0\rangle \quad (2.45)$$

em que  $f^m(\alpha_0)$  é a  $m$ -ésima iteração de  $f$  em  $\alpha_0$ . A eq.(2.45) pode ser mostrada diretamente. Primeiramente aplicamos  $J_0A^\dagger$  a  $|0\rangle$ . Utilizando a eq.(2.38) obtemos

$$J_0A^\dagger|0\rangle = A^\dagger f(J_0) |0\rangle = f(\alpha_0)A^\dagger|0\rangle. \quad (2.46)$$

Repetindo o mesmo procedimento, mas agora aplicando  $J_0(A^\dagger)^2$  a  $|0\rangle$  e utilizando a eq.(2.38) obtemos

$$(J_0A^\dagger)A^\dagger|0\rangle = (A^\dagger f(J_0))A^\dagger|0\rangle = A^\dagger(f(J_0)A^\dagger)|0\rangle = A^\dagger(A^\dagger f^2(J_0))|0\rangle = f^2(\alpha_0)(A^\dagger)^2|0\rangle. \quad (2.47)$$

Repetindo este procedimento  $m$  vezes, obtemos a eq.(2.45).

Desde que a aplicação de  $A^\dagger$  em  $|m\rangle$  cria um novo estado com um respectivo autovalor de  $J_0$  em que a iteração de  $\alpha_0$  através de  $f$  é aumentada de uma unidade, é conveniente definir este novo autoestado  $(A^\dagger)^m|0\rangle$  como sendo proporcional a  $|m\rangle$ , e assim chamar  $A^\dagger$  de operador levantamento, semelhante ao caso da álgebra de Heisenberg em que chamamos o operador  $a^\dagger$  de operador levantamento da álgebra. Das eqs.(2.43-2.45) temos que

$$\alpha_m = f^m(\alpha_0) = f(\alpha_{m-1}), \quad (2.48)$$

sendo  $m$  o número de iterações de  $\alpha_0$  através de  $f$ .

Seguindo o mesmo procedimento para operador  $A$ , aplicando a eq.(2.39) a  $|m+1\rangle$  e utilizando a eq.(2.43), obtemos

$$AJ_0|m+1\rangle = f(J_0)(A|m+1\rangle) = \alpha_{m+1}(A|m+1\rangle). \quad (2.49)$$

Utilizando a eq.(2.48) temos que  $\alpha_{m+1} = f(\alpha_m)$  e, como conseqüência, vemos que  $A|m+1\rangle$  é também um autovetor de  $J_0$  com autovalor  $\alpha_m$ . Então,  $A|m+1\rangle$  é proporcional a  $|m\rangle$ , mostrando que  $A$  é o operador abaixamento. Como  $|0\rangle$  é o vácuo, temos

$$A|0\rangle = 0. \quad (2.50)$$

Como se tornará claro nas próximas subseções, as iterações futuras  $f^m(\alpha_0)$  ( $m \geq 1$ ) devem ser sempre maiores que  $\alpha_0$  de maneira a produzir valores de vácuos consistentes.

A base no espaço de Fock é definida pelas aplicações sucessivas do operador  $A^\dagger$  em  $|0\rangle$ , e a representação é fixada pela atuação dos operadores na base e pela escolha de  $\alpha_0$ . Em geral, dada a função característica  $f$ , temos:

$$J_0|m\rangle = f^m(\alpha_0)|m\rangle \quad (2.51)$$

$$A^\dagger|m\rangle = N_m|m+1\rangle \quad (2.52)$$

$$A|m\rangle = N_{m-1}|m-1\rangle \quad (2.53)$$

sendo  $N_{m-1}^2 \equiv f^m(\alpha_0) - \alpha_0$  e  $m = 0, 1, 2, \dots$ . Podemos obter as eqs.(2.51-2.53) por indução, mostrando primeiramente que elas são válidas para  $m = 0$ ; notamos que colocando  $m = 0$  na eq.(2.53) obtemos  $N_{-1} = f^{(0)}(\alpha_0) - \alpha_0$ , que é igual a zero, o que é consistente com a eq.(2.50). Notamos também que a eq.(2.51) é consistente com a eq.(2.42) para  $m = 0$ . A eq.(2.52) por sua vez pode ser obtida para  $m = 0$  aplicando a eq.(2.38) ao estado de vácuo  $|0\rangle$ ,

$$J_0(A^\dagger|0\rangle) = A^\dagger f(J_0)|0\rangle = f(\alpha_0)(A^\dagger|0\rangle), \quad (2.54)$$

e definindo um estado  $|1\rangle$  como sendo a aplicação do operador levantamento  $A^\dagger$  em  $|0\rangle$ , i.e.  $|1\rangle \equiv \frac{1}{N_0}A^\dagger|0\rangle$ , sendo  $N_0$  uma constante a ser determinada. A constante  $N_0$  pode

ser determinada impondo que o estado  $|1\rangle$  seja normalizado e com o uso da eq.(2.40) obtemos  $N_0^2 = f(\alpha_0) - \alpha_0$ . Assim, as eqs.(2.51-2.53) são válidas para  $m = 0$ . Uma vez que as eqs.(2.51-2.53) são válidas para  $m = 0$ , podemos mostrar que as mesmas são válidas para  $m = 1$ . De fato, utilizando a definição  $|1\rangle \equiv \frac{1}{N_0}A^\dagger|0\rangle$  e substituindo na eq.(2.54) obtemos  $J_0|1\rangle = f(\alpha_0)|1\rangle$ , i.e. a eq.(2.51) para  $m = 1$ . Para verificar a eq.(2.53), para  $m = 1$ , aplicamos a eq.(2.40) ao estado de vácuo  $|0\rangle$  e usando as eqs.(2.42,2.50) nós obtemos  $A|1\rangle = N_0|0\rangle$ . Definindo um auto estado  $|2\rangle$  como sendo a aplicação do operador levantamento  $A^\dagger$  no estado  $|1\rangle$ , i.e,  $|2\rangle \equiv \frac{1}{N_1}A^\dagger|1\rangle$ , sendo  $N_1$  determinada impondo que o estado  $|2\rangle$  seja normalizado, e utilizando a eq.(2.40) obtemos  $N_1^2 = f^2(\alpha_0) - \alpha_0$ , ou seja, a eq.(2.52) para  $m = 1$ .

Agora suponha que as eqs.(2.51-2.53) sejam válidas para um dado  $m$ . Neste caso, levando a eq.(2.52) na eq.(2.44) e utilizando a eq.(2.48), obtemos

$$J_0|m+1\rangle = f^{m+1}(\alpha_0)|m+1\rangle, \quad (2.55)$$

i.e. a eq.(2.51) para  $m = m+1$ . Para verificar a eq.(2.53) para  $m = m+1$  aplicamos a eq.(2.40) ao estado  $|m\rangle$  e usando as eqs.(2.42,2.50) temos que  $A|m+1\rangle = N_m|m\rangle$ . Por fim, definimos um estado  $|m+2\rangle$  como sendo a aplicação do operador levantamento  $A^\dagger$  em  $|m+1\rangle$ , i.e.  $|m+2\rangle \equiv \frac{1}{N_{m+1}}A^\dagger|m+1\rangle$ . A constante  $N_{m+1}$  pode ser encontrada impondo que o estado  $|m+2\rangle$  seja normalizado. Assim,

$$\begin{aligned} 1 &= \langle m+2|m+2\rangle = \frac{1}{N_{m+1}^2} \langle m+1|AA^\dagger|m+1\rangle \\ &= \frac{1}{N_{m+1}^2} [\langle m+1|A^\dagger A|m+1\rangle + \langle m+1|f(J_0) - J_0|m+1\rangle] \\ &= \frac{1}{N_{m+1}^2} (N_m^2 - f^{m+1}(\alpha_0) + f^{m+2}(\alpha_0)) \end{aligned} \quad (2.56)$$

que leva a  $N_{m+1}^2 = f^{m+2}(\alpha_0) - \alpha_0$ . Assim, nossa prova fica completa.

Note que as eqs.(2.51-2.53) definem uma representação geral  $n$ -dimensional para a álgebra dada pelas eqs.(2.38-2.40). A dimensão depende, como ficará claro nas subseções seguintes, da função característica  $f$  utilizada e da escolha de  $\alpha_0$ .

Para uma função característica linear,  $f(J_0) = J_0 + 1$ , a álgebra dada pela eqs.(2.38-2.40) recupera a álgebra de Heisenberg, se indentificamos o operador  $J_0$

com o operador número  $N$ , i.e.,  $J_0 = N$ . Como veremos, a escolha de  $f(J_0) = qJ_0 + s$  corresponde a álgebra deformada a um-parâmetro [32]; no caso de uma função quadrática  $f(J_0) = tJ_0^2 + qJ_0 + s$  obtemos uma álgebra deformada a dois-parâmetros; para um polinômio de grau  $n$  obteremos uma álgebra de Heisenberg deformada multiparametricamente [32]. Devido ao fato da álgebra apresentar uma estrutura mais geral, que depende da função  $f$  escolhida, iremos nos referir à álgebra definida nas eqs.(2.38-2.40) como uma Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG).

Por fim, é de interesse dizer que em [33] foi mostrado que a AHG aqui apresentada pode ser associada a uma família de sistemas quânticos unidimensionais que tenham dois níveis sucessivos quaisquer de energia relacionados pela eq.(2.48), i.e.,

$$\varepsilon_n = f(\varepsilon_{n-1}). \quad (2.57)$$

A cada sistema quântico unidimensional diferente, cujos níveis de energia satisfazem a eq.(2.57), podemos associar uma função característica  $f$  correspondente. Esta função é exatamente a função característica da álgebra. Como uma possível consequência física foi mostrado também que é possível contruir uma generalização da teoria quântica de campos baseada nesta AHG tanto no caso em que a função característica  $f$  é linear ([35],[36], [79]) quanto no caso não-linear [37].

### 2.2.1 A AHG para uma função característica linear

Nesta subseção abordaremos o caso em que a função característica da AHG é uma função linear. Considerando a função  $f(J_0) = qJ_0 + s$ , as relações algébricas (2.38-2.40), tornam-se

$$[J_0, A^\dagger]_q = sA^\dagger \quad (2.58)$$

$$[J_0, A]_{q^{-1}} = -\frac{s}{q}A \quad (2.59)$$

$$[A, A^\dagger] = (q-1)J_0 + s \quad (2.60)$$

em que  $[a, b]_q \equiv ab - qba$  é o  $q$ -comutador de dois operadores  $a$  e  $b$ .

Note que fazendo  $q = 1$  e usando o reescalonamento  $A/\sqrt{s}$ ,  $A^\dagger/\sqrt{s}$  e  $J_0/s$  obtemos a álgebra de Heisenberg eqs.(2.14-2.16). Portanto, a AHG definida pelas eqs. (2.38-2.40) é uma álgebra de Heisenberg deformada a um-parâmetro que possui como caso especial ( $q = 1$ ) a álgebra de Heisenberg.

Neste caso linear,  $f(x) = qx + s$ , é fácil ver que [32]

$$f^m(\alpha_0) = q^m \alpha_0 + s(q^{m-1} + q^{m-2} + \dots + 1) \quad (2.61)$$

$$= q^m \alpha_0 + s \frac{1 - q^m}{1 - q} \quad (2.62)$$

assim,

$$N_{m-1}^2 = f^m(\alpha_0) - \alpha_0 = [m]_q N_0^2 \quad (2.63)$$

sendo  $[m]_q \equiv \frac{1-q^m}{1-q}$ , conhecido como o número de Gauss de  $m$ , e  $N_0^2 = \alpha_0(q-1) + s$ .

Note que, da eq.(2.63), podemos escrever:

$$[m]_q = \frac{N_{m-1}^2}{N_0^2} = \frac{1 - q^m}{1 - q}, \quad (2.64)$$

que pode ser vista de maneira mais geral [32] e permite definirmos o número de Gauss generalizado  $[m]_{geral}$  para uma função  $f$  como:

$$[m]_{geral} = \frac{N_{m-1}^2}{N_0^2} = \frac{f^m(\alpha_0) - \alpha_0}{f(\alpha_0) - \alpha_0}, \quad (2.65)$$

que é útil em casos não-lineares. É importante frisar que o número de Gauss definido na eq.(2.64) é diferente daquele definido na seção 2.1, relacionado com a álgebra dos  $q$ -osciladores, eq.(2.28). Entretanto, eles estão relacionados por meio da expressão:

$$[m] = q^{1-m} [m]_{q^2}. \quad (2.66)$$

Uma vez explicitada a função característica  $f$ , linear, vamos estudar as representações de dimensões finitas da AHG. Para tal, partiremos do estado de vácuo  $|0\rangle$  e aplicaremos repetidamente o operador  $A^\dagger$ ; eventualmente, dados os parâmetros algébricos  $q$ ,  $s$  e  $\alpha_0$ ,  $A^\dagger|m-1\rangle = 0$ , que corresponderá a uma representação de dimensão  $m$ . Das eqs.(2.52,2.63) vemos que, para uma representação de dimensão  $m$ , vale:

$$N_{m-1}^2 = [m]_q N_0^2 = 0. \quad (2.67)$$

Como  $N_0^2 > 0$ , as soluções  $[m]_q = 0$  são dadas por  $q = \exp(2\pi ik/m)$  para  $k = 1, 2, \dots, m-1$  ( $k = 0$  corresponde à álgebra de Heisenberg, que não estaremos considerando aqui), as quais correspondem à raiz primitiva da unidade, já que  $q^l \neq 1$  para  $1 \leq l < m$  com  $l$  inteiro. Como  $J_0$  é hermitiano, existe apenas uma solução interessante de dimensão finita que é o caso  $m = 2$  (solução bidimensional) com  $q = -1$  e  $\alpha_0 < s/2$ . Para  $q \in (-1, 1) \cup (1, \infty)$  obtemos uma solução trivial unidimensional para  $\alpha_0 = \alpha^* = s/(1-q)$ . Obtemos também uma solução marginal unidimensional para  $q \rightarrow \infty$  e  $s/q^2$  finito.

Por outro lado, e mais interessante, obtemos as soluções de dimensão infinita. Nestes casos temos que resolver a seguinte equação

$$N_{m-1}^2 > 0 \quad \forall m = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.68)$$

que possui as seguintes soluções

$$q > 1, \quad \alpha_0 > \frac{s}{1-q} \quad (2.69)$$

e

$$-1 < q < 1, \quad \alpha_0 < \frac{s}{1-q} \quad (2.70)$$

que chamaremos de soluções Tipo I e Tipo II, respectivamente. Note que para as soluções do Tipo I, dadas pela eq.(2.69), os autovalores de  $J_0$ , que podem ser computados da eq.(2.48), tendem ao infinito quando consideramos autoestados  $|m\rangle$  com valores de  $m$  crescentes. Por outro lado, nas soluções do Tipo II, dadas pela eq.(2.70), os autovalores tendem para  $s/(1-q)$ , o ponto fixo de  $f$ , quando  $m$  cresce.

A razão deste comportamento assintótico dos autovalores de  $J_0$  pode ser visto de outra maneira; das eqs.(2.48) e (2.51) vemos que os autovalores de  $J_0$  são dados pelas iterações funcionais de  $f(\alpha) = q\alpha + s$  a partir de  $\alpha_0$ . Além disso, a estabilidade dos pontos fixos de  $f(\alpha)$  está diretamente relacionada com o comportamento assintótico dos autovalores de  $J_0$ . Se o ponto fixo de  $f(\alpha)$  é estável, i.e.  $|f'(\alpha^*)| < 1$ , para

$-1 < q < 1$ , ou instável, i.e.  $|f'(\alpha^*)| > 1$ , para  $q > 1$ , os autovalores de  $J_0$  tendem para o ponto fixo  $\alpha^* = s/(1 - q)$  ou para infinito respectivamente, já que são dados pela iteração de  $\alpha_0$  através de  $f$ .

Uma outra maneira de encontrar as representações de dimensão finita e infinita discutidas anteriormente baseia-se na análise gráfica da função  $f$ , que será mais relevante quando estudarmos o caso quadrático. Para realizar a análise gráfica, primeiramente esboçamos  $y = f(\alpha)$  junto com  $y = \alpha$ ; os pontos fixos são determinados pela condição  $y = \alpha = f(\alpha)$ . Partindo de uma escolha de  $\alpha_0$  podemos encontrar os autovalores de  $J_0$  correspondentes a partir das iterações de  $f$  seguindo os seguintes passos:

1. mover verticalmente até o gráfico de  $f(\alpha)$
2. mover horizontalmente até o gráfico  $y = \alpha$
3. repita os passos (1) e (2)

Como exemplo, mostramos na figura 2.1 uma representação gráfica curiosa da álgebra de Heisenberg em que o aspecto iterativo desta álgebra é enfatizado. Na figura 2.1 esboçamos as funções  $f(\alpha) = \alpha + 1$  e  $f(\alpha) = \alpha$  versus  $\alpha$  e realizamos as iterações para  $\alpha_0 = -3$ . Notamos que os níveis de energias são igualmente espaçados e que a dimensão da representação algébrica é infinita, como já era de se esperar.

Na figura 2.2, mostramos um exemplo típico de análise gráfica definida acima para estudar as representações de dimensões infinitas da AHG para o caso de uma função linear  $f$  com inclinação  $q < 1$  e  $s = 1$ . Note que para qualquer autovalor de vácuo  $\alpha_0$ , as iterações futuras sempre tendem ao ponto fixo  $\alpha^* = 1/(1 - q)$ , que é um ponto fixo estável, sendo que os autovalores de  $J_0$  (dados por  $f^m(\alpha_0)$ ) vão se acumulando e formando um quase-contínuo no espectro de energias, diferindo do caso do oscilador harmônico em que os níveis de energias são igualmente espaçados. Entretanto, no que concerne aos valores permitidos do autovalor de vácuo,  $f^m(\alpha_0) > \alpha_0 (m \geq 1)$ , obtemos neste caso que apenas os valores dados por  $\alpha_0 < \alpha^* = 1/(1 - q)$ , condizentes com as soluções do Tipo II, eq.(2.70), são aceitáveis. Esta análise gráfica

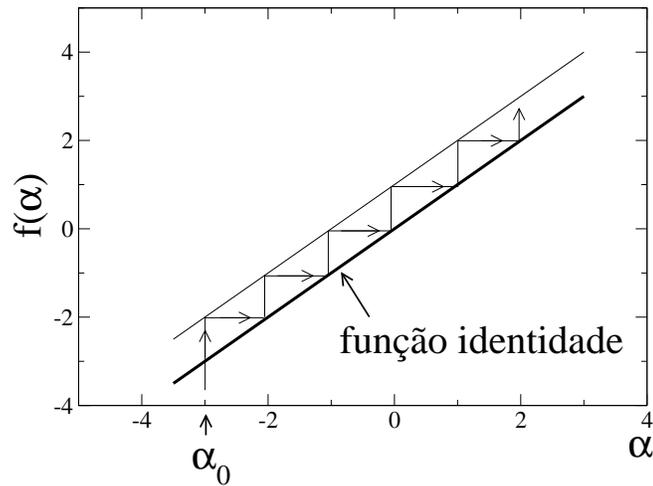


Figura 2.1: Representação gráfica da álgebra de Heisenberg dada pelas iterações de  $\alpha_0 = -3$  através de uma  $f(\alpha) = \alpha + 1$  ( $q = 1, s = 1$ ). Note que todos os autovalores  $\alpha_0$  são permitidos já que  $\alpha_0 < \alpha_m = f^m(\alpha_0) \forall m$ . Como já era de se esperar o espectro de energia possui níveis de energia igualmente espaçados e a dimensão da representação é infinita.

descrita acima é válida apenas para  $-1 < q < 1$ , como pode ser vista facilmente. Note também que existe uma representação unidimensional que corresponderia a escolher um auto-valor de vácuo  $\alpha_0 = \alpha^* = 1/(1 - q)$ .

Na figura 2.3, mostramos a análise gráfica para o caso de uma função linear com uma inclinação  $q > 1$ . Note que qualquer iteração futura a partir de  $\alpha_0$  ( $\alpha_0 > \alpha^*$ ) tende ao infinito e se afasta do ponto fixo  $\alpha^* = 1/(1 - q)$ , que é um ponto fixo instável. Portanto, os únicos valores permitidos para o autovalor do vácuo são dados por  $\alpha_0 > \alpha^* = 1/(1 - q)$ , o que também está em concordância com a solução do Tipo I. Podemos ver também que os autovalores de  $J_0$  (dados por  $f^m(\alpha_0)$ ) diferem daqueles do oscilador harmônico, uma vez que a distância entre dois níveis sucessivos aumenta a medida em que as iterações tendem a infinito.

Mais uma vez gostaríamos de frisar que este estudo das representações da AHG via análise gráfica para a classificação dos diferentes tipos de pontos fixos e suas estabilidades serão mais relevantes quando estudarmos o caso quadrático, em que até mesmos as representações de dimensões finitas serão estudadas pela análise dos pontos fixos através dos atratores de  $f$ .

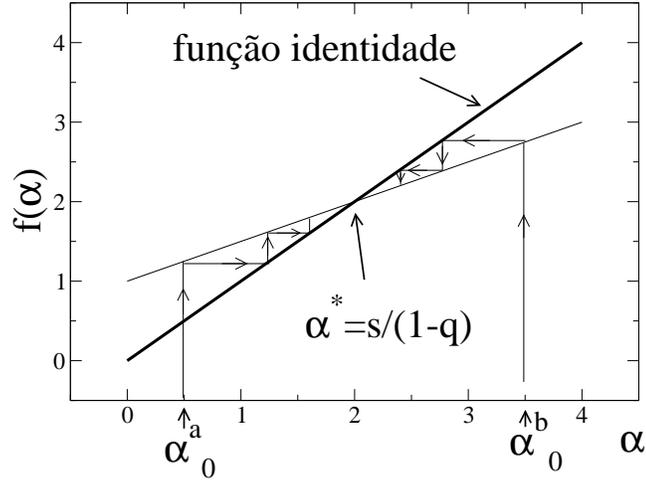


Figura 2.2: Iterações de  $\alpha_0$  através de uma função linear  $f(\alpha) = 0,5\alpha + 1$  ( $q < 1$ ) e duas diferentes regiões para o vácuo: (a)  $\alpha_0 < s/(1-q)$  (permitido) e (b)  $\alpha_0 > s/(1-q)$  (não permitido). Note que as iterações futuras vão se acumulando e tendem para o ponto fixo  $\alpha^* = s/(1-q) = 2$  que é estável e os únicos valores permitidos para o vácuo pertencem ao caso (a) onde  $\alpha_0 < \alpha_m = f^m(\alpha_0) \forall m$ .

Finalmente gostaríamos de frisar que existe uma relação direta entre a AHG para o caso de uma função característica linear dada pelas eqs.(2.58- 2.60) e a álgebra dos  $q$ -osciladores ([25]-[26]), de maneira que uma pode ser mapeada na outra pelas relações:

$$J_0 = q^N \alpha_0 + s [N]_q \quad (2.71)$$

$$\frac{A^\dagger}{N_0} = b^\dagger q^{N/2} \quad (2.72)$$

$$\frac{A}{N_0} = q^{N/2} b, \quad (2.73)$$

onde  $b$ ,  $b^\dagger$  e  $N$  satisfazem a álgebra dos  $q$ -osciladores

$$bb^\dagger - qb^\dagger b = q^{-N} \quad (2.74)$$

$$[N, b] = -b \quad (2.75)$$

$$[N, b^\dagger] = b^\dagger. \quad (2.76)$$

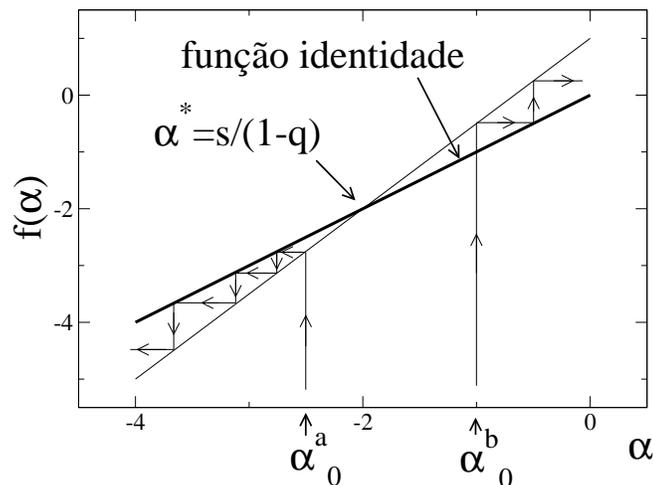


Figura 2.3: Iterações de  $\alpha_0$  através de uma função linear  $f(\alpha) = 1,5\alpha + 1$  ( $q > 1$ ) e duas diferentes regiões para o vácuo (a)  $\alpha_0 < s/(1 - q)$  (não permitido) e (b)  $\alpha_0 > 1/(1 - q)$  (permitido). Note que o ponto fixo  $\alpha^* = 1/(1 - q) = -2$  é instável. Note também que os únicos valores permitidos para o vácuo estão na região (b) já que valor do vácuo deve satisfazer  $\alpha_0 < \alpha_m = f^m(\alpha_0) \forall m$  e que as iterações futuras tendem ao infinito.

Note que a álgebra de Heisenberg é obtida das eqs.(2.71-2.73) para  $q \rightarrow 1$  e  $\alpha_0 = 0$ .

Na próxima subseção estudaremos a AHG para o caso em que  $f$  é não-linear e em particular estaremos interessados no caso mais simples, que é obtido escolhendo uma função quadrática. Veremos que a estrutura algébrica é mais geral do que a estrutura algébrica apresentada aqui nesta seção e por conseguinte mais geral que a álgebra dos  $q$ -osciladores. No fim da próxima seção discutiremos a interpretação fenomenológica.

### 2.2.2 A AHG para uma função característica não-linear

Nesta subseção consideraremos a AHG para o caso em que  $f$  é uma função quadrática do tipo  $f(x) = tx^2 + qx + s$ , que é o exemplo não-linear mais simples. Neste caso as AHG's possuem as seguintes relações de comutação:

$$[J_0, A^\dagger]_q = tA^\dagger J_0^2 + sA^\dagger \quad (2.77)$$

$$[J_0, A]_{q^{-1}} = -\frac{t}{q}J_0^2A - \frac{s}{q}J_0 \quad (2.78)$$

$$[A, A^\dagger] = tJ_0^2 + (q-1)J_0 + s \quad (2.79)$$

que recuperam as relações da AHG linear para  $t = 0$  e da álgebra de Heisenberg para  $t = 0$ ,  $q = 1$  e  $s = 1$ .

Aqui nos concentraremos em encontrar as representações finitas e infinitas para as álgebras descritas nas eqs.(2.77-2.79) através da análise gráfica mostrada no caso de uma  $f$  linear. Os casos a serem estudados na procura dos pontos fixos  $x^*$  da função  $f(x)$ , soluções de  $f(x^*) = x^*$ , são: (1)  $\Delta < 0$ ; (2)  $\Delta = 0$  e (3)  $\Delta > 0$ , sendo  $\Delta = (q-1)^2 - 4ts$ . No primeiro caso não há pontos fixos e, pela análise gráfica, figura 2.4, é fácil ver que para  $t > 0$  a representação tem dimensão infinita ( $N_m^2 \neq 0, \forall m, m \in Z^+$ ) possuindo sempre um estado de vácuo com o menor autovalor,  $\alpha_0 < f^m(\alpha_0)(m \geq 1)$ , como desejado. Então o caso (1) produz uma representação de dimensão infinita quando o menor autovalor  $\alpha_0$  e os parâmetros  $t, q$  e  $s$  satisfazem as condições:

$$t > 0 : (q-1)^2 - 4ts < 0, \quad \alpha_0 \in R. \quad (2.80)$$

No caso (2),  $\Delta = 0$ , para  $t > 0$ ,  $f$  apresenta um ponto fixo dado por  $\alpha^* = (1-q)/2t$  sendo que  $|f'(\alpha^*)| = 1$ . Este ponto fixo corresponde a uma representação unidimensional, trivial, para a escolha  $\alpha_0 = \alpha^*$ , pois  $N_0 = 0$ . Além desta, há representações de dimensão infinita quando os parâmetros satisfazem  $(q-1)^2 - 4ts = 0$  e quando: (i)  $-\infty < \alpha_0 < \alpha_m$  ou  $\alpha^* < \alpha_0 < \infty$  e (ii)  $\alpha_m < \alpha_0 < \alpha^*$ , sendo que  $\alpha_m \equiv -(1+q)/(2t)$  é tal que  $f(\alpha_m) = f(\alpha^*)$ , como podemos ver na figura 2.5. Nesta figura, vemos que no caso (i) as iterações tendem para infinito enquanto que no caso (ii) as iterações tendem assintoticamente para o ponto fixo  $\alpha^* = 0.7$ .

Notamos também que o ponto fixo é um ponto atrator apenas para valores de  $\alpha_0$  escolhido no caso (ii). Como  $|f'(\alpha^*)| = 1$  não é possível prever o comportamento das iterações futuras perto do ponto fixo, a não ser que se tenha outras informações, em geral ligadas a derivadas de ordem mais altas.

No caso (3),  $\Delta > 0$ , é possível ter atratores de período 1, 2, 4, ... e até mesmo

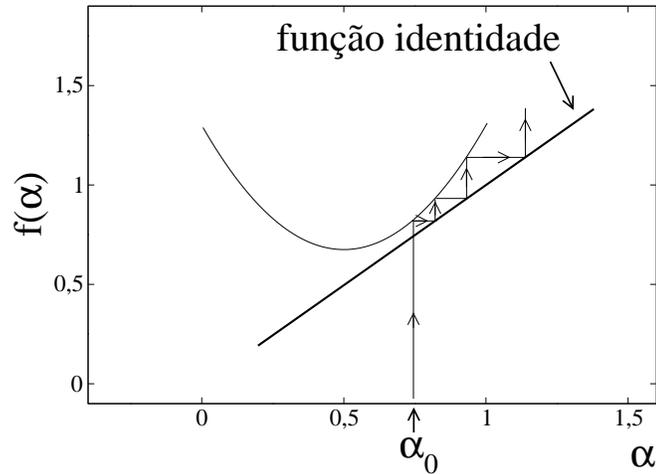


Figura 2.4: Iterações de  $\alpha_0 = 0,75$  através de uma função quadrática  $f(\alpha) = 2,5\alpha^2 - 2,5\alpha + 1,3$  ( $t > 0$  e  $\Delta < 0$ ). Como pode ser facilmente visto, todo  $\alpha_0 \in \mathbb{R}$  é permitido e as iterações futuras  $\alpha_m = f^m(\alpha_0)$  tendem para infinito.

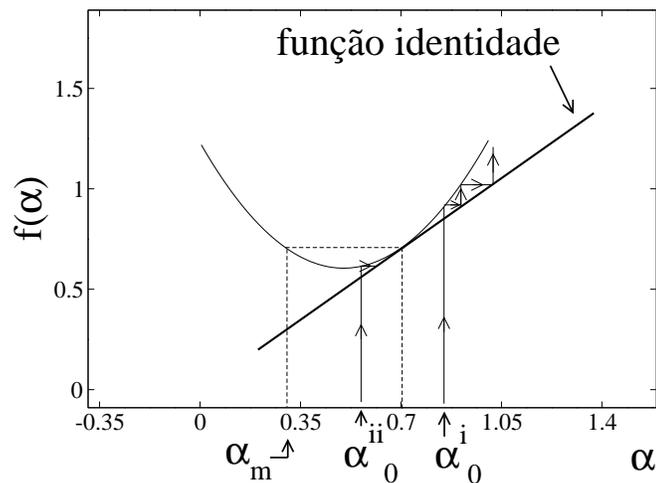


Figura 2.5: Iterações de  $\alpha_0^i = 0,85$  e  $\alpha_0^{ii} = 0,56$  através de uma função quadrática  $f(\alpha) = 2,5\alpha^2 - 2,5\alpha + 1,225$  ( $t > 0$  e  $\Delta = 0$ ) e duas diferentes regiões para o vácuo (i)  $-\infty < \alpha_0 < \alpha_m$  ou  $\alpha^* < \alpha_0 < \infty$  (permitido) e (ii)  $\alpha_m < \alpha_0 < \alpha^*$  (permitido) sendo  $\alpha_m = -(1+q)/2t = 0,3$ . Note que no caso (i) as iterações tendem para infinito enquanto que no caso (ii) as iterações tendem ao ponto fixo  $\alpha^* = 0,7$ .

regiões caóticas para certos valores dos parâmetros  $t$ ,  $q$ ,  $s$  e  $\alpha_0$ . Assim, há regiões de parâmetros associados com representações de dimensão finita e infinita, onde analisaremos, no caso de dimensão finita, os casos de atratores de períodos 1 e 2. Gostaríamos de frisar que faremos a análise mencionada acima para  $t > 0$ , sendo que a análise para  $t < 0$  não apresenta diferenças conceituais.

Para o caso (3) os pontos fixos são dados por

$$\alpha_{\pm}^* = \frac{1 - q \pm \sqrt{\Delta}}{2t}, \quad (2.81)$$

que é estável se  $|f'(\alpha^*)| < 1$  e instável no caso contrário.

O ponto fixo  $\alpha_+^*$  é sempre instável e avaliando a derivada de  $f$  em  $\alpha_-^*$  vemos que  $\alpha_-^*$  é estável para os parâmetros  $t > 0$  e  $q$  e  $s$  tal que  $0 < \Delta < 4$ . Para este grupo de parâmetros procuramos as regiões de  $\alpha_0$  que correspondem ao estado de menor autovalor de  $J_0$ . É fácil ver, figura 2.6, que a região  $\alpha_-^* < \alpha_0 < \alpha_+^*$  deve ser eliminada, já que esta região não corresponde a uma representação em que  $\alpha_0$  possui o menor valor do que qualquer iteração futura. Para os valores permitidos de  $\alpha_0$  que correspondem a uma representação de dimensão infinita, i.e.,  $-\infty < \alpha_0 < \alpha_-^*$  e  $\alpha_+^* < \alpha_0 < \infty$ , existem dois tipos de comportamento assintótico para os autovalores de  $J_0$ . Eles podem tender ao infinito ou tender assintoticamente para o ponto fixo  $\alpha_-^*$ . Com o intuito de diferenciar estas duas regiões, considere o ponto  $f(\alpha_+^*)$ . Há um outro ponto, que denotaremos por  $\alpha^m$ , tal que  $f(\alpha^m) = f(\alpha_+^*) = \alpha_+^*$ ; este ponto é dado por

$$\alpha^m = \frac{-1 - q - \sqrt{\Delta}}{2t}. \quad (2.82)$$

É fácil ver que o grupo de parâmetros tal que  $0 < \Delta < 4$  e  $-\infty < \alpha_0 < \alpha^m$  ou  $\alpha_+^* < \alpha_0 < \infty$  corresponde a representações de dimensão infinita em que os comportamentos dos autovalores de  $J_0$  tendem ao infinito. Para  $0 < \Delta < 4$  e  $\alpha^m < \alpha_0 < \alpha_-^*$  os autovalores de  $J_0$  tendem ao valor assintótico  $\alpha_-^*$ , como pode ser visto na figura 2.6. Note também que neste caso as iterações futuras de  $\alpha_0$  não crescem monotonamente, apesar de possuírem um valor de vácuo,  $\alpha_0$ , consistente. Além disso, as escolhas para  $\Delta > 0$  e  $\alpha_0 = \alpha_-^*$  ou  $\alpha_0 = \alpha_+^*$  correspondem a uma representação unidimensional,

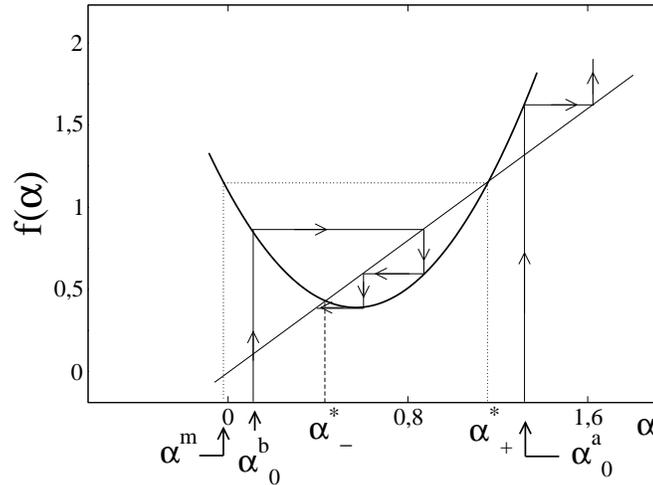


Figura 2.6: Iterações de  $\alpha_0$  através de uma função quadrática  $f(\alpha) = 2,2\alpha^2 - 2,5\alpha + 1,1$  ( $t > 0$  e  $\Delta = 2,57$ ). Como pode ser facilmente visto, as regiões permitidas para  $\alpha_0$  associadas a uma representação de dimensão infinita em que  $0 < \Delta < 4$  são dadas por (a)  $-\infty < \alpha_0 < \alpha^m$  ou  $\alpha_+^* < \alpha_0 < \infty$  e (b)  $\alpha^m < \alpha_0 < \alpha_-^*$ , sendo que no caso (a) as iterações tendem a infinito enquanto no caso (b) tendem assintoticamente a  $\alpha_-^*$ .

trivial, para a AHG.

O próximo passo agora é discutir o caso em que a função  $f$  apresenta atratores de período 2. Para isto devemos estudar os atratores  $x^*$  dados por  $f^2(x^*) = x^*$ , que apresentam novas soluções além das soluções tipo ponto fixo já discutidas. As soluções para estes pontos fixos de  $f^2$  são dados por:

$$\beta_{\pm}^* = \frac{-1 - q \pm \sqrt{\Delta_1}}{2t}, \quad (2.83)$$

sendo  $\Delta_1 = -3 - 2q + q^2 - 4ts = \Delta - 4$ . Desde que  $f$  possui a mesma derivada nos pontos fixos  $\beta_{\pm}^*$ , é suficiente analisar a região de estabilidade de um deles. É simples ver que esta região é dada pela região de parâmetros tal que  $4 < \Delta < 6$ . Assim vemos que para  $\Delta = 4$  os pontos fixos de período 1 perdem estabilidade e se inicia a estabilidade dos pontos fixos de período 2. Deste modo, a região de parâmetros tal que  $4 < \Delta < 6$  e  $-\infty < \alpha_0 < \alpha^m$  ou  $\alpha_+^* < \alpha_0 < \infty$  corresponde à representações de dimensão infinita em que os valores dos autovalores de  $J_0$  tendem para o infinito. A região de parâmetros tal que  $4 < \Delta < 6$  e  $\alpha^m < \alpha_0 < \beta_-^*$  correspondem à representações de

dimensão infinita nas quais os valores dos autovalores de  $J_0$  tendem para os valores dos atratores de ciclo 2, dados por  $\beta_{\pm}^*$ .

Neste caso há também uma região de parâmetros para  $4 < \Delta < 6$  e  $\alpha_0 = \beta_-^*$  que corresponde a uma representação bidimensional, uma vez que  $\alpha_0 < \alpha_1 = f(\alpha_0) = f(\beta_-^*) = \beta_+^*$ . Para  $\Delta > 6$  a função  $f$  apresenta ciclos de período 4, 8, ...,  $2^k$ , ... até entrar na região caótica, mostrando o mesmo cenário que o mapa logístico [80].

Gostaríamos de frisar que estas análises, feitas para os casos linear e quadrático, são os primeiros passos para uma análise no caso em que a função  $f$  for um polinômio mais geral,  $f(J_0) = \sum_{i=0}^n a_i (J_0)^i$ , que conduz à seguinte AHG,

$$[J_0, A^\dagger]_{a_1} = a_0 A^\dagger + \sum_{i=2}^n a_i A^\dagger (J_0)^i \quad (2.84)$$

$$[J_0, A]_{a_1^{-1}} = -\frac{a_0}{a_1} A - \sum_{i=2}^n \frac{a_i}{a_1} (J_0)^i A \quad (2.85)$$

$$[A, A^\dagger] = \sum_{i=2}^n a_i (J_0)^i + (a_1 - 1) J_0 - a_0. \quad (2.86)$$

Neste caso mais geral espera-se que o estudo das representações da AHG seja feita também através da análise da estabilidade dos pontos fixos da função  $f$  e de suas funções compostas. Para polinômios de ordem maiores que 2 tem-se a possibilidade da função apresentar mais de um atrator, cada com sua própria bacia de atração no espaço de parâmetros. Apesar disso, em uma particular bacia de atração, o cenário é o mesmo do apresentado aqui para o caso quadrático.

Por fim, vimos que o espectro de energia oriundo da AHG pode apresentar comportamentos bem peculiares, dependendo da região de parâmetros que estamos considerando, bem com da própria função  $f$ . Nossa abordagem fenomenológica gira em torno das partículas que seriam *criadas* e *aniquiladas* pelos operadores  $A^\dagger$  e  $A$ , respectivamente. Se considerarmos a hamiltoniana de um oscilador *deformado* como sendo, por exemplo, o operador  $J_0$ , os autovalores da hamiltoniana serão os próprios autovalores de  $J_0$ . Como estamos interessados em espectros, por exemplo, do tipo do átomo de hidrogênio, então devemos trabalhar com  $q < 1$ , no caso linear, e com  $t, q$  e  $s$  no caso quadrático, de maneira que os autovalores de  $J_0$  apresentem um espectro

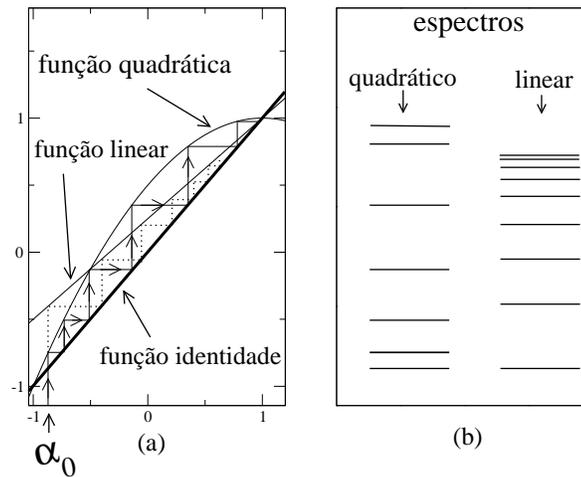


Figura 2.7: Ilustração comparativa entre dois possíveis espectros da AHG para duas diferentes escolhas da função caracterísitica: função linear  $f(\alpha) = 0,75\alpha + 0,25$  e uma quadrática  $f(\alpha) = -0,5\alpha^2 + \alpha + 0,5$  ( $t < 0$  e  $\Delta > 0$ ). Em (a) realizamos as iterações utilizando o mesmo  $\alpha_0$  para ambas funções e em (b) esboçamos o espectro de energia correspondente para cada função  $f$ . Como podemos ver, o espectro algébrico quando  $f$  é não-linear possui um comportamento mais geral do que no caso em que  $f$  é linear.

típico de átomos e moléculas, como pode ser visto na figura 2.7. Note que, no caso quadrático, podemos obter espectros que possuem comportamentos distintos daquele apresentado, por exemplo, no átomo de hidrogênio, em que a diferença de energia entre dois níveis de energia sucessivos sempre diminui à medida em que o número quântico  $n$  vai aumentando. Isso mostra que o espectro de energia do caso quadrático pode se ajustar a uma família de espectro mais variado comparados àqueles obtidos no caso linear, com  $q < 1$ , que sempre diminuem à medida em que subimos de nível. Esses comportamentos peculiares dos possíveis espectros de energia que podem ser obtidos da AHG têm sido usados em abordagens fenomenológicas de sistemas físicos reais como átomos e moléculas [29]. A AHG tem se mostrado mais eficiente em ajustar não somente o espectro de energia mas também a energia de dissociação de moléculas diatômicas [29].

