Fluctuacions en sistemes de no-equilibri

Francesc Sagués i Mestre

FLUCTUACIONS EN SISTEMES DE NO-EQUILIBRI.

Tesi doctoral presentada en la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona, per Francesc Sagués i Mestre.

Barcelona, Abril 1983.

UNIVERSIDAD DE BARCELONA
FACULTAD DE QUIMICA
DEPARTAMENTO DE QUIMICA FISICA

Josep Virgili i Vinadé, Catedràtic i Director del Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona,

CERTIFICA: Que el treball "Fluctuacions en sistemes de no-equilibri", ha estat dirigit pel Prof. Dr. L.M. Garrido Arilla, Catedràtic i Director del Departament de Física Teòrica. Ha estat revisat pel que subscriu i s'autoritza la seva presentació com memòria de Tesi Doctoral.

Barcelona, Abril 1983.

epartamento de Física Teórica
Facultad de Ciencias
Universidad de Barcelona

Tel. 321 43 00
Av. Generalísimo. s/n.
Barcelona-14

En cumplimiento de la legislación vigente declaro que la tesis del Sr. Sagués "Fluctuaciones en sistemas de no equilibrio" ha sido realizada bajo mi dirección. La tesis ha sido terminada y está en condiciones de ser presentada y leida.

Barcelona, a 26 de Abril de 1983

L. Garrido

Prof. L. Garrido
Director del Dpto. Física Teórica

ILMO. SR. DECANO DE LA FACULTAD DE QUIMICAS.-

D'ells m'anima la confiança,
de vosaltres la companyia.

Als meus pares, i a vosaltres
Margarida i Carles.

Vull agrair al Professor L.M. Garrido la confiança que em va demostrar en proposarme i iniciar-me en aquest treball, així com la seva constant i generosa disposició davant de qualsevol discussió. No oblido tampoc el seu encoratgament en els moments difícils de dubte i d'incertesa.

També vull donar les gràcies a tots els companys del Departament de Física Teòrica, i especialment als Drs. M. San Miguel i J.M. Sancho per les sempre valuoses converses que hem mantingut.

No puc tampoc deixar de recordar l'entúsiàstica ajuda del Dr. C. Simó i dels seus col.laboradors en el tractament numèric d'algunes qüestions d'aquesta tesi.

Igualment em plau recordar aquí a L. Vallés i R. Toral per la seva companyonia, i a J.M. Lucas i F. Mota per posar-me al dia en la utilització dels mitjans informàtics de que disposàvem.

Finalment, i no pas perquè sigui menys important, agraeixo al Departament de Química Física les facilitats proporcionades per a poder realitzar aquesta tesi en el Departament de Física Teòrica.

NOTACIÓ.

El treball es divideix en tres parts, encapçalades per un pròleg, i seguides d'unes conclusions. Cadascuna de les parts va dividida en capítols, i aquests darrers en seccions. Les equacions van numerades en cadascun dels capítols; així (I.2.3) indica la tercera equació del segon capítol de la primera part. Els indicatiu de capítol i part no els indicarem en el propi capítol i part respectivament. Igual notació i criteris emprarem pel que fa a les seccions, però suprimint els parèntesis. Les equacions dels apèndixs van numerades amb la lletra corresponent.

ÍNDEX

INTRODUCCIÓ.

No és gens estrany, que davant la complexitat dels problemes que pretenen abastar actualment la Física i la Química, ambdues esdevinguin cada cop més depenents una envers l'altra. La Química cerca explicacions rigoroses d'allò que el seu utillatge permet endevinar, mentre que la Física, i especialment la Teòrica, no pot prescindir, quan vol justificar les seves prediccions, de l'aplicació en sistemes concrets, aplicació que té, moltes vegades, aspectes químico-físics.

Ens ha semblat important d'insistir en aquesta idea, ja que l'estudi que hem realitzat, si bé té una extensa formulació teòrica, pot ser d'aplicació a sistemes típicament químico-físics, com poden ser, per exemple, sistemes de reaccions químiques amb difusió o sense. Exposat de manera breu, aquest és el contingut del pròleg que encapçala el treball que presentem.

L'estudi mecano-estadístic d'un sistema, es concreta molt sovint en la determinació dels anomenats propagadors o funcions de Green, d'entre els quals n'hi ha dos que tenen una especial significació. Ens estem referint a les anomenades funcions de correlació i de resposta, que, sí són conegudes exactament, especifiquen amb detall les principals propietats macroscòpiques del sistema.

En la primera part del treball hem plantejat procediments per a la resolució de qualsevol propagador, i en especial seran doncs d'aplicació per a les dues funcions abans esmentades. Allí fem servir amb escreix tècniques funcionals, que, sí bé tenen les seves arrels en la Teoria de Camps, són avui dia abastament utilitzades en altres aspectes de la Física Teòrica.

L'estreta connexió entre disciplines de què parlàvem un xic més amunt, és igualment comprovable a un altre nivell, sense que ens hàgim de moure de la Física Teòrica.

Així resulta alliçonador, que les poderoses tècniques desenvolupades especialment en el context de la Teoria Quàntica de Camps, augmentin cada cop més l'àmbit de la seva aplicació, superin l'objectiu primer de les partícules elementals, i s'endinsin en problemes genuïns de Mecànica Estadística, com poden ser, per exemple, el tractament de fenòmens crítics. En aquest sentit, el reconeixement envers el treball del guardonat recentment K. G. Wilson, ens sembla fora de qualsevol dubte. Creiem doncs molt interessant, utilitzar algunes de les esmentades tècniques en el context de dinàmiques estocàstiques ben caracteritzades.

En la segona part d'aquest treball hem formalitzat alguns aspectes d'aquesta darrera questió, i especialment ens hem sentit interessats en el desenvolupament de teories pertorbatives renormalitzades, com alguns autors les qualifiquen, encara que aquest adjectiu sol ésser emprat amb significats que sovint no són exactament coincidents.

Finalment, i per tal de completar el treball bàsicament de fonamentació realitzat fins aquell moment, ens va semblar oportú d'incorporar-hi una resolució pràctica per a un sistema real. Hauríem preferit que aquesta aplicació tingués elements químico-físics el més ben establerts possible. Tanmateix, dificultats inherents a la propia caracterització de la dinàmica estocàstica a que ens havíem restringit de bon començament, van fer que haguéssim de centrar-nos en d'altres sistemes, potser un xic allunyats d'aquelles característiques.

Així en la tercera i darrera part del treball, tractem amb l'acció laser, exemple que considerem especialment adient per a un tractament d'aquest tipus.

No dubtem però, de la conveniència d'avançar en l'aplicació de les tècniques esmentades en aquest treball vers la resolució de sistemes més propis de la Química-Física, i no cal dir, que aquest objectiu té per a nosaltres un interès inqüestionable.

PRÒLEG

No és pas exagerar quan afirmem que un dels grans reptes actuals de la Física i la Química, especialment en els seus aspectes teòrics, sigui justificar de manera concreta i rigorosa l'existència d'una direcció privilegiada en el temps, evidència per altra banda òbvia en la nostra realitat quotidiana.

Si bé la Termodinàmica del segle passat obrí la possibilitat de l'estudi fenomenològic de processos evolutius, en general no s'atreví a considerar més que sistemes en situacions d'equilibri termodinàmic o com a molt amb una evolució propera a l'equilibri i vers ell amb una termodinàmica de no equilibri lineal.

Això no obstant, esperaven resultats reveladors a qui es proposés la investigació de comportaments suficientment allunyats de l'equilibri termodinàmic, per als quals encara fos possible una descripció en termes de variables termodinàmiques macroscòpiques. En aquest sentit la figura de I. Prigogine i l'escola de Brussel.les en són els pioners. Llurs formulacions estan particularment elaborades i sistematitzades en el tractat de I. Prigogine i P. Glansdorff (1971).

Com a exemple de les situacions esmentades considerem aquells sistemes, familiars per a nosaltres, que suposen mescles que reaccionen químicament i subjectes a processos de difusió interna. En general llur evolució és descrita per sistemes d'equacions en derivades parcials acoblades i no lineals de difícil resolució. I si a més a més s'especifiquen unes condicions inicials i de contorn compatibles amb el procés estudiat, aquest darrer admet solucions no unívocament determinades. De totes aquestes, la termodinàmica permet de distingir la que correspon a les condicions d'equilibri, és a dir, entropia màxima per a sistemes aïllats, o energia lliure de Helmholtz mínima per als que especifiquem una temperatura i un volum fixos. Aquest tipus de solucions caracteritzen el que s'anomena branca termodinàmica. Suposem ara que variem suficientment els paràmetres del sistema, per exemple, la temperatura, de tal manera que el sistema sigui conduït a situacions cada cop més allunyades de l'equilibri. La termodinàmica de no equilibri ens haurà proporcionat condicions suficients d'estabilitat de la branca termodinàmica, i si no resulten satisfetes, hi ha la possibilitat que les solucions corresponents esdevinguin inestables. En aquestes condicions el sistema pot evolucionar cap a noves estructures, anomenades dissipatives, caracteritzades per comportaments organitzats o cooperatius.

Quan parlem dels comportaments esmentats ens podem referir a una gran varietat de sistemes dinàmics. Només ens cal revisar el treball de Haken(1975) i algunes monografies dedicades a aquests temes. (Haken (1973, 1974, 1977)). Per tal de precisar més sobre els treballs esmentats, tot i no pretendre ser exhaustius, indicarem que des d'aquest punt de vista s'han tractat sistemes físics com els laser (Graham i Haken(1970), De Giorgio i Scully (1970), Grossman i Richter (1971)), problemes hidrodinàmics(Boon (1972)), etc.; resulta però molt més interessant per a nosaltres l'estudi sota l'esmentada perspectiva de reaccions químiques, on la presència d'estructures amb un alt grau d'ordenació espacio-temporal ha estat posada experimentalment en evidència. (Zhabotinsky (1964), Busse (1969), Herschowitz i Kaufman (1970)). Concretant i referint-nos a sistemes químics, assenyalarem que la reacció de Belousov-Zhabotinsky està caracteritzada per un model amb tres estadis intermedis anomenat Oreganator, introduït prèviament per Field i Noyes (1974). Es pot trobar un comportament semblant en un altre model amb dues variables intermèdies postulat originalment per Prigogine i Lefever (1968) i conegut actualment com a Bruselator.

Una de les característiques essencials, i en general necessaria, per al manteniment de dites estructures organitzades, consisteix en què el sistema que les experimenta pugui mantenir-se en situacions suficientment allunyades de l'equilibri termodinàmic. Aquest fet requereix habitualment una transferència contínua d'energia o de matèria vers o des del sistema, i per això, aquest sistema es considerarà obert al seu entorn el qual funcionarà com una font o com un engolidor d'energia o de matèria. Si cessen aquests bescanvis, el procés evoluciona sota l'acció de forces dissipatives cap a un estat estacionari d'equilibri, caracteritzat per un valor mínim de l'entropia. Tot el que acabem d'assenyalar es manifesta amb claredat en la inestabilitat de Benard on l'aparició espontània de cel.letes regulars de convecció es produeix un cop s'ha superat un valor llindar del gradient de temperatures entre les capes superior i inferior del líquid, en tant que per sota d'aquest llindar la calor travessarà la capa líquida per pura conducció a un ritme cada cop més lent que tendeix a igualar aquella diferència de temperatures.

Amb tot el que hem dit anteriorment només hem donat unes idees parcials de caràcter fenomenològic, però en qualsevol cas persisteix l'interrogant pel que fa al mecanisme pel qual un sistema donat operant en certes situacions de no equilibri pot generar aquestes estructures ordenades. No sembla possible, ni tampoc prudent, de donar una resposta precisa i completa a aquesta qüestió i de lluny és el que nosaltres pretenem. Tal vegada el que cal ara és aventurar alguna hipòtesi amb arguments suficients de veracitat, com la que han considerat nombrosos autors, i que tot seguit exposem breument.

La idea consisteix a no limitar-nos a una visió totalment determinista i causal, sinó que confiem amb el que d'una manera complementària pugui proporcionar-nos un tractament estocàstic de l'evolució dinàmica d'aquests sistemes.

No podem prescindir d'aquesta perspectiva. En efecte, normalment tractem amb processos en que coexisteixen i interaccionen un nombre elevat de graus de llibertat. En aquestes condicions, si pretenem fer una descripció a nivell macroscò - pic, haurem d'escollir uns graus de llibertat rellevants com per exemple, potencials químics, concentracions, temperatura, etc. Un estat macroscòpic estarà sempre associat a transicions ràpides que involucren la resta de graus de llibertat no considerats explícitament. Per tant les variables triades com a rellevants estaran subjectes a desviacions entorn de certs valors de referència que corresponen als resultats de mesures experimentals efectuades amb dispositius d'aquest mateix caràcter macroscòpic. Aquestes desviacions s'apareixeran a l'observador com a fluctuacions associades a processos aparentment aleatoris.