É de interesse também frisar que existe uma outra interpretação para a AHG que considera o formalismo da segunda quantização para partículas compostas ([35]-

[36]). Para abordarmos esta interpretação, permita-nos relembrar que na álgebra de Heisenberg o formalismo da segunda quantização nos diz que a energia do sistema formado por  $n$  partículas é igual a  $n$  vezes a energia de cada partícula (partículas independentes), ou seja,  $\varepsilon_n = n\varepsilon_1$ .

Como foi mostrado na Ref.[33] a AHG descreve uma família de sistemas quânticos unidimensionais em que os valores das energias de dois níveis sucessivos estão relacionados por  $\varepsilon_n = f(\varepsilon_{n-1})$ . Como vimos, dependendo da função  $f$  e dos parâmetros algébricos, obtemos, em geral,  $\varepsilon_n \neq n\varepsilon_1$ , ou seja, a energia não é mais aditiva diferenciando-se do caso dado pela álgebra de Heisenberg. Essa não aditividade na energia é similar com a não aditividade presente em sistemas reais, como em átomos e moléculas.

Assim, nesta interpretação via formalismo de segunda quantização, a atuação do operador de criação  $e$ , analogamente, do operador de aniquilação, está relacionada com a criação de sistemas compostos onde as partículas constituintes do sistema composto são criadas necessariamente com interação entre si. Tal interação estaria sendo levada em conta através do parâmetro, ou dos parâmetros, de deformação da AHG.

Enfim, vimos um cenário no qual podemos interpretar a AHG de duas maneiras distintas, tanto ao considerar o formalismo da segunda quantização para partículas compostas quanto na abordagem fenomenológica de usar o espectro de energia algébrico para representar o espectro de sistemas ligados, como por exemplo átomos e moléculas.

Os resultados que têm sido produzidos trabalhando-se com a AHG têm se mostrados compatíveis com a interpretação da álgebra para partículas compostas ([29],[35]-[37], [38],[41],[43]), de maneira que desviando-se das relações usuais da álgebra de Heisenberg podemos levar em conta de maneira fenomenológica a estrutura da partícula.

No próximo capítulo calcularemos as propriedades “termodinâmicas” de um gás ideal de partículas compostas, por considerar a AHG com uma função característica linear.



## Capítulo 3

# Simulação computacional

Com o advento de computadores mais velozes, as simulações computacionais, ou “experimentos computacionais”, tornaram-se uma ferramenta de trabalho de grande valia na física moderna, surgindo como uma terceira abordagem, complementar às tradicionais físicas experimental e teórica [81].

As informações obtidas por um “experimento computacional”, podem ser “exatas” (desde que, em princípio, podemos fazer os erros tão pequeno quanto desejarmos) [81], em contraste com, por exemplo, as informações extraídas de abordagens teóricas em que, em muitos casos, são exigidas aproximações não controladas, fazendo-se necessário um tratamento computacional para verificá-las. Assim, nos casos em que a física teórica e a física experimental são duvidosas, inconclusivas e até mesmo impraticáveis, um “experimento computacional” torna-se necessário para tentar produzir respostas, que poderão indicar mais conclusivamente se o modelo teórico representa sistemas reais ou não, e até mesmo, propor observações experimentais até então não apreciadas. Some-se também o fato de que na simulação podemos alterar parâmetros físicos de forma conveniente que dificilmente conseguiríamos experimentalmente [82].

O êxito dos “experimentos computacionais” não está restrito à física, desempenhando um papel, interdisciplinar, importante em outras áreas do conhecimento como ciências políticas sociais [83], biologia [84], engenharia [85], química [86] e etc, nos quais fornecem informações estatísticas (valores médios) relevantes para a confirmação de teorias e modelos propostos, realizando “experimentos” até então impraticáveis.

Os “experimentos computacionais” serão úteis nesta tese, em que serão realizadas simulações utilizando o Método de Monte Carlo (MMC) o qual será introduzido nas próximas subseções, nas quais discutiremos tanto a aplicação do método quanto os conceitos envolvidos no mesmo.

A necessidade de tal abordagem computacional se deve ao fato de que calcular quantidades físicas médias, como a energia e o calor específico, de “partículas compostas” associadas a AHG, tanto de sistemas tipo átomos e moléculas, usando a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (BG) é, em geral, uma tarefa impossível [38]. Esta impossibilidade se deve ao fato de que esta família de sistemas apresenta um espectro de energias com infinitos níveis limitados superiormente e assim apresentam uma função de partição divergente. Como consequência, as energias médias para qualquer temperatura finita de tais sistemas, correspondem às energias de ionização, ou dissociação, indicando que os sistemas se ionizam para qualquer temperatura finita. Assim, como átomos, moléculas e “partículas compostas” não podem ser estudados via o formalismo teórico de BG, aplicaremos o MMC e investigaremos o que acontece com cada sistema antes da sua ionização (dissociação).

Uma discussão mais detalhada sobre a divergência na função de partição bem como a aplicação do MMC para “partículas compostas” serão apresentadas no próximo capítulo. Aqui nos restringiremos a introduzir o MMC e estudaremos a sua aplicação no oscilador harmônico.

### 3.1 O Método de Monte Carlo (MMC)

O MMC é uma técnica de simulação computacional com vasta aplicação na ciência. Recebe este nome devido ao uso de números “aleatórios” para simular flutuações estatísticas com o objetivo de gerar numericamente distribuições de probabilidade. A primeira aplicação relevante deste método foi em 1953, quando Metropolis e co-autores estudaram um “fluido” constituído de esferas rígidas [87].

O MMC é mais facilmente descrito para um sistema com um número finito de estados possíveis, apesar de não ser limitado para este tipos de sistemas, sendo possível

a generalização para sistemas com um número (enumerável) infinito de estados e até mesmo para sistemas com um contínuo de estados possíveis [88].

Vamos introduzir o MMC no contexto de sistemas magnéticos e mostraremos as grandes utilidade e vantagem de tal técnica. Para isto consideramos um sistema formado por  $N$  spins em que cada configuração do sistema, denotada por  $\{S_i\}$ , é obtida fornecendo o valor de cada spin  $s_j$  com  $j = 1, 2, \dots, N$ . Se conhecemos a função de partição  $Z$  do sistema podemos calcular, analiticamente, a média de algum observável físico, como a magnetização, definida por <sup>1</sup>:

$$\langle m \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} \exp(-E(\{S_i\})/k_B T) m(\{S_i\}) \quad (3.1)$$

sendo a média realizada sobre todas as configurações acessíveis  $\{S_i\}$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura,  $m(\{S_i\})$  e  $E(\{S_i\})$  são, respectivamente, a magnetização e a energia da configuração  $\{S_i\}$  e  $Z$  é a função de partição dada por:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp(-E(\{S_i\})/k_B T). \quad (3.2)$$

É da função de partição  $Z$  que derivamos as quantidades termodinâmicas do nosso sistema. O problema em obter tais propriedades é devido a soma (3.2) sobre todas as configurações acessíveis ao sistema, a qual torna o problema muitas vezes inviável e/ou pode divergir em algumas condições.

Por exemplo, consideramos o sistema para o modelo de Ising em uma rede quadrada com tamanho  $32 \times 32$ , i.e.  $2^{10}$  spins. O número de configurações é  $2^{32} \approx 10^{300}$ . Suponha um computador com frequência de relógio  $f = 10 \text{ GHz} = 10 \times 10^9 \text{ Hz}$  (bem acima do mercado hoje) [89], o que equivale a  $10^{10}$  pulsos de relógio a cada segundo. Se o computador gastar um pulso de relógio para gerar uma configuração  $\{S_i\}$ , este gastará um tempo aproximado de  $10^{282}$  anos (a idade aproximada do universo é  $10^{10}$  anos) para realizar a soma (3.2). Portanto, calcular alguma propriedade do sistema via (3.1) se torna impraticável. É neste tipo de problema que o MMC se torna útil.

Como é impossível realizar a soma sobre todas as configurações  $\{S_i\}$ , a idéia

---

<sup>1</sup>por simplicidade assumimos uma distribuição exponencial

é realizar a média da magnetização sobre  $M$  configurações de maior peso do sistema (amostragem por importância), para cada temperatura  $T$ , dada por:

$$\langle m \rangle_M = \frac{1}{M} \sum_{t=1}^M m(\{S_i\}_t). \quad (3.3)$$

O MMC é um eficiente algoritmo para gerar esta amostragem das configurações por importância  $\{S_i\}_1, \{S_i\}_2, \dots, \{S_i\}_M$  sendo cada configuração  $\{S_i\}_{k+1}$  construída a partir de  $\{S_i\}_k$  através de uma probabilidade de transição  $W$ . Distto podemos construir uma sequência amostral dada por:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\text{o número de vezes } \{S_i\}_j = \{S_i\}, j = 1, \dots, M}{M} \quad (3.4)$$

sendo  $\{S_i\}_j$  a  $j$ -ésima configuração, das  $M$  configurações, gerada; esta equação nada mais é a definição de probabilidade  $P(\{S_i\})$  como a frequência que a configuração  $\{S_i\}$  ocorre. A utilidade em construir uma sequência amostral é que para  $M$  suficientemente grande é possível escolher  $W$  tal que cada configuração gerada  $\{S_i\}$  tenha probabilidade dada por  $P(\{S_i\}) = \frac{1}{Z} \exp(-E(\{S_i\})/k_B T)$  como desejado, e assim, esperamos que <sup>2</sup> a média calculada canonicamente, eq.(3.1), seja igual a média realizada sobre as  $M$  configurações de maior peso, eq.(3.3), ou seja:

$$\langle m \rangle_{M \rightarrow \infty} = \langle m \rangle_\beta, \quad (3.5)$$

evitando muitas vezes o impossível cálculo da função de partição  $Z$ , eq.(3.2).

A configuração aleatória com que se inicia certamente não corresponde àquela de equilíbrio na temperatura de interesse. Então, antes de calcular qualquer média devemos gerar várias configurações. No final obteremos um sistema termalizado, i.e, as configurações corresponderão ao equilíbrio termodinâmico naquela temperatura [82]. Só então passamos a gerar novas configurações e calcular a média (3.3).

Notamos então que o MMC é uma técnica muito útil nestes casos em que podemos evitar o cálculo analítico (3.2) bem como possíveis aproximações não controladas. Na próxima subseção faremos uma breve abordagem sobre a Equação Mestra e desta

---

<sup>2</sup>veremos na próxima subseção que de fato isto acontece

retiraremos a condição de balanço detalhado que será utilizado para definirmos o algoritmo do MMC.

### 3.1.1 Equação mestra e a condição de balanço detalhado

No MMC, ao sistema em estudo é permitido fazer transições de uma configuração (ou um estado) para outra, de maneira probabilista. Em cada instante de “tempo”, chamado de passo de Monte Carlo<sup>3</sup> ( $t_{MC}$ ), o sistema passa para uma nova configuração que pode ser igual ou não à anterior.

Assim, se o sistema encontra-se em uma configuração  $C$  em um dado instante de tempo, ele pode passar para uma outra configuração  $C'$  no instante de tempo posterior, com uma certa probabilidade de transição  $T(C \rightarrow C')$ , independente do tempo (sendo, necessariamente  $C \neq C'$ ), que não depende das configurações passadas, i.e. não depende das configurações anteriores à configuração atual  $C$ ; este tipo de processo, em que a probabilidade de transição  $T(C \rightarrow C')$  é independente das configurações em que o sistema passou antes de chegar na configuração atual  $C$  é chamado de processo Markoviano [88].

Uma vez definido a probabilidade de transição  $T(C \rightarrow C')$ , será de nosso interesse achar uma equação que governa a dinâmica da probabilidade,  $P_t(C)$ , em que o sistema esteja em uma certa configuração  $C$ , depois de decorridos um tempo  $t$ . Podemos derivar esta equação de uma maneira relativamente simples; a probabilidade do sistema estar em uma dada configuração  $C$  e *sofrer* uma transição para uma outra configuração acessível  $C'$ , no próximo instante de tempo, é dada por  $\sum_{C' \neq C} T(C \rightarrow C')$ ; portanto, a probabilidade do sistema permanecer na mesma configuração  $C$ , no próximo instante de tempo, é dada por  $(1 - \sum_{C' \neq C} T(C \rightarrow C'))$ .

Assim, a probabilidade,  $P_t(C)$ , do sistema se encontrar na configuração  $C$ , no instante de tempo  $t$ , é formalmente dada por:

$$P_t(C) = P_{t-1}(C) \left[ 1 - \sum_{C' \neq C} T(C \rightarrow C') \right] + \sum_{C' \neq C} P_{t-1}(C') T(C' \rightarrow C) \quad (3.6)$$

---

<sup>3</sup>de agora em diante nesta seção nos referiremos o  $t_{MC}$  como simplesmente  $t$ .

que é simplesmente lida como a probabilidade de permanecer na mesma configuração  $C$  (primeira parte do lado direito da equação) somado com a probabilidade de estar em uma configuração diferente e ir para a configuração  $C$  (segunda parte do lado direito da equação). Esta eq.(3.6) pode ser colocada na forma:

$$P_t(C) - P_{t-1}(C) = \sum_{C' \neq C} [P_{t-1}(C')T(C' \rightarrow C) - P_{t-1}(C)T(C \rightarrow C')], \quad (3.7)$$

conhecida como Equação Mestra [90], equação esta, que governa a dinâmica da distribuição de probabilidade de um sistema físico. Desde que a probabilidade de transição  $T(C \rightarrow C')$  é independente do tempo, pode-se mostrar [88] que a distribuição de probabilidade  $P_t(C)$  tende a uma distribuição,  $P(C)$ , independente do tempo. Neste caso a distribuição de probabilidade do estado estacionário satisfará a eq.(3.7) colocando  $P_t(C) - P_{t-1}(C) = 0$ , e assim chegaremos à seguinte relação:

$$\sum_{C' \neq C} P(C')T(C' \rightarrow C) = \sum_{C' \neq C} P(C)T(C \rightarrow C'), \quad (3.8)$$

que simplesmente diz que, no equilíbrio, a probabilidade do sistema estar em uma configuração  $C'$  e ir para a configuração  $C$  é igual a probabilidade do sistema se encontrar na configuração  $C$  e ir para qualquer outra configuração distinta  $C'$ .

Em geral, a utilidade das eqs.(3.7-3.8) reside no fato de que podemos com elas, calcular a probabilidade  $P(C)$ , dada a probabilidade de transição  $T(C \rightarrow C')$ , que é um problema freqüente no estudo de processos Markovianos [88], ou de maneira inversa no MMC, em que procuramos a probabilidade de transição  $T(C \rightarrow C')$  que implica em uma certa distribuição de probabilidade,  $P_\beta(C)$ , independente do tempo. Então, dada a distribuição de probabilidade independente do tempo,  $P_\beta(C)$ , uma , mas não a única, solução para a probabilidade de transição  $T(C \rightarrow C')$  da eq.(3.8) é dada por:

$$P_\beta(C')T(C' \rightarrow C) = P_\beta(C)T(C \rightarrow C') \quad (3.9)$$

que é válida para cada par de configurações  $C$  e  $C'$ . Essa relação é conhecida como condição de *balanço detalhado*, a partir da qual definiremos o algoritmo do MMC.

### 3.1.2 O algoritmo do MMC

Antes mesmo de direcionar nossa atenção a um problema concreto, introduziremos o algoritmo com uma certa generalidade, aplicando-o a um sistema que possui um espectro de energia discreto. O objetivo neste “experimento computacional” será o de calcular a média de um observável físico do sistema.

Consideremos  $\epsilon_n$  a energia do nível  $n$ , onde  $n$  é um número inteiro que indexa o nível em que se encontra o sistema, satisfazendo  $\epsilon_n < \epsilon_{n+1}$ . Em cada passo de tempo, ao sistema é permitido, de maneira probabilista, permanecer, ou não, no mesmo nível. Assim, se o sistema se encontra no estado  $n$ , ele tem uma probabilidade de transição  $P(n \rightarrow n+1) (\equiv P_+)$  de ir para o nível  $n+1$ , uma probabilidade de transição  $P(n \rightarrow n-1) (\equiv P_-)$  de ir para o nível  $n-1$ , ou uma probabilidade de transição  $P(n \rightarrow n) (\equiv 1 - P_+ - P_-)$  de permanecer no nível  $n$ .

Utilizando estas probabilidades de transição podemos criar uma sequência amostral, eq.(3.4), e, a partir desta, podemos calcular a média de algum observável físico do sistema, usando a eq.(3.3). Entretanto, como afirmado no início deste capítulo, a média calculada na eq.(3.3) tem que ser feita depois de decorrido um certo instante de tempo, chamado de tempo transiente, necessário para que o sistema atinja o estado estacionário, de modo que a distribuição de probabilidades e a quantidade física observável não variem com o passar do tempo. Tal estado estacionário pode ser alcançado impondo que as distribuições de probabilidades envolvidas no sistema satisfaçam à condição de balanço detalhado, eq.(3.9), como segue

$$P_\beta(n)P(n \rightarrow n') = P_\beta(n')P(n' \rightarrow n), \quad (3.10)$$

para todo par de níveis  $n$  e  $n'$ , sendo  $\beta$  um parâmetro positivo.

Como estamos considerando que em cada passo de tempo o sistema pode sofrer transições de um nível  $n$  para o nível subsequente  $n+1$  e vice-versa, a eq.(3.10) fica na forma

$$P_\beta(n)P(n \rightarrow n+1) = P_\beta(n+1)P(n+1 \rightarrow n), \quad (3.11)$$

ou, na nossa notação,

$$P_\beta(n)P_+ = P_\beta(n+1)P_- \quad (3.12)$$

Dada a distribuição de probabilidade  $P_\beta(n)$ , podemos definir [88] a dinâmica do sistema da seguinte maneira: como uma transição de um nível  $n$  para um nível precedente  $n - 1$  sempre diminui a energia (pois estamos considerando  $\epsilon_n < \epsilon_{n+1}$ ), então esta transição é feita com uma probabilidade  $P_- \equiv c$ , com  $0 < c < \frac{1}{2}$ ; da eq.(3.12), por conseguinte, a probabilidade de transição do nível  $n$  para o nível subsequente  $n + 1$  é dado por  $P_+ \equiv c \frac{P_\beta(n+1)}{P_\beta(n)}$ . Note que a dinâmica supra definida garante que a probabilidade de permanecer no mesmo estado,  $P(n \rightarrow n)(\equiv 1 - P_+ - P_-)$ , é não negativa, e que necessariamente o sistema alcançará o estado estacionário com uma distribuição de probabilidades dada por  $P_\beta(n)$ , que independe do tempo.

Definido a dinâmica do MMC, resta-nos fazer a implementação computacional utilizando o seguinte algoritmo [88]:

1. coloque o sistema em um nível  $n = n_0$ ;
2. gere um número aleatório  $z$  uniformemente distribuído entre 0 e 1;
3. calcule  $P_+$  e  $P_-$ ;
4. se  $z < P_+$  então  $n \rightarrow n + 1$ ; se  $P_+ < z < (P_+ + P_-)$  então  $n \rightarrow n - 1$ ; caso contrário  $n \rightarrow n$ ;
5. volte para o passo 2;

repita os passos de 2 a 5 por um certo tempo,  $t$ , suficientemente grande, e somente após decorrido um tempo  $t_e$ , para garantir que o sistema alcance o regime estacionário. Desta maneira, obtemos um conjunto de valores para  $n$ , obedecendo necessariamente a distribuição de probabilidade  $P_\beta(n)$ . Assim, a média de um algum observável físico calculada pela eq.(3.3) será igual a média calculada canonicamente pela eq.(3.1).

É de interesse frisar que uma importante condição satisfeita pela dinâmica proposta é que, em cada passo de tempo, o sistema pode subir ou descer para os níveis distante de 1 unidade, ou seja a dinâmica apenas permite transições do tipo  $n \rightarrow n \pm 1$ ;

este tipo de dinâmica é necessário pois o sistema pode ir de uma configuração para qualquer outra, enquanto que em uma dinâmica em que as transições permitidas são, por exemplo, do tipo  $n \rightarrow n \pm 2$  nem todas as configurações são acessíveis ao sistema, que depende desta maneira das condições iniciais, pois o sistema fica limitado a mover-se em níveis pares ou ímpares [88].

A nossa intenção para a próxima seção é fazer uma aplicação do MMC no oscilador harmônico (OH) e calcular suas propriedades termodinâmicas.

## 3.2 O oscilador harmônico via simulação de Monte Carlo

Nesta seção faremos a nossa primeira aplicação do MMC a um sistema físico, o oscilador harmônico (OH), que servirá como um exemplo de referência para quando aplicarmos tal método a outros sistemas, tal como o átomo de hidrogênio; o estudo do OH torna-se interessante pois para tal sistema o formalismo de Boltzmann-Gibbs (BG) da mecânica estatística o descreve por completo, fornecendo as quantidades termodinâmicas tais como energia média e calor específico. Assim sendo, podemos comparar os resultados oriundos do nosso “experimento computacional” com aqueles previstos pelo formalismo de BG.

O espectro do OH, eq.(2.9), é dado por:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.13)$$

Para simplificar, definiremos

$$\varepsilon_n = n \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.14)$$

com  $\varepsilon_n \equiv (E_n - E_0)/(\hbar\omega)$  e  $E_0 = (1/2)\hbar\omega$ .

Aqui estudaremos este sistema via o MMC utilizando a dinâmica proposta na seção 4.1.2. A fim de compararmos os resultados do nosso “experimento computacional” com aqueles dados pela mecânica estatística de BG, definiremos as probabilidades

de transição da seguinte maneira

$$P_+ = c \exp\left[-\frac{\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n}{\theta}\right] \quad (3.15)$$

$$P_- = c \quad (3.16)$$

em que  $\theta \equiv (k_B T)/\hbar\omega$ , que por simplicidade chamaremos de temperatura, e  $k_B$  é a constante de Boltzmann. As probabilidades de transições definidas na dinâmica acima são conhecidas como funções de Metropolis, muito utilizadas para estudar sistemas magnéticos através, por exemplo, do modelo de Ising [81]. Nas nossas simulações utilizamos  $c = \frac{1}{2}$ ; entretanto, gostaríamos de frisar que outras escolhas da constante  $c$  no intervalo  $(0, \frac{1}{2})$  não muda quantitativa e qualitativamente nossos resultados.

A possibilidade de podermos comparar nossos resultados com os dados fornecidos pela mecânica estatística de BG vem do fato que uma vez definida a dinâmica dada pelas eqs.(3.15-3.16), a distribuição de probabilidade do estado  $n$  no regime estacionário será dada por  $P_\beta(n) = \exp(-\beta n)/Z$ ; ou seja, uma vez escolhido a distribuição de probabilidade de equilíbrio,  $P_\beta(n) = \exp(-\beta n)/Z$  na eq.(3.12), a dinâmica dada pelas eqs.(3.15-3.16) fica automaticamente definida. Como veremos no final deste capítulo, a dinâmica definida nas eqs.(3.15-3.16) não é a única que faz o sistema evoluir para a distribuição de equilíbrio exponencial e mostraremos que outras escolhas de funções (funções de Glauber, por exemplo, [81]) para as probabilidades de transição, levam a uma distribuição de equilíbrio exponencial, e não mudam qualitativa e quantitativamente nossos resultados.

Definida a dinâmica, realizamos simulações atribuindo uma condição inicial com  $n_0 = 3$  para duas diferentes temperaturas  $\theta = 1.0$  e  $\theta = 10.0$ . Os resultados da energia média  $\langle \varepsilon(t) \rangle$  em função do tempo de Monte Carlo  $t$  podem ser vistos na Fig. 3.1, sendo a média  $\langle \dots \rangle$  realizada sobre  $N = 10.000$  amostras (ou seja, em cada instante de tempo  $t$  anotamos o valor da energia para cada amostra e depois realizamos a média sobre  $N = 10.000$ ), juntamente com os resultados para a energia interna reduzida,  $u \equiv \varepsilon_{BG}/\hbar\omega$ , obtidas utilizando o formalismo de BG da mecânica estatística:  $u = 9.50$  (linha tracejada) e  $u = 0.58$  (linha contínua) para  $\theta = 10.0$  e

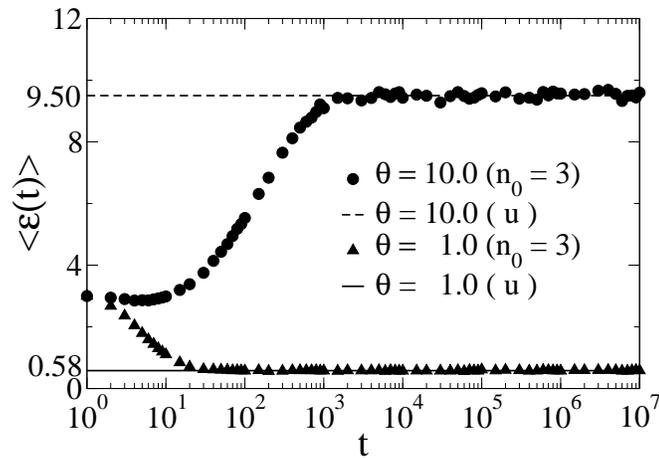


Figura 3.1: Energia média  $\langle \varepsilon \rangle$  versus tempo de monte carlo  $t$  para uma condição inicial  $n_0 = 3$  e duas diferentes temperaturas  $\theta = 10.0$  (círculos preenchidos) e  $\theta = 1.0$  (triângulos preenchidos). A média na energia foi feita sobre  $N = 10.000$  amostras. Note que para ambas temperaturas, a energia média relaxa no valor previsto pelo formalismo de BG,  $u = 9.50$  (linha tracejada) e  $u = 0.58$  (linha contínua) para  $\theta = 10.0$  e  $\theta = 1.0$ , respectivamente.

$\theta = 1.0$ , respectivamente. Note que após decorrido um certo tempo transiente  $t_e$ , o sistema alcança um regime estacionário e sua energia média coincide com aquela fornecida pelo formalismo de BG.

O próximo passo é comparar a energia média em função da temperatura  $\theta$ , obtida por esse “experimento computacional”, com o resultado previsto pelo formalismo de BG. Para isto, devemos esperar o sistema termalizar e só depois realizar a soma

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t - t_e} \sum_{t > t_e} \varepsilon(t), \quad (3.17)$$

sendo  $t_e$  o tempo de termalização. Portanto, devemos primeiramente definir o tempo transiente  $t_e$  para cada temperatura. Uma maneira de definirmos o tempo transiente em uma dada temperatura  $\theta$  é compararmos  $\langle \varepsilon(t + \Delta(t); \theta) \rangle$  com o valor da energia interna no equilíbrio dado pelo formalismo de BG,  $u(\theta)$ , sendo  $\Delta(t) = 0, 10, 20, \dots$  até que:

$$\frac{|\langle \varepsilon(t + \Delta(t); \theta) \rangle - u(\theta)|}{u(\theta)} \leq \delta \quad (3.18)$$

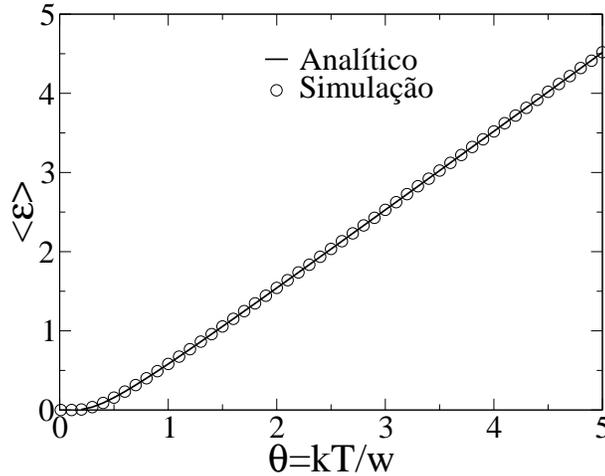


Figura 3.2: Comparação entre os resultados analítico (linha) e simulação (círculos) para a energia média  $\langle \varepsilon \rangle$  em função da temperatura  $\theta$  para o oscilador harmônico. Na simulação, a média na energia foi calculada com  $N = 10^6$  amostras e  $n_0 = 3$  para todas amostras, utilizando um tempo de relaxação  $t_e = 100$  e um tempo máximo  $t_{max} = 500$  para todas as temperaturas.

sendo que utilizaremos  $\delta = 0.05$ . Esta condição (3.18) nos diz que para obter o tempo transiente devemos comparar a energia média nos instante  $t$  e  $t + \Delta(t)$  ( $\Delta(t) = 0, 10, 20, \dots$ ) com a energia interna dada pelo formalismo de BG; quando todas estas energias diferirem, relativamente, de no máximo  $\delta = 0.05$  dizemos que o regime estacionário foi alcançado e a partir deste tempo transiente podemos calcular a média dada pela eq.(3.17). Nos casos mostrados na figura 3.1, para  $\theta = 1.0$  o tempo de relaxação calculado foi de  $t_e = 50$  enquanto que para a temperatura  $\theta = 10.0$   $t_e = 890$ .

Uma vez definido o tempo de relaxação  $t_e$ , podemos averiguar sua consistência, ou não, calculando o valor médio da energia para cada temperatura  $\theta$  a partir da eq.(3.17). Obviamente, colocaremos um tempo máximo  $t_{max}$ , após o tempo de relaxação, até o qual realizaremos a média. O resultado da simulação para a energia média e o calor específico, obtido sobre  $N = 10^6$  realizações (amostras), com condições iniciais  $n_0 = 3$ ,  $t_e = 100$  e  $t_{max} = 500$  para todas amostras, em função da temperatura, podem ser vistos nas figuras 3.2 e 3.3, nas quais confrontamos com os resultados analíticos

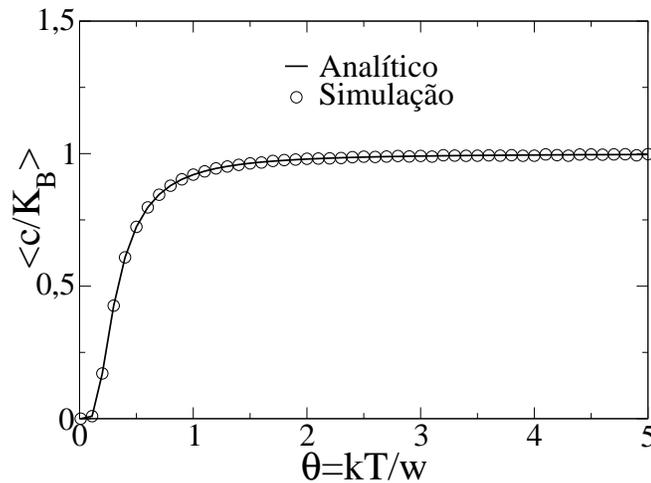


Figura 3.3: Comparação entre os resultados analítico (linha) e simulação (círculos) para o calor específico médio  $\langle c/K_B \rangle$  em função da temperatura  $\theta$  para o oscilador harmônico. Na simulação, a média foi calculada com  $N = 10^6$  amostras, utilizando um tempo de relaxação  $t_e = 100$  e um tempo máximo  $t_{max} = 500$  para todas as temperaturas.

obtidos pelo formalismo de BG que são dados por:

$$u = \frac{1}{\exp(\frac{1}{\theta}) - 1} \quad (3.19)$$

para a energia média, e para o calor específico

$$c/k_B = \frac{1}{\theta^2} \frac{\exp(\frac{1}{\theta})}{(\exp(\frac{1}{\theta}) - 1)^2}. \quad (3.20)$$

Como podemos observar os valores preditos pela formalismo de BG coincidem com os resultados “experimentais”, validando a condição para o cálculo do tempo transiente dado pela eq.(3.18).

A partir deste ponto discutiremos o significado de equilíbrio a partir dos resultados aqui obtidos. Por exemplo, uma inspeção na figura 3.1 nos permite ver que uma vez colocado o sistema em uma dada condição inicial, ele começa a evoluir e depois de um certo tempo sua energia alcança um valor que não varia mais com o tempo, apenas flutuando em torno de um valor fixo, o valor médio da grandeza de equilíbrio, durante um tempo muito grande. É após decorrido este tempo muito grande que garantimos que o sistema alcançou o que chamamos de equilíbrio termodinâmico . É neste estado

de equilíbrio termodinâmico que a condição do balanço detalhado (3.9) é satisfeita, e que a distribuição probabilidades alcança o regime estacionário, i.e.  $(\partial P(t)/\partial t) = 0$ .

Esta característica é vista na figura 3.4 na qual exibimos a frequência de aparecimento de uma dada energia para distintos tempos de referência que vão de  $t = 0$  até  $t = 10^5$ , para  $N = 10^5$  amostras todas inicialmente em  $n_0 = 3$  para a temperatura  $\theta = 1.0$ . Esta figura foi construída da seguinte maneira: coloca-se as  $N = 10^5$  amostras com a condição inicial  $n_0 = 3$  e com a temperatura  $\theta = 1.0$ ; em um dado instante anota-se quantas das  $N$  amostras estão em um dado valor de energia, e faz-se isto para  $t = 10, 10^2, 10^3, 10^4$  e  $10^5$ . O resultado é mostrado na figura 3.4 em que podemos ver que a distribuição de probabilidades evolui para uma distribuição estacionária. De fato, temos uma leve flutuação que diminui a medida em que aumentamos o número de amostras. Note na figura 3.5 que a distribuição de probabilidades é uma exponencial do tipo  $P_\beta(n) = \exp(-\beta n)/Z$  ( $Z$  é a função de partição) com  $\theta = 1.0$ , como era de se esperar, pois a dinâmica (3.15-3.16) foi definida de maneira que a distribuição de equilíbrio reproduzisse esse comportamento. Podemos ver também que o ajuste mostrado na figura 3.5,  $P(\varepsilon_n) = 0.56121 \exp(-0.9853 n)$  está próximo do previsto teoricamente  $P_\beta(\varepsilon_n) = \exp(-\beta n)/Z = 0.6321 \exp(-n)$ . Podemos melhorar tanto quanto queiramos os resultados, bastando apenas aumentar o número de amostras do nosso “experimento”.

Por fim, voltemos à discussão sobre as possíveis escolhas da dinâmica utilizada no MMC que produzem uma distribuição de equilíbrio também exponencial. Uma outra escolha muito utilizada é

$$P_+ = c \frac{\exp[-\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}]}{(\exp[\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}] + \exp[-\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}])} \quad (3.21)$$

$$P_- = c \frac{\exp[\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}]}{(\exp[\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}] + \exp[-\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}])} \quad (3.22)$$

com  $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n$ ,  $0 < c < 1/2$  e  $\theta \equiv k_B T / \hbar \omega$ . Estas funções que definem a dinâmica acima são conhecidas como funções de Glauber [81].

Para esta nova dinâmica, realizamos novas simulações com as mesmas condições daquelas feitas na figura 3.1. Como podemos observar na figura 3.6, os resultados

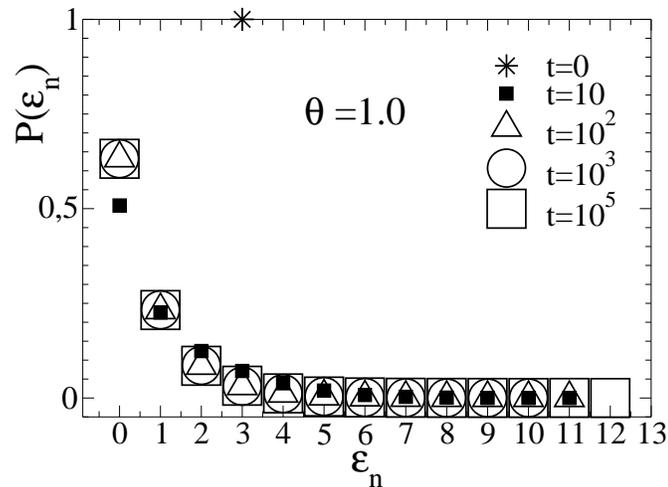


Figura 3.4: Distribuição de probabilidades das energias versus  $\epsilon_n$  para o oscilador harmônico em diferentes instantes de tempo  $t$ . Foram realizadas  $N = 10^5$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 3$  para todas as amostras, e a temperatura  $\theta = 1.0$ . Note que a partir de  $t = 10^2$  a distribuição não muda mais, indicando que o sistema já alcançou o equilíbrio. Note também que esta análise é consistente com a figura 4.1.

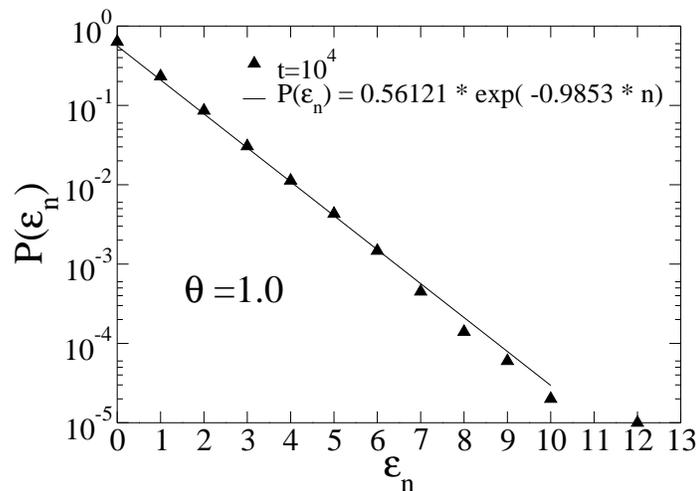


Figura 3.5: Logaritmo da distribuição de probabilidades das energias  $P(\epsilon_n)$  versus a energia  $\epsilon_n$  para o oscilador harmônico para tempo  $t = 10^4$  e para as mesmas condições da figura 4.4. Note que, como já era de se esperar, a curva ajustada é uma exponencial cujos parâmetros estão bem próximos dos previstos teoricamente.

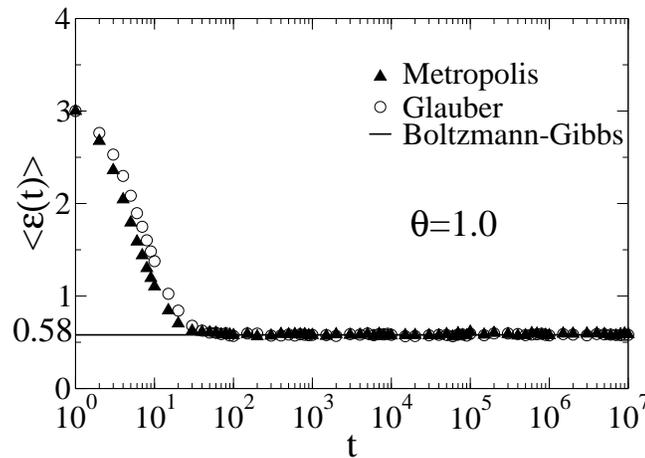


Figura 3.6: Comparação entre as dinâmicas de Metropolis e Glauber para o oscilador harmônico. Foram utilizadas  $N = 10^4$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 3$  para todas as amostras, com a temperatura  $\theta = 1.0$ . Note que obtemos o mesmo resultado qualitativo e que as duas dinâmicas fazem o sistema ir para a mesma energia de equilíbrio.

obtidos são quantitativa e qualitativamente os mesmos, mostrando que os resultados apresentados até então são uma propriedade do sistema e não da dinâmica. Note também que a dinâmica definida em (3.21-3.22) relaxa para a mesma energia de equilíbrio já que a mesma foi construída de maneira que a distribuição de probabilidade no regime estacionário fosse do tipo exponencial.

O objetivo principal nesta seção foi não só o de fazermos uma introdução ao método de Monte Carlo aplicando a um sistema bem conhecido e amplamente estudado, mas também de discutir algumas idéias, as quais serão de grande interesse quando estudarmos as “partículas compostas” relacionadas com a Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG) bem com o átomo de hidrogênio. É importante relembrar que os resultados aqui obtidos para um único oscilador harmônico são os mesmo de um sistema formados por vários osciladores harmônicos independentes. Ou seja, de fato o que estudamos nesta seção foi um gás de osciladores harmônicos sem interação [90].

No próximo capítulo aplicaremos todas estas idéias às “partículas compostas” oriundas da AHG. A diferença, como já dissemos anteriormente, é que a função de

partição deste sistema é divergente e, como consequência, a energia interna obtida pelo formalismo de BG é a energia de dissociação, ou ionização, do sistema. Ou seja, o sistema sempre se ioniza para qualquer temperatura finita. Assim, focaremos nossa atenção em investigar, por exemplo, quanto tempo o sistema leva para se ionizar e como este tempo depende da temperatura, bem como de outras informações físicas do sistema como energia média e calor específico.



# Capítulo 4

## Gás ideal de $q$ -osciladores: $q$ -Gás

Neste capítulo estaremos interessados em apresentar resultados que corroborem a interpretação da AHG em termos de partículas compostas, introduzida no capítulo 2. Para isto, analisaremos as propriedades termodinâmicas de um gás ideal de  $q$ -osciladores:  $q$ -gás ideal. Este sistema generaliza o gás ideal de osciladores, discutido no capítulo anterior, pelo uso de um conjunto de “partículas compostas” ( $q$ -osciladores), i.e. partículas com estrutura, não-interagentes em vez dos osciladores harmônicos [30] usuais.