Un cop ocorreguda la fluctuació, el sistema respon d'acord amb lleis fenomenològiques definides. Podríem pensar que aquestes fluctuacions, tot i ésser mesurables, ro - mandrien petites en front als valors macroscòpics, essent majoritàriament de caracter local i conseqüentment d'efectes restingits a una petita porció del sistema.

No obstant això, podrien desenvolupar un paper fonamental si aquell sistema es trobés en un estadi crític proper a una inestabilitat.

En aquest cas les petites fluctuacions del sistema es poden ampliar com a conseqüència del flux que mantenim amb el seu entorn i aquelles fluctuacions poden adquirir eventualment un caràcter global, i d'aquesta manera conduir el sistema a una nova branca estable amb característiques diferenciades d'aquella en la que anteriorment operava el procés.

Això es tradueix en un canvi rellevant de les propietats macroscòpiques, i aquesta transició, en alguns casos, pot venir acompanyada d'un augment en l'ordre del sistema.

A aquest mecanisme de generació d'estructures organitzades se'l coneix des de Prigogine i Glansdorff (1977) amb el nom de: <u>ordre a través de fluctuacions</u>.

La descripció anterior presenta força analogies amb la caracterització que usualment es fa de les transicions de fase en equilibri termodinàmic. Per això, a les transformacions d'estructures més o menys caòtiques que es converteixen en organitzades, i per a les quals n'hem avançat alguna explicació en el paràgraf anterior, s'ha convingut en anomenar-les transicions de fase de no equilibri, i així són considerades en els textos moderns de Física Estadística (Reichl (1980)).

Potser és oportú de fer observar que les idees apuntades en els paràgrafs anteriors han de considerar-se subjectes a investigació activa i per tant cal esperar-ne progressos intensos que poden ocórrer en forma d'una vertadera inestabilitat, com els mateixos Prigogine i Nicolis (1977) reconeixen.

Malgrat tot, entenem que pot ser d'interès aprofundir una mica més l'anàlisi anterior a sistemes de reaccions químiques. En aquest camp, la discussió de transicions de fase de no equilibri fou ja realitzada per Schögl (1972), el qual adoptà un punt de vista determinista cosa que el menà a descriure la dinàmica per als valors mitjos de les magnituds d'interès tot prescindint de l'estudi de les fluctuacions. Tenir-les en compte suposa incorporar un tractament estocàstic que fou realitzat per a transicions de segon ordre per McNeil i Walls (1974) i per a les de primer ordre per Matheson, Walls i Gardiner (1975). En Schögl (1980) poden trobar-se referències sobre treballs posteriors als esmentats.

Entrem ordenadament en els dos tipus de descripció: la determinista i l'estocàstica, aplicades ambdues a sistemes de reaccions químiques (Nitzan et als. (1974).

A partir d'ara s'entendrà que mantenim fixes les quantitats de totes les espècies químiques reaccionants llevat d'una d'elles, quantitat que notarem per x. Evidentment tot això podrà aconseguir-se amb l'adequada alimentació o drenatge del reactor.

Considerem, per exemple, el model d'Edelstein (Glansdorff i Prigogine (1971)).

$$\begin{aligned} A + X &\rightleftharpoons 2X \\ X + E &\rightleftharpoons C \\ C &\rightleftharpoons E + B \end{aligned} \qquad (1)$$

la reacció global del qual és

$$A \rightleftharpoons B \qquad (2)$$

El mecanisme consisteix en la producció autocatalítica de l'espècie X i la seva degradació enzimàtica a través d'una etapa de Michaelis-Menten. Imposem la condició de conservació de l'enzim

$$E + C = E_T = \text{const.} \qquad (3)$$

Prenguem a més a més totes les constants químiques igual a la unitat, amb la qual cosa les equacions cinètiques es converteixen en

$$\begin{aligned} dx \,/\, dt &= Ax - x^2 - xE + C \\ dE \,/\, dt &= -xE - BE + 2C \end{aligned} \qquad (4)$$

Emprant (3), l'equació per a l'estat estacionari resulta

$$\begin{aligned} f(x) &= x^3 + (2+B-A)x^2 + (E_T - A(2+B))x - BE_T = 0 \\ E &= 2E_T \,/\, x+B+2 \end{aligned} \qquad (5)$$

Ens interessa estudiar fonamentalment les solucions de (5) i donat que el comportament característic, com es veurà, l'aporta la no linealitat cúbica de l'equació, podem considerar un sistema equivalent i més senzill amb equació de moviment

$$dx / dt = F(x,\lambda) \tag{6}$$

on

$$F(x,\lambda) = - (x^3 - \mu x + \lambda) \tag{7}$$

corresponent els estats estacionaris de (6), $x^0(\lambda)$, a les solucions de $F(x^0(\lambda), \lambda) = 0$. μ és una constant positiva i λ un paràmetre extern. Segons (7) hi haurà una o tres arrels físiques, és a dir reals, depenent del valor de λ. En la figura (1) representem la corba $y = x^3 - \mu x$, i la línia horitzontal $y = -\lambda$. Els estats estacionaris buscats vénen donats per llur intersecció. Per a $|\lambda| > |\lambda^*| = 2/3\ (\mu^3/3)^{\frac{1}{2}}$ només hi ha un sol estat estacionari. Per a $|\lambda| < |\lambda^*|$ hi ha tres estats estacionaris, dos dels quals són estables i un és inestable. Determinem l'estabilitat tal com es fa usualment, és a dir, a partir d'una anàlisi lineal. Així, per a una variació infinitessimal entorn a un estat estacionari x^0 obtenim

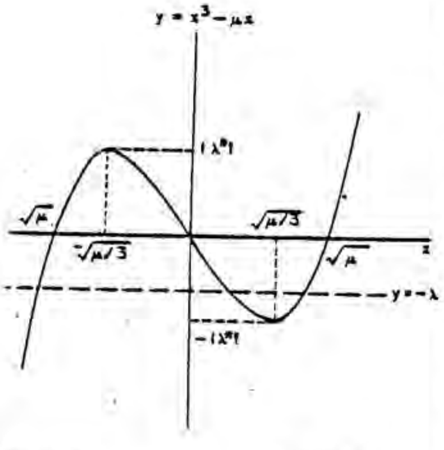


Fig.1

$$d\,\delta x / dt = - \left(d/dx\ (x^3 - \mu x + \lambda)\right)_{x^0(\lambda)} \delta x \tag{8}$$

on $\delta x = x - x^0(\lambda)$. Aleshores és clar que

$$\left(d / dx\ (x^3 - \mu x)\right)_{x^0(\lambda)} > 0 \tag{9}$$

correspon a un estat estacionari estable, mentre que la desigualtat oposada a l'anterior caracteritza un estat estacionari com a inestable.

Una inspecció més atenta de la fig. (1), revela una propietat important del sistema descrit per (6) : x^0 (λ) és discontínua en els punts de transició $\lambda^{*} = \pm 2/3\ (\mu^3/3)^{\frac{1}{2}}$ com s'evidencia fàcilment en la fig. (2). Aquesta propietat juntament amb altres és característica de les transicions de fase de primer ordre en equilibri. Per tal que aquesta analogia sigui més explícita, podem comparar la fig. (2) amb la fig. (3) que representa el diagrama P-V, a temperatura constant, d'una transició de fase líquid-gas. És ben clar que la corba (abcdef) en la fig. (3), és analoga a la corba x^0 (λ) de la fig.(2); les branques estables (abc) i (def) amb $(\partial P/\partial V)_T < 0$ corresponen a aquelles amb $dx^0(\lambda)/d\lambda < 0$, mentre que les inestables donades per $(\partial P/\partial V)_T > 0$ corresponen a $dx^0\ (\lambda)\ /\ d\lambda > 0$.

Malgrat la gran semblança entre ambdues situacions ha de quedar clara una diferència important. Així, en el sistema líquid-gas, les porcions (bc) i (de) de la corba P-V corresponen a estats termodinàmicament metaestables, mentre que la transició d'equilibri es materialitza al llarg de (be), línia construïda de tal forma que els potencials químics en ambdues fases siguin iguals en l'equilibri. Aquesta circumstància no apareix en la fig. (2). No obstant això, el fet que els punts c i d no puguin ser observats en la pràctica, té també una analogia en el sistema(6). En efecte, quan inclourem els efectes de les fluctuacions en aquella equació, demostrarem que els punts teòrics de transició entre les dues branques estables no poden ser assolits, i el pas d'una a l'altra es produeix abans d'arribar-hi.

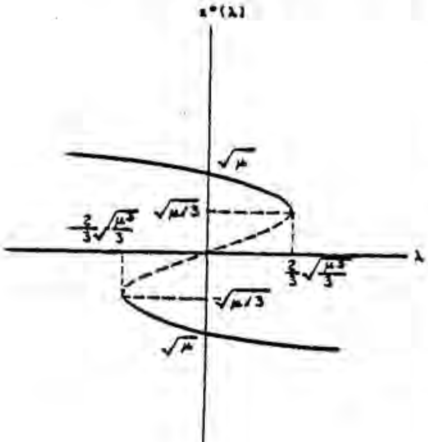


Fig.2

Per altra banda en el cas d'una transició líquid-gas podem

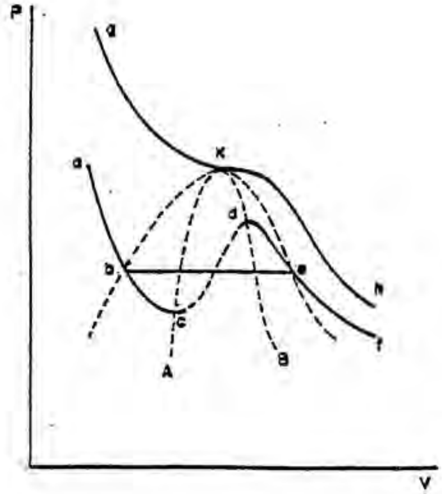


Fig.3

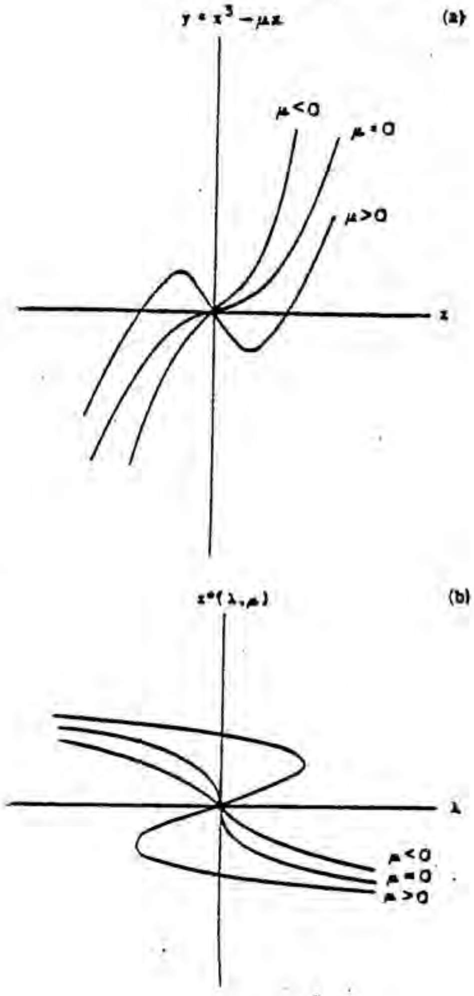


Fig.4

augmentar la temperatura i s'arribarà a una corba crítica,(gkh) que passa a través del punt crític k. Aquest es caracteritza per l'anul.lació de les dues primeres derivades de la pressió respecte al volum: $(\partial P/\partial V)_{Tc} = 0 = (\partial^2 P/\partial V^2)_{Tc}$ Per investigar una possible similitud pel que fa a l'equació (6) prenguem μ com a paràmetre variable i considerem l'equació d'estat $F(x,\lambda,\mu) = 0$ per diferents valors de μ .(Fig. (4)). Per $\mu > 0$ existeix una branca inestable i dos estats estacionaris estables. Per $\mu < 0$ només existeix un estat estacionari i és estable. El cas $\mu = 0$, correspon a la situació en què la branca inestable ha deixat d'existir. Es la condició única per a la qual existeix un punt ($\lambda = 0, x^o = 0$) en què $(\partial\lambda/\partial x^o)_\mu = (\partial^2\lambda/\partial(x^o)^2)_\mu = 0$. Aquest punt se l'hauria de considerar com l'anàleg al punt crític k de la transició líquid-gas.

Considerem ara el següent sistema de reaccions:

$$\left.\begin{aligned} A + C + X &\rightleftharpoons A + 2X \\ X &\longrightarrow Y + B \end{aligned}\right\} \quad (10)$$

L'equació cinètica seria ara

$$dx / dt = - Ax^2 + (AC - 1)x \qquad (11)$$

o posant $\Upsilon = tA$ i $\lambda = (AC-1)/A$

$$dx / d\Upsilon = - x^2 + \lambda x \qquad (12)$$

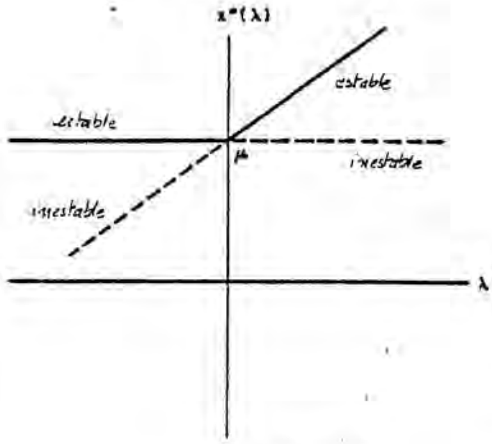


Fig.5

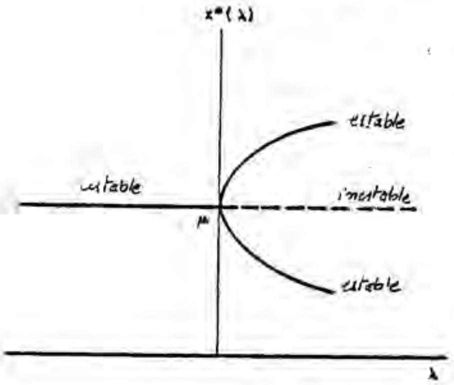


Fig.6

que podem generalitzar en la forma

$$F(x,\lambda) = -(x-\mu)^2 + \lambda(x-\mu) \quad (13$$

on μ es pren constant i λ és un paràmetre variable. Per aquest cas hi ha dos estats estacionaris l'estabilitat dels quals ve representada en la fig. (5). Un exemple un xic diferent però força relacionat amb la transició de fase de segon ordre en un material ferromagnètic, o en el laser, ve donat per

$$dx/dt = F(x,\lambda) = -((x-\mu)^3 - \lambda(x-\mu)) \quad (15$$

que pot tenir un o tres estats estacionaris físicament realitzables segons si λ és més petit o més gran que zero. Aquestes solucions i la seva estabilitat es representen en la fig.(6).

Els dos últims exemples presentats mostren possibilitats d'ocurrència de transicions de fase anàlogues a les de segon ordre. Observem una característica diferencial que les distingeix de les de primer ordre: $x^o(\lambda)$ és contínua en el punt de transició $\lambda = 0$, mentre que la seva derivada no ho és.

Fins aquí l'estudi desenvolupat correspon a l'adopció d'un punt de vista determinista sens tenir gens en compte les fluctuacions del sistema. Per a incorporar-les a la seva dinàmica, adoptem una anàlisi estocàstica, considerant el paper que exerccixen les fluctuacions sobre els estats estacionaris prèviament assenyalats i, en particular, serà de gran interès observar el seu comportament quan el sistema s'apropi a un punt crític. Mentre no es digui el contrari els raonaments seran també vàlids en les proximitats dels punts de transició.

Ens limitarem a considerar fluctuacions en aquelles variables macroscòpiques que estan influenciades per l'aproximació a una inestabilitat, i considerarem escales de temps inherents a les equacions macroscòpiques d'evolució temporal per a aquelles variables. Suposem l'existència d'equilibri local i en conseqüència despreciem les fluctuacions al seu entorn, ja que involucren escales de temps molt més curtes. Ens interessarà fonamentalment l'efecte que suposa l' aproximació al punt crític en: a) l'amplitud de les fluctuacions; b) el seu temps de relaxació i c) la longitud de correlació espacial. D'acord amb l'analogia establerta amb les transicions de fase d'equilibri cal esperar un increment de totes aquestes magnituds en la proximitat d'un punt crític.

No existeixen teories macroscòpiques que puguem adoptar genèricament per tractar les fluctuacions presents en sistemes de reaccions químiques. No hem però d'oblidar una extensa bibliografia que s'hi ha dedicat. Assenyalarem especialment els treballs de McQuarrie (1967) i el compendi d'Oppenheim, Shuler i Weiss (1977), tot i saber-nos conscients de ser imprecisos i potser fins i tot injustos amb molts noms.

Per tal de descriure i d'analitzar el comportament d'un sistema dinàmic, existeixen en general diversos punts de partida que resoldrem a favor d'un o altre segons de quin sistema es tracti. Per a no allargar-nos més en el pròleg, ens centrarem en la caracterització del procés estocàstic mitjançant una equació del tipus de Fokker-Planck de la que no en precisarem la seva deducció ja que en la secció (I.1.1) la considerarem amb més detall.

Suposem un model per a sistemes cinètics no lineals que consisteixi en una caixa amb x partícules a través de la qual hi hagi establerts uns fluxos entrants i uns de sortints, $Q(x)$ i $R(x)$ respectivament, que, si es vol, poden dependre d'un conjunt de paràmetres externs $(\lambda_1, \lambda_2, \ldots)$. En aquest cas la component estocàstica en la descripció dinàmica del sistema pot afegir-se a l'equació determinista que ens proporciona l'evolució macroscòpica de la variable en qüestió, i d'aquesta manera escriurem una equació tipus Langevin per a descriure la dinàmica global del sistema.

$$dx / dt = Q(x) - R(x) + \xi(t) \tag{15}$$

on $\xi(t)$ és la component aleatoria o "soroll". Per al procés en qüestió definim una distribució de probabilitat $P(x,t)$ que satisfà una equació en derivades parcials anomenada de Fokker-Planck del tipus

$$\partial P(x,t) / \partial t = -((Q(x)-R(x))P(x,t)) + \partial^2 P(x,t) / \partial x^2 \tag{16}$$

Hem de dir que per a poder obtenir (16) ha calgut prescriure condicions adequades sobre $\xi(t)$. D'això també en donarem alguna indicació en la secció (I.1.1)

Buscant realitzacions concretes per a $Q(x)$ i $R(x)$ podrem tractar sistemes amb inestabilitats del tipus dels considerats anteriorment sota un punt de vista estrictament determinista.

Així prenent

$$\begin{aligned} Q(x, \lambda, \mu) &= \mu x + \lambda \qquad \mu, \lambda \geqslant 0 \\ R(x, \lambda, \mu) &= x^3 \end{aligned} \tag{17}$$

tenim un sistema amb el mateix comportament determinista que el que hem considerat a propòsit de (7), i per tant susceptible de presentar transicions de primer ordre. Aquesta dinàmica podria representar un sistema de reaccions del tipus

$$
\begin{aligned}
A &\longrightarrow X \\
B + X &\longrightarrow 2X \\
3X &\longrightarrow 2X + C
\end{aligned}
\qquad (18)
$$

Per altra banda escollint

$$
\begin{aligned}
Q(x,\lambda) &= \lambda\, x \qquad \lambda \geqslant 0 \\
R(x,\lambda) &= x^2
\end{aligned}
\qquad (19)
$$

obtenim una dinàmica anàloga a la que s'ha considerat a (13) que podia exhibir transicions de segon ordre. Quant al sistema de reaccions corresponent podríem pensar en

$$
\begin{aligned}
A + X &\longrightarrow 2X \\
2X &\longrightarrow X + B
\end{aligned}
\qquad (20)
$$

Tal i com es va discutir anteriorment, podem trobar per a (18) un o tres estats estacionaris, mentre que en (19) tan sols n'existeixen dos. Pel que fa a la descripció en termes d'una distribució de probabilitat $P(x,t)$ només s'ha de parlar, tanmateix, d'una solució estacionària estable $P_{st}(x)$. Amb tot, els estats estacionaris macroscòpics, estables i inestables, conserven llur significat en la descripció estocàstica, car els primers corresponen a màxims locals de $P_{st}(x)$, mentre que els segons en són mínims locals.

El coneixement de $P_{st.}(x,\lambda)$ obtingut a partir de l'anàlisi estocàstica de sistemes amb inestabilitats, ens mostra per altra banda que, per contraposició a les transicions brusques entre branques estables corresponents a les solucions estacionàries macroscòpiques, la funció de distribució de probabilitat estacionària presenta un canvi gradual en variar els paràmetres externs del sistema. Aquest fet s'evidencia fàcilment en la fig. (7).

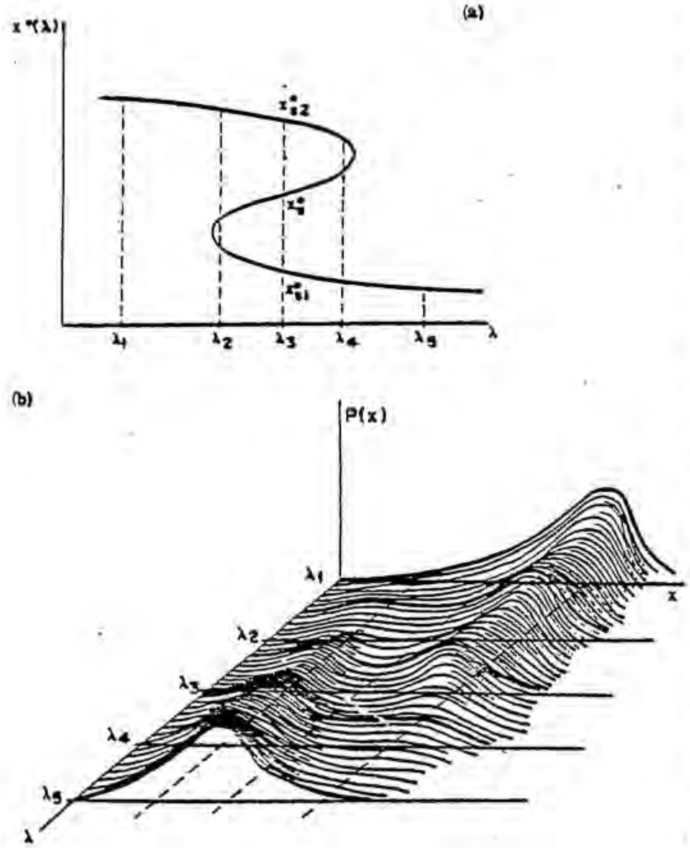


Fig. 7

Es més, en considerar les diferents escales de temps involucrades en variar els paràmetres esmentats, ens podríem adonar que els punts de transició no crítics, no poden ser mai assolits car abans d'arribar-hi, la funció de distribució de probabilitat evoluciona des d'una solució estacionària amb un màxim centrat a l'entorn d'una de les solucions estacionàries estables macroscòpiques corresponent als valors respectius dels paràmetres externs, i pobla el veïnatge de l'altra solució estacionària estable amb un ritme més gran com més propers estiguem del punt de transició.

I ja per acabar, discutirem de manera molt breu una de les característiques qualificades anteriorment de rellevants pel que fa al paper que exerceixen les fluctuacions en les proximitats de punts de transició. Així es considerarà solament l'augment en el temps de relaxació propi de les fluctuacions entorn a estats estacionaris macroscòpics. Una anàlisi semblant podria realitzar-se per als dos punts restants.

D'acord amb el model donat per (17) l'equació de

Fokker-Planck s'escriu com

$$\partial P(x,t) / \partial t = - \partial/\partial x \, ((-x^3 + \mu x + \lambda) P(x,t)) + \partial^2 P(x,t) / \partial x^2 \tag{21}$$

Prenguem uns valors λ, μ tals que existeixin tres estats estacionaris x^o_{s1} , x^o_u , x^o_{s2} dos dels quals estables i l'altre inestable. Linealitzant (21) per a una fluctuació η entorn a un d'ells x^o_{s1} obtenim

$$\partial P(\eta,t) / \partial t = \partial/\partial\eta \, (\gamma_1 \eta \, P(\eta,t)) + \partial^2 P(\eta,t) / \partial\eta^2 \tag{22}$$

amb $\eta = x - x^o_{s1}$, i on

$$\gamma_1 = 3(x^o_{s1})^2 - \mu \tag{23}$$

Per a la funció de correlació entre fluctuacions obtenim

$$\langle \eta(t) \, \eta(0) \rangle = \exp(-\gamma_1 t) \langle \eta(0) \, \eta(0) \rangle \tag{24}$$

En un punt de transició tenim

$$3(x^o_{s1})^2 - \mu = 0 \tag{25}$$

d'on $\gamma_1 = 0$, i per tant es manifesta el característic "critical slowing down" o dit d'altra manera, comprovem com el temps de relaxació divergeix quan ens apropem al punt de transició.