No ensemble canônico, utilizando o formalismo de Boltzmann-Gibbs (BG), a dificuldade que temos em obter as propriedades termodinâmicas de um sistema formado por partículas não-interagentes é o mesmo que temos para obter para uma única partícula [90]. Assim, focaremos nossa investigação em obter as propriedades termodinâmicas por “partículas compostas” ( $q$ -oscilador) de um gás ideal.

Veremos que, analogamente ao que acontece com o átomo de hidrogênio que será discutido no próximo capítulo, a função de partição no formalismo de BG de um gás de  $q$ -osciladores é divergente para o parâmetro de deformação no intervalo  $0 < q < 1$ . Analisaremos este problema através das simulações computacionais utilizando o Método de Monte Carlo (MMC) [38], discutido no capítulo 3. Veremos que nossa “partícula composta” permanece em um *Estado de Quase-Equilíbrio* (EQE) antes de se ionizar, ou dissociar, e apresenta envelhecimento (*aging*).

Tal EQE tem um tempo de duração que aumenta exponencialmente com o in-

verso da temperatura obedecendo uma lei de Arrhenius, típica de problemas chamados de escape de Kramers, em reações químicas ([39]-[40]). Proporemos uma regularização na função de partição a qual descreverá o  $q$ -gás no EQE e mostraremos que os resultados obtidos estão em boa concordância com os resultados das simulações computacionais à baixas temperaturas. Se consideramos o EQE como um equilíbrio efetivo, todas as propriedades termodinâmicas do  $q$ -gás podem ser preditas via o formalismo modificado (regularizado). Por fim, veremos que a regularização realizada se baseia em uma renormalização dos parâmetros físicos do sistema.

Os resultados aqui obtidos reforçam a interpretação fenomenológica da AHG e nos dão subsídio para estender o estudo do EQE a uma família de sistemas, como átomos e moléculas, caracterizadas por espectros de energias com infinitos níveis porém limitados superiormente. Um exemplo, o átomo de hidrogênio, será discutido no capítulo 6.

## 4.1 A divergência da função de partição do $q$ -gás

Iniciamos nossa investigação do  $q$ -gás ideal considerando um ensemble de “partículas compostas” ( $q$ -osciladores) não-interagentes. As propriedades termodinâmicas deste sistema podem ser calculados a partir da função de partição do mesmo. Esta por sua vez, se fatoriza em um produto [90], já que as partículas são não-interagentes, e o problema se reduz em calcular a função de partição de uma única partícula.

Definimos o hamiltoniano de uma única partícula como:

$$H \equiv \frac{\hbar\omega}{N_0^2} A^\dagger A = \frac{\hbar\omega}{N_0^2} (J_0 - \alpha_0) \quad (4.1)$$

em que  $A^\dagger$ ,  $A$  e  $J_0$  satisfazem as relações de comutação da AHG (2.40-2.42) para uma função característica linear  $f$  ( $q$ -osciladores),  $N_0^2 = f(\alpha_0) - \alpha_0$  e  $\alpha_0$  é o menor autovalor de  $J_0$ .

Deste hamiltoniano (4.1) obtemos as seguintes autoenergias para a partícula:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega [n]_q = \frac{1 - q^n}{1 - q} \hbar\omega, \quad (4.2)$$

sendo  $[n] \equiv \frac{1-q^n}{1-q}$  o número de Gauss de  $n$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  e o parâmetro de deformação<sup>1</sup>  $0 < q < 1$ .

Como observamos no capítulo 2, este é um espectro de energia típico de sistemas ligados os quais em geral apresentam infinitos níveis de energias e são limitados superiormente. Na figura 4.1 esboçamos  $\varepsilon_n/\hbar\omega$  (a) com  $q = 0.80$ , na qual comparamos com o espectro de um oscilador harmônico (b) desde o estado fundamental  $n = 0$  (primeira linha de baixo para cima) até estados mais excitados como  $n \rightarrow \infty$ , para o  $q$ -oscilador, e  $n = 5$ , para o oscilador harmônico. Notamos que à medida em que  $n$  cresce o espectro do  $q$ -oscilador tende à seguinte energia:

$$\varepsilon^* = \frac{1}{1-q} \hbar\omega, \quad (4.3)$$

que corresponde ao valor da energia de ionização (ou dissociação) da partícula, uma vez que a energia do estado fundamental,  $n = 0$ , vale  $\varepsilon_0 = 0$ .

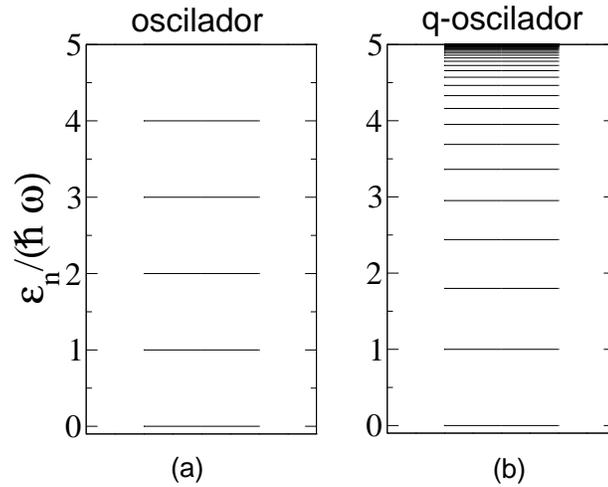


Figura 4.1: Níveis de energia de um (a) oscilador harmônico e de um (b)  $q$ -oscilador ( $q = 0.80$ ) são mostrados desde o estado fundamental ( $n = 0$ ), primeira linha de baixo para cima, até estados mais excitados como  $n \rightarrow \infty$  para o  $q$ -oscilador e  $n = 5$  para o oscilador harmônico. Notamos que o espectro do  $q$ -oscilador é limitado superiormente para  $0 < q < 1$  semelhante àquele apresentado por sistemas ligados, enquanto que o oscilador harmônico apresenta um espectro ilimitado com níveis de energias igualmente espaçados.

<sup>1</sup>o caso de  $q > 1$  foi estudado em [30].

Por simplicidade, e devido a esta semelhança com, por exemplo, o átomo de hidrogênio, nos referiremos a este limite superior no espectro de energia do  $q$ -oscilador como energia de ionização.

No ensemble canônico as propriedades termodinâmicas de um sistema são extraídas de sua função de partição  $Z_{BG}$  (Boltzmann-Gibbs). Considerando uma partícula com o espectro de energia (4.2), não degenerado, a sua função de partição é obtida por:

$$Z_{BG} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta\varepsilon_n) = \exp(-\beta_q) \sum_{n=0}^{\infty} \exp(\beta_q q^n) \quad (4.4)$$

sendo  $\beta = 1/k_B T$ ,  $\beta_q \equiv \beta\varepsilon^*$ ,  $\varepsilon^* = (\hbar\omega)/(1-q)$  e  $0 < q < 1$ . Esta equação (4.4) pode ser escrita na forma:

$$Z_{BG} = \exp(-\beta_q) \lim_{n^* \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{n^*} \exp(\beta_q q^n). \quad (4.5)$$

Manipulando o termo exponencial, podemos reescrevê-la da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \exp(\beta_q) Z_{BG} &= \lim_{n^* \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{n^*} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\beta_q)^m}{m!} (q^n)^m \\ &= \lim_{n^* \rightarrow \infty} \left( \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\beta_q)^m}{m!} \frac{1 - (q^m)^{n^*+1}}{1 - (q^m)} \right) \\ &= \lim_{n^* \rightarrow \infty} \left( n^* + 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(\beta_q)^m}{m!} [n^* + 1]_{q^m} \right). \end{aligned} \quad (4.6)$$

O limite  $n^* \rightarrow \infty$  do número de Gauss  $[n^* + 1]_{q^m}$  é finito e bem definido, resultando no valor  $(1/1 - q^m)$ ,  $\forall m > 1$ . Assim, a eq.(4.6) conduz a:

$$Z_{BG} = \exp(-\beta_q) \left( \lim_{n^* \rightarrow \infty} (n^* + 1) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(\beta_q)^m}{m!} \frac{1}{1 - q^m} \right), \quad (4.7)$$

que apresenta uma divergência linear com o número quântico  $n^*$ , oriundo do termo  $m = 0$  da eq.(4.6). Apesar da função de partição no formalismo de BG ser divergente podemos efetuar formalmente o cálculo da energia média,  $u_{BG}$ , em função da temperatura calculando  $\lim_{n^* \rightarrow \infty} -\partial \ln(Z_{BG}^{n^*}) / \partial \beta$ , sendo  $Z_{BG}^{n^*} \equiv \sum_{n=0}^{n^*} \exp(-\beta\varepsilon_n)$ ; fazendo isto obtemos o seguinte resultado para a energia média  $u_{BG}$ :

$$u_{BG} = \begin{cases} 0 & \text{se } T = 0 \\ \varepsilon^* & \text{se } T > 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

O resultado obtido na equação (4.8) ocorre para uma família de sistemas ligados caracterizados por espectros de energias com um limite superior  $\varepsilon^*$  precedido por um quase-contínuo de níveis de energias. Cada estado associado a um nível de energia que forma este quase-contínuo produz uma pequena contribuição,  $\exp(-\beta_q)$ , para a função de partição  $Z_{BG}$  (4.7). A divergência surge porque existe, em princípio, um número infinito de tais estados. Essencialmente, isto reflete o fato de que tais sistemas ligados sempre se ionizam, para qualquer temperatura finita, após decorrido um certo tempo. É devido a esta divergência que tais sistemas raramente são estudados nos livros textos de mecânica estatística <sup>2</sup>. Um exemplo que pertence a esta família de sistema ligados apresentando uma função de partição divergente é o átomo de hidrogênio. A função de partição deste, que será investigado no capítulo seguinte, foi regularizada via a mecânica estatística não-extensiva [42], que emerge de uma generalização do funcional entropia de BG [92], proposta por Tsallis. Mesmo dentro deste formalismo, as propriedades termodinâmicas, como por exemplo o calor específico, apresentam anomalias como divergências e descontinuidades. O mesmo cenário é apresentado para o  $q$ -oscilador.

Como vimos, a divergência em  $Z_{BG}$  (4.7), reflete o fato de que a partícula composta se ioniza, se esperamos um certo tempo, para qualquer temperatura finita. Na próxima subseção realizaremos “experimentos computacionais” e investigaremos nosso sistema via simulação computacional utilizando o MMC, procurando extrair informações sobre o sistema.

Pimeiramente, introduziremos a “função de partição regularizada” (modificada),  $Z'$ , para o  $q$ -oscilador, eliminando o termo que produz a divergência na eq.(4.7), da seguinte maneira:

---

<sup>2</sup>para uma exceção veja [91]

$$Z' \equiv Z_{BG} - \exp(-\beta_q) \lim_{n^* \rightarrow \infty} (n^*) = \exp(-\beta_q) \left( 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(\beta_q)^m}{m!} \frac{1}{1 - q^m} \right), \quad (4.9)$$

que é finita, e que também pode ser escrita como:

$$Z' = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta \varepsilon_n) - \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta_q) = \sum_{n=0}^{\infty} [\exp(-\beta \varepsilon_n) - \exp(-\beta \varepsilon^*)]. \quad (4.10)$$

Esta função de partição regularizada  $Z'$ , será utilizada para propor um MMC modificado para estudar nosso sistema. Aqui nesta seção, nos restringiremos a exibir a divergência da “função de partição” do  $q$ -oscilador. Entretanto, vimos que esta divergência na função de partição  $Z_{BG}$  (4.7) é causada pela contribuição infinita,  $\lim_{n^* \rightarrow \infty} n^* \exp(-\beta_q)$ , do quase-contínuo de energia presente no espectro de energias do sistema. Esta divergência conduz a um resultado em que o sistema se encontraria, para qualquer temperatura finita, ionizado. Esperamos que ao extraírmos o termo divergente, 4.9, a função de partição regularizada  $Z'$  forneça as quantidades físicas médias do sistema antes da ionização.

É interessante notar que o termo,  $\exp(-\beta_q)$ , que regulariza a função de partição  $Z_{BG}$  (4.7) depende da temperatura. Por exemplo, para  $T = 0$ , que implica  $\beta_q \rightarrow \infty$ , o termo regularizador tende a zero, i.e.  $\exp(-\beta_q) \rightarrow 0$ . Assim, para  $T = 0$ , todos os estados, exceto o fundamental, tem uma contribuição nula para a função de partição e portanto, podemos somá-los sem problemas adicionais de modo que a função de partição é finita para esta temperatura.

## 4.2 $q$ -Gás ideal via o MMC

Como vimos, o formalismo de BG é incapaz de prever as propriedades de sistemas ligados, já que o mesmo só é válido no equilíbrio termodinâmico, no qual os sistemas já se encontram ionizados (não-ligados).

Argumentamos que algumas propriedades de sistemas ligados podem ser obtidas por meio da função de “partição regularizada”  $Z'$ , como mostraremos a seguir.

Com este objetivo, realizaremos um estudo via o MMC usual e também via um MMC modificado, motivado pela função de partição regularizada  $Z'$ .

Aqui realizaremos nossos “experimentos computacionais” utilizando o algoritmo do MMC discutido no capítulo 3. A dinâmica que utilizaremos terá a mesma forma da utilizada no caso do oscilador harmônico eqs.(3.15-3.16) dada por:

$$P_+ = c \exp[-\beta(\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n)] \quad (4.11)$$

$$P_- = c \quad (4.12)$$

em que  $0 < c < 1/2$ ,  $P_+$  é a probabilidade de transição de  $n \rightarrow n + 1$ ,  $P_-$  é a probabilidade de transição de  $n \rightarrow n - 1$ ,  $\beta = (k_B T)^{-1}$  e  $\varepsilon_n$  é o espectro de energia (4.2) do  $q$ -oscilador. É importante lembrar que a dinâmica supra definida é construída de maneira a satisfazer a condição de balanço detalhado (3.12).

Uma vez que estamos utilizando uma dinâmica baseada em exponenciais, como no caso do oscilador harmônico discutido no capítulo precedente, a distribuição de probabilidade no equilíbrio será exponencial,  $P(\varepsilon_n) = \exp(-\beta\varepsilon_n)/Z$  em que  $Z$  é a função de partição do sistema. Desde que esta dinâmica leva, depois de um certo tempo (suficiente para alcançar o equilíbrio) a um resultado dado pelo formalismo de BG (distribuições de probabilidades exponenciais), sabemos a priori que o nosso “experimento computacional” levará, necessariamente, o sistema à ionização, i.e., a um valor da energia média igual a  $u^* \equiv \varepsilon^*/\hbar\omega$ . Implementando as mesmas regras discutidas na subseção 4.1.2 com a dinâmica (4.11-4.12), obtemos a energia média adimensional <sup>3</sup>  $\langle u(t) \rangle \equiv \langle \varepsilon(t) \rangle / \hbar\omega$  em função do tempo de Monte Carlo  $t$ , para diferentes temperaturas  $\theta = k_B T / \varepsilon^*$ , como mostra a figura 4.2.

Para o resultado mostrado na figura 4.2 a média na energia foi realizada sobre  $N = 2000$  amostras com condições iniciais,  $n_0$ , uniformemente distribuídas no intervalo  $[0, 9]$  e  $c = 1/2$  (utilizado em todas simulações). Verificamos que outras escolhas desta constante ( $0 < c < 1/2$ ) não muda quantitativa e qualitativamente nossos resultados.

---

<sup>3</sup>por simplicidade referiremos a energia adimensional como energia.

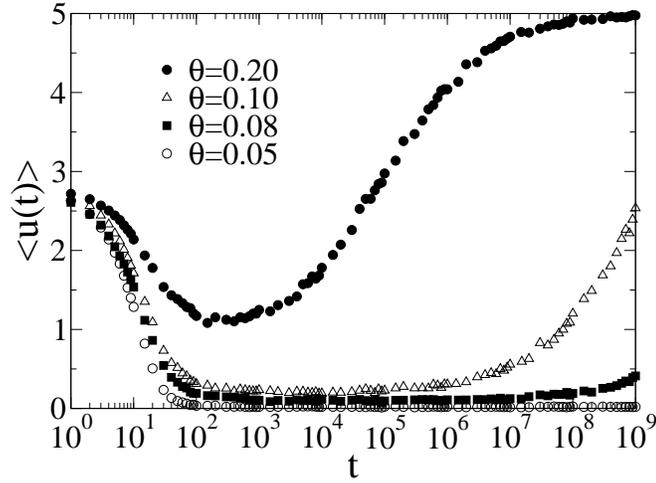


Figura 4.2: Energia média adimensional  $\langle u(t) \rangle$  por partícula do  $q$ -gás em função do tempo de Monte Carlo  $t$ , para diferentes temperaturas  $\theta = k_B T / \varepsilon^*$  e para o parâmetro de deformação  $q = 0.80$ . Note que depois de um certo tempo a energia média do sistema tende a energia de ionização  $\langle u^* \rangle = 5$ , para qualquer temperatura finita. Para temperaturas  $\theta \sim 0.10$ , a energia média apresenta um patamar, caracterizado por uma lenta variação em seu valor, o qual se torna mais evidente à medida em que a temperatura diminui.

Notamos nesta figura que a energia média por  $q$ -oscilador alcança o valor da energia de ionização  $\langle u^* \rangle = 1/(1 - q) = 5$ . Este comportamento reflete o fato de que ele se ioniza para qualquer temperatura finita, exibindo o resultado fornecido pelo formalismo de BG dado na eq.(4.8).

Notamos também que à medida em que diminuímos a temperatura, surge um patamar (*plateau*) na energia e esta flutua em torno de um valor médio durante um certo intervalo de tempo (dinâmica lenta), antes de alcançar a energia de ionização. A duração deste patamar está diretamente relacionada com a temperatura, e possui uma longa duração para valores de temperaturas pequenos, em relação à temperatura de dissociação  $T^* \equiv \varepsilon^*/K_B$ .

Desde já chamamos o tempo de Monte Carlo de tempo. A motivação pode ser vista do próprio MMC em que, em cada passo de Monte Carlo, ou seja cada atualização do estado atual do sistema, o sistema pode ou não sofrer uma transição para um outro nível de energia. Esta dinâmica refere-se às diversas colisões entre as

partículas existentes no  $q$ -gás ideal, a partir dos quais cada partícula pode ou não sofrer uma transição para outros níveis de energia. Portanto, cada instante de tempo estaria relacionado com o tempo médio entre duas colisões sucessivas das partículas que formam o  $q$ -gás ideal. Uma relação mais formal entre o tempo de Monte Carlo e o tempo real será sugerido no capítulo 5, quando estudarmos um gás ideal de átomos de hidrogênio.

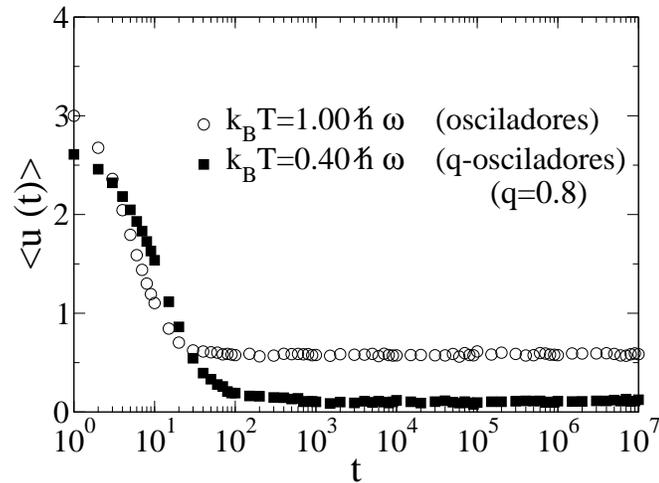


Figura 4.3: Energia média adimensional  $u(t)$  por partícula versus tempo  $t$  para o gás ideal de osciladores (círculos vazios) e o  $q$ -gás ideal,  $q = 0.8$ , (quadrados preenchidos) para as temperaturas  $k_B T = 1.0 \hbar \omega$  e  $k_B T = 0.40 \hbar \omega$ , respectivamente. Nesta figura observamos que durante grande parte do intervalo de tempo mostrado a energia média por partícula do  $q$ -gás ideal comporta-se como a energia média por partícula do gás ideal de osciladores, caracterizada por uma dinâmica lenta do  $q$ -gás antes de se ionizar.

Neste ponto gostaríamos de relembrar o comportamento da energia média por oscilador em função do tempo, figura 3.1. Naquela figura, obtivemos que depois de um certo tempo a energia média por partícula do sistema assume um valor que flutua em torno daquele previsto pelo formalismo de BG. Tal comportamento é mostrado novamente na figura 4.3, em que foi escolhida a temperatura  $\theta = 1.0$  ( $k_B T = 1.0 \hbar \omega$ ). Nesta mesma figura, mostramos também o comportamento da energia média por partícula do  $q$ -gás ideal,  $q = 0.8$ , para a temperatura  $\theta = 0.08$  ( $k_B T = 0.40 \hbar \omega$ ) até o instante de tempo  $t = 10^7$ . Durante grande parte do tempo exibido, observamos que a

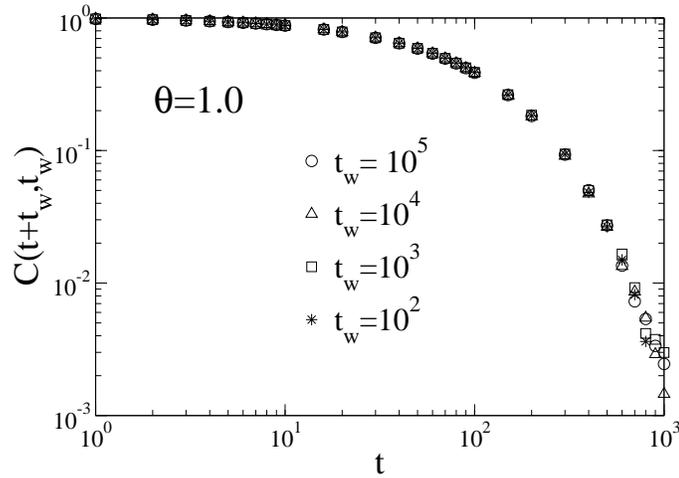


Figura 4.4: Função de autocorrelação de dois pontos  $C(t+t_w, t_w)$  para o oscilador harmônico é apresentada em função do tempo  $t$  para a temperatura  $\theta = 5.0$  e quatro diferentes tempos de espera  $t_w$  em que foi utilizado  $10^6$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 6$ . Notamos que a função de correlação não depende de  $t_w$ , caracterizando que o sistema já se encontra no equilíbrio termodinâmico.

dinâmica apresentada pelo  $q$ -gás ideal é semelhante àquela apresentada pelo gás ideal de osciladores que obviamente se encontra em um estado de equilíbrio termodinâmico a partir de tempos superiores a  $t = 10^2$ . Como observado na figura 4.2, o  $q$ -gás ideal sempre alcança o estado de equilíbrio ionizado depois de um período de tempo que depende da temperatura. Entretanto, antes de se ionizar completamente, o sistema permanece em um estado caracterizado por uma dinâmica lenta imitando um sistema que se encontra em equilíbrio. Este estado que precede o da ionização é um *Estado de Quase-Equilíbrio* (EQE) [38]. É neste EQE que focaremos nossos estudos.

Ainda neste capítulo, investigaremos a dependência destes resultados com o parâmetro de deformação  $q$ , mas, primeiramente, caracterizaremos concretamente este EQE verificando o fenômeno de envelhecimento (*aging*) que é característico de sistemas que não se encontram no verdadeiro equilíbrio termodinâmico [93]. Para observarmos tal fenômeno de envelhecimento devemos calcular a função de autocorrelação de dois-tempos definida como [93]:

$$C(t + t_w, t_w) = \frac{\langle x(t + t_w)x(t_w) \rangle - \langle x(t + t_w) \rangle \langle x(t_w) \rangle}{\sigma_{t+t_w} \sigma_{t_w}} \quad (4.13)$$

sendo  $t_w$  o tempo de espera (*waiting time*),  $\langle \dots \rangle$  é a média sobre amostras e

$$\sigma_t^2 = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \quad (4.14)$$

é variância de uma grandeza  $x$  no instante  $t$ , sendo  $x$  uma grandeza que caracteriza o sistema em análise.

A eq.(4.13) mede a correlação entre a variável  $x$  em instantes diferentes  $t_w$  e  $t + t_w$ . Para sistemas que se encontram no verdadeiro equilíbrio termodinâmico, a correlação não depende do tempo de espera  $t_w$ , i.e., depende apenas da distância temporal  $t$  que separa os valores  $x(t_w)$  e  $x(t_w + t)$ . Esta característica pode ser vista na figura 4.4 na qual exibimos a função de correlação  $C(t + t_w, t_w)$ , sendo  $x(t) \equiv u(t) = \varepsilon(t)/\hbar\omega$ , para o oscilador harmônico em função de  $t$ . Os resultados exibidos nesta figura foram obtidos para  $\theta = 5.0$  e quatro diferentes valores para o tempo de espera  $t_w = 10^2, 10^3, 10^4$  e  $10^5$ , em que foram utilizados  $10^6$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 6$ . Como já era de se esperar, a função de correlação não depende de  $t_w$ ,  $C(t + t_w, t_w) = C(t)$ , uma vez que o sistema já se encontra no verdadeiro equilíbrio termodinâmico. Além disto, exibe um decaimento exponencial  $C(t) = 0.72813 \exp(-bt)$  sendo  $b = 0.00624 \pm 0.00007$ , característico de um sistema em equilíbrio. Tal dependência pode ser vista na figura 4.5 na qual exibimos a logaritmo de  $C(t)$  em função de  $t$  para  $t_w = 10^5$ , bem com o ajuste dos dados.

Por outro lado, para sistemas que não alcançaram o verdadeiro equilíbrio termodinâmico, a função de correlação (4.13) depende explicitamente de  $t$  e  $t_w$ . Esta característica é uma assinatura de sistemas fora do equilíbrio termodinâmico. Um exemplo pode ser visto na figura 4.6 em que mostramos  $C(t + t_w, t_w)$  (sendo  $x(t) \equiv u(t)$ ) para o  $q$ -gás com  $q = 0.80$ ,  $\theta = 0.08$  e cinco diferentes tempos de espera  $t_w$ , sendo que as médias foram realizadas sobre  $N = 150000$  amostras com as mesmas condições iniciais dos resultados obtidos da figura 4.2. Os  $t_w$  escolhidos foram tais que a função de correlação foi avaliada com o sistema no EQE (tipicamente dentro do intervalo  $10^2$  a  $10^8$  como mostra a figura 4.2).

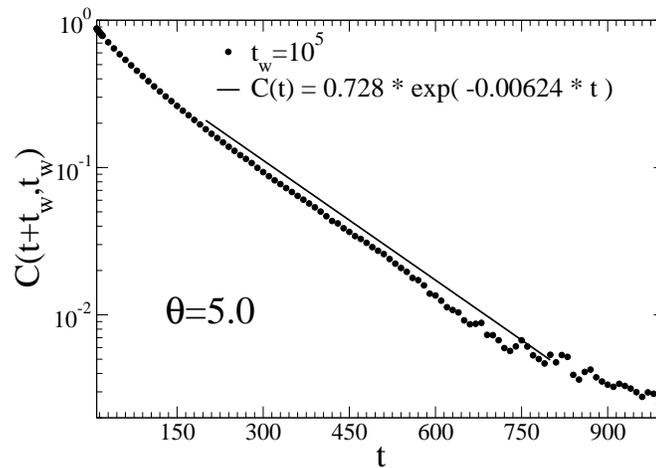


Figura 4.5: Logaritmo da função de autocorrelação de dois tempos  $C(t + t_w, t_w) = C(t)$  para o oscilador harmônico é apresentada em função do tempo  $t$  para a temperatura  $\theta = 5.0$  e  $t_w = 10^5$ . O número de amostras e as condições iniciais são as mesmas da figura 4.4 . Notamos que a função de correlação exibe um decaimento exponencial em  $t$ , característico de sistemas em equilíbrio.

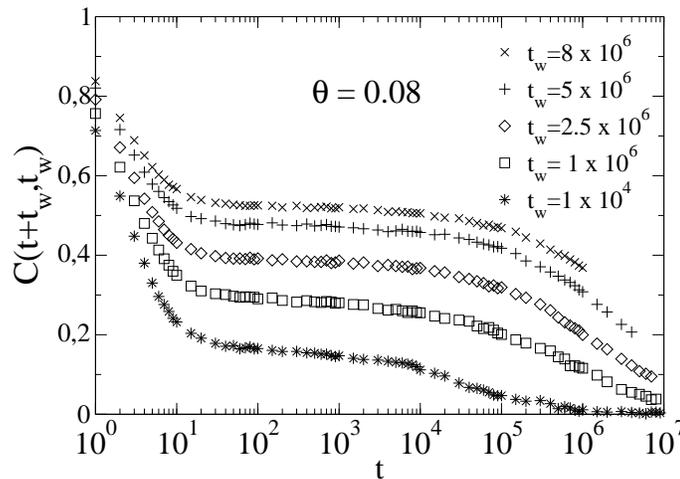


Figura 4.6: Função de autocorrelação  $C(t + t_w, t_w)$  para o  $q$ -oscilador com  $q = 0.80$  e  $\theta = 0.08$  em função do tempo  $t$ . Foram realizadas 150000 amostras com as mesmas condições iniciais da figura 4.2. Os valores de  $t_w$  foram escolhidos de maneira que a função de correlação seja avaliada no estado de quase-equilíbrio. Notamos claramente que a função de correlação depende de  $t_w$  mostrando assim a assinatura de que o sistema está em um estado que não corresponde ao estado de equilíbrio termodinâmico.

Claramente existe uma dependência com o tempo de espera  $t_w$  mostrando que no então chamado EQE o sistema está envelhecendo e que portanto não alcançou o verdadeiro equilíbrio termodinâmico.

### 4.3 $q$ -Gás ideal via o MMC modificado

Quando exibimos a função de partição regularizada  $Z'$  (4.10) discutimos sobre o conteúdo físico da mesma e vimos que esta, possivelmente descreveria as propriedades físicas, durante um certo intervalo de tempo, do  $q$ -gás ideal no EQE. Com o intuito de investigar tal hipótese, propomos nesta seção uma dinâmica de Monte Carlo modificada, motivada e baseada na função de partição regularizada  $Z'$ . Analogamente à dinâmica usual (4.11-4.12), definimos a dinâmica do MMC modificada com as seguintes probabilidades de transição:

$$P_+ = c \frac{\exp(-\beta\varepsilon_{n+1}) - \exp(-\beta\varepsilon^*)}{\exp(-\beta\varepsilon_n) - \exp(-\beta\varepsilon^*)} \quad (4.15)$$

$$P_- = c \quad (4.16)$$

sendo  $c = 1/2$ ,  $P_+$  é a probabilidade de transição de  $n \rightarrow n+1$ ,  $P_-$  é a probabilidade de transição de  $n \rightarrow n-1$ ,  $\beta = (k_B T)^{-1}$ ,  $\varepsilon^*/(\hbar\omega) = 1/(1-q)$  e  $\varepsilon_n = \hbar\omega \frac{1-q^n}{1-q}$  com  $0 < q < 1$ . É importante dizer que esta dinâmica modificada também satisfaz a condição de balanço detalhado (3.12) e que a distribuição de probabilidades estacionária será dada por  $P(\varepsilon_n) = (\exp(-\beta\varepsilon_n) - \exp(-\beta\varepsilon^*)) / Z'$  sendo  $Z'$  a função de partição regularizada (4.10).

Fazendo a mesma implementação computacional feita no caso da dinâmica do MMC usual, obtemos a energia média por partícula do  $q$ -gás em função do tempo para diferentes temperaturas  $\theta$  e comparamos com os resultados obtidos com a dinâmica usual, como mostra a figura 4.7.

As condições iniciais tanto quanto o número de amostras para os resultados obtidos com a dinâmica usual (símbolos preenchidos) são as mesmas da figura 4.2 enquanto que para os resultados com a dinâmica modificada as médias foram realizadas

sobre  $N = 1000$  amostras com as condições iniciais,  $n_0$ , distribuídas uniformemente no intervalo  $[0, 9]$ . A dinâmica modificada não permite que o sistema alcance a energia de ionização, desde que a função de partição associada a esta dinâmica é finita, e portanto a energia média por partícula alcança um valor de equilíbrio diferente de  $\langle u^* \rangle = 5$ . Para temperaturas em torno de  $\theta = 0.10$ , observamos que a energia média por partícula obtida com a dinâmica modificada coincide com a energia média por partícula, no EQE, obtida com a dinâmica usual. Tal concordância entre as duas dinâmicas persiste durante um intervalo de tempo que aumenta à medida em que a temperatura diminui.

Assim vemos que, para temperaturas  $\theta \sim 0.10$  ou menores, dependendo da escala de tempo de interesse, a dinâmica modificada reflete o comportamento do sistema no EQE que antecede o estado de ionização. A grande vantagem desta dinâmica é que a função de partição correspondente  $Z'$  é finita, e portanto, podemos calcular analiticamente as quantidades físicas médias do  $q$ -gás no EQE. Assim, em situações em que podemos considerar o estado de quase-equilíbrio como um estado de equilíbrio efetivo, o formalismo modificado fornecerá as quantidades “termodinâmicas” do sistema para temperaturas menores que  $\theta \sim 0.10$ , em que seguramente poderemos utilizar o formalismo modificado. No capítulo 6 estudaremos o átomo de hidrogênio e veremos que o tempo de duração real deste EQE é em geral muito grande, e portanto, poderemos considerar tal estado como um estado de equilíbrio efetivo.

Agora focaremos nossa atenção em calcular qual é o período de duração do EQE, bem como a sua dependência com a temperatura e com o parâmetro de deformação  $q$ . Já é sabido, das análises e resultados obtidos até agora, que este tempo aumenta com a diminuição da temperatura. Este resultado já era de se esperar pelo fato de que o tempo de duração do EQE é o tempo de vida média de cada  $q$ -oscilador que forma o  $q$ -gás ideal. É intuitivo perceber que este tempo de vida média aumenta à medida em que a temperatura do  $q$ -gás diminui, já que as colisões entre as partículas se tornam menos frequentes. Some-se a isto o fato da energia cinética média de cada partícula diminuir e portanto a probabilidade de ocorrer uma colisão que faça uma partícula se ionizar se torna cada vez menor.

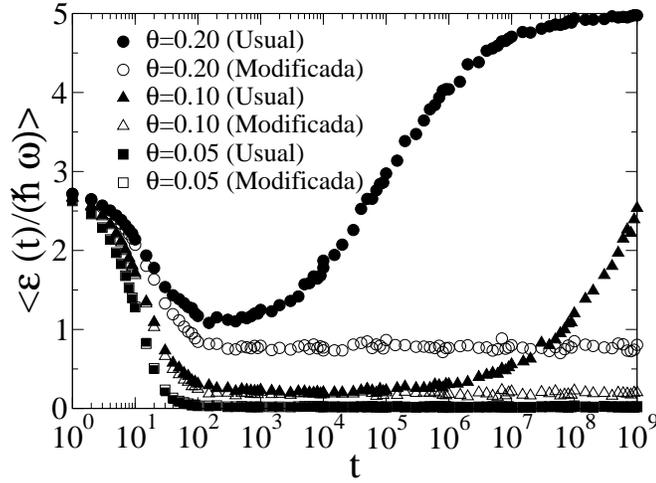


Figura 4.7: Energia média por partícula  $\langle \varepsilon(t)/(\hbar\omega) \rangle$  do  $q$ -gás ( $q = 0.80$ ) em função do tempo  $t$ , para as dinâmicas usual (símbolos preenchidos) e modificada (símbolos vazios) para três diferentes temperaturas. Notamos que a dinâmica modificada, por ser baseada em uma função de partição  $Z'$  finita, não apresenta a ionização. Observamos uma boa concordância, no EQE, entre as duas dinâmicas para temperaturas em torno e menores que  $\theta = 0.10$ .

Já que o tempo de duração do EQE é o tempo de vida médio de cada partícula que compõe o  $q$ -gás, este possui também uma dependência com o parâmetro de deformação  $q$ . Como vimos, o espectro de energia das partículas constituintes do  $q$ -gás possui um limite superior  $\varepsilon^*/(\hbar\omega) = 1/(1-q)$  que é a energia de ionização adimensional da partícula. Notamos que, à medida em que o parâmetro  $q$  se aproxima do valor 1, a energia de ionização se torna cada vez maior e como consequência, a partícula tem que absorver uma energia cada vez maior para se ionizar.

Agora, definimos a duração do EQE,  $\tau(q, \theta)$ , como o tempo durante o qual o sistema permanece em tal estado com a dinâmica usual de BG, de maneira que a diferença absoluta entre as energias médias por partícula obtidas pelas dinâmicas usual e modificada seja menor que um dado valor  $\delta$ . Embora a escolha de  $\delta$  seja arbitrária, esperamos que a lei de crescimento de  $\tau(q, \theta)$  seja independente desta escolha particular.

Assim, podemos estimar  $\tau(q, \theta)$  considerando  $q = 0.80$  e cinco diferentes temperaturas  $\theta = 0.08, 0.09, 0.10, 0.11$  e  $0.12$ , impondo que  $\delta = 0.05$ . Realizamos simulações

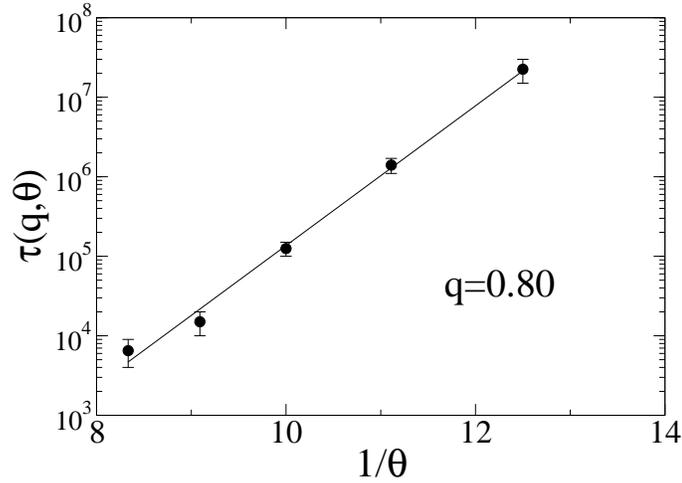


Figura 4.8: Dependência do logaritmo do tempo de duração do EQE  $\tau(q, \theta)$  versus  $1/\theta$  ( $\theta \equiv k_B T / (\hbar \omega E^*)$ ) para o  $q$ -gás com  $q = 0.80$ . Os dados se ajustam bem com uma lei exponencial. A inclinação da linha sólida é  $2.02 \pm 0.09$  e a barra de erros refere-se à imprecisão na medida do final do EQE. Para estes resultados realizamos simulações com condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as 2000 amostras.

com condições iniciais  $n_0 = 1$  com  $N = 2000$  amostras. O resultado é mostrado na figura 4.8 na qual esboçamos  $\tau(q, \theta)$  versus  $1/\theta$ . Podemos ver que os dados se ajustam bem a uma lei exponencial do tipo  $\tau(q, \theta) \sim \exp[h(q)/\theta]$  com  $h(q) = 2.02 \pm 0.09$ . Essencialmente, a duração do EQE segue uma lei de Arrhenius, típica do problema de escape de Kramers em reações químicas ([39],[40]) em que o sistema pode permanecer por um longo período de tempo em um estado quase-estacionário, antes de superar a barreira de potencial associada com a reação. Notamos que  $\tau(q, \theta) \rightarrow \infty$  quando  $T \rightarrow 0$ , recuperando o fato de que o sistema permanece no estado fundamental sem se ionizar. A barra de erros refere-se a imprecisão em medir o instante final do EQE.

Agora, investigaremos como este resultado do tempo de duração do EQE depende do parâmetro de deformação  $q$ . Primeiramente, como mostrado na figura 4.9, podemos ver que para outros valores do parâmetro  $q$ , por exemplo  $q = 0.25$ , o resultado da energia média por partículas do  $q$ -gás em função do tempo é qualitativamente igual ao mostrado na figura 4.2 para  $q = 0.80$ , na qual podemos ver também o surgimento do EQE. Estes resultados foram obtido utilizando  $N = 2000$  amostras com

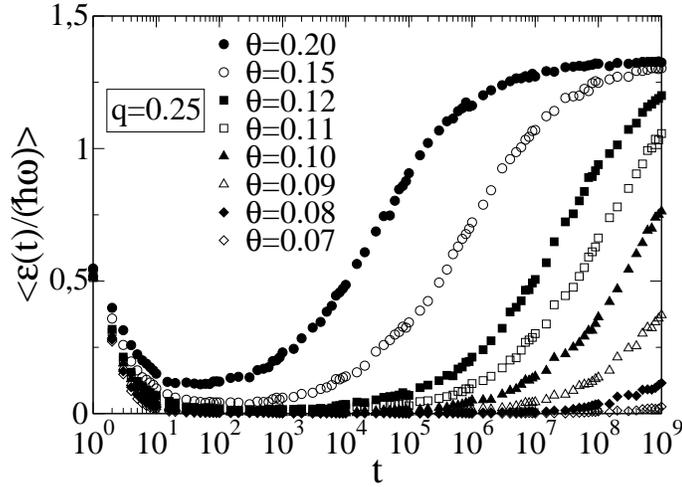


Figura 4.9: Energia média por partícula  $\langle \varepsilon(t)/\hbar\omega \rangle$  do  $q$ -gás em função do tempo  $t$ , para oito diferentes temperaturas  $\theta = k_B T/\varepsilon^*$  e para o parâmetro de deformação  $q = 0.25$ . As condições iniciais utilizadas foram  $n_0 = 1$  para as  $N = 2000$  amostras. Este resultado é análogo àquele mostrado na figura 4.2 na qual foi utilizado  $q = 0.80$ . Podemos observar a existência de um EQE que precede a ionização,  $\langle \varepsilon(t)/\hbar\omega \rangle = \varepsilon^*/\hbar\omega = 1/(1 - q) = 1.333$ , que possui um período de duração que depende da temperatura, o qual aumenta à medida em que a temperatura diminui.

condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as amostras.

Assim, de maneira análoga ao realizado para  $q = 0.80$ , medimos o tempo de duração do EQE para outros valores do parâmetro de deformação  $q = 0.25, 0.40, 0.50, 0.60$  e  $0.70$ . Realizamos simulações com  $N = 2000$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 1$ . Os resultados dos tempos de duração  $\tau(q, \theta)$  para quatro valores de  $q$  são mostrados na figura 4.10 e comparados com o resultado obtido com  $q = 0.80$ . Podemos ver que todos os dados se ajustam bem a uma lei exponencial com o inverso da temperatura e que todas as curvas ajustadas têm inclinações bem próximas. De fato, as inclinações das linhas sólidas referentes a  $q = 0.25, q = 0.40, q = 0.60$  e  $q = 0.70$  são, respectivamente: (a)  $2.06 \pm 0.06$  (b)  $1.96 \pm 0.09$  (c)  $2.02 \pm 0.07$  (d)  $1.93 \pm 0.03$ . De maneira geral obtemos que o tempo de duração do EQE obedece a seguinte lei de crescimento:

$$\tau(q, \theta) \sim \exp[h(q)/\theta] \quad (4.17)$$

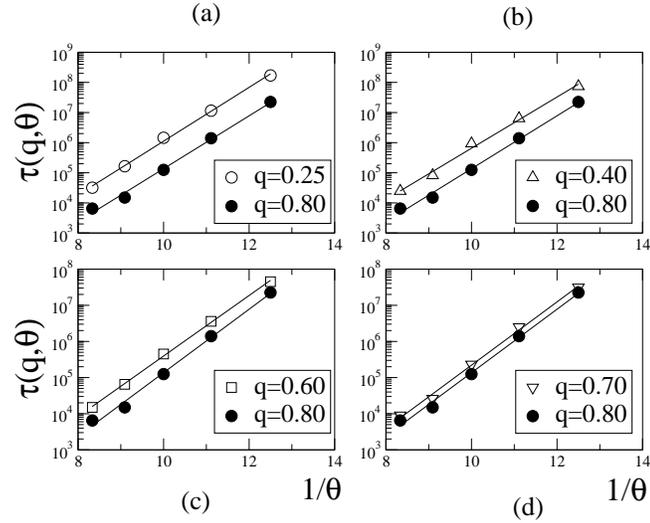


Figura 4.10: Dependência do logaritmo tempo de duração do EQE  $\tau(q, \theta)$  versus  $1/\theta$  ( $\theta \equiv k_B T / (\varepsilon^*)$ ) para o  $q$ -gás com  $q = 0.25, 0.40, 0.60$  e  $0.70$  comparados com  $q = 0.80$ . Os dados se ajustam bem com uma lei exponencial. As inclinações das linhas sólidas, ajustadas aos  $\tau(q, \theta)$  para  $q \neq 0.8$ , são: (a)  $2.06 \pm 0.06$  (b)  $1.96 \pm 0.09$  (c)  $2.02 \pm 0.07$  (d)  $1.93 \pm 0.03$ . Considerando as barras de erros, notamos que as inclinações são praticamente iguais. Para estes resultados realizamos simulações com condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as 2000 amostras.

sendo  $h(q)$  a inclinação das curvas ajustadas nas figuras 4.8 e 4.10. Como observamos na figura 4.10 as inclinações  $h(q)$  são bem próximas. Tal resultado pode ser melhor observado na figura 4.11 na qual exibimos a dependência de  $h(q)$  com o parâmetro  $q$ . Como observado na figura 4.10, vemos que dentro da barra de erro mostrada,  $h(q)$  não depende do parâmetro  $q$  sendo sua média dada por:

$$\overline{h(q)} = 2.00 \pm 0.07 = h. \quad (4.18)$$

Como analisamos anteriormente, a duração do EQE deve depender do parâmetro  $q$  já que o mesmo está diretamente relacionado com a energia de ionização  $\varepsilon^* = (\hbar\omega)/(1 - q)$  das partículas do  $q$ -gás. O que obtivemos até agora é que a dependência na lei de crescimento não está na função  $h(q)$  já que  $h(q) = h \sim 2$  para  $\forall q \in (0, 1)$ . Por outro lado notamos que  $\theta \equiv k_B T / \varepsilon^*$  sendo que  $\varepsilon^* = 1/(1 - q)$ . Assim,

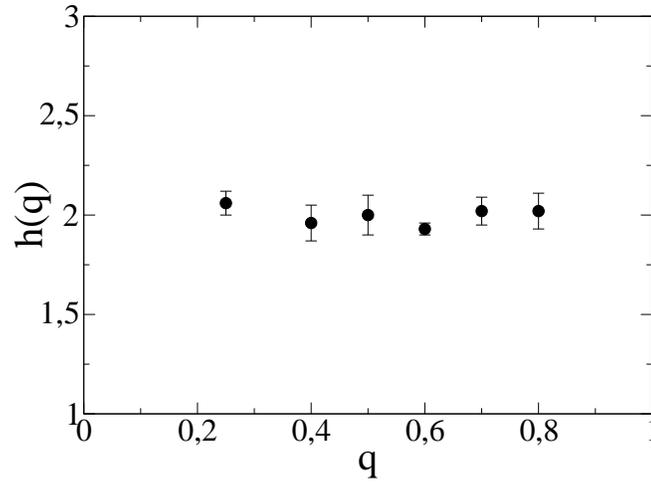


Figura 4.11: Dependência do coeficiente da lei de crescimento  $h(q)$  do tempo de duração do EQE  $\tau(q, \theta)$  versus  $q$ . Dentro da barra de erro mostrada,  $h(q)$  assume um valor constante para todos os valores do parâmetro  $q$  mostrado na figura, assumindo a média  $\overline{h(q)} = 2.00 \pm 0.07$ .

se isolamos por completo toda a dependência em  $q$  no argumento da exponencial, a lei de crescimento (4.17) assume a seguinte forma:

$$\tau(q, \theta) \sim \exp \left[ h'(q) / (k_B T / \hbar \omega) \right] \quad (4.19)$$

sendo que  $h'(q) = 2/(1 - q) = 2\varepsilon^*/(\hbar\omega)$ . Na figura 4.12 esboçamos a dependência de  $h'(q)$  com o parâmetro  $q$ . Percebemos que à medida em que  $q \rightarrow 1$  a energia de ionização  $\varepsilon^*/(\hbar\omega) \rightarrow \infty$  e assim  $h'(q)$  cresce indefinidamente, ou seja, o tempo de vida média do EQE do sistema cresce à medida que  $q \rightarrow 1$ . Por outro lado, observamos também, que quando  $q \rightarrow 0$ ,  $h'(q) \rightarrow 2$ . Este resultado recupera uma característica do sistema em que o tempo de duração do EQE, em uma dada temperatura  $\theta$ , está diretamente relacionado com o tempo de vida média de cada partícula; este por sua vez, aumenta à medida em que a energia de ionização,  $\varepsilon^*$ , do sistema aumenta pois quanto maior a energia de ionização maior será o tempo para o sistema absorver uma energia igual ou superior a  $\varepsilon^*$  para se ionizar.

Uma outra característica que podemos observar também é que  $\varepsilon^*/(\hbar\omega) \rightarrow \varepsilon_1/(\hbar\omega) = 1$  quando  $q$  diminui e assim, o coeficiente da lei de crescimento  $h'(q) \rightarrow h = 2.00 \pm 0.07$ . Portanto, dentro da barra de erro existente, há uma faixa de valores

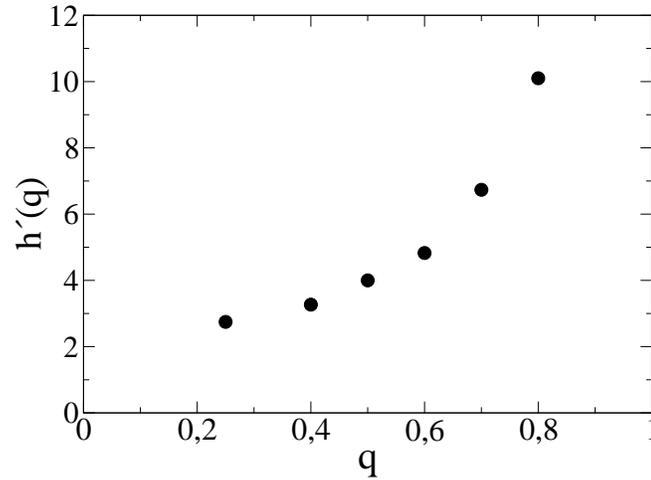


Figura 4.12: Dependência do coeficiente da lei de crescimento  $h'(q) \equiv h\varepsilon^*/(\hbar\omega) \sim 2/(1-q)$  do tempo de duração do EQE versus  $q$ . Notamos que quando  $q \rightarrow 1$ , o termo  $h\varepsilon^*/(\hbar\omega)$  cresce indefinidamente. Tal comportamento reflete o fato de que quanto maior a energia de ionização mais difícil se torna a ionização do sistema. Podemos notar também que  $h\varepsilon^*/(\hbar\omega)$  satura quando  $q \rightarrow 0$ . A barra de erro é do tamanho do símbolo utilizado.

de  $q$  tal que a taxa de crescimento é a mesma. Este resultado também, recupera uma outra característica do sistema em que, para pequenos valores de  $q$ , o primeiro estado excitado  $\varepsilon_1/(\hbar\omega) = 1$  de cada partícula possui um valor próximo a energia de ionização  $\varepsilon^*/(\hbar\omega)$  e, portanto, o tempo de vida média de cada partícula assume um valor próximo do tempo de vida média do primeiro estado excitado; como  $\varepsilon_1/(\hbar\omega) = 1$ ,  $\forall q$ , o tempo de vida média de cada partícula, e portanto a duração do EQE para o  $q$ -gás, assume valores próximos para valores de  $q$  pequenos.

Uma vez obtida a lei de crescimento (4.17), focamos agora nossos esforços em discutir sobre a distribuição das energias neste EQE. Para isto realizamos simulações para o  $q$ -gás com  $q = 0.80$ , utilizando  $N = 3 \times 10^6$  amostras colocadas inicialmente em  $n_0 = 0$ , com a temperatura  $\theta = 0.07$ ; para os instantes de tempos  $t = 10^2, 10^3, 10^4$  e  $10^5$  medimos a frequência (probabilidade)  $P(u_n)$ ,  $u_n \equiv \varepsilon_n/(\hbar\omega)$ , com que uma dada energia adimensional  $u_n = \varepsilon_n/(\hbar\omega)$  aparece. O resultado é mostrado na figura 4.13 na qual esboçamos o logaritmo da probabilidade  $P(u_n)$  versus  $u_n$  bem como a linha sólida que é o ajuste aos dados. Notamos que  $P(u_n)$  depende exponencialmente de

$u_n$  sendo o ajuste dado por  $P(u_n) = 1.0991 \exp(-b u_n)$  em que  $b = 2.95 \pm 0.09$ . Se consideramos  $\beta = 1/(k_B T) \equiv b/(\hbar\omega)$  obtemos [94]  $k_B T/(\hbar\omega) = 0.34 \pm 0.01$ . Notamos que esta definição nos leva ao valor, dentro da barra de erro, da temperatura  $\theta$  em que o sistema foi colocado já que  $\theta \equiv k_B T/\varepsilon^*$  implica em  $k_B T/(\hbar\omega) = 0.35$ .

Vimos nesta seção que o EQE pode ser descrito pela “função de partição” regularizada  $Z'$ . Esta por sua vez possui um peso estatístico do tipo  $P'(\varepsilon_n) \sim [\exp(-\beta\varepsilon_n) - \exp(-\beta\varepsilon^*)]$  e portanto essa pode ser usada como a dependência da distribuição de probabilidade no EQE. Notamos que mesmo este peso estatístico modificado apresenta uma dependência exponencial com  $\varepsilon_n$ , em que o termo regularizado é muito pequeno, i.e.  $\exp(-\beta\varepsilon^*) = 6.249 \times 10^{-7}$ , para os valores de  $q$  e  $\theta$  considerados. É importante lembrar que este termo, apesar de muito pequeno, é o que produz a divergência na função de partição devido a contribuição dos infinitos níveis que formam o quase-contínuo no espectro de energias do sistema.

Podemos notar também que dentro do EQE a distribuição das energias possui um regime quase-estacionário e mais uma vez tal comportamento é similar ao de um sistema que se encontra em equilíbrio como, por exemplo, o resultado que obtivemos para o oscilador harmônico na figura 3.6. Neste último, a distribuição de probabilidade no estado estacionário não muda com o tempo enquanto que para o  $q$ -gás a distribuição muda, mas de maneira bem lenta, fazendo surgir o EQE. Podemos notar na figura 4.13 que em  $t = 10^5$  as energias dos estados mais excitados aparecem com uma frequência maior com relação aos tempos anteriores, caracterizando um aumento na energia média do sistema com o tempo, até a mesma alcançar a energia de ionização  $\varepsilon^*$ . Este comportamento foi mostrado na figura 4.2, na qual observamos que a energia média do sistema varia lentamente até alcançar a energia de ionização; durante este tempo em que a energia média possui uma variação lenta, o sistema tem uma distribuição de energias como mostrado na figura 4.13.

Nas figuras 4.2 e 4.9, observamos também que existem dois tempos nos quais o sistema possui o mesmo valor na energia média por partícula. Entretanto nesses dois instantes de tempo as distribuições nas energias, ou equivalentemente a distribuição dos níveis de energias  $n$ , são completamente diferentes como mostra a figura 4.14, na

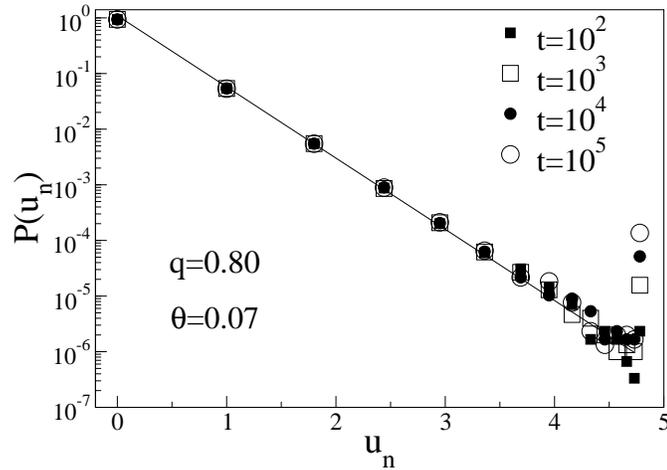


Figura 4.13: Logaritmo da distribuição da energia adimensional  $P(u_n)$  versus a energia adimensional  $u_n$ ,  $u_n \equiv \varepsilon_n/(\hbar\omega)$ , para o  $q$ -gás dentro do EQE. A simulação foi realizada para  $q = 0.80$ ,  $\theta = 0.07$ ,  $N = 3 \times 10^6$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 0$ . Notamos que a distribuição dentro do EQE é quase-estacionária já que praticamente não varia no intervalo de  $t = 10^2$  a  $t = 10^5$  e que a mesma se ajusta bem a linha sólida, lei exponencial, com inclinação  $-2.95 \pm 0.09$ .

qual esboçamos os resultados das distribuições dos níveis de energias  $P(\varepsilon_n)$  versus  $n$  para o  $q$ -gás,  $q = 0.25$ , na temperatura  $\theta = 0.15$ ; no gráfico interno, exibimos o mesmo resultado em escala Log-Log, no qual excluímos o nível fundamental  $n = 0$ . Podemos ver que para  $t = 10$  o sistema possui uma distribuição  $P(\varepsilon_n)$  mais acentuada em níveis de energias menores. Para  $t = 10^4$  notamos que  $P(\varepsilon_n)$  diminui para os níveis de energias menores, o que implicaria em uma diminuição na energia média mas, por outro lado,  $P(\varepsilon_n)$  aumenta para os estados mais excitados de maneira que a média da energia por partícula seja igual à do instante  $t = 10$ . Apesar disto, notamos, figura 4.9, que nestes instantes de tempos analisados a energia média por partícula possui comportamentos bem distintos, devido ao fato de que as distribuições dos níveis de energias serem completamente diferentes.

Na próxima seção calcularemos a partir da função de partição regularizada  $Z'$  quantidades físicas médias do sistema e compararemos com os resultados medidos através do nosso “experimento computacional”. Neste último, esperamos que as

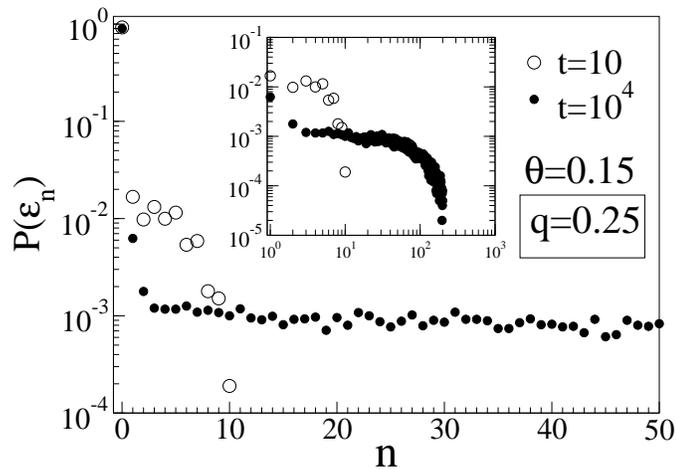


Figura 4.14: Probabilidade dos níveis de energias  $P(\varepsilon_n)$  versus  $n$  para o  $q$ -gás com  $q = 0.25$ ,  $\theta = 0.15$  para dois tempos  $t = 10$  e  $t = 10^4$ . No gráfico interno, exibimos em escala Log-Log  $P(\varepsilon_n)$  versus  $n$  a partir do primeiro estado excitado ( $n = 1$ ). Nas simulações foram utilizadas  $n_0 = 1$  para  $N = 10^5$  amostras. Notamos da figura 4.9 que para estas condições iniciais o  $q$ -gás apresenta uma energia média por partícula com valores bem próximos para os instantes de tempo em questão. Apesar disto, as distribuições de probabilidades dos níveis são bem distintas produzindo comportamentos bem distintos na evolução da energia média em função do tempo, como podemos observar na figura 5.9.

propriedades físicas extraídas do EQE possuam uma certa robustez com relação as condições iniciais,  $n_0$ , fornecidas ao sistema. De fato, na figura 4.15 exibimos a energia média por partícula  $\langle \varepsilon(t)/(\hbar\omega) \rangle$  versus o tempo  $t$  para o  $q$ -gás ( $q = 0.80$ ), para  $\theta = 0.10$  e com duas condições iniciais diferentes  $n_0 = 0$  e  $n_0 = 1$  para  $N = 2000$  amostras. Podemos notar que temos uma certa liberdade nas condições iniciais tal que a energia média do EQE calculada para as duas condições iniciais diferentes tenham o mesmo valor. Este comportamento é similar ao que acontece em um sistema que alcança o equilíbrio termodinâmico, sendo que para condições iniciais diferentes a dinâmica sempre faz o sistema relaxar para o estado estacionário.

Assim, qualquer que seja a condição inicial distribuída entre  $n_0 = 0$  e  $n_0 = 1$  em que preparamos o nosso sistema, as quantidades físicas médias do EQE serão as mesmas para qualquer valor do parâmetro  $q$ . É importante dizer que para um

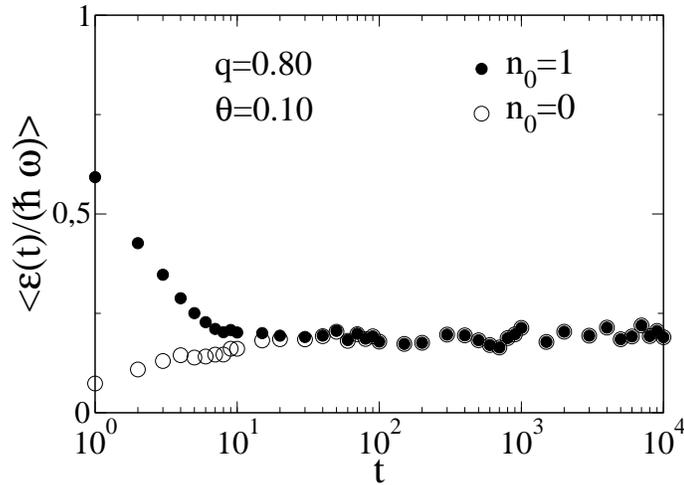


Figura 4.15: Energia média por partícula  $\langle \varepsilon(t)/(\hbar\omega) \rangle$  versus tempo para o  $q$ -gás com  $q = 0.80$ ,  $\theta = 0.10$  e duas condições iniciais  $n_0 = 0$ ,  $n_0 = 1$  para  $N = 2000$  amostras. Notamos que as duas simulações relaxam para a energia média do EQE e assim temos uma certa liberdade em preparar nosso sistema de maneira a obter o EQE.

valor do parâmetro  $q$  pequeno, um esforço computacional maior (maiores valores do número de amostras  $N$ ) deve ser feito para que as simulações com condições iniciais diferentes produzam as mesmas energias no EQE. Um exemplo disto é mostrado na figura 4.16 na qual mostramos os resultados das simulações para o  $q$ -gás ( $q = 0.40$ ) com as condições iniciais  $n_0 = 0$ ,  $n_0 = 1$  bem como combinações destas duas últimas:  $(n_0/N) = 0.50$  e  $(n_1/N) = 0.50$ ;  $(n_0/N) = 0.75$  e  $(n_1/N) = 0.25$ ;  $(n_0/N) = 0.90$  e  $(n_1/N) = 0.10$  para  $N = 10^7$  amostras. Podemos ver que as energias médias por partícula obtidas das simulações para as diferentes condições iniciais relaxam todas para a mesma energia e assim definem a energia do EQE.

Um outro resultado importante é mostrado na figura 4.17 na qual exibimos os resultados das simulações para o  $q$ -gás utilizando as dinâmicas de Metropolis (4.15,4.16) e Glauber (3.21,3.22), lembrando que esta última é definida como:

$$P_+ = c \frac{\exp[-\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}]}{(\exp[\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}] + \exp[-\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}])} \quad (4.20)$$

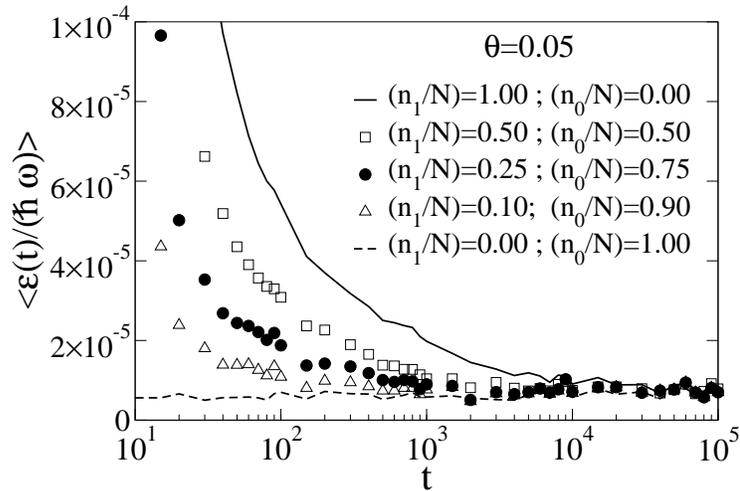


Figura 4.16: Energia média por partícula versus tempo para o  $q$ -gás com  $q = 0.40$ ,  $\theta = 0.05$  e cinco condições iniciais  $n_0 = 0$ ,  $n_0 = 1$  e outras três combinações destas duas últimas, para  $N = 2000$  amostras. Notamos que as simulações relaxam para o EQE com a mesma energia mas em tempos diferentes.

$$P_- = c \frac{\exp\left[\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}\right]}{\left(\exp\left[\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}\right] + \exp\left[-\frac{\Delta\varepsilon}{2\theta}\right]\right)} \quad (4.21)$$

com  $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n$ ,  $0 < c < 1/2$  e  $\theta \equiv k_B T / \hbar \omega$ . Os resultados exibidos na figura 4.17 foram obtidos para  $q = 0.80$ ,  $\theta = 0.10$  e  $n_0$  distribuído uniformemente no intervalo  $[0, 9]$  para  $N = 2000$  amostras. Como podemos ver, o sistema estudado pelas duas dinâmicas apresenta qualitativamente o mesmo comportamento para a energia média por partícula, e portanto, todas as análises até agora discutidas do EQE são propriedades do sistema que se mantêm, como desejado, independente da dinâmica utilizada.

Na próxima seção calcularemos a quantidades físicas médias do EQE via a função de partição regularizada e dos nossos “experimentos computacionais”.

## 4.4 Propriedades “termodinâmicas” do EQE.

Nesta seção focaremos nossos esforços em obter as quantidades físicas médias do  $q$ -gás enquanto o mesmo permanece no EQE. Estas quantidades serão obtidas por métodos

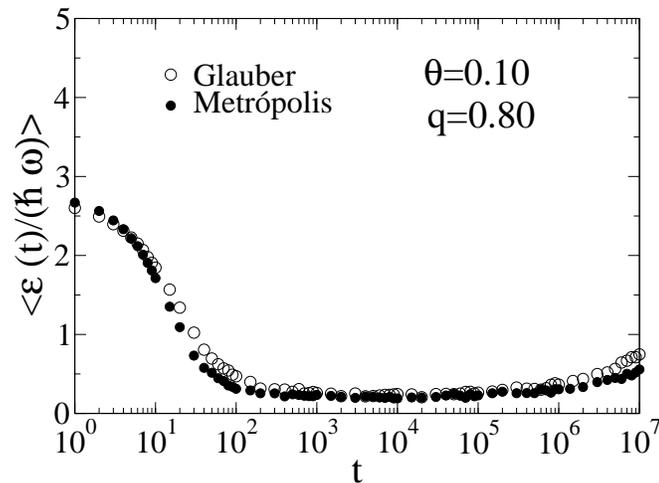


Figura 4.17: Energia média por partícula versus tempo para o  $q$ -gás com  $q = 0.80$ ,  $\theta = 0.10$  utilizando as dinâmicas de Glauber (círculos vazios) e Metrópolis (círculos preenchidos). As condições iniciais foram escolhidas uniformemente distribuídas em  $[0, 9]$  para  $N = 2000$  amostras. Notamos que as duas dinâmicas produzem o mesmo comportamento qualitativo para a energia média por partícula do sistema, e portanto, o EQE pode ser estudado utilizando qualquer uma das dinâmicas.

computacionais e pela função de partição regularizada.

Assim, realizamos o cálculo da energia média por partícula em função da temperatura  $\theta$  para o  $q$ -gás com  $q = 0.80$ . O resultado é mostrado na figura 4.18, o qual foi obtido com uma simulação utilizando a dinâmica usual do MMC com  $N = 10^6$  amostras, inicialmente em  $n_0 = 1$ . A média foi calculada entre  $t_1 = 200$  a  $t_2 = 400$  para garantir que a mesma fosse realizada dentro do EQE. Os resultados são qualitativamente iguais para outros valores do parâmetro  $q$ .

Para as mesmas condições em que foi obtido o resultado mostrado na figura 4.18, foi calculado o calor específico médio por partícula do  $q$ -gás. Este resultado é mostrado na figura 4.19, na qual podemos observar um comportamento análogo ao da energia média por partícula na figura 4.18.

Uma vez mostrado os resultados das simulações, iremos calcular a energia e o calor específico do  $q$ -gás através do formalismo modificado que é obtido da função de partição regularizada  $Z'$ . Como observamos na seção anterior, os resultados obtidos

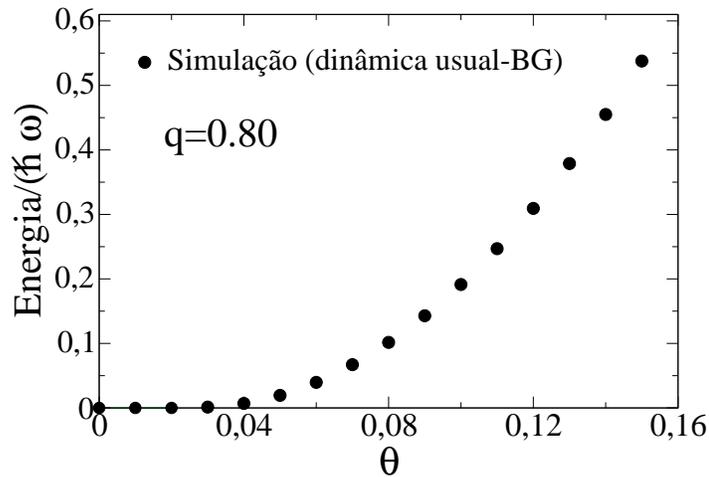


Figura 4.18: Energia média por partícula versus temperatura  $\theta$  para o  $q$ -gás com  $q = 0.80$ . As simulações foram realizadas com  $N = 10^6$  amostras, com condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as amostras. A média foi realizada entre os tempos  $t_1 = 200$  até  $t_2 = 400$  para garantir que a mesma fosse realizada dentro do EQE. Resultados similares são obtidos para outros valores do parâmetro  $q$ .

para a energia média por partícula, com o MMC modificado, coincidem com aqueles resultados obtidos utilizando o MMC usual, para certos valores de temperaturas, dentro do EQE. Assim, para estes valores de temperatura a energia interna e o calor específico por partícula do  $q$ -gás preditos com a função de partição regularizada  $Z'$  devem coincidir com os resultados obtidos pela dinâmica usual, já que a dinâmica modificada é baseada na função de partição regularizada.

Dentro deste novo formalismo dado pela função de partição regularizada  $Z'$  (4.9), a energia interna por partícula é dada por:

$$u' = -\partial \ln Z' / \partial \beta = \varepsilon^* \left\{ 1 - \frac{\sum_{m=1}^{\infty} (m/m!) (\beta_q)^{m-1} (1/(1-q^m))}{1 + \sum_{m=1}^{\infty} ((\beta_q)^m / m!) (1/(1-q^m))} \right\} \quad (4.22)$$

e o calor específico por partícula  $c'/k_B = \beta^2 \partial u' / \partial \beta$  é dado por:

$$\frac{c'}{k_B} = (\beta_q)^2 \left\{ \frac{\sum_{m=1}^{\infty} m(m-1)(1/m!) (\beta_q)^{m-2} (1/(1-q^m))}{1 + \sum_{m=1}^{\infty} ((\beta_q)^m / m!) (1/(1-q^m))} - \frac{[\sum_{m=1}^{\infty} (m/m!) (\beta_q)^{m-1} (1/(1-q^m))]^2}{(1 + \sum_{m=1}^{\infty} ((\beta_q)^m / m!) (1/(1-q^m)))^2} \right\} \quad (4.23)$$

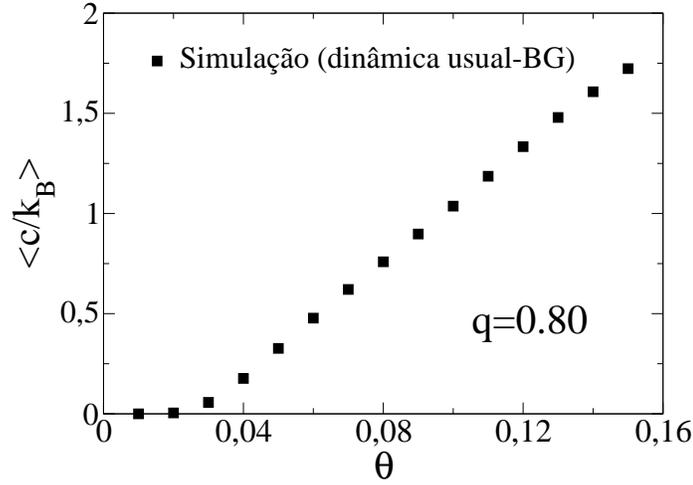


Figura 4.19: Calor específico médio por partícula versus temperatura  $\theta$  para o  $q$ -gás com  $q = 0.80$ . Nas simulações foram utilizadas  $N = 10^6$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as amostras. A média foi realizada entre os tempos  $t_1 = 200$  até  $t_2 = 400$  para garantir que a mesma fosse realizada dentro do EQE. Um resultado similar é obtido para outros valores do parâmetro  $q$ .

sendo  $\beta = (k_B T)^{-1}$  e  $\beta_q \equiv \beta \varepsilon^*$ , em que mantemos o apóstrofo para lembrar que tais propriedades foram calculadas utilizando a função de partição regularizada  $Z'$ .

Antes de compararmos estes resultados com os resultados mostrados na figura 4.18 e 4.19, observamos que usamos a mesma forma de calcular a energia interna por partícula (4.22) e o calor específico por partícula (4.23) como no formalismo de BG. Entretanto, vimos que a função de partição regularizada, eq.(4.10), é dada por:

$$Z' = \sum_{n=0}^{\infty} [\exp(-\beta \varepsilon_n) - \exp(-\beta \varepsilon^*)] \quad (4.24)$$

e portanto, a energia média por partícula pode ser calculada por:

$$\bar{u} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{Z'} [\exp(-\beta \varepsilon_n) - \exp(-\beta \varepsilon^*)] \varepsilon_n \quad (4.25)$$

que, como vemos facilmente, é diferente da expressão  $u' = -\partial \ln Z' / \partial \beta$  (4.22). Apesar disto podemos ver na figura 4.20 que a energia interna  $u'$  (círculos preenchidos) (4.22) e a energia média  $\bar{u}$  (linha sólida) (4.25) para  $q = 0.60$  coincidem para temperaturas

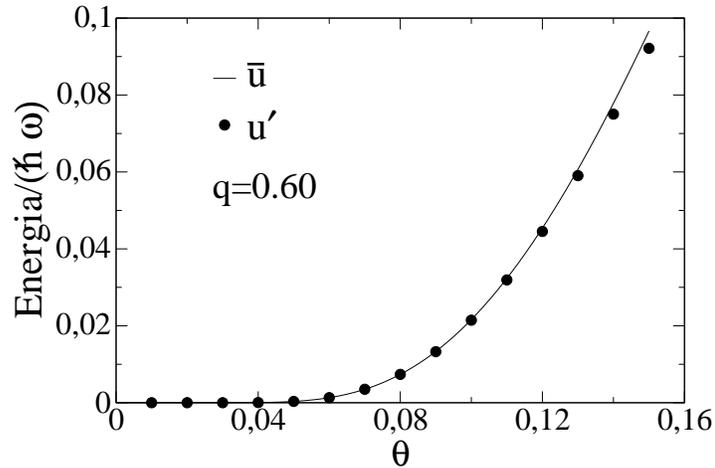


Figura 4.20: Energia interna por partícula do  $q$ -gás ( $q = 0.60$ ) calculada analiticamente  $\bar{u}$  (círculos preenchidos) e numericamente  $u'$  (linha sólida) pelo formalismo modificado em função da temperatura. Podemos ver que para temperaturas até  $\theta = 0.12$  os dois procedimentos produzem o mesmo resultado. Como o EQE surge para temperaturas em torno de  $\theta = 0.10$ , este pode ser descrito pelo formalismo modificado utilizando o cálculo da energia interna por partícula  $u'$ .

menores que  $\theta = 0.12$ . Como o EQE surge para temperaturas em torno de  $\theta = 0.10$  podemos utilizar a relação (4.22) já que a mesma reproduz completamente o cálculo (4.25). As duas relações, dadas pelas eqs.(4.22,4.25), são, portanto, equivalentes para baixas temperaturas ( $\theta \leq 0.10$ ).

Na figura 4.21 esboçamos a energia interna por partícula calculada pela expressão analítica dada pela eq.(4.22) e comparamos com o resultados das simulações numéricas, sendo a média nas simulações calculadas no EQE para  $q = 0.80$ , no intervalo de tempo  $t_1 = 200$  até  $t_2 = 400$  utilizando a dinâmica usual, sobre  $N = 10^6$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as amostras. Podemos ver que o formalismo modificado fornece, com boa precisão, a energia média do EQE que existe para temperaturas menores que  $\theta = 0.10$ . De fato, o erro relativo entre o resultado analítico e o medido nas simulações aumenta com o aumento da temperatura, assumindo valores de 0.0007 para  $\theta = 0.09$ , 0.017 para  $\theta = 0.10$  e 0.03175 para  $\theta = 0.11$ .

Na figura 4.22 esboçamos a mesma comparação realizada na figura 4.21 mas

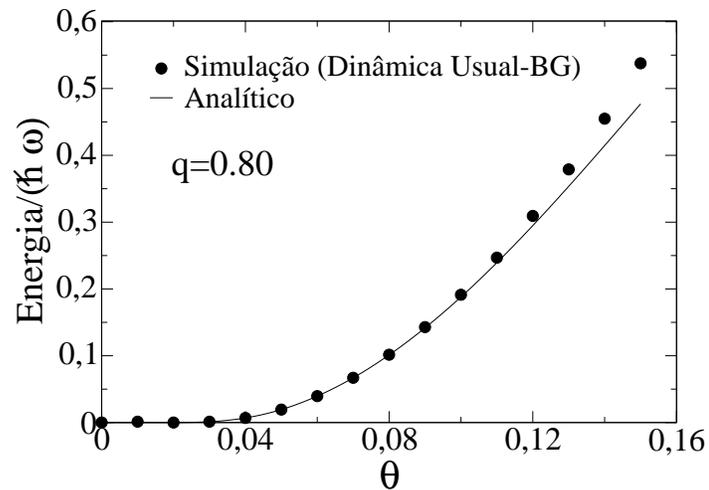


Figura 4.21: Comparação entre a energia interna por partícula calculada analiticamente pelo formalismo modificado (linha sólida) e aquela calculada numericamente (círculos preenchidos), sendo  $q = 0.80$  e a média na simulação realizada no intervalo  $t_1 = 200$  até  $t_2 = 400$  sobre  $N = 10^6$  amostras, com condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as amostras. Podemos observar que o formalismo modificado fornece com boa precisão a energia interna do sistema no EQE.

com  $q = 0.60$ . Podemos observar que a concordância entre o cálculo analítico e o obtido através das simulações diminui quando comparadas nas mesmas temperaturas com  $q = 0.80$ . De fato, o erro relativo assume valores 0.057 para  $\theta = 0.09$ , 0.095 para  $\theta = 0.10$  e 0.125 para  $\theta = 0.11$ .

Um cenário semelhante é encontrado para o calor específico. Na figura 4.23 são comparados o resultado obtido via o formalismo modificado e o resultado das simulações computacionais, sendo que os erros relativos assumem os valores 0.029 para  $\theta = 0.09$ , 0.051 para  $\theta = 0.10$  e 0.092 para  $\theta = 0.11$ .

Concluindo, vimos que o formalismo modificado obtido a partir da função de partição regularizada  $Z'$  descreve com boa precisão as quantidades físicas médias como energia e calor específico por partícula do  $q$ -gás no EQE. O intervalo de temperaturas que produz uma boa concordância diminui para valores menores do parâmetro  $q$ . Para cada parâmetro  $q$ , os erros associados em cada temperatura podem ser diminuídos com o aumento do número de amostras  $N$ , o que exige um esforço computacional maior.

Como veremos no capítulo 5, quando estudarmos o átomo de hidrogênio, o

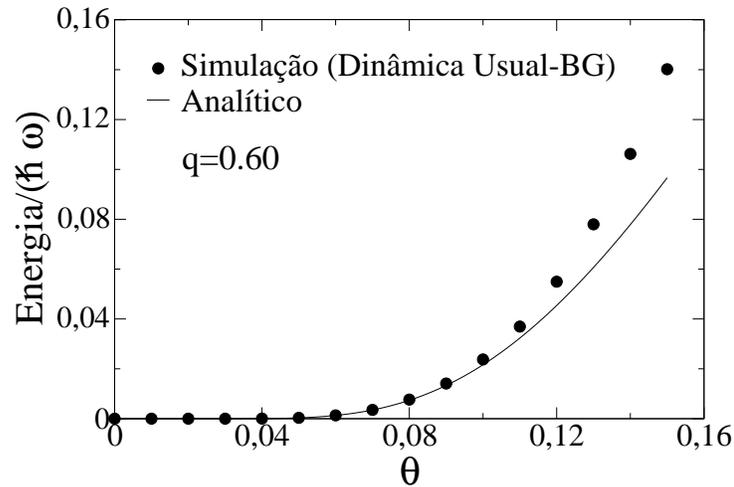


Figura 4.22: Comparação entre a energia interna por partícula calculada analiticamente pelo formalismo modificado (linha sólida) e aquela calculada numericamente (círculos preenchidos), sendo  $q = 0.80$ . A média na simulação foi realizada no intervalo  $t_1 = 200$  até  $t_2 = 400$  sobre  $N = 10^6$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as amostras. Podemos notar que a concordância entre os dois procedimentos diminui quando comparamos as mesmas temperaturas com o caso  $q = 0.80$ .

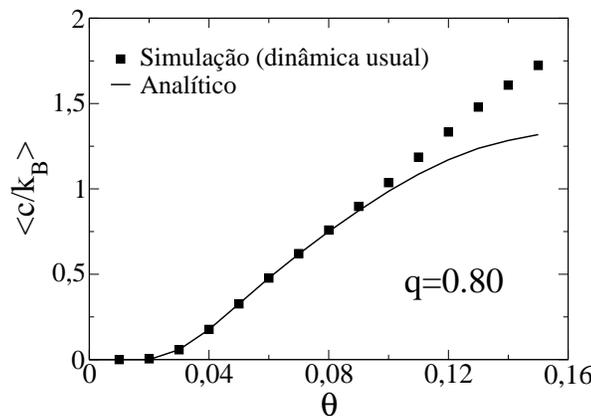


Figura 4.23: O calor específico por partícula versus temperatura  $\theta$  para o  $q$ -gás com  $q = 0.80$  é comparado com o calor específico médio calculada através da simulação. Nas simulações foram utilizadas  $N = 10^6$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as amostras. A média foi realizada entre os tempos  $t_1 = 200$  até  $t_2 = 400$  para garantir que a mesma fosse realizada dentro do EQE. Resultados similares são obtidos para outros valores do parâmetro  $q$  e os erros relativos estão na ordem daqueles obtidos para a energia média.

tempo de duração do EQE pode ser muito grande e, assim, podemos considerar o EQE como um estado de equilíbrio efetivo em que as suas propriedades “quase-termodinâmicas” podem ser obtidas via a função de partição regularizada.

# Capítulo 5

## Gás ideal de átomos de hidrogênio

Neste capítulo iniciaremos o estudo do átomo de hidrogênio que é um dos sistemas de partículas ligadas mais simples. Não obstante ser um dos mais simples, este é o mais importante de um ponto de vista histórico, pois foi o primeiro sistema que Schroedinger tratou com sua teoria de mecânica quântica, abrindo as portas para os tratamentos de sistemas como moléculas e núcleos [95]. Ironicamente, os livros textos de mecânica estatística quase nunca <sup>1</sup> calculam as propriedades de equilíbrio do hidrogênio. Esta dificuldade existe devido ao fato de que a função de partição no formalismo de Boltzmann-Gibbs (BG) é divergente e como consequência o sistema sempre se ioniza para qualquer temperatura finita [41]. Por simplicidade estudaremos o átomo de hidrogênio sem considerar a estrutura fina (interação spin-órbita) e a degenerescência no seu espectro de energia.