Rera aquest pròleg, tal vegada massa extens, però que pretenem que hagi estat il.lustratiu, creiem haver estat capaços de motivar cert interès per a l'estudi de sistemes macroscòpics des d'un punt de vista estocàstic, que tot i haver estat tractats històricament des d'un punt de vista determinista, presenten aspectes altament significatius i rellevants quan sobre ells es realitza una anàlisi estocàstica detallada.

PART I : TEORIES PERTORBATIVES EN TERMES DE PROPAGADORS LLIURES.

INTRODUCCIÓ.

La descripció de la dinàmica estocàstica d'un sistema, mitjançant una equació de Fokker- Planck, constitueix el punt de partida en la caracterització de la corresponent solució per a la densitat de probabilitat condicional per mitjà d'una integral realitzada damunt totes les trajectòries possibles que el sistema pot recórrer entre la primera posició i la darrera, suposades fixes, que respectivament ocupava en els instants inicial i final de la seva evolució. Aquesta descripció ha estat precisada amb detall per autors tal com Graham (1977a, 1977b), Leschke i Schmutz (1977), i molts d'altres que assenyalarem més endavant, i pot considerar-se com una altervativa a un tractament operacional, que posseeix també una llarga tradició iniciant-se amb el treball de Martin, Siggia i Rose (1973), i desenvolupant-se posteriorment amb les aportacions d'altres autors com Phytian (1975,1976), Enz i Garrido (1976), Garrido i San Miguel (1978a, 1978b),etc.

Un cop establerta la dinàmica de Fokker-Planck mitjançant les esmentades integrals de camí, tindrem un interès evident en formular d'aquella mateixa manera l'estudi dels propagadors, definits en el sistema com a mitjanes d'una successió de mesures realitzades durant la seva evolució. En especial ens referirem a dos d'aquells propagadors: les anomenades funcions de correlació i de resposta.

La utilització d'un funcional generador pels esmentats propagadors resulta particularment atractiva, i de fet així varen procedir Martin, Siggia i Rose en el treball citat abans, aplicant- ho a sistemes classics, i encara més recentment Tirapequi i col. (1977,1978c) ho ampliaren per tal de poder incloure sistemes estocàstics. Aquest funcional generador incorporant fonts externes $J(\tau)$ i $J^*(\tau)$, permet,per derivacions funcionals repetides respecte d'aquelles fonts, d'obtenir qualsevol propagador, un cop les derivades hagin estat avaluades en $J(\tau)=J^*(\tau)=0$.

Fàcilment podrem compendre doncs, que la determinació d'aquell funcional generador constitueix el punt essencial del tractament, i per aconseguir-ho cal recórrer sovint a l'ús de mètodes pertorbatius, especialment sí aquell sistema conté una part lliure o no pertorbada de resolució coneguda. Així ho suposarem nosaltres, i per tant ens interessarà la resolució del funcional generador associat precissament a aquella dinàmica lliure, funcional que obtindrem solucionant una equació en derivades funcionals amb condicions de contorn especificades amb propietat.

Una etapa posterior consistirà, evidentment, en l'expressió del funcional generador pel problema pertorbat en termes del lliure, i, una vegada més, en aquest punt concret, l'ús de tècniques funcionals ens resultarà molt avantatjós.

Amb aquesta manera de procedir, coincident d'altra banda amb el tractament del grup de Tirapequi (1977,1978c), anem elaborant un esquema pertorbatiu en termes de les funcions de correlació i resposta lliures, i essent una via alternativa a la utilització, potser més convencional, del teorema de Wick (Enz i Garrido (1976), Garrido i San Miguel (1978a)).

De tota manera, ambdós plantejaments no poden conduir a resultats discrepants, i en aquest sentit els desenvolupaments pertorbatius coincideixen plenament, com es tindra ocasió de demostrar explícitament.

Cal deixar clar que quan parlàvem més amunt de la utilització d'una descripció en termes d'integrals de camí, aquestes trajectòries poden ser considerades bé en un espai de fases o en un de configuracions Volem dir amb això que la descripció funcional de la dinàmica estocàstica de Fokker-Planck, admet una dualitat de representacions, una d'elles basada en una funció Hamiltoniana, i l'altra en una Lagrangiana.

L'esquema pertorbatiu comentat anteriorment és igualment d'aplicació en ambdués representacions, pero cal que fem algunes precissions. En principi, en representació Hamiltoniana, la funció de correlació i de resposta juguen un paper totalment semblant, i així mateix, tal com ja s'ha comentat anteriorment, les components lliures d'ambdós propagadors apareixen per un igual en els desenvolupaments pertorbatius de qualsevol mena de propagadors. En canvi, ens plantejàvem si això també seria cert si féssim servir una representació Lagrangiana, donat que en aquesta, sí bé podem continuar caracteritzant amb propietat a la funció resposta, és també cert, que aquella funció no apareix de forma tan explícita en la descripció, pel fet d'haver prescindit del conjunt de variables conjugat de les que pròpiament descriuen el sistema a nivell macroscòpic, conjunt per mitjà del qual definim de forma natural la funció resposta.

Enteníem que aquesta qüestió no havia estat tractada suficientment en la literatura de què erem coneixedors, i el reclam d'una evident simplificació en els desenvolupaments pertorbatius, tant a nivell formal com diagramàtic, ens va empènyer a tractar-la amb detall.

El resultat fou però que ambdués representacions, no tan sols són completament equivalents a nivell formal i condueixen a una determinació unívoca dels propagadors, la qual cosa era de preveure, sinó que, i aquesta era realment la qüestió que ens interessava, els desenvolupaments pertorbatius de qualsevol propagador, estan constituïts per diagrames coincidents a tot ordre de pertorbació, i intervenint-hi també les components lliures de la funció de correlació i de resposta, no és possible fer-ne una simplificació.

No sembla doncs poder-se concloure a aquest nivell l'avantatge d'una representació Lagrangiana envers una de tipus Hamiltoniana, però de fet farem servir en la segona part del treball la primera de les esmentades per a formular un esquema pertorbatiu no en termes de propagadors lliures sinó de complerts, i alla sí es podran trobar algunes aventatges de la formulació Lagrangiana.

Pel que fa a la primera part, la dividim en dos capítols. El primer tracta de la representació Hamiltoniana, i el segon de la Lagrangiana.

1. DESCRIPCIÓ FUNCIONAL DE LA DINÀMICA DE FOKKER-PLANCK EN UNA REPRESENTACIÓ HAMILTONIANA.

1.1 FORMULACIÓ DE LA DINÀMICA DE FOKKER-PLANCK.

L'estudi de la dinàmica de processos macroscòpics suposa establir unes determinades equacions d'evolució per a les variables rellevants del problema. La primera qüestió que se'ns planteja és la tria d'aquestes variables qualificades com a rellevants i un cop escollides s'han de formular les seves equacions de moviment corresponents. Quant a aquest punt, s'hauria de dir que constitueix un dels objectius fonamentals de la Mecànica Estadística, al qual diversos autors s'hi han dedicat des de fa força anys. (Green (1952),(1954), Zwanzig (1961)). Aquí, però no ens ocuparem d'aquest problema sinó que suposarem que per a les variables macroscòpiques del sistema existeixen unes equacions fenomenològiques ben establertes que n'especifiquen completament la seva dinàmica, de forma que el coneixement dels valors que adopten les variables esmentades en un instant determinat fixa el que han de valdre per a qualsevol altre. A aquestes variables s'en diu gruixudes tot i que, a vegades, se'ls aplica també el qualificatiu de lentes, amb que es pretén reflectir-ne el caràcter macroscòpic amb temps característics de relaxació i d'evolució molt més grans que els corresponents microscòpics. Amb tot el que s'ha vist anteriorment, entendrem doncs que un sistema que pretenem estudiar, i que en general consistirà de molts cossos en interacció més o menys complicada, el bon sentit físic haurà permès de fer una tria inicial entre variables lentes i ràpides, i a continuació s'hauran d'haver formulat per a les primeres o lentes, unes equacions de moviment fenomenològiques, en les quals probablement hi intervindran les segones amb efectes amitjanats. Per tal que aquesta manera de procedir resulti satisfactòria hem de tenir la certesa que la descripció aportada per les variables qualificades de lentes és suficient per a caracteritzar el sistema al nivell en què pretenguem descriure'l. Evidentment aquest procediment comporta una reducció dràstica del nombre de graus de llibertat a considerar;per tant és molt més plausible una formulació de l'esmentada dinàmica reduïda.

D'acord amb la idea de Langevin en estudiar el moviment Brownià s'entendrà que les variables ràpides confereixen a les equacions d'evolució macroscòpica per a les lentes un caràcter estocàstic. Al soroll així introduït per a descriure la dinàmica d'un sistema intrínsecament determinista, se l'anomena soroll intern, o es parla del seu origen tèrmic, i en aquest cas ha de quedar clar que el caràcter estocàstic assumit és una conseqüència directa del procés de reducció dels graus de llibertat rellevants, amb el benentès que un estudi complet i per altra banda irrealitzable en la majoria dels casos d'interès, de tots i cada un dels graus de llibertat realment existents en el problema, anul.laria per complet qualsevol influència no determinista.

Altrament també pot ocórrer que un sistema,la dinàmica completa del qual sigui exactament coneguda, és a dir per al que no cal una eliminació prèvia de les variables no rellevants macroscòpicament, interessi ser estudiat enfront a pertorbacions externes de caràcter fluctuant. En aquesta situació l'origen del soroll és radicalment distint i es considerarà de caràcter extern. Ben segur que ambdues possibilitats no són excloents en cap manera,i hi haurà sistemes per als que interessi considerar-les conjuntament.

En tot el que segueix no ens preocuparà l'origen del comportament estocàstic sinó més aviat les particularitats que confereix a l'evolució del problema considerat.

Hem d'insistir que fins i tot en els sistemes dinàmics més senzills, una descripció microscòpica de les propietats del soroll estocàstic intern suposa una tasca complexa. Pel que fa a sistemes sota la influència de sorolls d'origen extern, en la naturalesa es troben exemples típics. Així poden considerar-se representatius, el cas de camps electromagnètics fluctuants actuant sobre sistemes magnètics, o el cas de fluxos turbulents d'aire que arrosseguen onades en la superfície de l'oceà. Molts d'aquests processos subjectes a entorns fluctuants, poden ser escrits i formulats mitjançant equacions estocàstiques del tipus de Langevin com les que veurem seguidament. El que acabem de dir pot ser comprovat àmpliament en el resum publicat per Schenzle i Brand (1979). Podria ser també d'interès, i especialment des del punt de vista químic, considerar l'exemple de reaccions fotoquímiques activades per intensitats elèctriques fluctuants. (Dekepper i Horsthemke (1979)).

Per a nosaltres el punt de partida el constituirà una equació de Langevin generalitzada, m-dimensional, per al conjunt de les m macrovariables escollides $q(t) = \{q^{\mu}(t)\}$ $\mu = 1,\ldots,m$, i que expressarem en el cas més general com

$$\dot{q}^{\mu}(t) = K^{\mu}(q(t),t) + g^{\mu}_{\nu}(q(t),t)\,\xi^{\nu}(t) \qquad (1)$$

on $K^{\mu}(q(t),t)$ i $g^{\mu}_{\nu}(q(t),t)$ són funcions arbitràries no lineals de $q(t)$, i eventualment poden incorporar una dependència temporal explícita; $\xi(t) \equiv \{\xi^{\mu}(t)\}$ $\mu = 1,\ldots,m$

representa un procés aleatori caracteritzat per:

-mitjana nul.la $E_\xi \{ \xi^\mu(t) \} = 0$

-gaussianitat (2)

-espectre de soroll blanc i matriu de correlació constant donada per

$$E_\xi \{ \xi^\mu(t) \xi^\nu(t') \} = \overline{D}^{\mu\nu} \delta(t-t')$$

i on E_ξ representa una mitjana sobre les realitzacions de $\xi(t)$, que s'hauria de calcular a partir d'una distribució funcional de probabilitat $\mathcal{P}(\xi(t))$ definida en l'espai funcional $\xi(t)$. (Garrido i San Miguel (1978a), Sancho i San Miguel (1980)).

Fem un petit parèntesi abans de continuar per a establir una qüestió de notació. Intentarem ser escrupulosos mantenint una notació covariant. Entendrem d'acord amb aquesta notació que la contracció d'un parell d'índexs repetits, covariant i contravariant respectivament, suposa suma. Quan per algun motiu relaxem l'esmentada notació ho indicarem explícitament.