Como feito para o gás ideal de  $q$ -osciladores no capítulo 5, estudaremos o gás ideal de átomos de hidrogênio via simulação computacional utilizando o MMC.

Veremos que o átomo de hidrogênio permanece em um *Estado de Quase-Equilíbrio* (EQE) antes de alcançar o estado de ionização. Analisando tal EQE poderemos prever algumas quantidades físicas médias para o gás como energia e calor específico. Analogamente ao  $q$ -oscilador, mostraremos que a duração do EQE segue uma lei de Arrhenius com a temperatura, e que a taxa de crescimento é a mesma do  $q$ -oscilador para o parâmetro  $q = 0.25$ . Gostaríamos de frisar que o resultado analítico

---

<sup>1</sup>para uma exceção ver [91].

que apresentaremos, só deve valer até temperaturas de aproximadamente  $10^4 K$  (6% da energia de ionização) e se estende, qualitativamente, a qualquer partícula composta que possua um espectro de energia limitado superiormente com infinitos níveis de energia, tais como átomos e moléculas.

Proporemos também uma dinâmica do MMC não usual (dinâmica modificada) que surgirá de uma regularização da função de partição do átomo de hidrogênio. Esta dinâmica coincidirá com a dinâmica usual do MMC até 6% da energia de ionização ( $10^4 K$ ). Por fim, proporemos duas possíveis situações físicas nas quais o átomo de hidrogênio pode estar no EQE.

## 5.1 Equação de Schrödinger e o átomo de hidrogênio

Aqui abordaremos suscintamente o tratamento da mecânica quântica de Schrödinger para o átomo de hidrogênio, de maneira a obter quantidades prevista por este formalismo, as quais serão utilizadas e analisadas nas seções futuras.

O átomo de hidrogênio consiste de um núcleo carregado positivamente e um elétron carregado negativamente ligados pela atração Coulombiana mútua. Consideraremos [95] assim um elétron de massa reduzida  $\mu$  que se move sob a ação do potencial Coulombiano:

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (5.1)$$

sendo  $-e$  a carga do elétron e  $r$  a distância que separa o núcleo, fixo, do elétron.

Utilizando a técnica de separação de variáveis, podemos encontrar as soluções aceitáveis para o estado ligado da equação de Schrödinger para o potencial (5.1) como:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi) \quad (5.2)$$

sendo  $Y_l^m(\theta, \phi)$  os harmônicos esféricos, enquanto que a solução radial é dada por:

$$R_{nl}(r) = \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) \left(\frac{r}{a_0}\right)^l G_{nl}\left(\frac{r}{a_0}\right) \quad (5.3)$$

em que  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$  e  $G_{nl}(\frac{r}{a_0})$  são os polinômios de Laguerre [44], sendo que os números quânticos devem satisfazer às seguintes condições:

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.4)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1 \quad (5.5)$$

$$m = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, +l - 1, l \quad , \quad (5.6)$$

para que as soluções sejam fisicamente aceitáveis.

A energia do estado  $\psi_{nlm}$  é:

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \quad (5.7)$$

sendo  $n$  dado por (5.4); ou seja, a energia permitida para o átomo de hidrogênio, bem como para qualquer outro sistema ligado, é quantizada com valores discretos. As eqs.(5.4-5.6) mostram que para um mesmo valor de  $n$  existem geralmente valores diferentes para  $l$  e  $m$ . Como as autofunções (5.2) dependem dos três números quânticos, podemos ver [95] que para cada nível de energia  $E_n$  teremos  $n^2$  autofunções diferentes, i. e. teremos estados degenerados.

Estudando as formas das funções distribuições de probabilidades podemos obter informações adicionais sobre o átomo de hidrogênio, como por exemplo, o valor esperado da coordenada radial do elétron que caracteriza o raio da subcamada  $(n, l)$ , dado por:

$$\bar{r}_{nl} = \frac{a_0}{2} (3n^2 - l(l+1)), \quad (5.8)$$

que, diferente da energia  $E_n$ , eq.(5.7), depende dos números quânticos  $n$  e  $l$ . Notamos também das eqs.(5.4-5.6) que para um dado valor de  $n$  temos  $n$  subcamadas (referente aos  $n$  valores possíveis de  $l$ ) com o mesmo valor de energia  $E_n$ ; este resultado mostra que o elétron pode se encontrar em subcamadas mais afastadas (subcamadas mais externas) do núcleo,  $l = 0$ , entretanto possuir a mesma energia,  $E_n$  (5.7), que as outras subcamadas que possuem o mesmo número quântico  $n$  mas diferentes valores

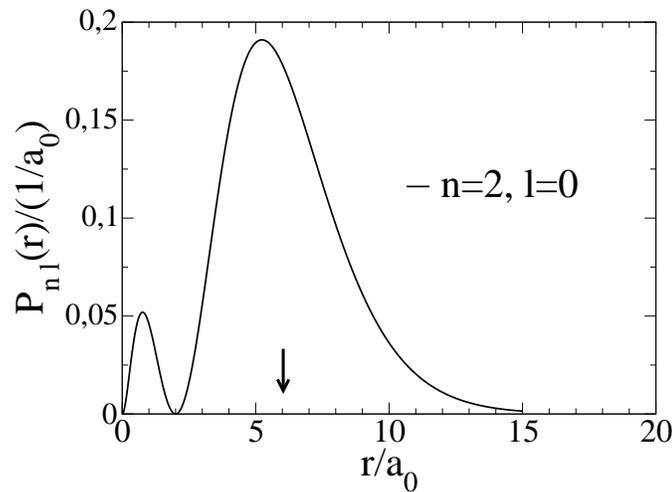


Figura 5.1: Probabilidade radial  $P_{nl}(r)/(1/a_0)$  versus  $r/a_0$  para o elétron no átomo de hidrogênio para  $n = 2$  e  $l = 0$ . A seta indica o valor esperado da coordenada radial  $\bar{r}_{nl}$  do elétron.

de  $l$ . Este resultado pode ser visto [95] se representarmos graficamente  $P_{nl}(r)/(1/a_0)$  versus  $\bar{r}_{nl}/(1/a_0)$ , em que  $P_{nl}(r)$  é a densidade de probabilidade radial dada por [95]:

$$P_{nl}(r) = R_{nl}^*(r)R_{nl}(r)r^2. \quad (5.9)$$

Nas figuras 5.1 e 5.2 exibimos a densidade de probabilidade  $P_{nl}(r)/(1/a_0)$  (5.9) para  $n = 2$ ,  $l = 0$  e  $l = 1$ . Podemos ver que o raio médio, indicado pela seta, é maior quanto menor for o valor de  $l$ , indicando assim que o elétron se encontra mais afastado da origem (núcleo). De fato,  $\bar{r}_{nl}$  depende fundamentalmente mais de  $n$  do que de  $l$ , como podemos observar comparando as figuras 5.1 ( $n = 2$  e  $l = 0$ ) e 6.3 ( $n = 1$  e  $l = 0$ ).

Portanto, este resultado para o raio médio em função de  $n$  e  $l$  dada pela eq.(5.8) nos diz que o elétron pode se encontrar em subcamadas mais distante do núcleo e possuir a mesma energia das subcamadas que possuem o mesmo número quântico  $n$  mas um número quântico  $l$  maior; ou seja, ele pode sofrer transições para subcamadas mais externa sem que mude a sua energia.

Na próxima seção mostraremos a dificuldade em obter as propriedades termodinâmicas do átomo de hidrogênio não ionizado.

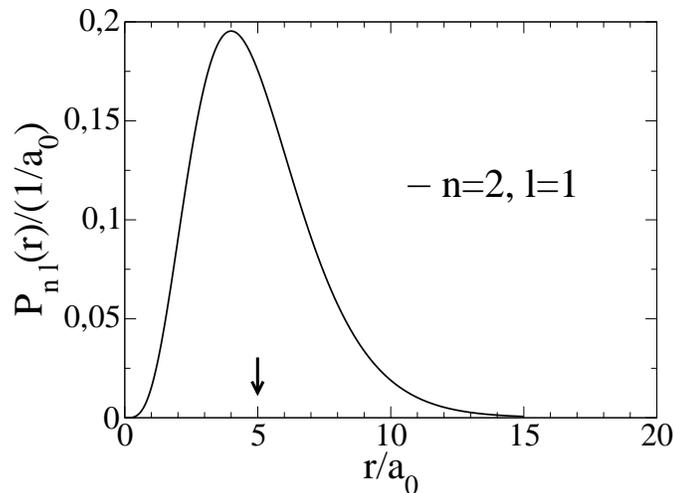


Figura 5.2: Probabilidade radial  $P_{n,l}(r)/(1/a_0)$  versus  $r/a_0$  para o elétron no átomo de hidrogênio para  $n = 2$  e  $l = 1$ . A seta indica o valor esperado da coordenada radial do elétron. Podemos observar que o valor esperado  $\bar{r}_{2,1}$  é menor do que  $\bar{r}_{2,0}$  mostrado na figura 5.1. Apesar disto, a energia do sistema  $E_n$  nestas duas subcamadas (5.7) é a mesma pois possuem o mesmo número quântico  $n$ .

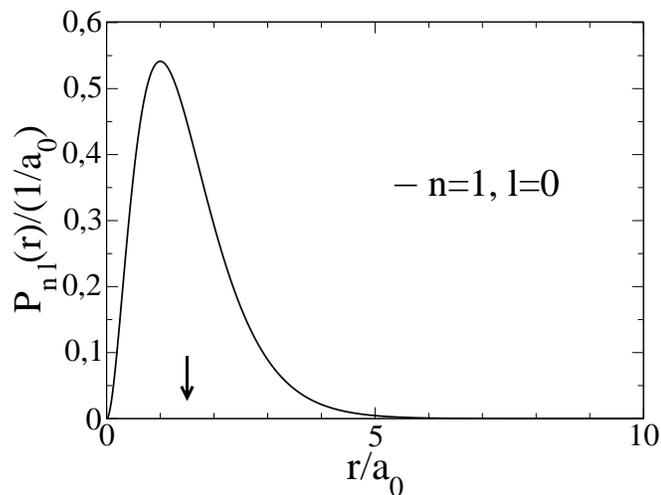


Figura 5.3: Probabilidade radial  $P_{n,l}(r)/(1/a_0)$  versus  $r/a_0$  para o elétron no átomo de hidrogênio para  $n = 1$  e  $l = 0$ . A seta indica o valor esperado  $\bar{r}_{n,l}$  do coordenada radial do elétron. Este resultado, quando comparado com o mostrado na figura 5.1 mostra que  $\bar{r}_{n,l}$  depende mais fortemente de  $n$  do que de  $l$ .

## 5.2 Divergência e regularização da função de partição

Nesta seção estaremos interessados em mostrar, concomitantemente, a divergência e a regularização da função de partição do átomo de hidrogênio. Para isto, consideramos o seu espectro dado por (5.7):  $E_n = -13.6 eV/n^2$  com  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Colocando, por conveniência, o estado fundamental  $n = 1$  com energia nula, i.e.  $E_1 = 0$ , o seu espectro fica escrito como:

$$E_n = R \left( 1 - \frac{1}{n^2} \right), n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.10)$$

sendo  $R$  a constante de Rydberg ( $R = 13.6 eV$ , que corresponde a uma temperatura de  $(R/k_B) = 1,579 \times 10^5 K$ ). A função de partição no formalismo de BG, considerando os níveis não degenerados, é dada por:

$$Z_{BG} = \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\beta E_n) = \exp(-\beta R) \sum_{n=1}^{\infty} \exp(\beta R/n^2) \quad (5.11)$$

sendo  $\beta = 1/k_B T$ . É importante lembrar que o espectro acima possui uma degenerescência  $g(n) = n^2$  para cada nível  $n$ . Entretanto, na análise que realizaremos, apenas os níveis de energias mais baixos contribuirão significativamente de maneira que os efeitos da degenerescência não afetarão qualitativamente nossos resultados. Conseqüentemente, trabalharemos com  $g(n) = 1$ , por simplicidade.

A eq.(5.11) pode ser escrita na forma:

$$Z_{BG} = \exp(-\beta R) \lim_{n^* \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{n^*} \exp(\beta R/n^2). \quad (5.12)$$

Manipulando o termo exponencial, podemos reescrever a equação acima da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \exp(\beta R) Z_{BG} &= \lim_{n^* \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{n^*} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\beta R)^k}{k!} \frac{1}{n^{2k}} \\ &= \lim_{n^* \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{n^*} \left[ 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\beta R)^k}{k!} \frac{1}{n^{2k}} \right] \end{aligned}$$

$$= \lim_{n^* \rightarrow \infty} \left[ n^* + \sum_{k=1}^{\infty} H_{n^*, 2k} \frac{(\beta R)^k}{k!} \right] \quad (5.13)$$

em que  $H_{n^*, 2k} = \sum_{n=1}^{n^*} 1/n^{2k}$  é o número harmônico de ordem  $2k$  [96]. Os limites  $n^* \rightarrow \infty$  dos números harmônicos são bem definidos, produzindo coeficientes finitos,  $B_{2k} = \lim_{n^* \rightarrow \infty} H_{n^*, 2k}$  (por exemplo,  $B_2 = \pi^2/6$ ,  $B_4 = \pi^4/90$ ,  $B_6 = \pi^6/945$ ), e convergem para 1 à medida que  $k$  cresce. Assim, a eq.(5.13) pode ser escrita da forma:

$$Z_{BG} = \exp(-\beta R) \left[ \lim_{n^* \rightarrow \infty} (n^*) + \sum_{k=1}^{\infty} B_{2k} \frac{(\beta R)^k}{k!} \right] \quad (5.14)$$

que mostra uma divergência linear com o número quântico  $n^*$ , que vem do termo  $k = 0$  da eq.(5.13).

Introduzimos a “função de partição regularizada” (modificada),  $Z'$ , passando o termo que produz a divergência em (5.14) para o lado esquerdo, da seguinte maneira:

$$Z' \equiv Z_{BG} - \lim_{n^* \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{n^*} \exp(-\beta R) = \exp(-\beta R) \sum_{k=1}^{\infty} B_{2k} \frac{(\beta R)^k}{k!}. \quad (5.15)$$

$Z'$  é finita e também pode ser escrita como:

$$Z' = \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\beta E_n) - \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\beta R) = \sum_{n=1}^{\infty} [\exp(-\beta E_n) - \exp(-\beta R)]. \quad (5.16)$$

Apesar da função de partição no formalismo de BG ser divergente, podemos efetuar o cálculo da energia interna por átomo de hidrogênio do gás ideal de hidrogênio em função da temperatura, usando a expressão  $u_{BG} = \lim_{n^* \rightarrow \infty} -\partial \ln(Z_{BG}^{n^*}) / \partial \beta$ , sendo  $Z_{BG}^{n^*} \equiv \sum_{n=1}^{n^*} \exp(-\beta \varepsilon_n)$ . Fazendo isto, obtemos o seguinte resultado para a energia média  $u_{BG}$  por átomo de hidrogênio:

$$u_{BG} = \begin{cases} 0 & \text{se } T = 0 \\ R & \text{se } T > 0 \end{cases}. \quad (5.17)$$

De fato, se  $T = 0$  o gás permanece no estado fundamental, energia média por partícula igual a zero, durante um intervalo de tempo infinito. Por outro lado, para qualquer

temperatura finita o sistema possui uma energia média por partícula igual a  $R$ , corroborando o fato de que ele sempre se ioniza (equilíbrio). Este resultado mostra que o átomo de hidrogênio nunca entra em equilíbrio termodinâmico e portanto usando o formalismo de BG não podemos extrair nenhuma informação (quantidades físicas médias) sobre o sistema já que tal formalismo é válido apenas no equilíbrio.

Como obtido para o  $q$ -oscilador, no formalismo de BG o átomo de hidrogênio sempre se ioniza para qualquer temperatura finita em decorrência da divergência da sua função de partição  $Z_{BG}$  oriunda da contribuição infinita do quase-contínuo de energia. A função de partição regularizada  $Z'$  por sua vez é obtida pela eliminação da contribuição  $\exp(-\beta R)$  de cada estado, dos infinitos, que formam o quase-contínuo de energia. Devido a esta eliminação, esperamos que a função de partição regularizada  $Z'$  descreva as propriedades do átomo de hidrogênio (sistema não ionizado) antes da ionização pois  $Z'$  esta não considera os estados (níveis) com energias próximos da ionização, os quais contribuiriam com o termo  $\exp(-\beta R)$ . Este formalismo será aplicado na seção 6.4 no qual também mostraremos que podemos também realizar uma regularização da função de partição se consideramos o espectro degenerado. Na próxima seção estudaremos um gás ideal de átomos de hidrogênio via simulação computacional utilizando o MMC.

### 5.3 O “experimento computacional” para o átomo de hidrogênio

Realizaremos nosso “experimento computacional” na tentativa de obter informações do gás ideal de átomos de hidrogênio antes dele se ionizar. Para isto utilizaremos o MMC discutido no capítulo 4. A dinâmica que utilizaremos terá a mesma forma da utilizada no caso do  $q$ -oscilador:

$$P_+ = c \exp\left[-\frac{\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n}{\theta}\right] \quad (5.18)$$

$$P_- = c \quad (5.19)$$

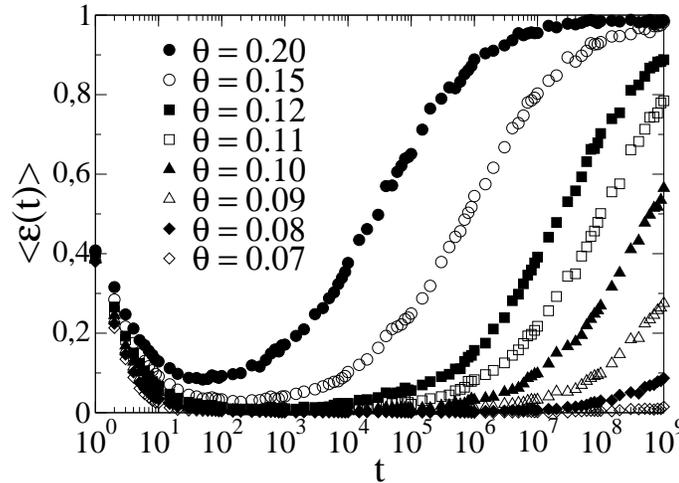


Figura 5.4: Energia média por átomo de hidrogênio  $\langle \varepsilon(t) \rangle$  em função do tempo  $t$ , para diferentes temperaturas  $\theta$ . A dinâmica proposta leva o sistema para energia média  $\langle \varepsilon^* \rangle = 1$  (ionização). Note que a energia média por átomo, para certas temperaturas, permanece durante um certo intervalo de tempo com um valor que varia lentamente, formando um patamar na energia sendo que tal patamar se torna mais evidente à medida em que a temperatura diminui, apresentando um resultado qualitativamente igual ao observado para o  $q$ -oscilador.

sendo  $0 < c < 1/2$ ,  $P_+$  a probabilidade de transição de  $n \rightarrow n + 1$ ,  $P_-$  a probabilidade de transição de  $n \rightarrow n - 1$ ,  $\theta = k_B T / R$  e  $\varepsilon_n = E_n / R$ .

Estamos utilizando uma dinâmica baseada em exponenciais e portanto a distribuição de probabilidade no equilíbrio será exponencial. Desde que esta dinâmica leva, depois de um certo tempo (suficiente para alcançar o equilíbrio) a um resultado dado pelo formalismo de BG, o nosso “experimento computacional” levará o sistema a ionização. Implementando as mesmas regras discutidas em 4.1.2 com a dinâmica acima, obtemos a energia média adimensional por átomo de hidrogênio <sup>2</sup>  $\langle \varepsilon(t) \rangle$  em função do tempo  $t$ , para diferentes temperaturas, como mostra a figura 5.4.

No resultado mostrado na figura 5.4, utilizamos  $c = 1/2$  (utilizado em todas simulações), sendo verificado que outras escolhas desta constante ( $0 < c < 1/2$ )

<sup>2</sup>de agora em diante nos referiremos à energia média adimensional como energia média, por simplicidade

não mudam quantitativa e qualitativamente nossos resultados. Para este resultado mostrado na figura 5.4, a média na energia foi realizada sobre  $N = 2.000$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 2$  (primeiro estado excitado) para todas as amostras; isto significa que em cada instante de tempo anotamos a energia de cada uma das amostras e realizamos uma média sobre o número de amostras total.

Note que para qualquer temperatura finita o sistema tende a aumentar a energia média por átomo para o valor da energia de ionização  $\langle \varepsilon^* \rangle = 1$  após um certo tempo, refletindo o fato de que o átomo de hidrogênio sempre se ioniza para qualquer temperatura finita. Antes de alcançar este estado de ionização, o resultado mostra que à medida em que a temperatura diminui forma-se um patamar caracterizado por uma lenta variação na energia média por átomo de hidrogênio fazendo surgir um *Estado de Quase-Equilíbrio* (EQE) que pode ter uma longa duração para valores de temperatura pequenos. Neste EQE o átomo sofre várias colisões com os outros átomos que compõem o gás ideal e o elétron ligado ao núcleo tende com o passar do tempo, a se afastar do núcleo (sofrendo transições entre estados eletrônicos), produzindo uma lenta variação na energia média do sistema (propriedades macroscópicas praticamente inalteradas) durante um certo tempo.

Este comportamento apresentado aqui para o átomo de hidrogênio é o mesmo apresentado para os  $q$ -osciladores, os quais fazem parte de uma família de sistemas que têm uma função de partição divergente pois apresentam espectros de energias limitados e com infinitos níveis de energia. Como podemos ver também na figura 5.5, o surgimento do EQE para o átomo de hidrogênio também independe da dinâmica escolhida, sendo que nesta figura comparamos a dinâmica de Metropolis (resultado da figura 5.4) e a dinâmica de Glauber (3.21,3.22). A simulação foi realizada com  $N = 2000$  amostras, com condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as amostras, sendo a temperatura  $\theta = 0.11$ . É importante lembrar que os conceitos básicos do Método de Monte Carlo (MMC) são os mesmos independente de qual dinâmica está sendo utilizada, Metropolis ou Glauber; escolher dinâmicas diferentes implica apenas em escolher probabilidades de transição diferentes.

Iniciaremos nosso estudo deste EQE analisando a distribuição dos níveis durante

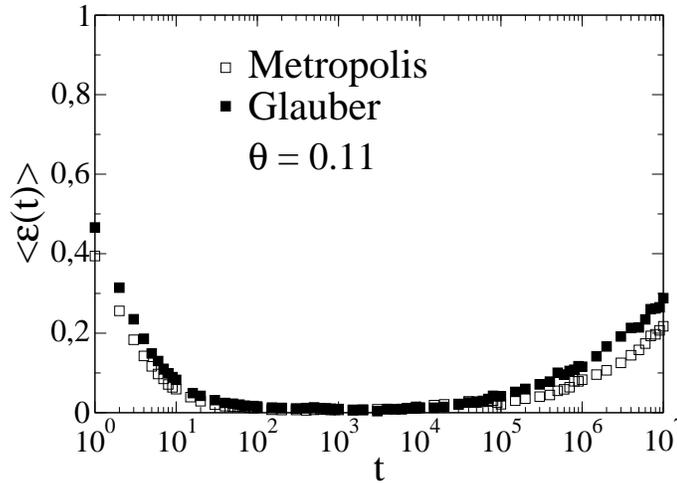


Figura 5.5: Comparação entre as dinâmicas de Glauber (quadrados preenchidos) e Metropolis (quadrados vazios) para a temperatura  $\theta = 0.11$  e condições iniciais  $n_0 = 2$  (primeiro excitado) para todas  $N = 2000$  amostras. Note que o comportamento da energia média por átomo de hidrogênio é semelhante para as duas dinâmicas, apresentando uma lenta variação antes de alcançar a energia de dissociação, reafirmando que tal comportamento é uma característica típica de sistema com infinitos níveis de energias limitados superiormente. Cenário semelhante foi encontrado para o  $q$ -oscilador com  $0 < q < 1$ .

o intervalo de tempo em que o sistema permanece em tal estado.

Na figura 5.6 exibimos em escala Log-Log, a distribuição de probabilidades  $P(n)$  dos níveis  $n$  do átomo de hidrogênio dentro do EQE. Estes resultados foram obtidos nos instantes de tempo  $t = 10^2, 10^3$  e  $10^4$ , sendo que as simulações foram realizadas com  $N = 10^8$  amostras, com a temperatura  $\theta = 0.07$  e inicialmente em  $n_0 = 1$  (estado fundamental). Podemos observar que os níveis com energia mais baixa (tipicamente até  $n = 10$ ) têm uma frequência de aparecimento muito grande em relação aos níveis mais excitados (tipicamente acima de  $n = 10$ ). Observamos que o estado fundamental  $n = 1$  possui uma contribuição dominante em relação aos outros níveis. No decorrer do tempo, os níveis mais excitados vão sendo visitados mas de uma maneira muito lenta, fazendo surgir o EQE.

Uma característica do comportamento da energia média por átomo de hidrogênio mostrada na figura 5.4 é que existem dois instantes de tempo nos quais o átomo

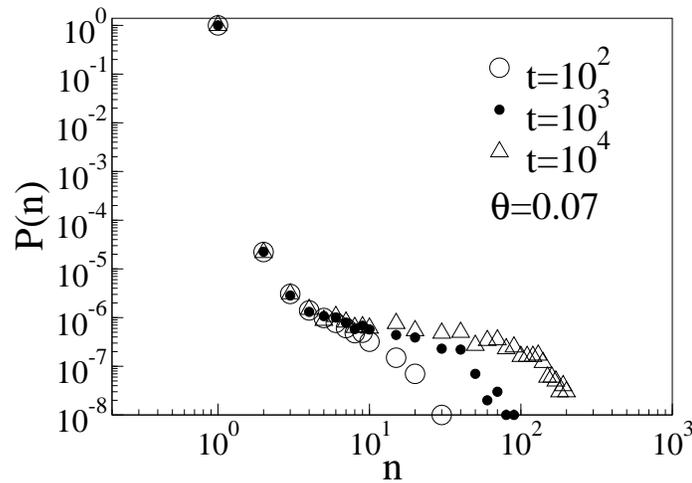


Figura 5.6: Distribuição de probabilidade para o átomo de hidrogênio dentro do EQE na escala Log x Log. Utilizamos  $N = 10^8$  amostras com a temperatura  $\theta = 0.07$  e todas as amostras inicialmente no estado fundamental ( $n_0 = 1$ ). Note que a probabilidade do átomo estar nos estados de mais baixa energia praticamente não varia durante o intervalo de tempo ( $10^2, 10^4$ ). Os níveis mais excitados vão sendo ocupados de maneira a produzir a lenta variação da energia média mostrada na figura 5.4. Por conveniência deslocamos o eixo  $n = 1$ .

de hidrogênio possui o mesmo valor para a energia média. Por exemplo, para a temperatura  $\theta = 0.15$ , nos instantes  $t = 10$  e  $t = 10^4$  o sistema possui o mesmo valor da energia média. Entretanto, a figura 5.7 nos mostra que nestes dois instantes de tempo as distribuições dos níveis são completamente diferentes. O resultado mostrado nesta figura foi obtido realizando simulações com  $N = 10^6$  amostras inicialmente em  $n_0 = 2$  com a temperatura  $\theta = 0.15$ , sendo analisadas as distribuições nos instantes  $t = 10$  e  $t = 10^4$ . Esse mesmo comportamento foi observado para o  $q$ -oscilador ( $q = 0.25$ ) na figura 4.14 .

Uma vez que durante um certo intervalo de tempo o átomo de hidrogênio vive em um estado caracterizado por uma dinâmica lenta em direção à ionização cujas propriedades são análogas a de um sistema em equilíbrio, devemos ser capazes de caracterizar mais concretamente que este estado não corresponde ao verdadeiro estado de equilíbrio termodinâmico.

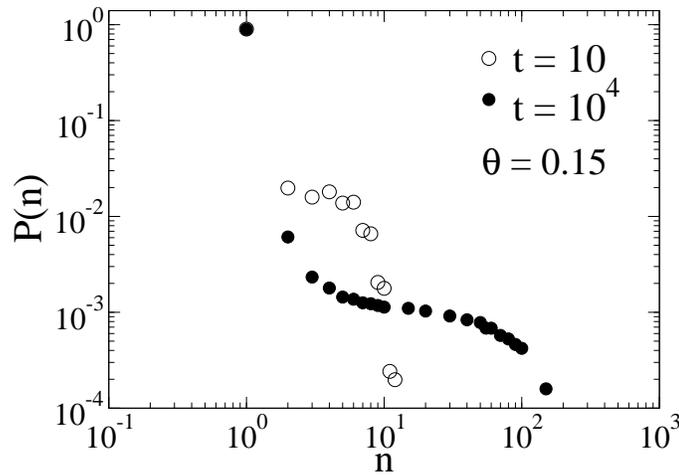


Figura 5.7: Na escala Log-Log exibimos a distribuição de probabilidade do níveis de energias  $P(n)$  versus  $n$  para o átomo de hidrogênio para dois instantes de tempo  $t = 10$  e  $t = 10^4$ . Nas nossas simulações foram utilizadas  $N = 10^5$  amostras, todas inicialmente em  $n_0 = 2$  e com a temperatura  $\theta = 0.15$ . Note, figura 5.4, que o sistema apresenta energias com valores bem próximas para  $t = 10$  e  $t = 10^4$ , mas apresenta distribuições bem distintas. Por conveniência deslocamos o eixo  $n = 1$ .

Para isto, verificamos o fenômeno de envelhecimento (*aging*) como discutido no capítulo 5 para o  $q$ -oscilador. Para observarmos este efeito de envelhecimento devemos medir a função de autocorrelação de dois-tempos:

$$C(t + t_w, t_w) = \frac{\langle \varepsilon(t + t_w)\varepsilon(t_w) \rangle - \langle \varepsilon(t + t_w) \rangle \langle \varepsilon(t_w) \rangle}{\sigma_{t+t_w}\sigma_{t_w}} \quad (5.20)$$

sendo  $t_w$  o tempo de espera (*waiting time*),  $\langle \dots \rangle$  é a média sobre amostras e

$$\sigma_t^2 = \langle \varepsilon(t)^2 \rangle - \langle \varepsilon(t) \rangle^2 \quad (5.21)$$

é a variância da energia  $\varepsilon(t) \equiv E(t)/R$ .

Calculamos a função de correlação para o gás ideal de átomos de hidrogênio na temperatura  $\theta = 0.08$  com diferentes  $t_w$ , como mostra a figura 5.8. As condições iniciais são as mesmas da figura 5.4, com as médias sobre  $N = 350000$  amostras. Os  $t_w$  escolhidos foram tais que a função de correlação foi avaliada com o sistema no EQE (tipicamente dentro do intervalo  $10^2$  a  $10^8$  como mostra a figura 5.4).

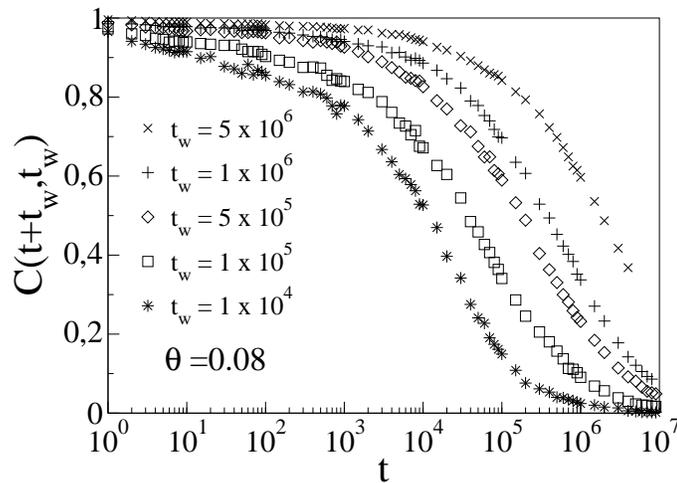


Figura 5.8: Função de autocorrelação  $C(t+t_w, t_w)$  em função do tempo  $t$  para o gás ideal de átomos de hidrogênio para a temperatura  $\theta = 0.08$  e para diferentes tempos de espera  $t_w$ . Claramente a função de autocorrelação depende do tempo de espera  $t_w$ , mostrando a assinatura de que o sistema de fato está fora do equilíbrio.

Claramente existe uma dependência com o tempo de espera  $t_w$  mostrando que o sistema está envelhecendo enquanto permanece no EQE.

Uma vez observado e caracterizado este EQE, calcularemos a energia média e o calor específico para o gás ideal de átomos de hidrogênio, por átomo de hidrogênio, em função da temperatura, enquanto ele permanece neste estado.

O resultado para a energia média em  $eV \times 10^{-3}$  (mili-elétron volts) versus a temperatura em  $K \times 10^3$  (quilo Kelvin) é exibido na figura 5.9, sendo as médias realizadas no intervalo de tempo de  $t = 200$  a  $t = 400$  utilizando  $N = 10^6$  amostras, todas inicialmente no estado fundamental ( $n_0 = 1$ ). No gráfico interno exibimos uma ampliação dos resultados no intervalo  $T = 0K$  até  $T = 11000K$ .

Utilizando as mesmas condições computacionais, obtemos o calor específico por átomo de hidrogênio; o resultado é mostrado na figura 5.10 no qual exibimos uma ampliação dos resultados, gráfico interno, no intervalo  $T = 0K$  até  $T = 11000K$ .

Na próxima seção estaremos focando nossos esforços em obter informações sobre o átomo de hidrogênio via o formalismo modificado.

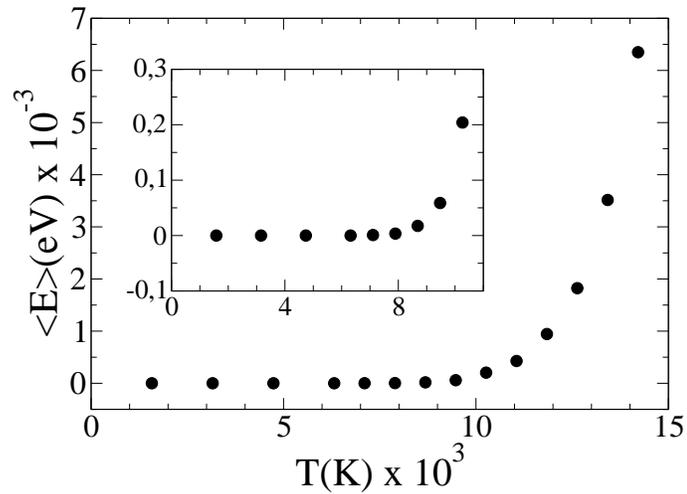


Figura 5.9: Energia média (em  $eV \times 10^{-3}$ ) (mili-elétron volts) por átomo de hidrogênio do gás ideal de átomos de hidrogênio em função da temperatura em  $K \times 10^3$  (quilo Kelvin) calculada dentro do EQE. As simulações foram realizadas  $N = 10^6$  amostras com todas inicialmente no estado fundamental  $n_0 = 1$  e a média sendo calculada no intervalo de tempo  $(200, 400)$ . O gráfico interno mostra uma ampliação dos resultados no intervalo  $T = 0K$  até  $T = 11000K$ .

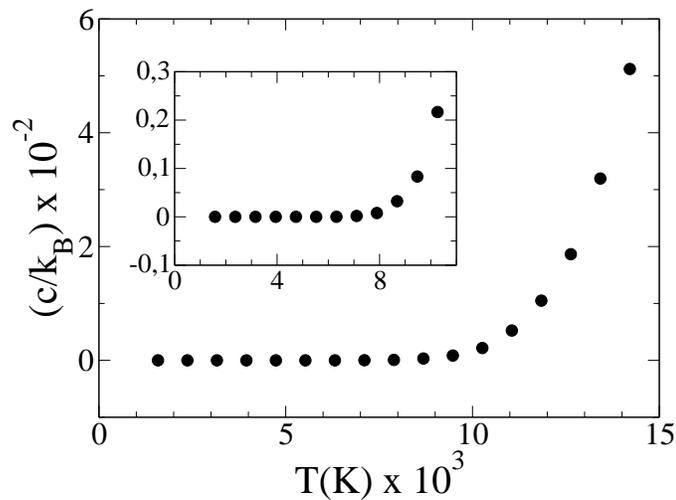


Figura 5.10: Calor específico médio por átomo de hidrogênio em função da temperatura calculada dentro do EQE. As condições das simulações foram as mesmas utilizadas na figura 5.10. O gráfico interno mostra uma ampliação dos resultados no intervalo  $t = 0K$  até  $T = 11000K$ .

## 5.4 Propriedades termodinâmicas via o formalismo modificado

Nesta seção propomos uma dinâmica modificada, baseada na função de partição regularizada  $Z'$ , eq.(5.15), obtida na seção 6.2 . Esperamos que os resultados obtidos com esta dinâmica modificada coincidam com aqueles da dinâmica usual, já que a função de partição regularizada  $Z'$  leva em consideração apenas os estados ligados do átomo de hidrogênio.

O peso estatístico associado à função de partição regularizada  $Z'$  (5.15) é dado por:

$$P'_\beta(n) = \frac{[\exp(-\beta E_n) - \exp(-\beta R)]}{Z'} \quad (5.22)$$

Assim, propomos a dinâmica modificada com as seguintes probabilidades de transição:

$$P_+ = c \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon_{n+1}}{\theta}\right) - \exp\left(-\frac{R}{\theta}\right)}{\exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{\theta}\right) - \exp\left(-\frac{R}{\theta}\right)} \quad (5.23)$$

$$P_- = c \quad (5.24)$$

sendo  $0 < c < 1/2$ ,  $P_+$  a probabilidade de transição de  $n \rightarrow n+1$ ,  $P_-$  a probabilidade de transição de  $n \rightarrow n-1$ ,  $\theta = (k_B T/R)$  e  $\varepsilon_n = (E_n/R)$ . É importante dizer que esta dinâmica modificada também satisfaz à condição de balanço detalhado.

Fazendo a mesma implementação computacional feita para a dinâmica anterior obtemos a energia média por átomo de hidrogênio em função do tempo como mostra a figura 5.11, sendo que nas simulações utilizamos  $N = 2000$  amostras inicialmente em  $n_0 = 2$  para as temperaturas  $\theta = 0.12$  e  $\theta = 0.07$ .

Note que o fato desta dinâmica modificada ser construída com um peso estatístico que possui uma função de partição finita, faz com que o sistema alcance um estado de equilíbrio diferente daquele estado de ionização.

Na figura 5.12 comparamos o resultado obtido com a dinâmica modificada com o resultado obtido com a dinâmica usual. Em relação à dinâmica modificada,

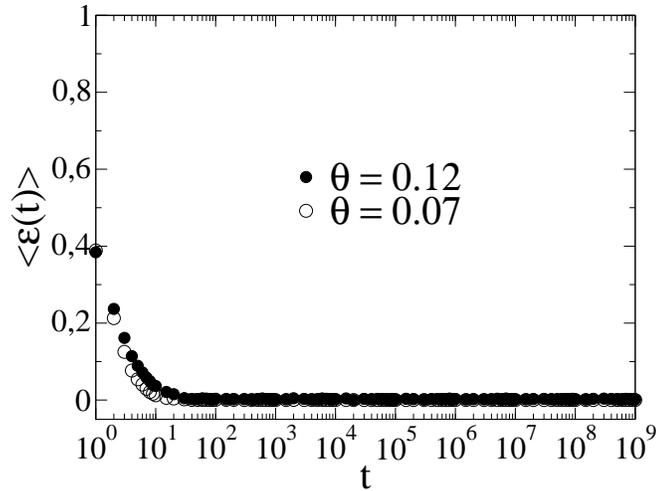


Figura 5.11: Energia média adimensional por átomo de hidrogênio  $\langle \varepsilon(t) \rangle$  em função do tempo  $t$  para o gás ideal de átomos de hidrogênio utilizando a dinâmica modificada. As simulações foram realizadas para duas temperaturas  $\theta = 0.12$  (círculos preenchidos) e  $\theta = 0.07$  (círculos vazios) utilizando  $N = 2000$  amostras inicialmente no primeiro estado excitado  $n_0 = 2$ . Esta dinâmica modificada é baseada na função de partição regularizada  $Z'$  e portanto, a mesma previne o sistema da ionização.

que permanece com um valor de energia média constante, observamos que à medida em que a temperatura baixa, as duas dinâmicas possuem uma concordância melhor, persistindo durante um intervalo de tempo (dentro do EQE).

Assim se consideramos, para baixas temperaturas, o EQE como sendo um equilíbrio efetivo, podemos usar  $Z'$  de maneira a calcular as propriedades físicas médias para o gás ideal de átomos de hidrogênio. Dentro deste novo formalismo, tais quantidades médias podem ser dados por:

$$u' = -\partial \ln Z' / \partial \beta = R \left\{ 1 - \frac{\sum_{k=1}^{\infty} k (B_{2k}/k!) (\beta R)^{k-1}}{\sum_{k=1}^{\infty} (B_{2k}/k!) (\beta R)^k} \right\} \quad (5.25)$$

$$\frac{c'}{k_B} = \beta^2 \partial^2 u' / \partial \beta^2 = (\beta R)^2 \left\{ \frac{\sum_{k=1}^{\infty} k(k-1) (B_{2k}/k!) (\beta R)^{k-2}}{\sum_{k=1}^{\infty} (B_{2k}/k!) (\beta R)^k} - \frac{[\sum_{k=1}^{\infty} k (B_{2k}/k!) (\beta R)^{k-1}]^2}{\sum_{k=1}^{\infty} (B_{2k}/k!) (\beta R)^k} \right\}, \quad (5.26)$$

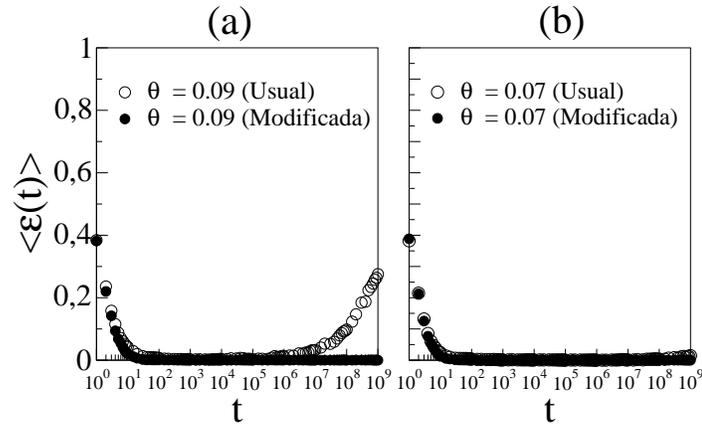


Figura 5.12: Energia média adimensional por átomo de hidrogênio  $\langle \varepsilon(t) \rangle$  em função do tempo  $t$ , para as dinâmicas usual (círculos vazios) e modificada (círculos preenchidos). As simulações foram realizadas para duas temperaturas diferentes (a)  $\theta = 0.09$  e (b)  $\theta = 0.07$ . Note que o tempo de duração do EQE aumenta à medida em que a temperatura diminui.

sendo  $u'$  e  $c'$  a “energia interna” e o “calor específico” por átomo de hidrogênio do gás. Por simplicidade e analogia, chamaremos estas grandezas de energia e calor específico, apesar das mesmas não terem sido calculadas em um estado de equilíbrio. Mantivemos o apóstrofo para lembrar que tais propriedades foram calculadas utilizando a função de partição regularizada  $Z'$ .

Na figura 5.13 esboçamos a energia interna por partícula calculada da expressão analítica (5.25) e comparamos com o resultado das simulações numéricas, sendo que a média na energia interna foi calculada, no EQE, no intervalo de tempo  $t_1 = 200$  até  $t_2 = 400$  utilizando a dinâmica usual, sobre  $N = 10^6$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as amostras.

Nós observamos uma boa concordância entre os dois resultados até  $10^4 K$ . De fato, a discrepância relativa entre estes dois procedimentos aumenta à medida que a temperatura aumenta, assumindo valores de 0.004 para  $\theta = 0.05$  ( $T \approx 7895K$ ) e 0.282 para  $\theta = 0.06$  ( $T \approx 9474K$ ). Este mesmo comportamento e discrepâncias relativas (em mesma ordem de magnitude) se verificam também no calor específico por átomo de hidrogênio, exibido na figura 5.14.

Para o intervalo de temperatura em que encontramos uma boa concordância

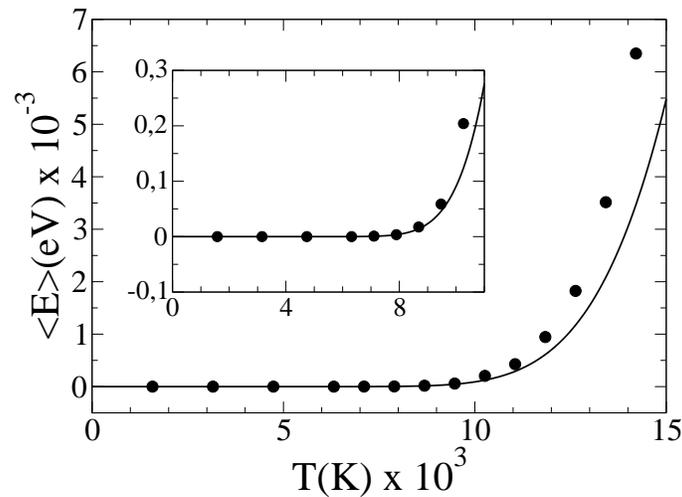


Figura 5.13: Energia interna por átomo de hidrogênio calculada até  $T = 15000K$ , por dois diferentes métodos: (i) o formalismo da função de partição regularizada (linha contínua) (ii) simulação de Monte Carlo (pontos) usando pesos de Boltzmann-Gibbs. O gráfico interno mostra uma ampliação destes resultados no intervalo de  $T = 0K$  a  $T = 11000K$ .

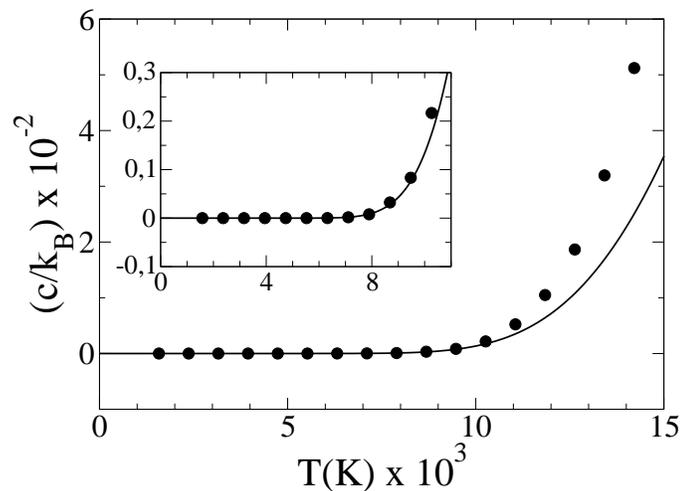


Figura 5.14: Calor específico por átomo de hidrogênio é calculada até  $T = 15000K$ , por dois diferentes métodos: (i) o formalismo da função de partição regularizada (linha contínua) (ii) simulação de Monte Carlo (pontos). O gráfico interno mostra uma ampliação destes resultados no intervalo de  $T = 0K$  a  $T = 11000K$ . Similar comportamento também é observado para a energia interna por átomo de hidrogênio.

entre os dois procedimentos (tipicamente de  $0K$  a  $10^4K$ ), o *Estado de Quase-Equilíbrio* pode ser considerado como um *Estado de Equilíbrio Efetivo*, e assim, podemos calcular as propriedades termodinâmicas do gás ideal de átomos de hidrogênio via a função de partição regularizada  $Z'$ . É importante frisar que o intervalo de temperaturas no qual o formalismo modificado, baseado na função de partição regularizada, pode ser aplicado a temperaturas bem acima da temperatura ambiente.

Por fim, mediremos o tempo de duração deste EQE,  $\tau(\theta)$ , como sendo o tempo durante o qual o sistema permanece neste estado com a dinâmica usual, de maneira que a diferença absoluta entre as energias médias por partícula obtidas pelas dinâmicas usual e modificada seja menor que  $\delta = 0.05$ . Assim, para as temperaturas  $\theta = 0.08, 0.09, 0.10, 0.11$  e  $0.12$ , realizamos simulações com  $N = 2000$  amostras, todas inicialmente em  $n_0 = 2$  (primeiro excitado). Como podemos observar na figura 5.15, nosso resultado se ajusta bem a uma lei exponencial:

$$\tau(\theta) \sim \exp(b/\theta) = \exp[bR/(k_B T)] \quad (5.27)$$

sendo  $b = 1.94 \pm 0.07$ . Este valor obtido para o coeficiente  $b$  coincide, dentro da barra de erro, com a média dos valores dos coeficientes medidos  $\overline{h(q)} = 2.00 \pm 0.07$  para o  $q$ -gás ideal ( $q \in (0.25, 0.80)$ ) exibidos na figura 4.11. Assim, vemos que em termos da temperatura  $\theta = k_B T/(E^*)$ , sendo  $E^* = \hbar\omega/(1-q)$  para o  $q$ -oscilador e  $E^* = R$  para o átomo de hidrogênio, a lei de crescimento possui a mesma taxa de crescimento para todos estes sistemas que possuem espectros de energias com infinitos níveis e limitados.

Observamos também para o  $q$ -oscilador que quando escrevemos a temperatura em relação a energia do primeiro estado excitado  $k_B T/E_1$ , sendo  $E_1 = \hbar\omega$ , a lei de crescimento fica escrita na forma (4.19):

$$\tau(q, \theta) \sim \exp[h'(q)/\theta_1] \quad (5.28)$$

sendo que  $h'(q) = h(q)E^* \cong 2E^*$  e  $\theta_1 = k_B T/(\hbar\omega)$ . Fazendo isto para a lei de

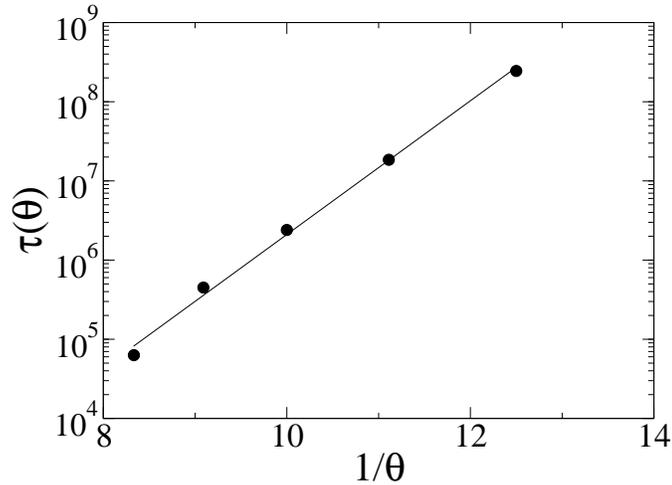


Figura 5.15: Dependência do tempo de duração do EQE para o gás ideal de átomos de hidrogênio versus o inverso da temperatura  $1/\theta$  ( $\theta \equiv k_B T/(R)$ ). O gráfico é exibido na escala Semi-Log e podemos ver que os dados (círculos preenchidos) se ajustam bem a uma lei exponencial em que a inclinação da linha sólida é  $b = 1.94 \pm 0.07$ . As simulações foram realizadas para  $N = 2000$  amostras com condições iniciais  $n_0 = 2$  e cinco diferentes temperaturas  $\theta$ . As barras de erro são da mesma ordem dos símbolos utilizados.

crescimento do EQE do átomo de hidrogênio, para o qual  $E_1 = 3R/4$ , obtemos:

$$\tau(\theta) \sim \exp [b'/\theta_1] \quad (5.29)$$

sendo  $b' \equiv 4b/3 = 2.59 \pm 0.09$  e  $\theta_1 = k_B T/(0.75R)$ . Na figura 5.16 exibimos  $b' = 4b/3$  e  $h'(q) = h(q)E^* \cong 2E^*$  (figura 4.11 e 4.12) versus  $E_1/E^*$ . Podemos observar que a relação  $E_1/E^* = 1 - q$  para o  $q$ -oscilador e para o átomo de hidrogênio  $E_1/E^* = 0.75$ . Assim, quando medimos a temperatura em relação ao primeiro nível excitado  $\theta_1 = k_B T/(0.75R)$ , observamos que o átomo de hidrogênio possui uma taxa de crescimento  $b' \equiv 4b/3 = 2.59 \pm 0.09$  que coincide, dentro da barra de erro, ao apresentado pelo  $q$ -oscilador com  $q = 0.25$ ,  $h'(0.25) = 2.75 \pm 0.08$ . Notamos que estes dois sistemas possuem um espectro de energia com uma característica em comum:  $E_1/E^* = 0.75$ . Este resultado sugere que uma grandeza importante é a energia do primeiro estado excitado  $E_1$  medido em relação a energia de ionização  $E^*$  de maneira que átomo de hidrogênio pode ter seu comportamento dinâmico imitado pelo  $q$ -oscilador com  $q = 0.25$ . De fato, como podemos observar na figura 5.17, quando

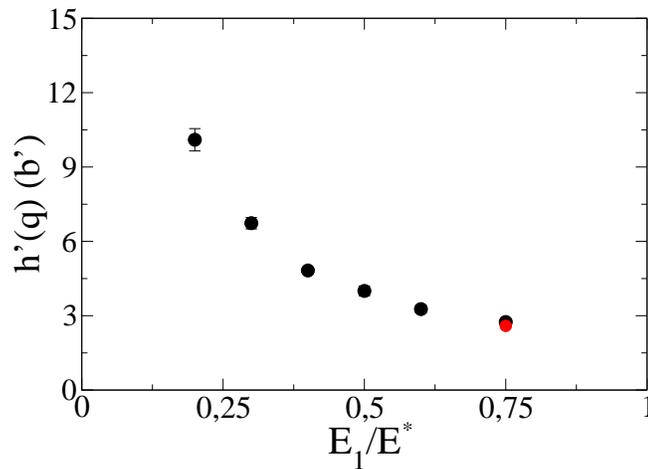


Figura 5.16: Dependência do coeficiente da lei de crescimento  $h'(q)$  para o  $q$ -oscilador (círculos preenchidos em preto) e  $b'$  para o átomo de hidrogênio (círculo preenchido em vermelho) do tempo de duração do EQE versus  $E_1/E^*$ . Podemos observar que na relação  $E_1/E^* = 1 - q$ , tanto para o  $q$ -oscilador quanto para o átomo de hidrogênio vale  $E_1/E^* = 0.75$ . Podemos observar também que o átomo de hidrogênio possui uma taxa de crescimento igual, dentro da barra de erro, ao apresentado pelo  $q$ -oscilador com  $q = 0.25$ .

representamos a energia média de cada sistema escalada pela energia de ionização, i.e.  $\langle \varepsilon(t) \rangle \equiv E(t)/E^*$ , sendo  $E^* = 4(\hbar\omega)/3 =$  para o  $q$ -oscilador ( $q=0.25$ ) e  $E^* = R$  para o átomo de hidrogênio, observamos um comportamento essencialmente idêntico entre os dois sistemas. Nesta figura exibimos duas temperaturas  $\theta = (k_B T)/E^*$  diferentes sendo as condições iniciais  $n_0 = 1$  para todas as  $N = 2.000$  amostras para ambos os sistemas. É importante frisar mais uma vez que uma característica em comum entre estes dois sistemas é que os dois possuem a mesma energia de separação entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, quando medidos em relação a energia de ionização, i.e.  $E_1/E^* = 0.75$ . Assim, o átomo de hidrogênio pode ter sua dinâmica imitada pelo  $q$ -oscilador ( $q = 0.25$ ).

Assim, da interpretação fenomenológica da Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG) em termos de partículas compostas, apresentada no capítulo 2, o gás ideal de átomos de hidrogênio corresponderia ao  $q$ -gás ideal com o parâmetro  $q = 0.25$ .

Agora, para discutir a influência da degenerescência nos resultados obtidos,

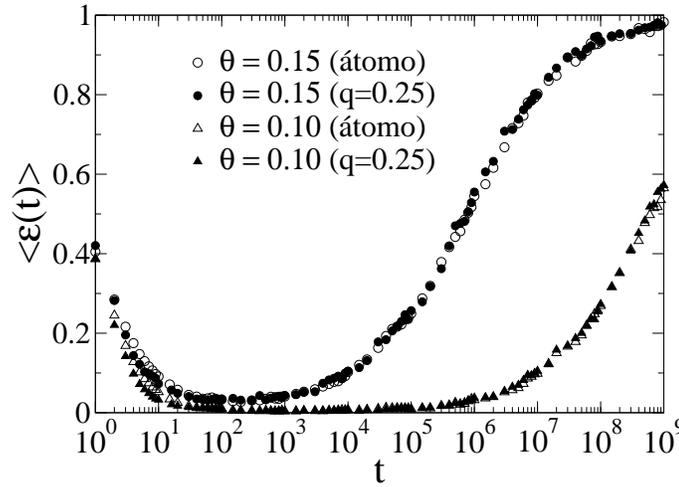


Figura 5.17: Energia média escalada pela energia de ionização  $E^*$  para o átomo de hidrogênio (símbolos vazios) e para o  $q$ -oscilador com  $q = 0.25$  (símbolos preenchidos) para duas diferentes temperaturas  $\theta = (k_B T)/E^*$ . Para o átomo de hidrogênio temos  $E^* = R$  enquanto que para o  $q$ -oscilador, com  $q = 0.25$ ,  $E^* = 4(\hbar\omega)/3$ . Essencialmente podemos notar um comportamento idêntico entre os dois sistemas.

mostraremos a regularização da função de partição com a degenerescência:

$$Z_{BG} = \exp(-\beta R) \lim_{n^* \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{n^*} n^2 \exp(\beta R/n^2). \quad (5.30)$$

Manipulando o termo exponencial, podemos reescrever a equação acima da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \exp(\beta R) Z_{BG} &= \lim_{n^* \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{n^*} n^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\beta R)^k}{k!} \frac{1}{n^{2k}} \\ &= \lim_{n^* \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{n^*} n^2 \left[ 1 + (\beta R/n^2) + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{(\beta R)^k}{k!} \frac{1}{n^{2k}} \right] \\ &= \lim_{n^* \rightarrow \infty} \left[ \sum_{n=1}^{n^*} (n^2 + \beta R) + \sum_{k=2}^{\infty} H_{n^*, 2(k-1)} \frac{(\beta R)^k}{k!} \right] \end{aligned} \quad (5.31)$$

em que  $H_{n^*, 2(k-1)} = \sum_{n=1}^{n^*} 1/n^{2(k-1)}$  é o número harmônico de ordem  $2(k-1)$  [96]. Os limites  $n^* \rightarrow \infty$  dos números harmônicos são bem definidos, produzindo coeficientes finitos,  $B_{2(k-1)} = \lim_{n^* \rightarrow \infty} H_{n^*, 2(k-1)}$  (por exemplo,  $B_2 = \pi^2/6$ ,  $B_4 = \pi^4/90$ ,  $B_6 =$

$\pi^6/945$ ), e converge para 1 à medida que  $k$  cresce. Assim, a eq.(5.31) pode ser escrita da forma:

$$Z_{BG} = \exp(-\beta R) \left[ \lim_{n^* \rightarrow \infty} \left( \sum_{n=1}^{n^*} (n^2 + \beta R) \right) + \sum_{k=2}^{\infty} B_{2(k-1)} \frac{(\beta R)^k}{k!} \right] \quad (5.32)$$

que mostra a divergência nos dois primeiros termos do lado direito da equação, que estão relacionados aos termos  $k = 0$  e  $k = 1$  da eq.(5.31).

Introduzimos a “função de partição regularizada” (modificada) com a degenerescência,  $Z'_{deg}$ , definida como:

$$Z'_{deg} = Z_{BG} - \exp(-\beta R) \lim_{n^* \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{n^*} (n^2 + \beta R) = \exp(-\beta R) \sum_{k=1}^{\infty} B_{2k} \frac{(\beta R)^{(k+1)}}{(k+1)!} \quad (5.33)$$

sendo que reordenamos os termos da soma, que é finita, e que também pode ser escrita como:

$$Z'_{deg} = \sum_{n=1}^{\infty} \left[ n^2 \exp(-\beta E_n) - (n^2 + \beta R) \exp(-\beta R) \right] = \exp(-\beta R) \sum_{k=1}^{\infty} B_{2k} \frac{(\beta R)^{(k+1)}}{(k+1)!}. \quad (5.34)$$

Assim, por exemplo, a energia interna por átomo é dada por:

$$u'_{deg} = -\partial \ln Z' / \partial \beta = R \left\{ 1 - \frac{\sum_{k=1}^{\infty} (k+1) (B_{2k}/(k+1)!)(\beta R)^k}{\sum_{k=1}^{\infty} (B_{2k}/(k+1)!)(\beta R)^{(k+1)}} \right\} \quad (5.35)$$

sendo  $u'_{deg}$  a energia interna obtida com o formalismo modificado levando em consideração a degenerescência. A comparação entre este resultado e aquele em que desconsideramos a degenerescência é mostrado na figura 5.18. Como já era de se esperar a energia interna possui um valor maior quando consideramos a degenerescência já que os níveis excitados fornecem contribuições maiores.

O resultado exibido na figura 5.18 é obtido via a regularização da função de partição considerando a degenerescência  $Z'_{deg}$ , eq.(5.32). Esperamos que o resultado analítico da energia interna por partícula  $u'_{deg}$  mostrado na figura 5.18 seja condizente com os resultados obtidos pela simulação computacional utilizando o MMC usual

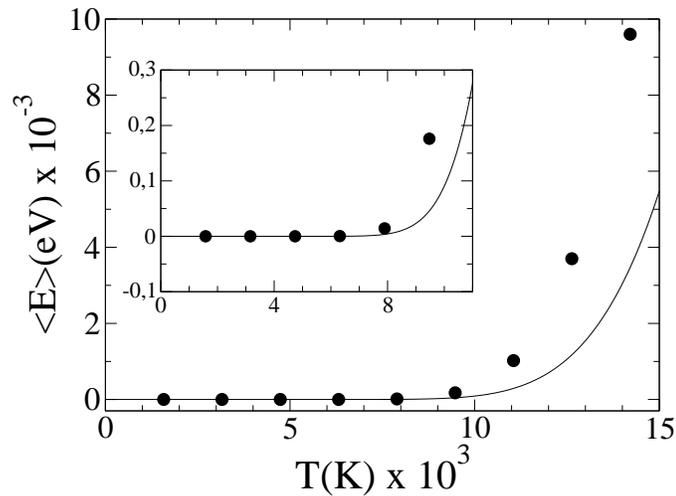


Figura 5.18: Comparação entre o cálculo analítico da energia interna por átomo de hidrogênio via o formalismo modificado considerando a degenerescência (círculos preenchidos) e sem a degenerescência (linha sólida). O gráfico interno é uma ampliação dos resultados no intervalo de  $T = 0K$  a  $T = 11000K$ . Como já era de se esperar, a energia interna considerando a degenerescência possui um valor maior.

levando em conta a degenerescência do espectro de energia do átomo. Este último certamente forneceria uma energia média por átomo maior do que aquela obtida com o MMC usual sem considerar a degenerescência, já que nas simulações aumentariam as frequências com que as energias dos níveis excitados apareceriam. Como a energia de ionização do átomo não se modifica quando levamos em conta a degenerescência, esperamos que a lei de crescimento do EQE continue sendo exponencial, talvez com um coeficiente um pouco menor.

Na próxima seção proporemos duas realizações físicas nas quais o gás ideal de átomos de hidrogênio apresentaria o EQE. Destes, faremos uma conexão entre o tempo de Monte Carlo e o tempo real.

## 5.5 Possível realização física

Do ponto de vista experimental, parece-nos difícil fazer medidas em sistemas reais altamente diluídos de átomos não ionizados, desde que devemos evitar que os átomos

de hidrogênio se ionizem (que é favorecido a altas temperaturas) e se combinem,  $H + H \rightarrow H_2$  (que é favorecido a baixas temperaturas). Aqui nesta subseção nós propomos duas possíveis realizações físicas em que o átomo de hidrogênio poderia ser encontrado no acima mencionado *Estado de Quase Equilíbrio* (EQE).

### 5.5.1 Gás de átomos de hidrogênio

Aqui estaremos assumindo a viabilidade, do ponto de vista experimental, de produzir um gás de átomos de hidrogênio não ionizado em baixas temperaturas (comparadas com a energia de ionização) em que supomos ser satisfeitas as seguintes condições:

1. as combinações,  $H + H \rightarrow H_2$ , podem ser ignorados. De fato, existem técnicas experimentais para tal suposição em que pares de átomos, assim chamados, *spin-polarized state*, não podem produzir estados ligados ([97]-[99]);
2. a temperatura  $T$  é baixa o suficiente de modo que a maioria dos átomos do gás estão nos estados de menor energia;
3. um dado átomo de hidrogênio pode apenas mudar de estado através de colisões com outros átomos (assumiremos que a dimensão linear da caixa que confina o gás é bem maior que o livre caminho médio do átomo, de maneira que as colisões com a parede podem ser desprezadas). Um átomo que esteja em um estado próximo do estado fundamental pode sofrer, antes da excitação, várias colisões, pois o átomo tem que sofrer uma colisão com um átomo altamente energético para absorver uma energia superior a  $3R/4$  para uma transição ocorrer.

Assim, o tempo médio entre duas colisões sucessivas,  $\tau(T)$ , em função da temperatura,  $T$ , pode ser calculado da teoria cinética [100] dando o seguinte resultado:

$$\tau(T) \approx \frac{1}{16\sqrt{\pi}\rho a^2} \left( \frac{m}{k_B T} \right)^{1/2}, \quad (5.36)$$

sendo que  $\rho$  representa a densidade de átomos no gás,  $m$  a massa do átomo de hidrogênio e  $a$  o raio de Bohr. Com o intuito de estabelecer uma conexão entre a duração do EQE (figura 5.4 dados em passo de Monte Carlo) com o tempo real propomos uma

simples, mas sugestiva, correspondência:  $\tau(T) = t$ , sendo  $t$  o tempo de Monte Carlo. Com esta suposição vemos que a duração (em tempo real) do EQE, para o átomo de hidrogênio, pode ser escrito como:

$$t_{real} = t \tau(T) \approx \frac{1}{16\sqrt{\pi}na^2} \left(\frac{m}{k_B T}\right)^{1/2} \exp[2R/(k_B T)], \quad (5.37)$$

sendo  $t_{real}$  medido em segundos, em que consideramos o parâmetro  $b = 2$ , dado pelo ajuste mostrado na eq.(5.27). Note que este tempo de duração do estado de quase-equilíbrio depende de dois parâmetros, a densidade de átomos de hidrogênio  $n$  e da temperatura  $T$ . Sendo assim, nós estimamos  $t_{real}$  para valores típicos, a saber:  $n = 10^{23}$  átomos/m<sup>3</sup> e  $\theta = 0.10$  ( $T \approx 15797K$ ),  $\theta = 0.05$  ( $T \approx 7898K$ ),  $\theta = 0.03$  ( $T \approx 4739K$ ) e  $\theta = 0.01$  ( $T \approx 1580K$ ), que fornecem, respectivamente, os tempos de duração,  $t_{real} = 5,35$  segundos,  $t_{real} = 3,67 \times 10^9$  segundos,  $t_{real} = 1,81 \times 10^{21}$  segundos ( $\approx 5,73 \times 10^{13}$  anos); notemos que o tempo de duração do EQE é enorme para baixas temperaturas.

É importante lembrar que o resultado acima não leva em consideração a degenerescência do espectro de energia do átomo de hidrogênio; entretanto, o crescimento exponencial encontrado acima, para baixas temperaturas, não se alteraria significativamente se considerarmos o espectro degenerado pois, para baixas temperaturas que é a faixa de temperaturas em que nossos resultados são mais direcionados, o estado que mais contribui é o estado fundamental (não degenerado).

### 5.5.2 Átomos de hidrogênio em um banho de fótons

É bem conhecido que átomos de hidrogênio não ionizados existem em baixas concentrações e em baixas temperaturas (tipicamente  $3K$ ), no meio intergalático. Estes átomos estão em contato com fótons de maneira que as transições entre estados ocorrem através da emissão e absorção de fótons.

Agora apresentaremos uma simples estimativa de um limite inferior para a duração (em tempo real) do então chamado EQE para o átomo de hidrogênio em meios como o meio intergalático. Para isto nós consideramos:

1. um átomo de hidrogênio não ionizado em contato com um banho de fótons a temperatura  $T$ ;
2. a temperatura  $T$  suficientemente baixa para que o átomo seja encontrado inicialmente em seu estado fundamental;
3. a velocidade do átomo negligenciável com respeito à velocidade da luz;

Chamemos  $t_{1 \rightarrow n}(\theta)$  o tempo médio que o átomo absorve um fóton suficientemente energético (com frequência angular  $\omega \geq 3R/(4\hbar)$ ) de tal maneira que o possibilite a realizar uma transição do estado fundamental para algum estado excitado caracterizado pelo número quântico  $n$  ( $n > 1$ ), para um dado valor de  $\theta$ . Obviamente,  $t_{1 \rightarrow n}(\theta)$  representa um limite inferior para a estimativa do tempo de duração do EQE, desde que o átomo pode retornar para o estado fundamental (que pode ocorrer com grande probabilidade, desde que estamos considerando baixas temperaturas). Consideremos agora o número médio de fótons por unidade de volume (incluindo ambas direções de polarização), com frequência angular  $\omega \geq \Lambda$ ,

$$n_{\omega \geq \Lambda}(\theta) = \frac{8}{(2\pi c)^3} \int_{\Lambda}^{\infty} \frac{\omega^2 d\omega}{\exp[(\hbar\omega)/(R\theta)] - 1}, \quad (5.38)$$

sendo  $c$  a velocidade da luz e  $\theta \equiv k_B T/R$ . Para o intervalo de temperatura de interesse, temos que  $\exp[(\hbar\omega)/(R\theta)] \gg 1$  de maneira que a integral acima pode ser calculada facilmente,

$$n_{\omega \geq \Lambda}(\theta) \approx \frac{8}{(2\pi c)^3} \exp\left(\frac{-3}{4\theta}\right) \left[ 2 \left(\frac{R\theta}{\hbar}\right)^3 + 2\Lambda \left(\frac{R\theta}{\hbar}\right)^2 + \Lambda^2 \frac{R\theta}{\hbar} \right]. \quad (5.39)$$

Usando este resultado podemos estimar o número de fótons com energia  $\hbar\omega \geq 3R/4$  no volume do átomo de hidrogênio (considerado como  $4\pi a^3/3$ , em que  $a$  é o raio de Bohr). O tempo máximo para este fóton atravessar a região do volume do átomo é  $2a/c$ . Então, o número médio de fótons no volume do átomo de hidrogênio por unidade de tempo, pode ser escrito como:

$$N_{\omega \geq \Lambda}(\theta) = n_{\omega \geq \Lambda}(\theta) \left( \frac{c}{2a} \right) \left( \frac{4}{3} \pi a^3 \right) \approx \frac{2a^3}{3\pi c^2} \exp\left(\frac{-3}{4\theta}\right) \left[ 2 \left( \frac{R\theta}{\hbar} \right)^3 + 2\Lambda \left( \frac{R\theta}{\hbar} \right)^2 + \Lambda^2 \frac{R\theta}{\hbar} \right]. \quad (5.40)$$

Partindo deste resultado estimamos o tempo médio para que o átomo de hidrogênio absorva um fóton com energia o suficiente para realizar a transição  $1 \rightarrow n$ ,  $t_{1 \rightarrow n}(\theta) N_{\omega \geq \Lambda}(\theta) = 1$ , i.e.,  $t_{1 \rightarrow n}(\theta) = [N_{\omega \geq \Lambda}(\theta)]^{-1}$ . É importante notar que, analogamente como acontece para o tempo de duração do EQE, ver eq.(5.27), o limite inferior  $t_{1 \rightarrow n}(\theta)$  (em unidades tempo real) também segue uma lei de Arrhenius:

$$t_{1 \rightarrow n}(\theta) \sim \exp[3/4\theta] = \exp[3R/(4K_B T)]. \quad (5.41)$$

Note, como era de se esperar, que o fator multiplicativo de  $1/\theta$  na eq.(5.41) é menor que o encontrado na eq.(5.27). Notamos também que podem existir maneiras alternativas de obter  $N_{\omega \geq \Lambda}(\theta)$  através do conhecimento de  $n_{\omega \geq \Lambda}(\theta)$ , como feito na eq.(5.40), por considerar uma dependência temporal distinta na eq.(5.40). Entretanto, o principal comportamento (a lei de Arrhenius) permanece inalterado por usar diferentes dependências temporais. A título de exemplo, calcularemos dois valores típicos para o limite inferior  $t_{1 \rightarrow n}(\theta)$ , a saber:  $\theta = 0.01$  ( $T \approx 1580K$ ),  $\theta = 0.0001$  ( $T \approx 15,80K$ ), que corresponde, respectivamente, aos tempos colossais (comparados com a idade do universo  $1,5 \times 10^{10}$  anos),  $t_{1 \rightarrow n}(0.01) \approx 3,52 \times 10^{16}$  anos e  $t_{1 \rightarrow n}(0.0001) \approx 1,57 \times 10^{3243}$  anos. Desde que o tempo de duração do EQE (em unidades de tempo real) deve ser maior que  $t_{1 \rightarrow n}(\theta)$ , torna-se evidente o tratamento deste estado, considerado aqui, como um estado de equilíbrio efetivo para baixas temperaturas.



# Capítulo 6

## Mapa de Jordan-Schwinger generalizado

A realização da álgebra do  $su(2)$  via o mapa de Jordan-Schwinger (JS) ([51]-[52]) é um método muito interessante, e amplamente conhecido, de realizar a conexão entre a álgebra de momentum angular e a álgebra de dois osciladores independentes [44].

Neste capítulo introduziremos as álgebras do  $su(2)$  [44],  $su_q(2)$  ([5],[45]-[49]) e uma classe de álgebras do  $sl(2)$  generalizadas [34]. Esta última foi construída de maneira análoga à Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG) em que utiliza-se uma função característica  $g$  de um dos seus geradores em suas relações de comutação algébricas. Todas essas álgebras serão realizadas através do método de JS em que os geradores das álgebras são escritos em termos dos geradores das álgebras dos osciladores,  $q$ -osciladores e da AHG, respectivamente.

Para realizar esta nova classe de álgebras do  $sl(2)$  generalizadas, precisaremos fazer uma generalização do mapa de JS em que será necessário mais do que uma forma quadrática dos operados da AHG.

O mapa de JS será apresentado no caso em que as funções características de ambas as álgebras generalizadas forem não-lineares, em particular uma função quadrática [50]. Mesmo neste caso em que as relações algébricas apresentam uma estrutura mais complexa, veremos que o mapa de JS possui uma forma simples e compacta.

Na seção 6.1 introduziremos as álgebras do  $su(2)$  e do  $su_q(2)$  via a realização de JS. Na seção 6.2 apresentaremos a álgebra generalizada do  $sl(2)$ . Na seção 6.3 faremos a conexão entre a AHG e a álgebra do  $sl(2)$  generalizada.

## 6.1 Realização do $su(2)$ e do $su_q(2)$ via mapa de JS

Nesta seção, introduziremos primeiramente a álgebra do momento angular  $su(2)$  via a realização de Jordan-Schwinger (JS) ([51]-[52]) e depois faremos a realização da álgebra do  $su_q(2)$ .

Considere então as álgebras de dois osciladores independentes em que adotaremos os índices 1 e 2 para os osciladores. Assumimos que as relações de comutação dos geradores de cada álgebra satisfazem às relações da álgebra de Heisenberg (2.14-2.16)

$$[N_i, a_i] = -a_i \quad (6.1)$$

$$[N_i, a_i^\dagger] = a_i^\dagger \quad (6.2)$$

$$[a_i, a_i^\dagger] = 1, \quad (6.3)$$

sendo  $N_i \equiv a_i^\dagger a_i$  para  $i = 1, 2$ .

Como estamos assumindo que as álgebras são independentes, obtemos que qualquer par de operadores comutam entre osciladores diferentes [44]:

$$[a_1, a_2^\dagger] = [a_2, a_1^\dagger] = 0 \quad (6.4)$$

e assim por diante.

Como os operadores números  $N_1$  e  $N_2$  comutam, podemos considerar um autoestado de vácuo simultâneo  $|0, 0\rangle \equiv |0\rangle$  definido como  $a_i|0\rangle \equiv 0$  (ou  $N_i|0\rangle \equiv 0$ ) para  $i = 1, 2$ . Partindo deste estado de vácuo podemos criar uma base no espaço de Fock formada pelos autoestados de  $N_1$  e  $N_2$  dados por:

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} |0\rangle \quad (6.5)$$

sendo  $n_1$  e  $n_2$  inteiros, e a representação da álgebra é fixada como:

$$N_i |n_i, n_l\rangle = n_i |n_i, n_l\rangle \quad (6.6)$$

$$a_i^\dagger |n_i, n_l\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1, n_l\rangle \quad (6.7)$$

$$a_i |n_i, n_l\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1, n_l\rangle, \quad (6.8)$$

sendo  $i \neq l$  e  $n_{i/l} = 0, 1, 2, \dots$ .

O mapa de JS é definido por:

$$J_z \equiv \frac{\hbar}{2}(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2) = \frac{\hbar}{2}(N_1 - N_2) \quad (6.9)$$

$$J_+ \equiv \hbar a_1^\dagger a_2 \quad (6.10)$$

$$J_- \equiv \hbar a_2^\dagger a_1 \quad (6.11)$$

e podemos facilmente ver que os operadores  $J_z$ ,  $J_+$  e  $J_-$  satisfazem à álgebra do momento angular dada por:

$$[J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm \quad (6.12)$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (6.13)$$

sendo que  $(J_+)^\dagger = (a_1^\dagger a_2)^\dagger = (a_2^\dagger a_1) = J_-$ .

As relações (6.12-6.13) podem ser demonstradas facilmente. Por exemplo, podemos demonstrar a eq.(6.13) utilizando as relações (6.1-6.4,6.9-6.11) da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= \hbar^2 [a_1^\dagger a_2, a_2^\dagger a_1] \\ &= \hbar^2 a_1^\dagger [a_2, a_2^\dagger a_1] + \hbar^2 [a_1^\dagger, a_2^\dagger a_1] a_2 \\ &= \hbar^2 a_1^\dagger [a_2, a_2^\dagger] a_1 + \hbar^2 a_2^\dagger [a_1^\dagger, a_1] a_2 \\ &= \hbar^2 a_1^\dagger a_1 - \hbar^2 a_2^\dagger a_2 \\ &= 2\hbar J_z. \end{aligned} \quad (6.14)$$

De maneira análoga, podemos verificar a eq.(6.12).

Se definimos o operador número total  $N \equiv N_1 + N_2 = a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2$ , podemos provar também que o operador Casimir da álgebra é dado por:

$$J^2 \equiv J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) \quad (6.15)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2} N \left( \frac{N}{2} + 1 \right), \quad (6.16)$$

de tal maneira que  $[J^2, J_z] = [J^2, J_\pm] = 0$ .

Portanto, vimos que o mapa de JS dado pelas eqs.(6.9-6.11) conecta a álgebra de dois osciladores independentes com a álgebra do momento angular  $su(2)$ .

A representação da álgebra do momento angular pode ser obtida através da aplicação dos operadores  $J_z$ ,  $J_+$  e  $J_-$  nos autoestados simultâneos de  $N_1$  e  $N_2$ . Então se identificamos

$$n_1 \rightarrow j + m \implies j = \frac{n_1 + n_2}{2} \quad (6.17)$$

$$n_2 \rightarrow j - m \implies m = \frac{n_1 - n_2}{2} \quad (6.18)$$

obtemos

$$J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \quad (6.19)$$

$$J_+ |j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle \quad (6.20)$$

$$J_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle \quad (6.21)$$

$$J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle. \quad (6.22)$$

Por fim, podemos notar que utilizando as eqs.(6.5,6.17- 6.18), um autoestado de  $J_z$ ,  $|j, m\rangle$  é construído da seguinte maneira:

$$|j, m\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{j+m} (a_2^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} |0\rangle. \quad (6.23)$$

Uma vez introduzido a álgebra do momento angular  $su(2)$  via a realização de JS, vamos abordar a realização da álgebra do  $su_q(2)$  utilizando o mesmo método de JS ([25],[26]).

Agora, trabalharemos com as álgebras de dois  $q$ -osciladores independentes, que assumimos satisfazer as relações de comutação da álgebra dos  $q$ -osciladores (2.23-2.25):

$$[\widehat{N}_i, b_i] = -b_i \quad (6.24)$$

$$[\widehat{N}_i, b_i^\dagger] = b_i^\dagger \quad (6.25)$$

$$[b_i, b_i^\dagger]_{q^\pm} = q^{\mp \widehat{N}_i}, \quad (6.26)$$

sendo que  $i = 1, 2$ ,  $(\widehat{N}_i)^\dagger = \widehat{N}_i$ ,  $b_i = (b_i^\dagger)^\dagger$ ,  $[b_i, b_i^\dagger]_q \equiv b_i b_i^\dagger - q b_i^\dagger b_i$  é o  $q$ -comutador e  $q$  é o parâmetro de deformação.

Como uma consequência das álgebras serem independentes obtemos:

$$[b_1, b_2^\dagger] = [b_2, b_1^\dagger] = 0, \quad (6.27)$$

que é válida para quaisquer dois pares de operadores pertencentes a álgebras diferentes.

Assumimos que existe uma representação irredutível da álgebra formada pelos dois  $q$ -osciladores independentes. Esta representação é fixada pela atuação dos geradores da álgebra nos autoestados simultâneos  $|n_1, n_2\rangle$  dos operadores  $\widehat{N}_1$  e  $\widehat{N}_2$ . Estes autoestados simultâneos podem ser obtidos pelas aplicações dos operadores levantamento de cada álgebra no autoestado de vácuo  $|0\rangle$ , definido como  $b_i|0\rangle = 0$  (ou  $\widehat{N}_i|0\rangle = 0$ ) sendo  $i = 1$  ou  $2$ , da seguinte maneira:

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{(b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{[n_1]! [n_2]!}} |0\rangle \quad (6.28)$$

em que  $n_1$  e  $n_2$  são números inteiros e  $[n_i] \equiv \frac{q^{n_i} - q^{-n_i}}{q - q^{-1}}$ . Assim, uma representação da álgebra formada pelos dois  $q$ -osciladores independentes é dada por:

$$\widehat{N}_i |n_i, n_l\rangle = n_i |n_i, n_l\rangle \quad (6.29)$$

$$b_i^\dagger |n_i, n_l\rangle = \sqrt{[n_i + 1]} |n_i + 1, n_l\rangle \quad (6.30)$$

$$b_i |n_i, n_l\rangle = \sqrt{[n_i]} |n_i - 1, n_l\rangle, \quad (6.31)$$

sendo  $i \neq l$  e  $n_{i/l} = 0, 1, 2, \dots$ .

De maneira a obter a álgebra do  $su_q(2)$ , definiremos o seguinte mapa de JS:

$$S_z \equiv \frac{1}{2}(\widehat{N}_1 - \widehat{N}_2) \quad (6.32)$$

$$S_+ \equiv b_1^\dagger b_2 \quad (6.33)$$

$$S_- \equiv b_2^\dagger b_1. \quad (6.34)$$

A representação algébrica é obtida aplicando o operador  $S_+$  sucessivamente ao autoestado de vácuo  $|0\rangle$ . Se realizarmos as mesmas identificações dada pelas eqs.(6.17-6.18) obtemos a seguinte representação:

$$S_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle \quad (6.35)$$

$$S_+ |j, m\rangle = \sqrt{[j-m][j+m+1]} |j, m+1\rangle \quad (6.36)$$

$$S_- |j, j-m\rangle = \sqrt{[j+m][j-m+1]} |j, m-1\rangle. \quad (6.37)$$

O próximo passo agora é demonstrar que os operadores  $S_z$ ,  $S_+$  e  $S_-$  definidos nas eqs.(6.32-6.34) satisfazem à álgebra do  $su_q(2)$ . Para isto, mostraremos que os operadores  $S_z$ ,  $S_+$  e  $S_-$  satisfazem as seguintes relações de comutação:

$$[S_z, S_\pm] = \pm S_\pm \quad (6.38)$$

$$[S_+, S_-] = [2S_z], \quad (6.39)$$

sendo  $(S_+)^{\dagger} = S_-$  e  $[2S_z] \equiv \frac{q^{2S_z} - q^{-2S_z}}{q - q^{-1}}$ .