Tornem a les característiques del soroll considerat en (2). La hipòtesi de gaussianitat és físicament adequada i les que corresponen a la mitjana i a la funció de correlació, generalment es fan per comoditat, tot i que poden trobar-se arguments a favor seu. El soroll blanc correspon al límit $\tau \longrightarrow 0$ del fet real, des del punt de vista físic, de prendre temps de correlació petits. De totes maneres, suposar que el temps de correlació del soroll fos petit però no nul, donaria lloc a la caracterització dels anomenats sorolls de color. Un exemple particularment interessant és el que s'anomena d'Ornstein-Uhlenbeck considerat ja per San Miguel i Sancho (1981). Per altra banda prendre matrius de correlació $\overline{D}^{\mu\nu}$ constants respecte al temps i a les variables q(t), està basat,pel que fa al temps,en una qüestió de simplicitat, en tant que suposar independència davant les variables del sistema, tot i que pugui suposar una hipòtesi restrictiva, admet una justificació teòrica per al soroll d'origen tèrmic. Quant a $g^{\mu}_{a}(q(t),t)$, la seva eventual dependència explícita en la coordenada temporal permet de considerar processos no homogenis temporalment, i llur dependència en les variables q(t) fa possible el tractament dels anomenats processos amb soroll multiplicatiu. Una referència útil on es tracten equacions de Langevin en què el soroll intervé multiplicativament pot ser el treball de Lindenberg et als. (1981), on es consideren tant des del punt de vista teòric com d'aplicació a processos físics.

Un cop establerta una dinàmica del tipus de Langevin i especificades les propietats del soroll que hi intervé ja hem definit per complet el procés estocàstic; sovint,però,resulta més útil derivar una formulació paral-lela a la de Langevin, que es coneix amb el nom de dinàmica de Fokker-Planck, i que ha estat caracteritzada abastament en els treballs de Garrido i col.laboradors (Garrido i San Miguel (1978a), Sancho i San Miguel(1980)). No entrarem en detalls a propòsit dels aventatges d'aquesta formulació,ni considerarem el procés d'obtenció de l'anomenada equació de Fokker-Planck (FPE) que porta associada. Aquestes qüestions ja foren extensament tractades per San Miguel pel que fa al cas del soroll additiu que constituí la seva tesi doctoral,i posteriorment publicà un treball sobre el soroll multiplicatiu (Sancho i San Miguel (1981)) que pot consultar-se,així com les referències que s'hi inclouen. El que sí voldríem deixar ben clar és que tot el formalisme que es presentarà a partir d'ara pren com a punt de partida una FPE, representativa de la dinàmica estocàstica considerada.

La FPE, equació alternativa a (1) de la qual es dedueix un cop s'han tingut en compte les característiques del soroll considerat (2), l'escrivim com

$$\partial/\partial t \; P(q,t/q_o,t_o) = -\partial/\partial q^{\mu} \left\{ \left(K^{\mu}(q,t) + 1/2 \, g^{\lambda}_{\sigma}(q,t) \, \bar{D}^{\sigma\nu} \frac{\partial g^{\mu}_{\nu}(q,t)}{\partial q^{\lambda}} \right) P(q,t/q_o,t_o) \right\}$$

$$+ 1/2 \; \partial^2 / \partial q^{\mu} \partial q^{\lambda} \left\{ g^{\mu}_{\nu}(q,t) \, \bar{D}^{\nu\sigma} g^{\lambda}_{\sigma}(q,t) \, P(q,t/q_o,t_o) \right\} \qquad (3)$$

on $P(q,t/q_o,t_o)$ és la densitat de probabilitat condicional que el sistema es trobi en un instant t en un punt de l'espai de configuracions caracteritzat per q, si aquest mateix sistema ocupava un punt de tal espai q_o en un instant t_o anterior. Cal que ens adonem que aquí i diferentment de com hem fet en el pròleg, hem escrit una FPE per a la densitat de probabilitat condicional en lloc de fer-ho per a la densitat de probabilitat. Ambdós procediments resulten del tot equivalents i per al desenvolupament posterior ens interessa treballar fonamentalment amb $P(q,t/q_o,t_o)$.

A més cal que diguem que l'ambigüitat existent en la deducció de la FPE a partir de l'equació de Langevin quan es considera el cas del soroll multiplicatiu, l'hem resolta emprant la prescripció de Stratonovich en front a la prescripció d'Ito. Per a més detalls sobre la distinció i connexió entre les interpretacions d'Stratonovich i d'Ito es poden consultar referències com les d'Ito (1951), Arnold(1974), Wong(1965) o Mortensen(1969). No volem insistir en aquesta qüestió, molt formal de totes maneres, i únicament indicarem que per a processos amb soroll additiu, als que ens dedicarem especialment en aquest treball , ambdues prescripcions coincideixen.

La FPE (3) s'ha de resoldre amb la condició inicial òbvia

$$P(q,t_0 / q_0,t_0) = \delta(q-q_0) \tag{4}$$

on $\delta(q-q_0)$ representa una delta de Dirac m-dimensional definida en l'espai de configuracions del sistema. L'equació (3) pot reescriure's com

$$\dot{P}(q,t/q_0,t_0) = \partial/\partial q^\mu \left\{ \left(-f^\mu(q,t) + 1/2\ \partial/\partial q^\nu\ D^{\mu\nu}(q,t) \right) P(q,t;q_0,t_0) \right\} \tag{5}$$

amb les definicions

$$f^\mu(q,t) \equiv K^\mu(q,t) + 1/2\ g^\lambda_\sigma(q,t)\ \bar{D}^{\sigma\nu} \frac{\partial g^\mu_\nu(q,t)}{\partial q^\lambda} \tag{6}$$

$$D^{\mu\nu}(q,t) \equiv g^\mu_\lambda(q,t)\ \bar{D}^{\lambda\sigma} g^\nu_\sigma(q,t) \tag{7}$$

$f^\mu(q,t)$ és la component μ-èssima del terme d'arrossegament o "drift" de la FPE, mentre que els elements $D^{\mu\nu}(q,t)$ ens defineixen una matriu m x m simètrica per construcció, i definida positiva per hipòtesi, que anomenarem matriu de difusió. A més a més s'exigirà que aquesta matriu D(q,t) sigui no singular i per tant invertible. De la pròpia definició (7) es dedueix que pel que fa a la difusió ,els processos amb soroll additiu suposen aquella matriu constant. Assenyalarem també, per acabar aquesta secció, que últimament ha adquirit interès estudiar la covariància de la FPE sota transformacions generals de coordenades. Per al lector interessat en aquest punt li recomanem els treballs de Garrido (1980) i Graham (1977b).

1.2. PRIMERS RESULTATS EN UNA DESCRIPCIÓ FUNCIONAL DE LA DINÀMICA DE FOKKER-PLANCK.

Ja establerta la FPE, disposem de dos mètodes per seguir amb l'estudi de la dinàmica a ella associada. El primer consisteix en una formulació per integrals de camí mentre que el segon comporta un tractament operacional, l'origen del qual pot trobar-se en el formalisme de Martin Siggia i Rose (1973). Quant a la formulació per integrals de camí citarem entre molts d'altres els treballs de Graham(1977a, 1977b) , Leschke i Scmutz (1977), Phytian (1977), Dekker (1978 a, 1978b) Langouche, Roekaents i Tirapegui (1979); aquesta llista es pot ampliar amb les pròpies referències contingudes en els articles esmentats. D'altra banda en el plantejament operacional s'introdueixen un conjunt d'operadors per a representar les variables del sistema i aleshores les equacions de Langevin corresponents es converteixen en les respectives equacions per a aquells operadors i queda així establerta la seva dinàmica d'Heisenberg. Amb aquests operadors se n'introdueixen uns altres de conjugats a ells, no observables, i l'estocasticitat del procés es manifesta en la no commutativitat a temps distints dels operadors representatius de les variables macroscòpiques. Davant la dinàmica d'Heisenberg construïda d'aquesta manera, la de Fokker-Planck correspondria a la d'Schrödinger, i així s'establiria una dualitat d'imatges anàloga a l'usual en Mecànica Quàntica. Són abundants les referències que poden trobar-se de l'esmentada formulació operacional. (Phytian (1975, 1976), Enz(1977), Garrido i San Miguel (1978,1979); el darrer planteja un nexe d'unió entre ambdós tractaments). Aquí no ens ocuparem pas del formalisme operacional, però sí que ho farem i extensament del primer, i per tant les característiques de la seva descripció les anirem veient a mesura que es vagi construint.

Per formular la dinàmica per integrals de camí, partirem de (5), amb raonaments semblants als emprats per Tirapegui (1978c). Així definim l'operador $\hat{p}_{\iota}$, no observable, mitjançant

$$\hat{p}_\mu \equiv -i\ \partial / \partial q^\mu \tag{8}$$

conjugat de l'operador corresponent a la variable q^μ que notarem $\hat{q}^\mu$

$$\hat{q}^\mu \equiv q^\mu. \tag{9}$$

Els operadors introduïts així, clarament verifiquen

$$\left[\hat{q}^\mu, \hat{p}_\mu\right] = i\ \delta^\mu_\mu \tag{10}$$

Definim també un operador de Fokker-Planck, a què ens referirem communment amb el nom d'Hamiltonià $\hat{H}(\hat{p},\hat{q},t)$ en la forma

$$\hat{H}(\hat{p},\hat{q},t) \equiv \hat{p}_\mu f^\mu(\hat{q},t) - i/2\ \hat{p}_\mu \hat{p}_\nu D^{\mu\nu}(\hat{q},t) \tag{11}$$

Observem en primer lloc que donada la no commutativitat dels operadors $\hat{p}$ i $\hat{q}$, l'ordre amb que apareixen no és de cap manera irrellevant. En la definició de l'Hamiltonià que hem donat en (11) aquells operadors figuren normalment ordenats, segons una expressió introduïda per Graham (1977a), cosa que suposa escriure els operadors $\hat{p}$ a l'esquerra dels $\hat{q}$. En relació amb la formulació per integrals de camí en una representació Lagrangiana, discutirem en 2.3 la importància de prendre una o altra ordenació i les conseqüències que se'n deriven.

Per altra banda, a partir de l'operador Hamiltonià definim un nou operador que anomenarem Liouvillià $\hat{L}\ (\hat{p},\hat{q},t)$ segons

$$\hat{L}\ (\hat{p},\hat{q},t) \equiv -i\hat{H}(\hat{p},\hat{q},t) \tag{12}$$

Amb aquesta definició, tenint en compte (11) i les expressions per a $\hat{p}(t)$ i $\hat{q}(t)$ és imminent escriure la FPE en la forma

$$\dot{P}(q,t/q_0,t_0) = \hat{L}\ (\hat{p},\hat{q},t)\ P\ (q,t/q_0,t_0) \tag{13}$$

A partir de (13) resulta molt convenient d'introduir un operador d'evolució temporal per a la densitat de probabilitat condicional en la forma

$$P(q,t/q_0,t_0) \equiv \hat{U}(\hat{p},\hat{q},t,t_0)\; P(q,t_0/q_0,t_0) \tag{14}$$

L'operador $\hat{U}(\hat{p},\hat{q},t,t_0)$ definit així, acompleix

$$\partial\, \hat{U}(\hat{p},\hat{q},t,t_0) \,/\, \partial t \;=\; \hat{L}(\hat{p},\hat{q},t)\; \hat{U}(\hat{p},\hat{q},t,t_0) \tag{15}$$

A partir de (15) obtenim una expressió formal per a $\hat{U}(\hat{p},\hat{q},t,t_0)$ que és ben coneguda en el context de la Mecànica Quàntica

$$\hat{U}(\hat{p},\hat{q},t,t_0) = T \exp \int_{t_0}^{t} \hat{L}(\hat{p},\hat{q},\tau)\, d\tau \tag{16}$$

amb la condició inicial

$$\hat{U}(\hat{p},\hat{q},t_0,t_0) = I \tag{17}$$

i essent T l'operador d'ordenació temporal, necessari aquí, donada l'eventual dependència explícita de $f(q,t)$ i $D(q,t)$ en la coordenada temporal.

Segurament s'haurà evidenciat la coincidència formal entre bona part del que s'ha establert fins ara amb relació a definicions anàlogues amb les que hom es troba en les etapes inicials de la formulació dinàmica de la Mecànica Quàntica. De fet aquest paral.lelisme no és gens sorprenent si pensem que l'equació de Fokker-Planck per a la densitat de probabilitat condicional fa el mateix paper, i té una estructura idèntica a la Schrödinguer per a una funció d'ona. Ben gratificant ens és aquesta semblança formal.