Primeiramente derivamos das eqs.(6.25,6.26) duas importantes relações dadas por  $\widehat{N}_i b_i^\dagger = b_i^\dagger (\widehat{N}_i + 1)$  e  $b_i \widehat{N}_i = (\widehat{N}_i + 1) b_i$ . Então,

$$[S_z, S_+] = S_z S_+ - S_+ S_z$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}(\widehat{N}_1 - \widehat{N}_2)b_1^\dagger b_2 - b_1^\dagger b_2 \frac{1}{2}(\widehat{N}_1 - \widehat{N}_2) \\
&= \frac{1}{2}(\widehat{N}_1 - \widehat{N}_2)b_1^\dagger b_2 - \frac{1}{2}(\widehat{N}_1 - 1 - (\widehat{N}_2 + 1))b_1^\dagger b_2 \\
&= b_1^\dagger b_2 \\
&= S_+,
\end{aligned} \tag{6.40}$$

Efetando o conjugado Hermitiano da equação (6.40) a relação de comutação dada pela eq.(6.38) fica completamente demonstrada para  $S_z$  e  $S_\pm$  :

$$[S_z, S_\pm] = \pm S_\pm. \tag{6.41}$$

Demonstrar a relação dada na eq.(6.39) como feito anteriormente não é uma tarefa tão simples como foi no caso não-deformado. Uma maneira mais simples de demonstrá-la é através da aplicação das relação de comutação  $[S_+, S_-]$  nos autoestados de  $S_z$ . Assim,

$$\begin{aligned}
[S_+, S_-] |j, m\rangle &= (S_+ S_- - S_- S_+) |j, m\rangle \\
&= ([j + m] [j - m + 1] - [j - m] [j + m + 1]) |j, m\rangle \\
&= \left( \frac{q^{2m} - q^{-2m}}{q - q^{-1}} \right) |j, m\rangle \\
&= \left( \frac{q^{2\widehat{S}_z} - q^{-2\widehat{S}_z}}{q - q^{-1}} \right) |j, m\rangle,
\end{aligned}$$

a partir do qual obtemos

$$[S_+, S_-] = [2S_z]. \tag{6.42}$$

Portanto, concluímos que a álgebra gerada pelos operadores definidos pelo mapa de JS nas eqs.(6.32-6.34) é a álgebra do  $su_q(2)$  e assim sendo, a álgebra do  $su_q(2)$  é realizada pela álgebra dos  $q$ -osciladores através do mapa de JS.

Depois dessa introdução, partiremos para a próxima seção na qual discutiremos uma recente generalização da álgebra do  $sl(2)$  a qual será realizada pela AHG através de um mapa de JS generalizado.

## 6.2 Álgebra do $sl(2)$ generalizada

Recentemente, de maneira análoga como foi construída a AHG, uma generalização da álgebra do  $sl(2)$ <sup>1</sup> foi introduzida na qual a mesma apresenta uma função característica de um dos seus geradores ([34],[101]. Esta nova estrutura algébrica que generaliza a álgebra do  $sl(2)$  é construída através das seguintes relações entre seus geradores

$$S_0 J_- = J_- g(S_0) \quad (6.43)$$

$$J_+ J_0 = g(S_0) S_+ \quad (6.44)$$

$$[J_+, J_-] = S_0(S_0 + 1) - g(S_0)(g(S_0) + 1), \quad (6.45)$$

sendo que seus geradores obedecem  $J_- = J_+^\dagger$ ,  $S_0^\dagger = S_0$  e sendo  $g(S_0)$  uma função analítica de  $S_0$ . Esta álgebra satisfaz, para toda função  $g$ , a identidade de Jacobi

$$[S_0, [J_+, J_-]] + [J_-, [S_0, J_+]] + [J_+, [J_-, S_0]] = 0. \quad (6.46)$$

O primeiro termo da eq.(6.46) é identicamente nulo devido à eq.(6.45). Para mostrarmos que a soma dos outros dois termos é nula, basta expandi-los e usar a propriedade oriunda das eqs.(6.43-6.44) em que  $[S_0, J_+ J_-] = 0$ .

Usando as eqs.(6.43-6.45) podemos ver também que:

$$C \equiv \frac{1}{2} \{J_+ J_- + J_- J_+ + S_0(S_0 + 1) + g(S_0)(g(S_0) + 1)\} \quad (6.47)$$

satisfaz  $[C, S_0] = [C, J_\pm] = 0$ , i.e.  $C$  é o operador Casimir da álgebra.

Se utilizamos a função  $g(S_0) = S_0 - 1$  nas eqs.(6.43-6.45) obtemos as relações de comutação da álgebra do  $sl(2)$  a qual já é conhecida. Assim, as relações algébricas propostas nas eqs.(6.43-6.45) contêm como caso particular a álgebra do  $sl(2)$  quando escolhemos uma particular função linear de  $S_0$ . Agora vamos discutir a teoria de representação desta álgebra do  $sl(2)$  generalizada e o papel da função característica  $g$ .

---

<sup>1</sup>a diferença entre as álgebras do  $sl(2)$  e  $su(2)$  é que nesta última as matrizes são unitárias, i.e.  $U^\dagger U = 1$ .

Inicialmente assumimos existir uma representação da álgebra dada pelas eqs.(6.43-6.45) tal que o operador Hermitiano  $S_0$  seja diagonal. Consideramos  $|\alpha_j\rangle$  como sendo um autoestado normalizado de  $S_0$  com o maior autovalor da representação  $\alpha_j$ , i. e.,

$$S_0|\alpha_j\rangle = \alpha_j|\alpha_j\rangle. \quad (6.48)$$

Aplicando a eq.(6.43) em  $|\alpha_j\rangle$  obtemos

$$S_0(J_-|\alpha_j\rangle) = J_- (g(S_0)|\alpha_j\rangle) = g(\alpha_j)(J_-|\alpha_j\rangle). \quad (6.49)$$

Assim vemos que  $J_-|\alpha_j\rangle$  é um autovetor de  $S_0$  com um autovalor  $g(\alpha_j)$  que doravante chamaremos de  $\alpha_{j-1}$ . Partindo deste estado com maior peso da representação  $|\alpha_j\rangle$  e aplicando sucessivamente  $J_-$  neste estado criamos diferentes autoestados de  $S_0$  dados por:

$$S_0(J_-^m|\alpha_j\rangle) = g^m(\alpha_j)(J_-^m|\alpha_j\rangle) \propto \alpha_{j-m}(|\alpha_{j-m}\rangle), \quad (6.50)$$

sendo  $g^{(m)}(\alpha_j)$  a  $m$ -ésima iteração da função  $g$  em  $\alpha_j$ . Uma vez que consideramos  $|\alpha_j\rangle$  como sendo o autoestado com maior autovalor da representação, vale que  $\alpha_j > g^{(m)}(\alpha_j)$ , sendo  $m$  um número inteiro positivo.

Desde que a aplicação de  $J_-$  cria um novo autovetor de  $S_0$  com um autovalor tendo a iteração de  $\alpha_j$  através de  $g$  aumentada de uma unidade mas, em geral, com um valor menor, é conveniente definir os novos vetores  $J_-^m|\alpha_j\rangle$  como sendo proporcionais à  $|\alpha_{j-m}\rangle$ , como feito na eq.(6.50), e então chamamos o operador  $J_-$  de operador abaixamento. Assim, definimos:

$$\alpha_{j-m} \equiv g^m(\alpha_j) = g(\alpha_{j-(m-1)}) \quad (6.51)$$

em que  $m$  denota o número de iterações de  $\alpha_j$  através de  $g$ .

Seguindo um procedimento semelhante para  $J_+$ , aplicando a eq.(6.44) a um autoestado  $|\alpha_{j-m}\rangle$ , obtemos

$$J_+(S_0|\alpha_{j-m}\rangle) = g(S_0) (J_+|\alpha_{j-m}\rangle) = g(\alpha_{j-m})(J_+|\alpha_{j-m}\rangle). \quad (6.52)$$

Usando a eq.(6.51) podemos ver que  $J_+|\alpha_{j-m}\rangle$  é um autovetor de  $S_0$  com autovalor  $\alpha_{j-m+1} = g(\alpha_{j-m})$ . Então,  $J_+|\alpha_{j-m}\rangle$  é proporcional a  $|\alpha_{j-m+1}\rangle$ , mostrando que  $J_+$  é o operador levantamento. Desde que assumimos que a representação possui o vetor de maior peso  $|\alpha_j\rangle$ , obtemos que

$$J_+|\alpha_j; j\rangle = 0. \quad (6.53)$$

Como os autovetores de  $S_0$  dependem do maior autovalor  $\alpha_j$  e do número de vezes que aplicamos  $J_-$  em  $|\alpha_j\rangle$ , denotaremos estes estados como  $|\alpha_{j-m}\rangle \equiv |\alpha_j, j-m\rangle \propto J_-^m|\alpha_j\rangle$  [101]. O parâmetro  $\alpha_j$  indica o maior autovalor utilizado e o segundo parâmetro  $m$  indica o número de vezes que  $J_-$  foi aplicado em  $|\alpha_j\rangle$ .

Aplicando sucessivamente o operador  $J_-$ , obtemos uma base no espaço de Fock e para uma representação de dimensão finita obtemos

$$J_-|\alpha_j; j-d+1\rangle = 0, \quad (6.54)$$

sendo  $d$  a dimensão da representação. Sem perda de generalidade [101] chamaremos  $d = 2j + 1$ . Note que  $2j$  é um inteiro que é o número de iterações de  $\alpha_j$  através de  $g$  para alcançar o estado de menor peso da representação  $|\alpha_j; -j\rangle$  com o respectivo autovalor de  $S_0$  dado por  $\alpha_b = f^{d-1}(\alpha_j) = \alpha_{j-d+1}$ . Assim, dizemos que existe uma simetria escondida na sequência dos autovalores da álgebra do  $sl(2)$  generalizada.

Portanto, em geral, depois de alguma álgebra obtemos as seguintes expressões para um valor geral de  $m = 0, 1, 2, \dots, 2j$  [34]

$$S_0|\alpha_j; j-m\rangle = \alpha_{j-m}|\alpha_j; j-m\rangle \quad (6.55)$$

$$J_+|\alpha_j; j-m\rangle = \widehat{N}_{m-1}|\alpha_j; j-m+1\rangle \quad (6.56)$$

$$J_-|\alpha_j; j-m\rangle = \widehat{N}_m|\alpha_j; j-m-1\rangle \quad (6.57)$$

$$\widehat{C}|\alpha_j; j-m\rangle = \alpha_j(\alpha_j + 1)|\alpha_j; j-m\rangle \quad (6.58)$$

sendo  $\widehat{N}_m^2 = (\alpha_j - \alpha_{j-m-1})(\alpha_j + \alpha_{j-m-1} + 1) = \alpha_j(\alpha_j + 1) - \alpha_{j-m-1}(\alpha_{j-m-1} + 1)$  e  $\alpha_{j-m} = g^m(\alpha_j) = g(\alpha_{j-m+1})$  [101].

As eqs.(6.55-6.58) podem ser demonstradas de maneira análoga ao que feito quando introduzimos uma representação da AHG no capítulo 2.

Colocando  $m = 0$  na eq.(6.56), obtemos  $\widehat{N}_{-1}^2 = (\alpha_j - \alpha_j)(\alpha_j + \alpha_j + 1) = 0$  que é consistente com a eq.(6.53). Notamos também que a eq.(6.55) é consistente com a eq.(6.48) para  $m = 0$ .

Aplicando a eq.(6.43) no estado de maior peso da representação  $|\alpha_j; j\rangle$  obtemos

$$S_0(J_-|\alpha_j, j\rangle) = J_- (g(S_0)|\alpha_j, j\rangle) = g(\alpha_j)(J_-|\alpha_j, j\rangle). \quad (6.59)$$

Assim, definindo  $J_-|\alpha_j, j\rangle = \widehat{N}_0|\alpha_j, j-1\rangle$ , sendo  $\widehat{N}_0$  uma constante a ser determinada, podemos ver que  $S_0|\alpha_j, j-1\rangle = g(\alpha_j)|\alpha_j, j-1\rangle = \alpha_{j-1}|\alpha_j, j-1\rangle$  e assim a eq.(6.55) está demonstrada para  $m = 1$ .

A constante  $\widehat{N}_0$  pode ser determinada utilizando-se a eq.(6.45) e sabendo-se que o autoestado  $|\alpha_j, j-1\rangle$  é normalizado:

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \alpha_j, j-1 | \alpha_j, j-1 \rangle = \frac{1}{\widehat{N}_0^2} \langle \alpha_j, j | J_+ J_- | \alpha_j, j \rangle \\ &= \frac{1}{\widehat{N}_0^2} \langle \alpha_j, j | [J_- J_+ + S_0(S_0 + 1) - g(S_0)(g(S_0) + 1)] | \alpha_j, j \rangle \\ &= \frac{1}{\widehat{N}_0^2} [\alpha_j(\alpha_j + 1) - g(\alpha_j)(g(\alpha_j) + 1)] \\ &= \frac{1}{\widehat{N}_0^2} [\alpha_j(\alpha_j + 1) - \alpha_{j-1}(\alpha_{j-1} + 1)] \end{aligned} \quad (6.60)$$

o que implica que  $\widehat{N}_0^2 = \alpha_j(\alpha_j + 1) - \alpha_{j-1}(\alpha_{j-1} + 1)$  e assim a eq.(6.57) fica demonstrada para  $m = 0$ . Portanto, as eqs.(6.55-6.57) ficam verificadas para  $m = 0$ . Para  $m = 1$  a eq.(6.55) já foi verificada. A eq.(6.56) pode ser verificada para  $m = 1$  aplicando a eq.(6.45) em  $|\alpha_j, j\rangle$ :

$$(S_0 J_- - J_- J_+) |\alpha_j, j\rangle = [S_0(S_0 + 1) - g(S_0)(g(S_0) + 1)] |\alpha_j, j\rangle. \quad (6.61)$$

Utilizando as eqs.(6.55-6.57) para  $m = 0$ , já verificadas, obtemos

$$\widehat{N}_0 \widehat{J}_+ |\alpha_j, j-1\rangle = [\alpha_j(\alpha_j + 1) - g(\alpha_j)(g(\alpha_j) + 1)] |\alpha_j, j\rangle. \quad (6.62)$$

A constante no lado direito da eq.(6.62) que multiplica o autoestado  $|\alpha_j, j-1\rangle$  é  $\widehat{N}_0^2$  como mostrado. Então, obtemos

$$J_+|\alpha_j, j-1\rangle = \widehat{N}_0|\alpha_j, j\rangle \quad (6.63)$$

e a eq.(6.56) fica verifica para  $m = 1$ . Para verificar a eq.(6.57) para  $m = 1$  aplicaremos  $S_0(J_-)^2$  a  $|\alpha_j; j\rangle$ :

$$\begin{aligned} S_0[J_-]^2|\alpha_j, j\rangle &= [S_0J_-]J_-|\alpha_j, j\rangle = [J_-g(S_0)]J_-|\alpha_j, j\rangle \\ &= J_-[g(S_0)J_-]|\alpha_j, j\rangle = J_-[J_-g^{(2)}(S_0)]|\alpha_j, j\rangle \\ &= [J_-]^2g^{(2)}(\alpha_j)|\alpha_j, j\rangle. \end{aligned} \quad (6.64)$$

Desta equação podemos definir  $J_-^2|\alpha_j, j\rangle = J_-|\alpha_j, j-1\rangle = \widehat{N}_1|\alpha_j, j-2\rangle$ , sendo  $\widehat{N}_1$  uma constante a ser determinada que implica em  $S_0|\alpha_j, j-2\rangle = g(\alpha_j)|\alpha_j, j-1\rangle = \alpha_{j-2}|\alpha_j, j-2\rangle$  e assim a eq.(6.55) está demonstrada para  $m = 2$ .

A constante  $\widehat{N}_1$  é determinada pelo fato do autoestado  $|\alpha_j, j-2\rangle$  ser normalizado, da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \alpha_j, j-2 | \alpha_j, j-2 \rangle = \frac{1}{\widehat{N}_1^2} \langle \alpha_j, j-1 | J_+ \widehat{J}_- | \alpha_j, j-1 \rangle \\ &= \frac{1}{\widehat{N}_1^2} \langle \alpha_j, j-1 | [J_- J_+ + S_0(S_0 + 1) - g(S_0)(g(S_0) + 1)] | \alpha_j, j-1 \rangle \\ &= \frac{1}{\widehat{N}_1^2} [\widehat{N}_0^2 + \alpha_{j-1}(\alpha_{j-1} + 1) - g(\alpha_{j-1})(g(\alpha_{j-1}) + 1)] \\ &= \frac{1}{\widehat{N}_1^2} [\alpha_j(\alpha_j + 1) - \alpha_{j-2}(\alpha_{j-2} + 1)] \end{aligned} \quad (6.65)$$

o que implica em  $\widehat{N}_1^2 = \alpha_j(\alpha_j + 1) - \alpha_{j-2}(\alpha_{j-2} + 1)$  e assim a eq.(6.57) fica demonstrada para  $m = 1$ .

Até agora vimos que as eqs.(6.55-6.57) valem para  $m = 0$  e  $m = 1$ . Supondo que elas valham para um dado valor  $m$  podemos mostrar que elas valem também para  $m + 1$  e a prova fica completa. Por fim, frisamos que a eq.(6.58) é obtida usando as eqs.(6.46,6.53).

Então, as eqs.(6.55-6.57) definem uma representação de dimensão geral para a álgebra descritas pelas relações de comutação (6.43-6.45).

Fazendo  $m = d - 1$  na eq.(6.57) obtemos uma representação de dimensão  $d$ . O valor de  $\alpha_j$  correspondente a esta representação é obtido através da equação  $\widehat{N}_{d-1} = 0$  que é satisfeita se

$$\alpha_j = \alpha_{j-d} \quad (6.66)$$

ou se o vetor de maior peso da representação satisfaz a equação de de corte (*cut condition equation*) dada por:

$$\alpha_j + \alpha_{j-d} + 1 = 0; \quad (6.67)$$

caso contrário a dimensão será infinita.

Como ficará claro em seguida, a eq.(6.66) só poderá ter solução no caso em que a função característica  $g$  for não-linear (para  $d > 1$ ) enquanto que a representação de dimensão finita dada pela eq.(6.67) poderá ter solução para os casos não-linear e linear da função característica  $g$ . Uma consequência direta da eq.(6.67) é que  $\alpha_j > -\frac{1}{2}$  desde que  $\alpha_j > \alpha_{j-d}$ , que obviamente é válida para uma representação de dimensão finita.

Nas próximas subseções estudaremos a álgebra para casos especiais da função característica  $g$  e veremos que, analogamente ao já discutido para a AHG no capítulo 2, podemos estudar as dimensões finitas e infinitas da álgebra através da análise de estabilidade dos pontos fixos da função  $g$  e de suas funções compostas.

### 6.2.1 Funções características lineares: $sl(2)$ e $sl_q(2)$

Como frisamos, podemos obter a álgebra do  $sl(2)$  das eqs.(6.43-6.45) se utilizamos uma função característica  $g(S_0) = S_0 - 1$ . É simples verificar que para esta função característica, um autovalor geral  $\alpha_{j-m}$  pode ser escrito como

$$\alpha_{j-m} = g^m(\alpha_j) = \alpha_j - m. \quad (6.68)$$

Usando a eq.(6.68) na eq.(6.67), lembrando que  $d = 2j + 1$ , obtemos  $\alpha_j = j$ . Como  $2j + 1$  é um inteiro, isto significa que  $j$  e portanto  $\alpha_j$ , pode ser um inteiro ou um semi-inteiro, como é bem conhecido. Podemos ver também que o menor autovalor é  $-j$  e os autovetores podem ser escritos como  $|j; j - m\rangle$  sendo  $m = 0, 1, \dots, 2j$ .

Este resultado em que a função característica é  $g(x) = x - 1$ , pode ser mais facilmente visto através da análise gráfica como mostrado na figura 6.1, na qual realizamos o mesmo procedimento descrito quando estudamos as representações da AHG. Nesta representação gráfica de uma representação finita da álgebra do  $sl(2)$  em que o aspecto iterativo da álgebra é enfatizado, graficamos as funções  $y = \alpha, g(\alpha) = \alpha - 1$  versus  $\alpha$  para  $\alpha_j = j = 2$ . Graficamos também a linha vertical que representa a condição de corte dada pela eq.(6.67), i.e.  $\alpha_{j-d} = -\alpha_j - 1 = -j - 1 = -3$ .

Podemos ver que as iterações de  $\alpha_j$  através de  $g$  alcançam exatamente a interseção da linha vertical dada pela condição de corte e a função identidade. Se o ponto de partida  $\alpha_j$  não é um inteiro ou um semi-inteiro, as futuras iterações deste valor nunca alcançarão o ponto de interseção da condição de corte com a função identidade e assim a iteração permanecerá, produzindo uma representação de dimensão infinita. Note também que não há pontos fixos neste caso, ou seja  $g(x^*) \neq x^*$ , e que a análise gráfica da função característica nos fornece uma rápida e útil informação sobre a representação da álgebra sem a necessidade de muitos cálculos. Note também que  $\alpha_j$  é o maior autovalor da representação, satisfazendo a condição  $\alpha_j > g^m(\alpha_j)$  para  $m$  inteiro positivo.

Agora vamos discutir a álgebra do  $sl(2)$  generalizada para uma função do tipo  $g(S_0) = qS_0 - 1$  sendo o parâmetro  $q$  um número real. Neste caso as eqs.(6.43-6.45) podem ser escritas da seguinte maneira

$$[S_0, J_-]_q = -J_- \quad (6.69)$$

$$[S_0, J_+]_{q^{-1}} = (1/q) J_+ \quad (6.70)$$

$$[J_+, J_-] = (1 - q^2) S_0^2 + (1 + 2q - q) S_0 + (1 - q), \quad (6.71)$$

sendo  $[a, b]_q \equiv ab - qba$ .

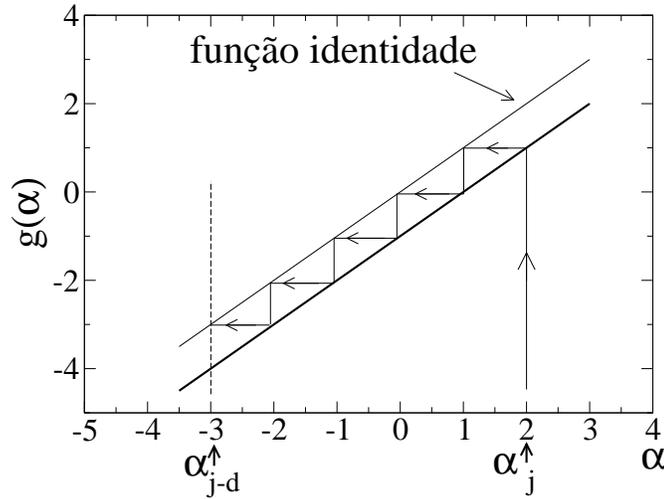


Figura 6.1: Representação gráfica da álgebra do  $sl(2)$  de dimensão  $d = 5$ , i.e.  $\alpha_j = j = 2$ . A linha tracejada ( $\alpha_{j-d} = -3$ ) é a condição de corte e a curva esboçada com a linha mais fina é a função identidade, como indicado na figura, enquanto a curva sólida é a função  $g(\alpha) = \alpha - 1$ .

Aqui existem três casos de interesse a ser analisados (i)  $q = 1$ , (ii)  $q > 1$  e (iii)  $|q| < 1$ . No primeiro caso, como já vimos, a álgebra do  $sl(2)$  generalizada torna-se a álgebra do  $sl(2)$  padrão. Uma vez que a dimensão é escolhida, a condição de corte nos fornece o seguinte valor para  $\alpha_j$ :

$$\alpha_j = \frac{d-1}{2}. \quad (6.72)$$

Note que para cada dimensão da representação que escolhermos, obtemos diferentes valores permitidos para  $\alpha_j$ . Um exemplo deste caso foi mostrado na figura 6.1, em que escolhermos uma representação de dimensão  $d = 5$  que corresponde a  $\alpha_j = 2$ .

No segundo,  $q > 1$  e portanto existe um ponto fixo  $\alpha^* = 1/(q-1)$ , solução da equação  $g(x^*) = x^*$  no qual a função  $g(\alpha)$  intercepta a função identidade  $y = \alpha$ . Este ponto fixo é instável ( $(\partial g/\partial \alpha)|_{\alpha^*} = q > 1$ ), mostrando que apenas pontos abaixo de  $\alpha^*$  são permitidos já que por hipótese  $\alpha_j > g^m(\alpha_j)$ . Também da equação de corte obtemos que  $\alpha_j > -1/2$  como uma consequência para  $\alpha_j > \alpha_{j-d}$ . Então, o parâmetro  $q$  deve satisfazer à relação  $\alpha^* > -1/2$  e assim  $-1/2 < \alpha_j < \alpha^*$ . Mas, mesmo neste

intervalo apenas os valores de  $\alpha_j$  que satisfazem à condição de corte são permitidos. Uma vez fornecido a função característica  $g(x) = qx - 1$  podemos ver da condição de corte que o valores de  $\alpha_j$  que fornecem uma representação de dimensão  $d$  são dados por:

$$\alpha_j = \frac{[d]_q - 1}{q^d + 1} \quad (6.73)$$

já que os autovalores de  $S_0$  podem ser escritos como:

$$\alpha_{j-m} = g^m(\alpha_j) = q^m \alpha_j - [m]_q, \quad (6.74)$$

sendo  $[m]_q \equiv (1 - q^m)/(1 - q)$  o número de Gauss de  $m$ . A eq.(6.73) é diretamente demonstrada da equação de corte (6.67) para  $d = m$ . Na figura 6.2 mostramos um exemplo deste caso em que escolhemos  $q = 2$  e portanto para uma representação de dimensão  $d = 5$  ( $j = 2$ ) obtemos da eq.(6.73) que  $\alpha_j = 30/33$ . Note que quando alguma iteração futura alcança exatamente o ponto de interseção da função identidade com a reta vertical  $\alpha_{j-d} = -\alpha_j - 1 = -63/33$  as iterações param, fixando uma representação de dimensão  $d$  finita. Podemos ver também que outras escolhas de  $\alpha_j$  sempre produzirão representações de dimensões infinitas, cujas iterações futuras tendem a  $-\infty$ . Notamos também que para uma representação de dimensão  $d > 1$  a eq.(6.66) nunca será satisfeita no caso linear, e portanto as representações de dimensões finitas são dada apenas através da condição de corte na eq.(6.67). Apesar disso, existe uma solução trivial unidimensional para  $\alpha_j = \alpha^*$ .

Existe também uma representação marginal bi-dimensional para  $q = -1$ . O caso em que  $q < -1$  não é permitido pois não é possível obter uma representação com um estado de maior peso da representação.

No caso (iii) há também um ponto fixo solução da equação  $g(x^*) = x^*$  com a mesma expressão formal  $\alpha^* = 1/(q - 1)$  mas agora estável pois  $|q| < 1$ , indicando que apenas a região  $\alpha_j > \alpha^*$  é permitida (desde que  $\alpha_j$  tem que ser o maior peso da representação). Mesmo neste caso a forma da expressão para os valores permitidos de  $\alpha_j$  continua sendo dada pela eq.(6.73). Além disso, de maneira a obtermos uma representação de dimensão finita devemos satisfazer  $\alpha^* < \alpha_{j-d} = -\alpha_j - 1$ , caso

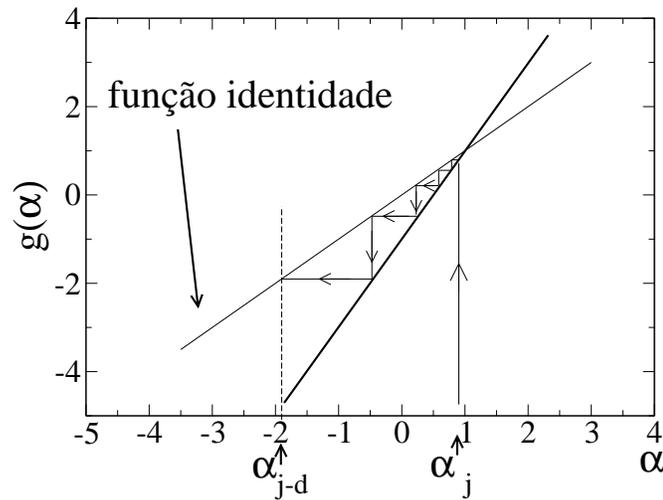


Figura 6.2: Análise gráfica da representação da álgebra do  $sl(2)$  generalizada para  $g$  linear com inclinação  $q > 1$  e de dimensão  $d = 5$ , para  $q = 2$ ,  $\alpha_j = 30/33$  e  $\alpha^* = 1$ . A linha tracejada ( $\alpha_{j-d} = -63/33$ ) é a condição de corte e a curva esboçada com a linha mais fina é a função identidade, como indicado na figura, enquanto a outra é a função  $g(\alpha) = 2\alpha - 1$ .

contrário a dimensão da representação será infinita e as iterações tendem ao ponto fixo  $\alpha^*$ . Da eq.(6.73) e da restrição dada por  $\alpha_j > -1/2$  obtemos que  $\alpha^* < -1/2$ . Uma representação gráfica desta situação pode ser vista na figura 6.3 em que graficamos as funções identidade e linear  $g(\alpha) = 0,8\alpha - 1$ . Para esta função característica  $g$  em que escolhemos  $q = 0,8$  e para uma representação de dimensão  $d = 5$  obtemos da eq.(6.73)  $\alpha_j = 1,7787$ . Note mais uma vez que outras escolhas para  $\alpha_j$  produziram representações de dimensão infinita em que as iterações futuras tenderiam ao ponto fixo  $\alpha^*$ .

Para finalizar essa subseção gostaríamos de demonstrar que no caso em que utilizamos uma função característica linear com inclinação  $q$ , a álgebra do  $sl(2)$  generalizada corresponde a álgebra do  $sl_q(2)$ .

Como vimos na seção 3.1 a álgebra do  $sl_q(2)$  é uma álgebra gerada por três operadores  $S_z$ ,  $S_+$  e  $S_-$  que satisfazem às seguintes relações de comutação (6.38-6.39):

$$[S_z, S_{\pm}] = \pm S_{\pm} \quad (6.75)$$

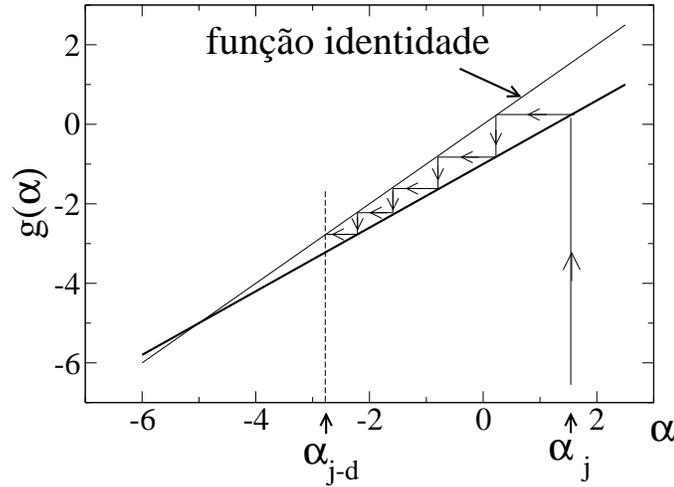


Figura 6.3: Análise gráfica da representação da álgebra do  $sl(2)$  generalizada de dimensão  $d = 5$ , para  $q = 0,8$ ,  $\alpha_j = 1,7787$  e  $\alpha^* = -5$ . A linha tracejada ( $\alpha_{j-d} = -2.7787$ ) é a condição de corte e a curva esboçada com a linha mais fina é a função identidade, como indicado na figura, enquanto a outra é a função  $g(\alpha) = 0,8\alpha - 1$ . Note que o caso em que  $\alpha_j < \alpha^*$  não é permitido já que não satisfazemos  $\alpha_j > g^m(\alpha_j) \forall m$  inteiro.

$$[S_+, S_-] = [2S_z], \quad (6.76)$$

sendo  $[x] \equiv (q^x - q^{-x})/(q - q^{-1})$ . A ação destes operadores em autoestados de  $S_z$  de dimensão  $2j + 1$  é uma representação da álgebra do  $sl_q(2)$  que pode ser escrita como <sup>2</sup>:

$$S_{\pm} |j; j - m\rangle = \sqrt{q^{-2j+1} [j \mp (j - m)]_{q^2} [j \pm (j - m) + 1]_{q^2}} |j; j - m \pm 1\rangle \quad (6.77)$$

$$S_z |j; j - m\rangle = (j - m) |j; j - m\rangle, \quad (6.78)$$

sendo  $2j + 1$  um inteiro positivo,  $m = 0, 1, 2, \dots, 2j$ , em que utilizamos a relação (2.66)  $[x] = q^{-x+1} [x]_{q^2}$ .

Em geral sempre podemos exibir um mapa que conecte os geradores de uma dada álgebra a outra ([102]-[103]). Em particular existe um mapa que converte os

<sup>2</sup>fazendo-se  $m \rightarrow j - m$  nas eqs. (6.38-6.39)

geradores da álgebra do  $sl(2)$  nos geradores da álgebra do  $sl_q(2)$  ([102]-[103]). A relevância em conhecer tal mapa é que eles podem munir informações das co-álgebras desconhecidas baseadas nas co-álgebras conhecidas ([34],[102]-[103]).

Em nosso caso, se relembrarmos a ação do operador  $S_0$  em um espaço de dimensão  $2j + 1$ , eq.(6.55), e usarmos a expressão para  $\alpha_{j-m}$  (fazendo  $q \rightarrow q^2$ ) dado por  $\alpha_{j-m} = q^{2m}\alpha_j - [m]_{q^2}$  podemos ver que expressando o operador  $S_0$  como:

$$S_0 = (q)^{2(j-S_z)}\alpha_j - [j - S_z]_{q^2}, \quad (6.79)$$

este age em uma representação de dimensão  $2j + 1$  da álgebra do  $sl_q(2)$ , exatamente como ele age em seu próprio espaço de mesma dimensão.

Se nós identificamos também:

$$J_+ = \frac{\sqrt{-Q_2(2\alpha_j + 1 + Q_2[j - S_z + 1]_{q^2})}}{\sqrt{q^{-2j+1}[j + S_z]_{q^2}}} S_+ \quad (6.80)$$

sendo  $Q_2 = (q^2 - 1)\alpha_j - s$ , este gerador também age em uma representação de dimensão  $2j + 1$  da álgebra do  $sl_q(2)$  de mesma maneira que ele age em seu próprio espaço de estados de mesma dimensão. Como  $J_- = (J_+)^{\dagger}$ , as transformações dadas pelas eqs.(6.79-6.80) conectam a álgebra do  $sl_q(2)$  com a álgebra do  $sl(2)$  generalizada para o caso de uma função  $g$  linear com inclinação  $q \neq 1$ .

Então fica demonstrado que o caso linear (com inclinação  $q \neq 1$ ) da álgebra do  $sl(2)$  generalizada corresponde à álgebra do  $sl_q(2)$ . Na próxima subseção estaremos interessado em analisar o caso em que a função característica  $g$  é não-linear, procurando as representações de dimensão finita e infinita da álgebra do  $sl(2)$  generalizada. É neste caso de uma função característica não-linear que estaremos interessados em exibir uma realização de JS que conecte esta álgebra generalizada com aquela AHG para uma função característica  $f$  também não-linear.

### 6.2.2 Função característica não-linear (quadrática)

Nesta subseção estaremos focando nossa atenção ao estudo da álgebra do  $sl(2)$  generalizada no caso em que a função característica  $g$  é uma função não-linear de  $S_0$ , em

especial consideraremos uma função quadrática. Por uma futura simplicidade, que se tornará claro quando apresentarmos o mapa de JS, consideraremos uma função característica quadrática do tipo  $g(x) = -tx^2 + qx - 1$  para  $t > 0$ . Neste caso as relações de comutação da álgebra ficam da seguinte forma:

$$[S_0, J_-]_q = J_-(-tS_0^2 - 1) \quad (6.81)$$

$$[S_0, J_+]_{q^{-1}} = (1/q) J_+(-tS_0^2 - 1) \quad (6.82)$$

$$[J_+, J_-] = t^2 S_0^4 + 2tq S_0^3 + (1 - q^2 - t) S_0^2 + (1 + q) S_0. \quad (6.83)$$

Se  $t = 0$  ( $q \neq 1$ ) obtemos as relações de comutação da álgebra do  $sl_q(2)$ ; para  $t = 0$  e  $q = 1$  obtemos as relações de comutação da álgebra  $sl(2)$ .

Agora voltamos nossa atenção para a análise das representações de dimensões finita e infinita da álgebra descrita pelas relações de comutação acima, onde estaremos considerando uma função  $g(\alpha) = t'\alpha^2 + q'\alpha - 1$  para  $t' > 0$  e com a restrição  $\alpha < q'/(2t')$ , para garantir uma função inversível  $g$ .

Para uma representação de dimensão finita, desde que nós iniciamos sempre de um estado de maior peso, podemos encontrar dois diferentes tipos de condições em que a eq.(6.57) é identicamente nula, i.e.  $\widehat{N}_m = 0$ , dadas por:

$$\alpha_j = \alpha_{j-d} \quad (6.84)$$

e

$$\alpha_j + \alpha_{j-d} + 1 = 0; \quad (6.85)$$

caso contrário a dimensão da representação será infinita.

O zero oriundo da condição dada pela eq.(6.84) podem ser estudados a partir da análise e estabilidade dos pontos fixos  $\overline{\alpha}^*$  da função característica  $g$  e suas funções compostas [34]. Primeiramente analisaremos a estabilidade dos pontos fixos de período 1, soluções da equação  $\overline{\alpha}^* = g(\overline{\alpha}^*)$ . Esta análise pode ser separada em três diferentes casos: (1)  $\Delta < 0$ , (2)  $\Delta = 0$  e (3)  $\Delta > 0$  sendo  $\Delta \equiv (q' - 1)^2 - 4t'$ . Como, a idéia

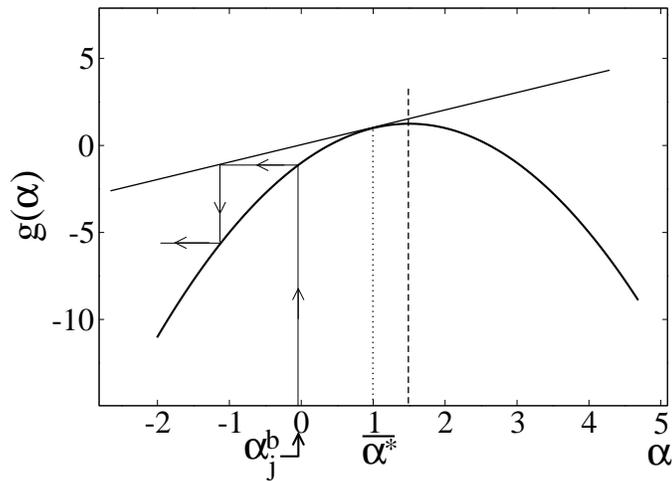


Figura 6.4: Análise gráfica das representações da álgebra do  $sl(2)$  generalizada para  $g(\alpha) = -\alpha^2 + 3\alpha - 1$  ( $\Delta = 0$ ). Note que há um ponto fixo  $\bar{\alpha}^* = 1$  e duas diferentes regiões que correspondem a dois diferentes comportamentos assintóticos para os auto-valores de  $J_0$ , que estão associados com as representações de dimensão infinita. Nesta figura, exibimos as iterações de  $\alpha_j^b$  cujas iterações futuras tendem para  $-\infty$ . Note também que uma representação uni-dimensional pode ser obtida para a escolha  $\alpha_j = \bar{\alpha}^*$ .

fundamental é exibir o mapa de JS que conecte as álgebras do  $sl(2)$  generalizada e a AHG, restringiremos nossa análise para o caso (2)  $\Delta \equiv (q' - 1)^2 - 4t' = 0$ .

Neste caso  $g$  apresenta um ponto fixo dado por  $\bar{\alpha}^* = (q' - 1)/2t'$  sendo que  $|f'(\bar{\alpha}^*)| = 1$ . Para  $\alpha_j = \bar{\alpha}^*$  obtemos uma representação unidimensional  $d = 1$  da álgebra, desde que  $\widehat{N}_0 = 0$ , ou seja,  $\alpha_{j-d} = \alpha_{j-1} = \alpha_j = \bar{\alpha}^*$ .

Além desta representação de dimensão finita, há representações de dimensões infinitas para os seguintes valores de  $\alpha_j$ : (i) (a)  $\bar{\alpha}^* < \alpha_j < -q'/(2t')$  e (b)  $-\infty < \alpha_j < \bar{\alpha}^*$ . No caso (a) os auto-valores de  $J_0$ ,  $g^{(m)}(\alpha_j)$ , tendem ao valor assintótico  $\bar{\alpha}^*$  enquanto na região (b) tendem ao  $-\infty$ . Na figura 6.4 mostramos as funções  $g(\alpha) = -\alpha^2 + 3\alpha - 1$  e  $y = \alpha$  versus  $\alpha$  e exibimos as iterações de  $\alpha_j^b = -0.05$ . A linha pontilhada vertical corresponde ao ponto fixo  $\bar{\alpha}^* = 1$  e a linha tracejada vertical a  $\alpha = -q'/(2t') = 1.5$ .