Considerem ara el c-nombre Hamiltonià, o c-funció Hamiltoniana, que resulta de (11) en substituir els operadors $\hat{p}$, i $\hat{q}$ per variables c-nombre p i q respectivament,

$$H(p,q,t) \equiv p_\mu f^\mu(q,t) - i/2\; p_\mu p_\nu D^{\mu\nu}(q,t) \tag{18}$$

De manera idèntica a com s'actua en Mecànica Clàssica podem transformar per Legendre l'esmentada Hamiltoniana per obtenir una c-funció Lagrangiana $\mathcal{L}(q,\dot{q},t)$

$$\mathcal{L}(q,\dot{q},t) \equiv p_\mu \dot{q}^\mu - H(p,q,t) \tag{19}$$

on com és usual

$$\dot{q}^\mu \equiv \partial H/\partial p_\mu \tag{20}$$

Substituint (18) en (20)

$$\dot{q}^\mu = f^\mu(q,t) - ip_\nu D^{\mu\nu}(q,t) \tag{21}$$

o de manera equivalent

$$p_\sigma = iD_{\sigma\mu}(q,t)\ (\dot{q}^\mu - f^\mu(q,t)) \tag{22}$$

expressió, la darrera, on s'ha fet ús del caràcter simètric de la matriu de difusió $D(q,t)$ i on s'ha introduït la seva inversa d'elements $D_{\mu\nu}(q,t)$

$$D_{\mu\rho} D^{\rho\nu} = \delta_\mu^\nu \tag{23}$$

Substituint (18) en (19) escrivim la Lagrangiana com

$$\mathcal{L}(q,\dot{q},t) = p_\mu \dot{q}^\mu - p_\mu f^\mu(q,t) + i/2\ p_\mu p_\nu D^{\mu\nu}(q,t) \tag{24}$$

o mitjançant (21)

$$\mathcal{L}(q,\dot{q},t) = -i/2\ p_\mu p_\nu D^{\mu\nu}(q,t) \tag{25}$$

que encara podem transformar segons (22) de manera que la seva dependència en les variables $\dot{q}$
sigui més explícita

$$\mathcal{L}(q,\dot{q},t) = i/2\ (\dot{q}^\mu - f^\mu(q,t)) D_{\mu\nu}(q,t)(\dot{q}^\nu - f^\nu(q,t)) \tag{26}$$

En el capítol següent veurem la utilitat de poder disposar d'una Lagrangiana de la manera com s'ha definit aquí. De moment ens n'oblidem i interessem-nos per una sèrie de transformacions formals amb què obtindrem la representació per integrals funcionals o de camí de la dinàmica associada a la FPE.

Ens cal definir un nou operador $\hat{\hat{U}}(\hat{p},\hat{q},t,t_0)$ obtingut prenent $\hat{U}(\hat{p},\hat{q},t,t_0)$ normalment ordenat. El caràcter d'ordenat normalment per a $\hat{\hat{U}}(\hat{p},\hat{q},t,t_0)$ el podem explicitar si l'escrivim mitjançant una integral de Fourier

$$\hat{\hat{U}}(\hat{p},\hat{q},t,t_0) = \int d^m\xi \; \exp\left\{-i\,\hat{p}_\mu \xi^\mu\right\} \Omega(\xi,\hat{q},t,t_0) \qquad (27)$$

Associem ara una c-funció a l' operador $\hat{\hat{U}}$ substituint, tal i com veiérem, operadors per a c-variables. En aquest cas

$$\tilde{U}(p,q,t,t_0) = \int d^m\xi \; \exp\left\{-i\,p_\mu \xi^\mu\right\} \Omega(\xi,q,t,t_0) \qquad (28)$$

transformació fàcilment invertible que ens permet de definir $\Omega(\xi,q,t,t_0)$ com

$$\Omega(\xi,q,t,t_0) = \int \frac{d^m p}{(2\pi)^m} \exp\left\{i\,p_\mu \xi^\mu\right\} \tilde{U}(p,q,t,t_0) \qquad (29)$$

Observem de què ens pot servir el coneixement de $\Omega(\xi,q,t,t_0)$ o equivalentment de $\tilde{U}(p,q,t,t_0)$, preguntant-nos a propòsit de la funció de correlació definida com

$$\left\langle f(q(t_1))\, g(q(t_0))\right\rangle = \int_\Gamma d^m q_1\, d^m q_0\, f(q_1)\, P(q_1,t_1\,/\,q_0,t_0)\, P(q_0,t_0)\, g(q_0) \qquad (30)$$

on $P(q_0, t_0)$ representa la densitat de probabilitat que el sistema es trobi en l'instant t_0 ocupant el punt q_0. Γ indica finalment la regió de l'espai de configuracions inherent a la definició del problema. Tenint en compte (14) i (4) escriurem

$$\left\langle f(q(t_1))\, g(q(t_0))\right\rangle = \int_\Gamma d^m q\; f(q)\; \hat{U}(\hat{p},\hat{q},t_1,t_0)\, P(q,t_0)\, g(q) \qquad (31)$$

on s'ha realitzat la integració sobre q_0. Inserint en (31) la forma normalment ordenada $\hat{\hat{U}}$ donada per (27), comprovarem que l'operador $\exp\left[i\,\hat{p}_\mu \xi^\mu\right]$ actua per l'esquerra sobre f(q) per integració repetida per parts, i en la hipòtesi que els termes de contorn són nuls en les condicions d'anul.lació assumides sobre $P(q,t_0)$ i totes les seves derivades. Emprant a més a més la relació pròpia del desenvolupament de Taylor per a f(q)

$$\exp\{i\xi^{\mu}\hat{p}_{\mu}\} f(q) = f(q+\xi) \tag{32}$$

la (31) es redueix a

$$\langle f(q(t_1))\, g(q(t_0))\rangle = \int_{\Gamma} d^m\xi\, d^m q\; \Omega(\xi, q, t_1, t_0)\, P(q,t_0)\, g(q) \tag{33}$$

i si prenem $f(q) = \delta(q-q_1)$, $g(q) = 1$ i $P(q,t_0) = \delta(q-q_0)$, obtenim finalment

$$P(q_1,t_1 / q_0,t_0) = \int \frac{d^m p}{(2\pi)^m} \exp\{ip_{\mu}(q_1^{\mu}-q_0^{\mu})\}\, \tilde{U}(p,q_0,t_1,t_0) \tag{34}$$

Per acabar assenyalem que les integrals que aquí s'han definit i totes les que apareixeran a partir d'ara, no referents a integrals sobre l'espai de configuracions, s'hauran d'entendre, mentre no indiquem res en contra, exteses a llurs límits naturals.

1.3 REPRESENTACIÓ MITJANÇANT INTEGRALS DE CAMÍ.

L'expressió fonamental (34) s'ha de considerar fins a cert punt formal, car expressar l'operador en la seva forma normalment ordenada pot resultar difícil en ser definit sobre intervals de temps arbitraris. El que sembla més senzill és fer primer aquesta construcció per a un interval infinitessimal per a després propagar l'ordenació normal fins a completar un interval finit. L'estratègia anterior sembla per altra banda convencional en la representació de la Mecànica Quàntica per integrals de camí. (Feyman (1948)).

Considerem doncs t_0 i t els extrems inicial i final de l'interval en que sotmetem el sistema a observació. Dividim-ho en n + 1 intervals de longitud ϵ i definim

$$t_j = t_0 + j\epsilon \qquad j \in [0, n+1]$$
$$t_{n+1} \equiv t \qquad \epsilon = \frac{t - t_0}{n+1} \tag{35}$$

Igualment notem

$$q_j \equiv q(t_j) \qquad q(t_0) \equiv q_0 \qquad q(t) \equiv q \tag{36}$$

Les condicions assumides sobre el procés estocàstic, permeten de qualificar-lo de Markovià i com a tal es compleix la propietat de Markoff per a $P(q,t/q_0,t_0)$

$$P(q_2,t_2/q_0,t_0) = \int_{\Gamma} d^m q_1 \; P(q_2,t_2/q_1,t_1)\, P(q_1,t_1/q_0,t_0) \tag{37}$$

la generalització del qual ens mena a l'equació de Chapman-Kolmogorov (Stratonovich (1963)).

$$P(q,t/q_0,t_0) = \int_{\Gamma} \left(\prod_{j=1}^{n} d^m q_j \right) \prod_{j=1}^{n+1} P(q_j,t_j/q_{j-1},t_{j-1}) \tag{38}$$

Prenguem ara $\hat{U}$ per a un interval $[t_{j-1}, t_j]$. A partir de (16), i considerant-lo infinitessimal, és a dir $\epsilon \to 0$ o $n \to \infty$ podrem limitar-nos a termes fins a $O(\epsilon)$ amb la qual cosa

$$\hat{U}(\hat{p},\hat{q},t_j,t_{j-1}) = 1 - i\epsilon \hat{H}(\hat{p},\hat{q}, t \in [t_{j-1},t_j]) + O(\epsilon^2) \tag{39}$$

Tenint en compte que $\hat{H}$ és normalment ordenat per construcció, vegis (11), resulta que $\hat{U}(\hat{p},\hat{q},t_j,t_{j-1})$ també ho és a $O(\epsilon)$ i per tant podem escriure fins a aquest ordre la identitat per a c-funcions

$$\tilde{U}(p,q,t_j,t_{j-1}) = 1 - i\epsilon H(p,q,t \in [t_{j-1},t_j]) + O(\epsilon^2) \tag{40}$$

amb la Hamiltoniana H donada per (18). Emprant ara l'expressió (34) especialitzada per a l'interval infinitessimal considerat

$$P(q_j,t_j/q_{j-1},t_{j-1}) = \int \frac{d^m p}{(2\pi)^m} \exp\left\{ i p_\mu (q_j^\mu - q_{j-1}^\mu) \right\} \left[1 - i\epsilon H(p, q_{j-1}, t \in [t_{j-1},t_j]) \right] \tag{41}$$

La dependència temporal de H en (41) la notem d'aquella forma per a indicar que en el cas que l'operador Hamiltonià, i la seva corresponent c-funció, depenguéssin explícitament del temps, aquesta dependència se suposa contínua i en aquest sentit qualsevol instant en l'interval $[t_{j-1}, t_j]$ seria vàlid per a figurar com a argument. Per comoditat prendrem l'extrem inicial i així la densitat de probabilitat elemental ve donada per

$$P(q_j, t_j / q_{j-1}, t_{j-1}) = \int \frac{d^m p}{(2\pi)^m} \exp\left\{ i p_\mu (q_j^\mu - q_{j-1}^\mu) \right\} \left[1 - i\epsilon H(p, q_{j-1}, t_{j-1}) \right] \qquad (42)$$

L'expressió anterior, recordem-ho, únicament és vàlida a $O(\epsilon)$ i a aquest mateix ordre la reescrivim com

$$P(q_j, t_j / q_{j-1}, t_{j-1}) = \int \frac{d^m p}{(2\pi)^m} \exp\left\{ i\epsilon \left[p_\mu \frac{(q_j^\mu - q_{j-1}^\mu)}{\epsilon} - H(p, q_{j-1}, t_{j-1}) \right] \right\} \qquad (43)$$

Substituint (43) en (38), i tenint en compte que p representa un conjunt de m variables d'integració i per consegüent són de caràcter mut, escrivim la densitat de probabilitat condicional finita com

$$P(q, t / q_0, t_0) = \lim_{\substack{n \to \infty \\ (\epsilon \to 0)}} \int_\Gamma \left(\prod_{j=1}^{n} d^m q_j \right) \left(\prod_{j=1}^{n+1} \frac{d^m p_j}{(2\pi)^m} \right) \exp\left\{ i\epsilon \sum \left[p_{j\mu} \frac{q_j^\mu - q_{j-1}^\mu}{\epsilon} - H(p_j, q_{j-1}, t_{j-1}) \right] \right\} \qquad (44)$$

expressió fonamental que correspon a la versió discretitzada de la integral funcional que immediatament definirem.

De totes maneres insistim que la necessitat de considerar contribucions només fins a $O(\epsilon)$ és un fet característic de la formulació per integrals de camí tal com assenyala oportunament Graham (1977a) i que el grup de Tirapegui (1978a, 1978b) comprova explícitament. A més sobre aquest punt en concret poden consultar-se les referències contingudes en els dos darrers articles citats.

Per expressar finalment $P(q, t/q_0, t_0)$ en termes d'una integral funcional introduirem una mesura adequada en l'espai de funcions p(τ),q(τ) per mitjà de

$$\mathcal{D}q(\tau)\,\mathcal{D}p(\tau) \equiv \lim_{n\to\infty}\left(\prod_{j=1}^{n} d^m q_j \prod_{j=1}^{n+1} \frac{d^m p_j}{(2\pi)^m}\right) \tag{45}$$

amb això l'expressió (44) defineix per si sola la integral de camí com

$$P(q,t\,/\,q_0,t_0) \equiv \int_{q(t_0)=q_0}^{q(t)=q} \mathcal{D}q(\tau)\,\mathcal{D}p(\tau)\,\exp\left\{ i\int_{t_0}^{t} d\tau\left[p_\mu(\tau)\,\dot{q}^\mu(\tau) - H(p(\tau),q(\tau),\tau)\right]\right\} \tag{46}$$

expressió per altra banda purament formal, que només té un significat precís en la seva versió discretitzada (44). La integral (46) s'haurà d'entendre com a realitzada sobre totes les trajectòries permeses al sistema amb l'única restricció que tinguin com a origen en l'instant t_0 i com a final en l'instant t, els punts q_0 i q respectivament;aquest és justament el sentit que tenen els límits d'integració que figuren en (46). Cal que ens adonem que en passar de la versió discretitzada (44) a la funcional (46) substituïm q^μ_{j-1} per $q^\mu(\tau)$ i $q^\mu_j - q^\mu_{j-1}/\epsilon$ per $\dot{q}^\mu(\tau)$. És a dir, discretitzem q(τ) a l'extrem inicial de cada interval elemental. Per altra banda amb p (τ) ho fem contràriament. Avancem que tal prescripció està relacionada amb l'ús de l'ordenació normal,i quan ens hi referirem ho farem amb el nom de discretització pre-puntual. En l'apartat 2.3 farem un estudi més detallat d'aquest punt en concret. De totes maneres, volem ressaltar que el fet de prendre una o altra prescripció, tractant-se d'una simple manipulació matemàtica, pot alterar algunes expressions formals, però en qualsevol dels casos no pot mai canviar el sentit, ni tampoc pot variar el resultat de càlculs de magnituds físiques reals i amb aquest qualificatiu entenem que són susceptibles de ser sotmeses a observació. Tirapegui i col. (1977) han comprovat explícitament tot el que hem exposat anteriorment en el context de teories pertorbatives, i per a casos de resolució exacta de la integral funcional. Assenyalarem però, que el grau de llibertat existent pel que fa a la discretització escollida podrà manifestar-se en l'ambigüitat intrínseca associada a certes expressions intermèdies presents en les etapes de càlculs que puguin seguir-se a partir d'una expressió funcional com (46); en aquest sentit, el fet de decidir-nos per una prescripció concreta ens permetrà de resoldre de forma unívoca les ambigüitats abans esmentades. Creiem que aquesta qüestió serà clarificada en el context de la funció resposta a temps iguals que definirem en la secció següent.

1.4 PROPAGADORS : FUNCIONS DE CORRELACIÓ I RESPOSTA

Els elements fonamentals que en un estudi mecano-estadístic ens interessarà conèixer són les anomenades funcions de Green o propagadors. N'hi ha dos d'entre ells especialment importants que designarem com a funció de correlació i funció resposta i als quals ens referirem abastament en tot l'estudi que segueix.

En general, definim els propagadors com a mitjanes que abans que res hauran d'incorporar la pèrdua de la imatge determinista en l'evolució dinàmica. Per altra banda eventualment s'haurà de considerar una font addicional d'estocacitat basada en el fet que les condicions inicials prescrites per al sistema subjecte d'estudi, puguin obeir per si sols a una distribució de probabilitat donada. En qualsevol cas haurem d'avaluar totes dues mitjanes, si ocorren alhora, i degut a llur procedència desigual, admetran tractaments diferents.

Després d'aquesta breu introducció, i precisant que notarem les mitjanes en la forma usual $\langle .... \rangle$, és possible demostrar l'existència d'una expressió per als propagadors en termes de la integral de camí definida anteriorment. Així escriurem

$$\langle p_{\mu_n}(t_n) \cdots p_{\mu_1}(t_1)\, q^{\nu_m}(t'_m) \cdots q^{\nu_1}(t'_1) \rangle = \int_{q(t_0)=q_0}^{q(t)=q} \mathcal{D}q(\tau)\, \mathcal{D}p(\tau)\, p_{\mu_n}(t_n) \cdots p_{\mu_1}(t_1)\, q^{\nu_m}(t'_m) \cdots q^{\nu_1}(t'_1)$$

$$\exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_\mu(\tau)\, \dot{q}^\mu(\tau) - H(p(\tau), q(\tau), \tau) \right] \right\} \qquad (47)$$

on la integral s'haurà d'interpretar a partir de la seva versió discretitzada i amb el mateix significat ja esmentat pel que fa als límits d'imtegració. L'expressió anterior ens dóna a entendre que les mitjanes, afectant una successió de mesures realitzades durant l'evolució dinàmica del sistema, s'hauran de prendre sobre les distintes trajectòries que aquell sistema pugui recórrer entre els instants inicial i final t_0 i t. No donarem una demostració rigorosa de (47) donat que la seva obtenció no suposa cap mena de dificultat. Podem però, comprovar la seva validesa amb un simple raonament intuïtiu. Així, i per senzillesa, suposem que en els propagadors no hi intervinguin més que variables q(t); en aquest cas només cal adonar-se que les mitjanes s'hauran de realitzar amb la densitat de probabilitat conjunta multitemporal que el sistema es trobi en els punts prescrits per als instants fixats, però en la hipòtesi formulada a propòsit del caràcter Markovià del procés estocàstic, l'esmentada probabilitat factoritza en productes de densitat de probabilitat condicional,de forma que, passant prèviament per la versió discretitzada de (47), obtenim finalment l'expressió indicada.

Segons (47), els propagadors vénen parametritzats per les condicions inicial i final de la trajectòria del sistema. Serà convenient de retenir la dependència en la condició inicial si després volem incloure la mitjana sobre condicions inicials de què ja s'ha parlat, però la que es refereix a la condició final és molt menys rellevant, i en aquest sentit serà més útil redefinir aquelles mitjanes un cop realitzada la integració sobre l'esmentada coordenada final. Així, i amb la mateixa notació pel propagador, serà

$$\langle p_{\mu_k}(t_k) \cdots\cdots q^{\nu_l}(t'_l) \rangle = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\,\mathcal{D}p(\tau)\, p_{\mu_k}(t_k) \cdots q^{\nu_l}(t'_l) \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_\mu(\tau)\,\dot{q}^\mu(\tau) - H(p(\tau), q(\tau), \tau) \right] \right\} \tag{48}$$

Hem emprat idèntica notació per al propagador i per a la mesura tal com ho féiem en (4.7) per tal de no complicar la notació. Això no obstant, el fet que només figuri com a límit d'integració $q(t_0) = q_0$, ens haurà de recordar que $\mathcal{D}q(\tau)$ en la seva versió discretitzada involucra un nou element de volum m-dimensional, $d^m q_{n+1}$; el propagador ara, és interpretat com la mitjana sobre trajectòries dinàmiques del sistema amb l'única condició que el seu extrem inicial estigui situat en q_0 en l'instant inicial. No creiem que resulti confús l'estalvi que proposem en la notació car a partir d'ara només emprarem propagadors definits d'aquesta manera.

Segons (48) sembla, a primer cop d'ull, que hi hauria d'haver una dependència dels propagadors respecte als instants inicial i final. La dependència en t_0 és lògica, però no ho és en t, donat que aquest darrer és irrellevant des del moment en què realitzem una integració sobre la posició del sistema en aquest instant; altrament no sembla lògic admetre la influència d'un temps posterior en mitjanes preses en instants anteriors. De fet, la demostració formal d'aquesta circumstància és immediata.

Situem-nos en la versió discretitzada de (48) i apliquem-hi estrictament la definició de derivada respecte a t, prenent el propagador avaluat fins aquest moment i fent-ne el càlcul per a $t + \epsilon$, essent ϵ la longitud d'un dels intervals elementals. Ens estalviem alguns passos de fàcil interpretació i finalment arribem a

$$d/dt \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\,\mathcal{D}p(\tau)\; p_{\mu_k}(t_k) \cdots q^{\nu_l}(t_l') \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau \left[\;\right] \right\} = -i \lim_{n\to\infty} \int_{\Gamma} \left(\prod_{j=1}^{n+2} d^m q_j \right) \int \left(\prod_{j=1}^{n+2} d^m p_j/(2\pi)^m \right)$$

$$p_{k,\mu_k} \cdots q_l^{\nu_l} \exp\left\{ i\epsilon \sum_{j=1}^{n+1} \left[p_{j\mu} \frac{q_j^{\mu} - q_{j-1}^{\mu}}{\epsilon} - H(p_j, q_{j-1}, t_{j-1}) \right] \right\} \exp\left\{ i p_{n+2,\mu} (q_{n+2}^{\mu} - q_{n+1}^{\mu}) \right\} H(p_{n+2}, q_{n+1}, t_{n+1}) \tag{49}$$

Si tenim en compte que la integració sobre la variable q_{n+2} ens genera una $\delta(p_{n+2})$, i que $H(p,q,t)$ ve donat segons (18) per

$$H(p_{n+2}, q_{n+1}, t_{n+1}) = p_{n+2,\mu} f^{\mu}(q_{n+1}, t_{n+1}) - i/2\; p_{n+2,\mu}\, p_{n+2,\nu}\, D^{\mu\nu}(q_{n+1}, t_{n+1}) \tag{50}$$

comprovem que la interpretació sobre p_{n+2} anul.la idènticament el segon terme de (49). Evidentment l'única restricció imposada sobre l'instant final consisteix en què els instants intermitjos que figuren en el propagador siguin interiors a $[t_0\;,\;t]$. Per tant, si es vol, es pot obviar la referència a l'instant t prenent-lo en l'infinit futur, tot i que nosaltres no ho farem.

En general no és fàcil interpretar físicament una mitjana qualsevol on hi hagi variables p. La raó cal buscar-la en que les m c-variables p_μ han aparegut en relació amb els operadors respectius $\hat{p}_\mu$ i aquests no són observables. Aquesta característica de no observabilitat també es podria relacionar amb el caràcter clarament imaginari de p_μ, vegis (22), tal com apunten Garrido, Lurié i San Miguel (1979). Tot això ho interpretem com que tots aquells propagadors en els que hi intervinguin únicament variables p seran idènticament nuls, i més encara, d'acord amb el principi de causalitat, el propagador definit en (48) serà nul si algun instant t_j és més gran que qualsevol t'_j. La demostració de tot el que acabem d'assenyalar no és complicada i ens limitarem a proposar un raonament intuïtiu de la seva validesa, que consisteix en adonar-se que en tots dos casos el límit t d'integració podrà rebaixar-se fins que el $p_{\mu j}(t_j)$ amb t_j més gran es representi en la versió discretitzada per $p_{n+1;\mu j}$, i en aquest cas la integració sobre q_{n+1} ens proporcionaria una $\delta(p_{n+1})$ que anul.laria qualsevol contribució.

No obstant això, un propagador molt important on apareix una variable p, és el conegut com a funció resposta que exercirà un paper rellevant en tot aquest treball.