É importante frisar que a álgebra apresenta representação de dimensão infinita se escolhermos um  $\alpha_j$  dentro das regiões permitidas e se a condição de corte não é

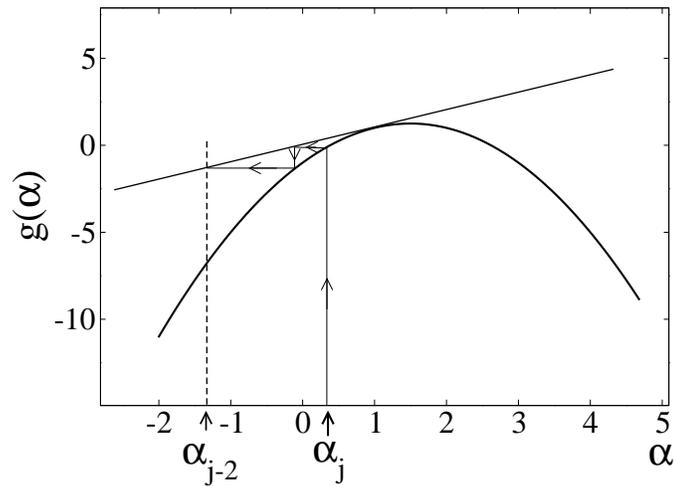


Figura 6.5: Análise gráfica das representações da álgebra do  $sl(2)$  generalizada para  $g(\alpha) = -\alpha^2 + 3\alpha - 1$  ( $\Delta = 0$ ). Note que há uma representação bi-dimensional ( $j = 1/2$ ) associada com a condição de corte  $\alpha_{j-2} = -\alpha_j - 1$  para a escolha de  $\alpha_j = 0.33479$ . Existe também uma outra representação bi-dimensional para  $\alpha_j = 2.9228$ , mas este valor está fora da região,  $\alpha < -q'/(2t') = 1.5$ , em análise.

satisfeita para alguma iteração futura. Como dito, a equação de corte (6.85) corresponde a uma representação  $d$ -dimensional da álgebra. Por exemplo, usando  $t' = -1$ ,  $q = 3$  e  $s' = 1$ , que implica em  $\Delta = 0$ , e selecionando a representação  $j = 1/2$  ( $d = 2$ ), obtemos  $\alpha_j = 0.33479$  e  $\alpha_j = 2.9228$  como solução da eq.(6.85). Assim, para obtermos uma representação de dimensão 2, devemos escolher  $\alpha_j = 0.33479$ , já que  $\alpha_j = 2.9228$  está fora da região em análise ( $\alpha_j < -q'/(2t) = 1.5$ ). Um exemplo desta representação bi-dimensional- $d = 2(j = 1/2)$ - é mostrada na figura 6.5, na qual exibimos as funções  $g(\alpha) = -\alpha^2 + 3\alpha - 1$  e  $y = \alpha$  versus  $\alpha$ , onde escolhemos  $\alpha_j = 0.33479$ .

### 6.3 Na direção de um mapa de JS generalizado

Primeiramente, considere a álgebra de dois osciladores deformados independentes (desacoplados) que chamaremos de oscilador do tipo-1 e oscilador do tipo-2. Assumiremos que as relações de comutação dos geradores de cada álgebra satisfaçam as relações (2.38-2.40) para uma dada função analítica  $f$ . Como vimos no capítulo 2, estas álge-

bras têm uma representação geral dada por:

$$H_1|n_1, n_2\rangle = f^{(n_1)}(\alpha_0)|n_1, n_2\rangle \quad (6.86)$$

$$A_1^\dagger|n_1, n_2\rangle = M_{n_1}|n_1 + 1, n_2\rangle \quad (6.87)$$

$$A_1|n_1, n_2\rangle = M_{n_1-1}|n_1 - 1, n_2\rangle \quad (6.88)$$

sendo  $M_{n_i-1}^2 = f^{(n_i)}(\alpha_0) - \alpha_0$ ,  $n_i = 1, 2, 3, \dots$  para  $i = 1, 2$  e  $|n_1, n_2\rangle \equiv |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle$ , onde  $\otimes$  é o produto tensorial. De maneira análoga  $H_2$  atua na segunda entrada de  $|n_1, n_2\rangle$ . Aqui estamos considerando que  $H_1$  e  $H_2$  possuem autoestado de vácuo com o mesmo auto-valor, i.e.  $\alpha_0^{(1)} = \alpha_0^{(2)} \equiv \alpha_0$ , onde  $H_1|0, 0\rangle = \alpha_0^{(1)}|0, 0\rangle$  and  $H_2|0, 0\rangle = \alpha_0^{(2)}|0, 0\rangle$ . Partindo do autoestado de vácuo  $|0, 0\rangle$  podemos construir diferentes autoestados dos osciladores deformados, dados por:

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{(A_1^\dagger)^{n_1} (A_2^\dagger)^{n_2}}{M_0^{n_1+n_2} \sqrt{[n_1]_f! [n_2]_f!}} |0, 0\rangle \quad (6.89)$$

onde o número de Gauss generalizado de  $m$ , denotado por  $[m]_f$ , para uma dada função geral  $f$ , é definido como [33]

$$[m]_f \equiv \frac{M_{m-1}^2}{M_0^2} = \frac{f^{(m)}(\alpha_0) - \alpha_0}{f(\alpha_0) - \alpha_0} \quad (6.90)$$

e

$$[m]_f! \equiv [m]_f [m-1]_f \dots [1]_f. \quad (6.91)$$

O objetivo nesta seção é exibir um mapa de JS que conecte duas AHG independentes, com uma função característica não-linear  $f$ , a álgebra do  $sl(2)$  generalizada, com uma função característica não-linear  $g$ . Analogamente ao mapa de JS padrão, nós introduzimos o seguinte mapa:

$$J_z \equiv G(N_1, N_2) \quad (6.92)$$

$$J_+ \equiv F(N_1, N_2) A_1^\dagger A_2 \quad (6.93)$$

$$J_- \equiv A_2^\dagger A_1 F(N_1, N_2), \quad (6.94)$$

onde  $N_1$  e  $N_2$  são os operadores números definidos como

$$N_1|n_1, n_2\rangle = n_1|n_1, n_2\rangle \quad (6.95)$$

$$N_2|n_1, n_2\rangle = n_2|n_1, n_2\rangle \quad (6.96)$$

e o funcional  $F$  e  $G$  tendo as seguintes formas

$$F(N_1, N_2) \equiv \frac{\sqrt{-Q_2 \left[ j + 1 - \frac{N_1 - N_2}{2} \right]_g \left( 2\alpha_j + 1 + Q_2 \left[ j + 1 - \frac{N_1 - N_2}{2} \right]_g \right)}}{M_0^2 \sqrt{\left[ j + 1 - \frac{N_1 - N_2}{2} \right]_f \left[ j + \frac{N_1 - N_2}{2} \right]_f}} \quad (6.97)$$

e

$$G(N_1, N_2) \equiv \alpha_j + Q_2 \left[ j - \frac{N_1 - N_2}{2} \right]_g \quad (6.98)$$

onde  $Q_2 = g(\alpha_j) - \alpha_j$ ,  $[m]_f = \frac{f^m(\alpha_0) - \alpha_0}{f(\alpha_0) - \alpha_0}$  e  $[m]_g = \frac{g^m(\alpha_j) - \alpha_j}{g(\alpha_j) - \alpha_j} \forall m$  inteiro e positivo, onde  $f$  e  $g$  são funções analíticas gerais. Podemos notar que para  $f(x) = x + 1$  e  $g(x) = x - 1$  o mapa de JS generalizado recupera o mapa padrão [44]. Se  $f(x) = qx + 1$  e  $g(x) = qx - 1$ ,  $q \neq 1$ , o mapa JS generalizado é o mapeamento que converte os geradores do  $sl_q(2)$  nos geradores da álgebra do  $sl(2)$  generalizada [34].

Como ficará claro adiante, o operador

$$J^2 \equiv \frac{1}{2} [J_+ J_- + J_- J_+ + J_z (J_z + 1) + g(J_z)(g(J_z) + 1)] \quad (6.99)$$

é o operador Casimir da álgebra gerada por  $J_z$ ,  $J_+$  e  $J_-$ . Se identificamos

$$n_1 \rightarrow j + m \implies j = \frac{n_1 + n_2}{2} \quad (6.100)$$

$$n_2 \rightarrow j - m \implies m = \frac{n_1 - n_2}{2} \quad (6.101)$$

podemos facilmente verificar das eq.(6.89), que um autoestado geral do operador  $J_z$  é escrito como

$$|j, m\rangle = \frac{(A_1^\dagger)^{j+m}(A_2^\dagger)^{j-m}}{M_0^{2j} \sqrt{[j+m]_f! [j-m]_f!}} |0, 0\rangle \quad (6.102)$$

onde  $m = -j, -j+1, \dots, 0, \dots, j-1, j$ . Sem perda de generalidade identificamos  $m \rightarrow j-m$  e denotamos  $|j, j-m\rangle \equiv |\alpha_j, j-m\rangle$  onde  $m = 0, 1, 2, \dots, 2j$ . A mudança de  $j$  para  $\alpha_j$ , e vice-versa, é bem definida, já que, estamos considerando apenas funções características inversíveis.

As representações da álgebra é fixada por  $J_z, J_+$  e  $J_-$  obtidas pela ação destes operadores nos autoestados de  $J_z, |\alpha_j, j-m\rangle$ , dados por:

$$J_z |\alpha_j, j-m\rangle = (\alpha_j + Q_2 [m]_g) |\alpha_j, j-m\rangle \quad (6.103)$$

$$J_+ |\alpha_j, j-m\rangle = \sqrt{-Q_2 [m]_g (2\alpha_j + 1 + Q_2 [m]_g)} |\alpha_j, j-m+1\rangle \quad (6.104)$$

$$J_- |\alpha_j, j-m\rangle = \sqrt{-Q_2 [m+1]_g (2\alpha_j + 1 + Q_2 [m+1]_g)} |\alpha_j, j-m-1\rangle \quad (6.105)$$

$$J^2 |\alpha_j, j-m\rangle = \alpha_j (\alpha_j + 1) |\alpha_j, j-m\rangle, \quad (6.106)$$

válida para funções analíticas gerais  $f$  and  $g$ , onde podemos ver que  $J^2$  é o operador Casimir da álgebra. É importante frisar que esta representação (6.103-6.106) é válida para  $m = 0, 1, 2, \dots, 2j$ . Assim, o mapa de JS generalizado (6.92-6.95) é muito bem definido para estes valores de  $m$ .

Uma vez apresentado a realização de JS generalizada, podemos mostrar que o mesmo, definido nas eqs.(6.92-6.95) conecta a álgebra do  $sl(2)$  generalizada a duas AHG independentes.

Para isto, basta mostrar que os operadores  $S_0, J_+, J_-$  e  $\hat{C}$  atuam em  $2j+1$  estados da representação da álgebra do  $sl(2)$  generalizada, eqs.(6.55-6.58, exatamente como os operadores  $J_z, J_+, J_-$  and  $J^2$ , definos nas eqs.(6.103-6.106), atuam nos  $2j+1$  estados de sua própria representação. Para verificar isto, usamos  $[m]_g = \frac{g^m (\alpha_j) - \alpha_j}{g(\alpha_j) - \alpha_j} =$

$\frac{\alpha_j - m - \alpha_j}{Q_2}$  e  $\alpha_{j-m} = g^m(\alpha_j)$ . Assim, podemos reescrever a representação da álgebra do  $sl(2)$  generalizada eqs.(6.55-6.58 como

$$J_0|\alpha_j, j - m\rangle = (\alpha_j + Q_2 [m]_g)|\alpha_j, j - m\rangle \quad (6.107)$$

$$J_+|\alpha_j, j - m\rangle = \sqrt{-Q_2 [m]_g (2\alpha_j + 1 + Q_2 [m]_g)} |\alpha_j, j - m + 1\rangle \quad (6.108)$$

$$J_-|\alpha_j, j - m\rangle = \sqrt{-Q_2 [m + 1]_g (2\alpha_j + 1 + Q_2 [m + 1]_g)} |\alpha_j, j - m - 1\rangle \quad (6.109)$$

$$\widehat{C}|\alpha_j, j - m\rangle = \alpha_j(\alpha_j + 1)|\alpha_j, j - m\rangle \quad (6.110)$$

e nossa prova está completa.

A partir deste ponto, discutiremos, por simplicidade, o caso em que as funções características das álgebra generalizadas,  $f$  e  $g$ , sejam polinômios de grau dois. Neste caso, é possível simplificar o mapa de JS generalizado, fazendo-se escolhas particulares para  $f$  e  $g$ . Por exemplo, se escolhermos  $f(\alpha_0) = t\alpha_0^2 + q\alpha_0 + 1$ ,  $g(\alpha_j) = -t\alpha_j^2 + q\alpha_j - 1$  e  $\alpha_j = -\alpha_0$  podemos ver que  $-Q_2 [m]_g = M_0^2 [m]_f \forall m$  inteiro, de tal maneira que a expressão para ofuncional  $F$  torna-se

$$F(N_1, N_2) = \frac{\sqrt{2\alpha_j + 1 + Q_2 \left[ j + 1 - \frac{N_1 - N_2}{2} \right]}}{\sqrt{-Q_2 \left[ j + \frac{N_1 - N_2}{2} \right]}} \quad (6.111)$$

onde, doravante,  $[m] = \frac{g^m(\alpha_j) - \alpha_j}{g(\alpha_j) - \alpha_j}$  para a função característica  $g$  definida acima. Note também que a representação (6.103-6.106) não se altera para estas escolhas particulares de funções características.

O próximo passo é verificar se estas escolhas de funções características para  $f$  e  $g$  e, para os parâmetros  $\alpha_0$  e  $\alpha_j$  são possíveis quando vistos dentro das AHG e da álgebra do  $sl(2)$  generalizada.

Como vimos no capítulo 2 e neste capítulo, as representações de cada álgebra pode ser estudada através de análise de estabilidade dedosatratores de  $f$  (ou  $g$ ) e de

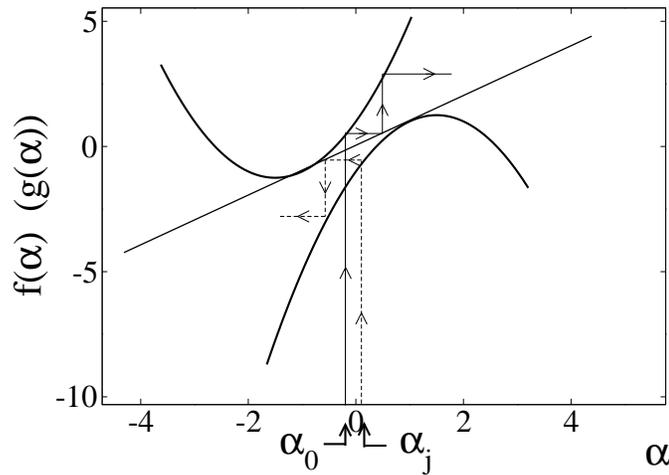


Figura 6.6: Análise gráfica das representações das AHG e da álgebra do  $sl(2)$  generalizada para  $f(\alpha) = \alpha^2 + 3\alpha + 1$  e  $g(\alpha) = -\alpha^2 + 3\alpha - 1$  ( $\Delta = 0$ ). Note que existe um ponto fixo,  $\alpha^* = -1$  and  $\overline{\alpha^*} = 1$ , para  $f$  e  $g$ , respectivamente. Note também que é possível escolher  $\alpha_0$  como o menor peso da representação da AHG que implica em  $\alpha_j = -\alpha_0$  como sendo o maior peso da representação da álgebra do  $sl(2)$  generalizada. Nesta figura mostramos os casos  $\alpha_0 = -0.15$  e  $\alpha_j = -\alpha_0 = 0.15$ .

suas funções compostas. Como discutido anteriormente nesta seção, consideraremos as funções características  $f(\alpha) = t\alpha^2 + q\alpha + 1$  com  $\alpha_0 > -q/2t$  e  $g(\alpha) = -t\alpha^2 + q\alpha - 1$  com  $\alpha_j < q/(2t)$ . Mostramos que na AHG, para  $\Delta = (q - 1)^2 - 4t = 0$ , as regiões permitidas de  $\alpha_0$  associados com representações de dimensão finita são dadas por: (i)  $-q/(2t) < \alpha_0 < \alpha^*$  e (ii)  $\alpha^* < \alpha_0 < \infty$  onde  $f'(-q/(2t)) = 0$ . Por outro lado, na álgebra do  $sl(2)$  generalizada, há também regiões permitidas para  $\alpha_j$  onde podemos encontrar representações de dimensão finita; estas regiões são: (a)  $\overline{\alpha^*} < \alpha_j < q/(2t)$  e (b)  $-\infty < \alpha_j < \overline{\alpha^*}$ , onde  $g'(q/(2t)) = 0$ .

Das regiões permitidas para  $\alpha_0$  podemos ver que cada valor dentro delas, corresponde a um valor  $\alpha_j = -\alpha_0$  dentro das regiões permitidas para  $\alpha_j$ , desde que

$$\overline{\alpha^*} = -\alpha^*. \quad (6.112)$$

Um exemplo deste caso, é mostrado na figura 6.6 onde exibimos as funções  $f(\alpha) = \alpha^2 + 3\alpha + 1$ ,  $g(\alpha) = -\alpha^2 + 3\alpha - 1$  e  $y = \alpha$  versus  $\alpha$ . Nesta figura, as iterações

são realizadas para  $\alpha_0 = -0.15$  e  $\alpha_j = -\alpha_0 = 0.15$ . Note também que as álgebras podem apresentar representações uni-dimensionais para  $\alpha_0 = \alpha^*$  e  $\alpha_j = -\alpha_0 = \overline{\alpha^*}$ .

Agora, focamos nossa atenção para discutir as representações de dimensão finita da álgebra do  $sl(2)$  generalizada, vinda da equação de corte

$$\alpha_j + \alpha_{j-d} + 1 = 0. \quad (6.113)$$

Como mostrado na seção 6.2, considerando a função característica  $g(\alpha) = -\alpha^2 + 3\alpha - 1$ , podemos obter uma representação bi-dimensional da álgebra do  $sl(2)$  generalizada quando escolhermos  $\alpha_j = 0.33479$ . Na figura 6.4, mostramos as iterações de  $\alpha_j = 0.33479$ . Nesta mesma figura, podemos ver também que  $\alpha_0 = -\alpha_j = -0.33479$  está dentro da região permitida para  $\alpha_0$ ,  $\alpha^* < \alpha_0 < \infty$ , que corresponde a uma representação de dimensão infinita da AHG para  $f(\alpha) = \alpha^2 + 3\alpha + 1$ .

Finalmente, argumentamos que para funções características gerais  $f$  e  $g$ , podemos sempre escolher, para uma dada função  $f(\alpha_0) = \sum_{i=1}^n a_i (\alpha_0)^i + 1$ , uma função  $g(\alpha_j) = \sum_{i=1}^n \overline{a}_i (\alpha_j)^i - 1$  onde  $\overline{a}_i = -a_i$ , se  $i$  é ímpar, e  $\alpha_j = -\alpha_0$  de tal maneira que  $-Q_2[m]_g = M_0^2[m]_f \forall m$  inteiro. Assim, podemos simplificar o funcional  $F$  de modo a tornar o mapa de JS generalizado mais simples. Obviamente, dado os parâmetros algébricos, devemos ser cuidadosos em encontrar as regiões permitidas para  $\alpha_0$  and  $\alpha_j$ .

# Capítulo 7

## Conclusão

Utilizamos nesta tese a Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG) que é construída através de uma generalização das relações de comutação da Álgebra de Heisenberg (AH). As relações de comutação são generalizadas com uma função  $f(J_0)$ , sendo  $J_0$  um dos geradores da AHG, que recupera as relações de comutação padrão da álgebra de Heisenberg no caso  $f(J_0) = J_0 + 1$ . Esta função, chamada função característica, permite-nos obter estruturas algébricas mais gerais. Por exemplo, se  $f(J_0) = qJ_0 + 1$ , a AHG corresponde à álgebra de Heisenberg deformada a um parâmetro, a qual pode ter seus geradores mapeados nos geradores da álgebra dos  $q$ -osciladores ([25],[26]) que, no limite  $q \rightarrow 1$ , reobtem a AH. Quando  $f$  é uma função não linear, vimos que as relações algébricas tornam-se mais gerais que a AH e a álgebra dos  $q$ -osciladores. Foi mostrado que quaisquer dois auto-valores sucessivos de  $J_0$  estão relacionados por  $\varepsilon_n = f(\varepsilon_{n-1})$ , sendo que  $\varepsilon_n$  é o auto-valor correspondente a um autoestado geral,  $|n\rangle$ , de  $J_0$ . Como vimos, um auto-valor  $\varepsilon_n$  de  $J_0$  pode ser escrito como  $\varepsilon_n = f^n(\alpha_0)$ , onde  $f^n(\alpha_0)$  é a  $n$ -ésima iteração da função  $f$  em  $\alpha_0$  (auto-valor de vácuo). Assim, as representações da AHG foram estudadas analisando a estabilidade dos atratores da função característica  $f$  e de suas funções compostas. Observamos que os autovalores do operador  $J_0$  podem apresentar os mais variados comportamentos, os quais dependem da função característica usada e do auto-valor de vácuo escolhido.

Um comportamento peculiar que analisamos usando este formalismo é análogo àquele que encontramos em sistemas ligados, como em átomos e moléculas, os quais

em geral apresentam um espectro de energia limitado superiormente, com infinitos níveis de energia. Esta analogia sugere que a AHG, pode ser usada na descrição fenomenológica de alguns espectros de energia de átomos e moléculas [29]. Um outro possível uso fenomenológico da AHG consiste em considerar o formalismo de segunda quantização ([35],[36]) aplicado para partículas compostas (sistemas ligados).

Consideramos então as propriedades termodinâmicas de um sistema formado por um conjunto de “partículas compostas” (AHG com uma função característica linear) não interagentes: o  $q$ -Gás ideal. Este sistema para  $0 < q < 1$ , possui um espectro de energia limitado superiormente e com infinitos níveis de energia [38]. Como consequência, a função de partição de Boltzmann-Gibbs (BG) dos estados ligados é divergente; isto reflete o fato de que este tipo de sistema sempre se ioniza a qualquer temperatura finita. Analisando esta função de partição obtemos uma função de partição regularizada que permitiria obter as propriedades tipo-termodinâmicas a baixas temperaturas do  $q$ -gás ideal antes de alcançar o equilíbrio termodinâmico (ionização).

Analisamos também o problema oriundo da divergência da função de partição via simulações computacionais, utilizando o Método de Monte Carlo (MMC). Através deste, podemos realizar simulações que mostram que o  $q$ -gás ideal de  $q$ -osciladores permanece, em baixas temperaturas, em um *Estado de Quase-Equilíbrio* (EQE) antes de atingir o estado correspondente à ionização, apresentando uma energia média por  $q$ -oscilador que varia lentamente até alcançar a energia média de ionização prevista pelo formalismo de BG. Este EQE possui um tempo de duração que aumenta exponencialmente com o inverso da temperatura, seguindo uma lei de Arrhenius típica do problema de Kramers em reações químicas. Nos casos estudados, o EQE surge para temperaturas menores que 10% da temperatura correspondente à energia de ionização do sistema.

Induzido pela função de partição regularizada, propomos um MMC modificado que produz resultados em boa concordância com aqueles obtidos com o MMC usual no EQE, a baixas temperaturas. Assim, o formalismo analítico modificado obtido da função de partição regularizada, descreve as propriedades físicas médias do sistema no EQE. A grande vantagem de obter esta função regularizada é que podemos calcular

---

analiticamente as propriedades físicas médias do sistema no EQE. A concordância entre o formalismo modificado e as simulações utilizando o MMC usual depende do parâmetro  $q$  bem como do intervalo de temperatura analisado. Já o tempo de duração do EQE segue sempre uma lei Arrhenius com a temperatura para qualquer  $q \in [0, 1)$ .

Investigamos o EQE analisando as distribuições das energias em tal estado e observamos que as mesmas apresentam uma dependência exponencial com a energia e são quase-estacionárias, onde os níveis mais energéticos vão, com o passar do tempo, sendo cada vez mais visitados até que o sistema atinja o equilíbrio, ionização, predito por Boltzmann-Gibbs (BG).

Mostramos explicitamente que o EQE é um estado fora do equilíbrio medindo a função de autocorrelação de dois tempos. Observamos que a mesma possui uma dependência com o tempo de espera (envelhecimento), que é característico de sistemas que ainda não alcançaram o equilíbrio termodinâmico.

Este comportamento, observado para o  $q$ -gás ideal, é esperado que seja uma característica de muitos sistemas formados por partículas que possuem espectros de energia limitados superiormente e com infinitos níveis. De fato, por exemplo, este comportamento foi observado para um gás ideal de átomos de hidrogênio [41]. Neste, o “experimento computacional” utilizando o MMC fornece resultados análogos aos obtidos para o  $q$ -gás ideal, em que o gás ideal de átomos de hidrogênio também permanece em um EQE caracterizado por uma variação lenta das suas propriedades físicas.

Observamos também que para o gás de átomos de hidrogênio é possível realizar uma regularização da função de partição. Desta função de partição regularizada, propomos um MMC modificado e com este obtemos resultados que coincidem com aqueles utilizando o MMC usual no EQE, a baixas temperaturas. Tal concordância melhora à medida em que baixamos a temperatura do gás ideal de átomos de hidrogênio. Assim, via a função de partição regularizada, a baixas temperaturas, as propriedades físicas do EQE do gás ideal de átomos de hidrogênio pode ser completamente determinadas analiticamente. Comparando a energia média por partícula das dinâmicas usual e modificada, medimos o tempo de duração do EQE e vimos que o

mesmo segue uma lei de Arrhenius com a temperatura, assim como apresentado para o  $q$ -gás.

Comparando as propriedades do EQE do gás ideal de átomos de hidrogênio com aquelas obtidas para o  $q$ -gás ideal com  $q = 0.25$ , concluímos que o gás ideal de átomos de hidrogênio pode ter comportamento, a baixas temperaturas, descrito pelo  $q$ -gás ideal ( $q = 0.25$ ) sendo, portanto, o  $q$ -gás ideal com  $q = 0.25$  um protótipo para estudar o gás ideal de átomos de hidrogênio a baixas temperatura (temperatura medida em relação a energia de ionização). Esta boa concordância entre as dinâmicas deste dois sistemas se deve ao fato de que os mesmos possuem o primeiro nível de energia excitado, com uma energia que corresponde a 75% da energia de ionização de cada sistema.

Como observado, a baixas temperaturas e durante o intervalo de tempo de existência do EQE, o MMC com a dinâmica modificada coincide com o MMC com a dinâmica usual e, assim, vimos que a função de partição modificada descreve as propriedades físicas do gás ideal de átomo de hidrogênio no EQE. Mostramos também que incluindo a degenerescência no espectro de energia do átomo de hidrogênio, podemos também regularizar a função de partição. Os resultados para a energia média por partícula mostram uma contribuição maior dos estados excitados, como era de se esperar, para baixas temperaturas. Não realizamos simulações extensivas com o MMC usual levando em consideração a degenerescência no espectro de energia do átomo, entretanto, os resultados observados sugerem que o EQE e a lei de crescimento do tempo de duração do mesmo, apresentem resultados similares aos medidos anteriormente.

Propomos duas realizações físicas nas quais o átomo poderia ser encontrado no EQE. Destes, obtemos uma estimativa do tempo de duração real do EQE e vimos que o mesmo fornece valores muito grandes em temperaturas próximas a da temperatura ambiente. Portanto, o EQE de um gás diluído de átomos de hidrogênio pode ser considerado como um *Estado de Equilíbrio Efetivo*. Apesar disto, no EQE medimos a função de autocorrelação de dois tempos e mostramos a existência do envelhecimento.

Os resultados aqui apresentados corroboram a interpretação em termos de par-

tículas compostas da AHG para uma função característica linear com inclinação  $q$  ( $q \neq 1$ ), uma vez que o comportamento das propriedades “termodinâmicas”, em particular, do gás ideal de átomo de hidrogênio é análogo ao comportamento das propriedades do gás ideal de  $q$ -oscilador ( $q = 0.25$ ).

Por fim, abordamos também uma generalização da álgebra do  $sl(2)$  que foi construída de maneira análoga a feita para a AHG, em que as relações de comutação dos seus geradores possuem uma função característica  $g$  de um dos seus geradores. No caso em que  $g(x) = x - 1$  as relações de comutação tornam-se as relações de comutação da álgebra do  $sl(2)$ . No caso  $g(x) = qx - 1$  a álgebra corresponde a álgebra do  $sl_q(2)$ . Se  $g$  for não-linear, a estrutura algébrica é mais geral do que aquelas apresentadas nos casos lineares [33]. As representações foram estudadas usando técnicas de sistemas dinâmicos como a estabilidade dos atratores de  $g$  e de suas funções compostas.

Uma interpretação para a álgebra do  $sl(2)$  generalizada pode ser futuramente sugerida com o auxílio de uma classe de mapa de Jordan-Schwinger (JS) generalizado, aqui introduzido, que contém o mapa usual como caso especial [50]. A compreensão física desta transformação apresenta um grande interesse e é atualmente objeto de pesquisa.

Vemos na AHG e na álgebra do  $sl(2)$  generalizada estruturas algébricas ricas que podem ter aplicações bastantes complexas dependendo de escolhas especiais das funções características de cada álgebra. Esta riqueza intrínseca pode ser útil em diversos sistemas físicos, alguns deles mencionados nesta tese. O estudo de suas possíveis aplicações bem como o estudo de seus aspectos matemáticos apresentam interesse e merecem ser explorados.



# Referências Bibliográficas

- [1] V. G. Drinfeld, in *Proceeding of the International Congress of Mathematicians (Berkeley 1986)*, ed. A. M. Gleason (American Mathematical Society, Providence, RI, 1987) p. 798 .
- [2] M. Jimbo, Lett. Math. Phys. **11** (1986) 247.
- [3] M. Jimbo, *Yang Baxter Equation in Integrable Systems*, Adv. Series in Math. Phys. **10** (World Scientific, Singapore, 1990).
- [4] P. P. Kulish and N. Yu. Reshetikhin, Zapiski Semenov LOMI **101** (1981) 101.
- [5] E. K. Sklyanin, Funct. Anal. Appl. **16** (1982) 262.
- [6] D. Bonatsos and C. Daskaloyannis, nucl-th/9909003.
- [7] E. Abe, *Hopf Algebras (Cambridge U. Press, Cambridge, 1997)*.
- [8] V. Chari and A. Pressley, *A guide to Quantum Groups (Cambridge University Press, Cambridge, 1994)*
- [9] L. C. Biedenharn and M. A. Lohe, *Quantum Group Symmetry and q-Tensor Algebras (World Scientific, Singapore, 1995)*.
- [10] C. Gómez, M. Ruiz-Altaba and G. Sierra, *Quantum Group in Two-dimensional Physics (Cambridge University Press, Cambridge, 1996)*.
- [11] A. Klimyk and K. Schmüdgen, *Quantum Groups and Their Representations (Springer-Verlag, Berlin, 1997)*.

- [12] M. Chaichian and A. Demichev, *Introduction to Quantum Groups (World Scientific, Singapore, 1996)*.
- [13] C. Kassel, *Quantum Groups (Spring-Verlag, New York, 1995)*.
- [14] A. Joseph, *Quantum Groups and Their Primitive Ideals (Spring-Verlag, New York, 1995)*
- [15] M. T. Batchelor, L. Mezincescu, R. I. Nepomechie and V. Rittenberg, J. Phys. A **23** (1990) L141.
- [16] H. Grosse, S. Pallua, P. Prester and E. Raschhofer, J. Phys. A **24** (1994) 4761.
- [17] V. Buzek, J. Mod. Opt. **39** (1992) 949.
- [18] M. Chaichian, D. Ellinas and P. Kulish, Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 980.
- [19] L. M. Kuang, J. Mod. Opt. **41** (1994) 517.
- [20] K. P. Marzlin, Int. J. Theor. Phys. **36** (1997) 841.
- [21] C. Zhe, Phys. Rev. A **47** (1993) 5017.
- [22] A. Lerda and Sciuto, Nucl. phys. B **401** (1993) 613.
- [23] P. Roy, Mod. Phys. Lett. A, **11** (1996) 1489.
- [24] M. R. Ubriaco, Phys. Rev. E **55** (1997) 291.
- [25] A. J. Macfarlane, J. Phys. A **22** (1989) 4581.
- [26] L. C. Biedenharn, J. Phys. A **22** (1989) L873.
- [27] M. Arik and D. D. Coon, J. Math. Phys. **17**, 524-527 (1976).
- [28] J. L. Matheus-Valle, tese de doutorado, *Grupos Quânticos e  $q$ -Osciladores: Algumas Aplicações (CBPF, 1995)*.
- [29] J. de Souza, N. M. Oliveira-Neto and C. I. Ribeiro-Silva, physics/0512251 (aceito para publicação Eur. Phys. J. D (2006)).

- [30] M. R-Monteiro, Itzhak Roditi and Ligia M. C. S. Rodrigues, *Int. J. Mod. Phys. B* **8** 23 3281 (1994).
- [31] Ver por exemplo, Sun W. G., Ren W. Y., Hou. S. L. and Feng H., *Molecular Physics*, **103**, (17) 2335-2345 (2005).  
K. D. Sviratcheva, C. Bahiri and A. I. Georgieva and J. P. Draayer, *Phys. Rev. Lett*, **93** (15), 152501 (2004).  
M. N. Angelova, V. K. Dobrev and A. Frank, *Eur. Phys. J. D*, **31**,27-37 (2004).  
F. Iachello, R. D. Levine, *J. Chem. Phys.*, **77** (6), 3046-3055, (1982); F. Iachello, *Chem. Phys. Lett.* **78** (3), 581-585, (1981); F. Iachello and S. Oss., *Eur. Phys. J. D*, **19**, 307-314 (2002);  
Spiridonov V., *Phys. Rev. Lett.*, **69** (3), 398-401 (1992).
- [32] E. M. F. Curado and M. A. Rego-Monteiro, *J. Phys. A: Math. Gen.* **34** (2001) 3253-3264.
- [33] E. M. F. Curado, M .A. Rego-Monteiro and H. N. Nazareno, *Phys. Rev. A* **64** (2001) 012105, hep-th/0012244.
- [34] E. M. F. Curado and M .A. Rego-Monteiro, *Physics Letter A*,**300** (2002) 205-212.
- [35] V. B. Bezerra, E. M. F. Curado and M .A. Rego-Monteiro, *Phys. Rev. D* **65** (2002) 065020.
- [36] V. B. Bezerra, E. M. F. Curado and M .A. Rego-Monteiro, *Phys. Rev. D* **66** (2002) 085013.
- [37] C. I. Ribeiro-Silva, N. M. Oliveira-Neto, hep-ph/0409267; C. I. Ribeiro-Silva, E. M. F. Curado, M. A. Rego-Monteiro and N. M. Oliveira-Neto (em andamento).
- [38] N. M. Oliveira-Neto, E. M. F. Curado, F. D. Nobre and M. A. Rego-Monteiro, *Physica A* **34** (3-4) (2004) 573-579.
- [39] H. A. Kramers, *Physica* **7**, 284 (1940).

- [40] P. Hanggi, P. Talkner and M. Borkovec, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 251 (1990).
- [41] N. M. Oliveira-Neto, E. M. F. Curado, F. D. Nobre and M. A. Rego-Monteiro, cond-mat/0601046 (submetido *Physica A*).
- [42] L. S. Lucena, L. R. da Silva and C. Tsallis, *Phys. Rev. E* **51**, 6247 (1995).
- [43] N. M. Oliveira-Neto, E. M. F. Curado, F. D. Nobre and M. A. Rego-Monteiro, (submetido).
- [44] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley Publishing Company, Revised Edition).
- [45] E. K. Sklyanin 1980 *Zap. Nauchn. Sem. LOMI* **95** 55 (1982 *J. Sov. Math.* **19** 1532); 1983 *Funkt. Anal. Pril.* **17** 34 (1983 **17** 273).
- [46] P. P. Kulish and N. Y. Reshetikhin, *J. Sov. Math.* **23** 2435.
- [47] M. Jimbo 1985 *Lett. Math. Phys.* **10** 63.
- [48] V. G. Drinfeld 1986 *Proc. ICM Berkeley, CA* ed A. M. Gleason (Providence, RI: AMS) p 798; 1986 *Zap. Nauchn. Sem. LOMI* **155** 18.
- [49] S. Woronowicz 1987a *Publ. RIMS (Kyoto University)* **23** 117; 1987b *Commun. Math. Phys.* **111** 613; 1988 *Invent. Math.* **93** 35.
- [50] N. M. Oliveira-Neto, E. M. F. Curado and M. A. Rego-Monteiro (em fase final de redação).
- [51] P. Jordan, *Zeit. Phys.* **94** (1935) 531.
- [52] J. Schwinger in “Quantum theory of angular momentum”, L. C. Biedenharn and H. Van Dam eds. , (1965). Academic Press.
- [53] R. D. Mota, M. A. Xicotencatt and V. D. Granados, *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** (7): 2835-2842 (2004), *Canadian J. Phys.* **82** (10): 767-773 (2004).
- [54] A. Klein and E. R. Marshalek, *Rev. Mod. Phys.* **63** (1991) 375.

- [55] G. Marmo, A. Simoni and F. Ventriglia, Reports Math. Phys. **48** (1-2): 149-157 (2001).
- [56] R. Banerjee, B. Chakraborty, Nuclear Phys. B **449** (1-2): 317-346 (1995).
- [57] L. Defalco, R. Migmani and R. Scipioni, Phys. Lett. A, **201** (1):9-11 (1995).
- [58] T. D. Palev, *Second-order realization of Lie algebras with parafields operators*, Comptes Rendus de l'Academie Bulgare des Sciences **24**, 565 (1971).
- [59] V. I. Man'ko, G. Marmo, P. Vitale and F. Zaccaria, hep-th/9310053. Int. J. Mod. Phys. **A9** (1994) 5541-5561.
- [60] Daskaloyannis C, Kanakoglou K and Tsohantjis I, J. Math. Phys. **41** (2): 652-660 (2000).
- [61] Kyung-Hyung Cho, S. U. Park, hep-th/9406084.
- [62] C. P. Sun and H. C. Fu, J. Phys. A **22** (1989) L983.
- [63] M. Arik and D. D. Coon, J. Math. Phys. **17** (1976) 524.
- [64] V. V. Kuryshkin, Ann. Fond. Louis de Broglie **5** (1980) 111.
- [65] P. P. Kulish and E. V. Damaskinsky, J. Phys. A **23** (1990) L415.
- [66] L. Baulicu and E. G. Floratos, Phys. Lett. B **258** (1991) 171.
- [67] A. Jannussis, in *Hadronic Mechanics and Non-Potential Interactions*, ed. H. C. Myung (Nova Science, Commack, NY, 1991).
- [68] C. Daskaloyannis, J. Phys. A **24** (1991) L789.
- [69] C. Daskaloyannis and K. Ypsilantis, J. Phys. **25** (1992) 4157.
- [70] G. Brodimas, A. Jannussis and R. Mignani, U. di Roma preprint N. 820 (1991).
- [71] A. Jannussis, G. Brodimas and R. Mignani, J. Phys. A **24** (1991) L775.
- [72] R. Chakrabarti and R. Jagannathan, J. Phys. A **24** (1991) L711.

- [73] M. Artoni, J. Zang and J. L. Birman, *Phys. Rev. A* **47** (1993) 2555.
- [74] V. I. Man'ko, G. Marmo and F. Zaccaria, *Phys. Lett. A* **197** (1995) 95.
- [75] D. Bonatsos, C. Daskaloyannis and Kokkotas, *J. Phys. A* **24** (1991) L795.
- [76] D. Bonatsos, C. Daskaloyannis and Kokkotas, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 2958.
- [77] Th. Ioannidou, Diploma Thesis, U. of Thessaloniki (1993)
- [78] M. A. Rego-Monteiro, *Eur. Phys. J. C*, **21**, 749-756 (2001).
- [79] M. A. Rego-Monteiro and E. M. F. Curado, *Int. J. Mod. Phys. A* **17** 661 (2002).
- [80] Rego-Monteiro M. A. 1999 Preprint cbpf:nf:023/99; Curado E. M. F. and Rego-Monteiro M. A., *Phys. Rev. E*, **61** 6255 (2000).
- [81] K. Binder e D.W. Heermann, *Monte Carlo Simulation and Statistical Physics* (Springer-Verlag, New York, 1992).
- [82] V. L. Líbero, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol.22, no. 3, Setembro, 346-352 (2000).
- [83] Ver, por exemplo, S. G. Alves, N. M. Oliveira Neto, M. L. Martins, *Physica A*, **365**, 601-614, (2002). M. L. Martins, S. G. Alves e A. T. Bernades, *Ciência Hoje*, **31**, 187, 2002.
- [84] Ver, por exemplo, S. C. Ferreira Jr., M. L. Martins and M. J. Vilela, *Physica A*, **65**,(2002). S. C. Ferreira Jr., M. L. Martins and M. J. Vilela, *Physica A*, **261**,569-580,(2002).
- [85] Mario Sergio de Souza Almeida, Dissertação de Mestrado, “Análise Numérica de Uma Prova de Carga em Verdadeira Grandeza em Solo Residual de Gnaise”, Universidade Federal de Viçosa-UFV, Viçosa-MG, (2000).
- [86] Ver, por exemplo, A. C. Silva, E. S. Mendonça, M. L. Martins e C. Reis , *Revista Brasileira de Ciência dos Solos*, **24**, número 4,759-766, 2000.

- [87] K. Binder, *Topics in Current Physics: Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Springer-Verlag, New York, 1979).
- [88] C. Garrod, *Statistical Mechanics and Thermodynamics* (Oxford University Press, New York, 1995).
- [89] A. F. Brito, Dissertação de Mestrado, “Transição de Rugosidade no Modelo de Ising Unidimensional com Interações de Alcance Longo”, Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa-UFV, 2003.
- [90] Sílvio R. A. Salinas, “Introdução à Física Estatística”, (Edusp, São Paulo, 1999)
- [91] R. H. Fowler, *Statistical Mechanics*, Second Edition (Cambridge University Press, Cambridge, 1966), Capítulo XIV.
- [92] C. Tsallis, J. Stat. Phys. **52**, 479 (1998).
- [93] L. F. Cugliandolo, cond-mat/0210312.
- [94] Veja, por exemplo, “Teoria de Erros”, apostila da disciplina FIS 224, Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa-UFV. [www.ufv.br/dpf/disciplinas.htm](http://www.ufv.br/dpf/disciplinas.htm).
- [95] Eisberg and Resnick, *Física Quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas* (Editora Campus, Rio de Janeiro, 1979).
- [96] R. L. Graham, D. E. Knuth and O. Patashnik, *Concrete Mathematics: A Foundation for Computer Science*, Second Edition (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1994).
- [97] I. F. Silvera and J. T. M. Walraven, Phys. Rev. Lett. **44**, 164 (1980).
- [98] I. F. Silvera, Physica B+C **109-110**, 1499 (1982).
- [99] J. T. M. Walraven, Physica A **156**, 227 (1989).
- [100] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics* (McGraw-Hill Kogakusha, Ltd., Tokyo, 1965).

- [101] E. M. F. Curado and M. A. Rego-Monteiro, *Physica A*, **295** (2001) 268-275.
- [102] T. L. Curtright, C. K. Zachos, *Phys. Lett. B* 243 (1990) 237.
- [103] A. P. Polychronakos. *Mod. Phys. Lett. A* 5 (1990) 2325.