Per a introduir-lo procedirem anàlogament a com ho feren Garrido i San Miguel (1978b). Suposem que ens interessés calcular la resposta lineal del sistema davant d'una pertorbació externa introduïda modificant el drift f(q, t) per mitjà d'un camp extern g(t) acoblat a les variables del sistema a través d'una funció β (q, t). El nou drift vindrà definit, en conseqüència, per

$$f^{g,\mu}(q,t) \equiv f^{\mu}(q,t) + \beta^{\mu}_{\nu}(q,t)\, g^{\nu}(t) \tag{51}$$

En aquestes condicions H(p, q, t) pren la forma

$$H^{g}(p,q,t) = p_{\mu}\left[f^{\mu}(q,t) + \beta^{\mu}_{\nu}(q,t)\, g^{\nu}(t) \right] - i/_{2}\, p_{\mu} p_{\nu} D^{\mu\nu}(q,t) \tag{52}$$

Si calculem $\langle q^{\nu}(t'_1) \rangle^{g}$, on el superíndex indica que hem de prendre H^{g}(p, q, t), tindrem

$$\langle q^{\nu}(t'_1) \rangle^{g} = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \mathcal{D}p(\tau)\, q^{\nu}(t'_1) \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_{\mu}(\tau)\, \dot{q}^{\mu}(\tau) - H^{g}(p(\tau), q(\tau), \tau) \right] \right\} \tag{53}$$

La pertorbació introduïda d'aquesta manera, presa en un instant t_1 genera una resposta per part del sistema, la component lineal de la qual podem calcular per a un instant arbitrari t_1' en la forma

$$\delta / \delta \mathfrak{q}^{\delta}(t_1) \langle q^{\nu}(t_1') \rangle^{\mathfrak{f}} \Big|_{\mathfrak{f}=0} = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \mathcal{D}p(\tau)\, q^{\nu}(t_1')\,(-i)\, p_{\mu}(t_1) \beta^{\mu}_{\delta}(q(t_1), t_1) \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_{\mu}(\tau)\, \dot{q}^{\mu}(\tau) - H(p(\tau), q(\tau), \tau) \right] \right\}$$

$$= -i \langle q^{\nu}(t_1') \beta^{\mu}_{\delta}(q(t_1), t_1)\, p_{\mu}(t_1) \rangle \qquad (54)$$

L'expressió anterior defineix la funció resposta $\overline{R}(t_1', t_1)$

$$\overline{R}^{\nu}_{\delta}(t_1', t_1) \equiv -i \langle q^{\nu}(t_1') \beta^{\mu}_{\delta}(q(t_1), t_1)\, p_{\mu}(t_1) \rangle \qquad (55)$$

que interpretem d'acord amb el que hem apuntat anteriorment. La majoria de vegades es pren $\beta^{\mu}_{\delta} = \delta^{\mu}_{\delta}$ i en aquest cas notarem la funció resposta prescindint de la barra.

$$R^{\nu}_{\delta}(t_1', t_1) \equiv -i \langle q^{\nu}(t_1')\, p_{\delta}(t_1) \rangle \qquad (56)$$

De fet, aquesta és la definició convencional de funció resposta, tot i que (55) és més general. Per altra banda, el principi de causalitat té un significat evident per a aquest propagador, i en aquest sentit serà nul si $t_1 > t_1'$.

A més els propagadors introduïts en (48) estan ben definits fins i tot en el cas que un temps t_j coincideixi amb un t_k'. En aquest cas es pot demostrar que a causa de la discretització prepuntual escollida aquí, aquell propagador adopta el valor corresponent al límit $t_j \rightarrow t_k' + 0$. Dit d'altra manera i prenent el propagador resposta com a exemple es té

$$\langle q^{\nu}(t_j)\, p_{\delta}(t_j) \rangle \propto \theta(0^-) = 0 \qquad (57)$$

Quant a aquest punt en concret, Tirapegui i col.(1977) estableixen que

$$\langle q^{\nu}(t_j)\, p_{\delta}(t_j) \rangle \propto \alpha \qquad (58)$$

on α, tal i com precisarem en 2.3, (2.27), és un paràmetre que ens fixa la prescripció adoptada en la discretització de la integral funcional. Per al cas que es prengui com a prepuntual es pot demostrar (Tirapegui (1977, 1978a, 1978b)) que $\alpha = 0$ i obtenim doncs (57) com a cas particular. En realitat es comprova que amb aquella prescripció

$$\theta(0) = \alpha \tag{59}$$

i per a la discretització prepuntual serà

$$\theta(0) = 0 \tag{60}$$

Un cop introduïda la funció resposta, definirem la funció de correlació representant-la per un propagador tal com

$$\phi^{\mu\nu}(t_1, t_1') \equiv \langle q^{\mu}(t_1)\, q^{\nu}(t_1') \rangle \tag{61}$$

Quan estudiem el teorema de fluctuació-dissipació, II.3.3, veurem que sota certes condicions que ja s'especificaran, ambdós propagadors mantenen una forta relació.

No voldríem acabar aquesta secció sense insistir en un detall d'interès. La definició de propagadors donada en (48) pressuposa per a $P(q,t/q_0,t_0)$ normalització a la unitat; és a dir

$$\int_{\mathbb{R}} d^{m}q \; P(q,t/q_0,t_0) = 1 \tag{62}$$

i mentre no s'indiqui el contrari ho entendrem així en tot l'estudi que segueix.

1.5. FUNCIONAL GENERADOR DE PROPAGADORS.

En aquesta secció ens proposem introduir un funcional generador del qual es puguin obtenir aquells propagadors definits en la secció anterior, emprant les regles usuals de derivàció funcional.

A tall d'introducció, assenyalem que la idea d'introduir un funcional depenent de fonts externes, o de funcions prova, com se les designa a vegades, per a calcular propagadors aventatjosament, no és recent ni de cap manera pot considerar-se patrimoni absolut de formulacions mecano-estadístiques o estocàstiques. Schwinger(1951) ja tractà aquesta qüestió en el context de la Teoria Quàntica de Camps i actualment s'ha convertit en fonamental en qualsevol text sobre aquesta matèria.(Bogolyubov i Shirkov(1959), Roman (1968), Amit(1978). Posteriorment seguirem en la mateixa línia els treballs de De Dominicis i Martin (1964a, 1964b) bé que especialitzats a sistemes quàntics de molts cossos. Més recentment, el tractament estadístic de sistemes clàssics contingut en el formalisme MSR(1973) de Martin, Siggia i Rose, insisteix en la mateixa qüestió, i també Phytian (1975, 1976, 1977). La seva utilització ha estat finalment ampliada per a abarcar sistemes estocàstics (Tirapegui i col. (1977, 1978c)).

No volem pas insistir en els aventatges de la seva utilització ja que ens hi tornarem a referir en 2.4 , quan plantegem el funcional generador en representació Lagrangiana. Voldríem però, ressaltar la pulcritud formal amb què podem treballar un cop imtroduït, tal i com es comprovarà en les seccions subsegüents. En 11 i 12 es veurà que resulta especialment útil en el context de teories pertorbatives no renormalitzades.

Definim el funcional generador, $Z(J, J^*)$ com

$$Z(J, J^*) \equiv \left\langle \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau \left[J_\mu(\tau)\, q^\mu(\tau) + J^{*\mu}(\tau)\, p_\mu(\tau) \right] \right\} \right\rangle \tag{63}$$

o explicitant-ne la mitjana

$$Z(J, J^*) = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \mathcal{D}p(\tau) \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_\mu(\tau)\, \dot{q}^\mu(\tau) - H(p(\tau), q(\tau), \tau) + J_\mu(\tau)\, q^\mu(\tau) + J^{*\mu}(\tau)\, p_\mu(\tau) \right] \right\} \tag{64}$$

on J(τ) i J*(τ) són les funcions prova respectivament associades a q(τ) i p(τ). A partir de la pròpia definició de Z(J,J*), obtindrem els propagadors per derivació funcional

$$\langle p_{\mu_n}(t_n) \dots p_{\mu_1}(t_1)\, q^{\nu_m}(t'_m)\, q^{\nu_1}(t'_1) \rangle = 1/i^{n+m} \left. \frac{\delta^{n+m} Z(J,J^*)}{\delta J^{*\mu_n}(t_n) \dots \delta J^{*\mu_1}(t_1)\, \delta J_{\nu_m}(t'_m) \dots \delta J_{\nu_1}(t'_1)} \right|_{J=J^*=0} \quad (65)$$

Una propietat interessant d'aquests propagadors, que ja es podia comprovar en (47) però que és més evident en (65), consisteix en llur simetria en front a qualsevol permutació dels seus arguments, expressable ara per la identitat de derivades creuades en (65).

A partir de llur pròpia definició serà

$$Z(0,0) = \int_{\Omega} d^m q \;\; P(q,t / q_0,t_0) = 1 \quad (66)$$

segons que s'establí en (62). Si no es verifiqués aquesta condició hauríem de redefinir els propagadors introduint un factor $[Z(J, J^*)]^{-1}$ en (65).

1.6 CONDICIONS DE CONTORN.

Atesa la definició de propagadors partint d'un funcional generador, resulta obvi que es podran calcular fàcilment, si es coneix aquest darrer. En aquest sentit ens plantegem la necessitat d'establir condicions de contorn adequades que poguessin ser eventualment d'utilitat davant la possibilitat de determinar Z(J,J*) com a solució d'alguna equació en derivades funcionals que en tot cas cal precisar.

Tenint en compte (36) és immediat comprovar

$$1/i \; \frac{\delta Z(J,J^*)}{\delta J_\mu(t_0)} = q_0^\mu \, Z(J,J^*) \quad (67)$$

Per altra banda en l'instant final és té

$$\frac{1}{i}\,\frac{\delta Z(J,J^{*})}{\delta J^{*\mu}(t)} = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\,\mathcal{D}p(\tau)\,p_\mu(t)\,\exp\left\{ i\int_{t_0}^{t} d\tau\,[\quad]\right\} \tag{68}$$

i integrant sobre q_{n+1} amb la conseqüent aparició d'una $\delta(\dot{p}_{n+1})$ i posterior integració sobre aquest argument s'arriba a establir

$$\frac{1}{i}\,\frac{\delta Z(J,J^{*})}{\delta J^{*\mu}(t)} = 0 \tag{69}$$

que amb (68) constitueixen les condicions de contorn buscades, la validesa de les quals pot generalitzar-se per a qualsevol funcional generador.

1.7 DETERMINACIÓ DEL FUNCIONAL GENERADOR ASSOCIAT A LA DINÀMICA LLIURE.

Més endavant pretendrem desenvolupar una teoria pertorbativa per al càlcul de propagadors i especialment per a les funcions de correlació i de resposta. En aquestes condicions serà convenient de definir d'antuvi el que prendrem com a sistema no pertorbat, que també qualificarem de lliure, així com els propagadors corresponents als que donarem el mateix qualificatiu. Introduirem un funcional generador associat a aquesta dinàmica lliure, l'obtenció del qual serà l'objectiu fonamental d'aquesta secció.

Tenint en compte l'expressió (18) per a l'Hamiltonià complet, descomposarem el drift f(q,t) en la forma

$$f^{\mu}(q,t) \equiv f_0^{\mu}(q) + F^{\mu}(q,t) \tag{70}$$

amb F(q,t) una pertorbació i $f_0(q)$ una contribució lineal

$$f_0^{\mu}(q) = \lambda_{(\mu)}\, q^{\mu} \tag{71}$$

on en aquest cas no existeix suma sobre índexs repetits. Notarem aquesta excepció escrivint-ne un d'ells dins d'un parèntesi. Altrament descomposarem la matriu de difusió

D(q,t) segons

$$D^{\mu\nu}(q,t) \equiv D_0^{\mu\nu} + A^{\mu\nu}(q,t) \tag{72}$$

on D_0 es pren constant i amb les mateixes propietats quant a simetria, etc., que se suposaven per a D(q,t). En aquestes condicions descomposem el Hamiltonià complet en una part lliure H_0 i la corresponent pertorbació H_1, on apareixeran les contribucions de F(q,t) y A(q,t)

$$H(p,q,t) = H_0(p,q) + H_1(p,q,t) \tag{73}$$

$$H_0(p,q) = p_\mu \lambda_{\kappa\mu} q^\kappa - \tfrac{1}{2} p_\mu p_\nu D_0^{\mu\nu} \tag{74}$$

El funcional generador corresponent $Z_0(J,J^*)$ vindrà donat per

$$Z_0(J,J^*) = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \mathcal{D}p(\tau) \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_\mu(\tau)\, \dot{q}^\mu(\tau) - H_0(p(\tau),q(\tau)) + J_\mu(\tau)\, q^\mu(\tau) + J^{*\mu}(\tau)\, p_\mu(\tau) \right] \right\} \tag{75}$$

i ens proporcionarà per derivació funcional els propagadors no pertorbats associats a la dinàmica lliure engendrada per H_0.

Les condicions de contorn establertes amb caràcter general en la secció precedent, seran, evidentment, vàlides per a $Z_0(J,J^*)$, el qual pretendrem de determinar com a solució d'una equació en derivades funcionals, l'obtenció de la qual detallem a continuació.

Per a fer-ho apliquem el lema d'integració per parts que per a integrals funcionals establim com

$$\int \mathcal{D}\phi \, \frac{\delta}{\delta\phi} \mathcal{F}(\phi) = 0 \tag{76}$$

Sobre aquest lema, ens cal precisar que en tot el que segueix interpretarem la integral funcional, o més ben dit la integració funcional, com una operació lineal que pot intercanviar-se amb la diferenciació funcional respecte a una font exterior, i que obeeix el lema d'integració funcional per parts (Rösen (1969)).

Si particularitzem (76) en prendre $\mathcal{F}$ com l'integrant de (75) tenim

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\,\mathcal{D}p(\tau)\; \delta/\delta p_\mu(t')\; \exp\left\{ i\int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_\mu(\tau)\dot{q}^\mu(\tau) - H_0(p(\tau),q(\tau)) + J_\mu(\tau) q^\mu(\tau) + J^{*\mu}(\tau) p_\mu(\tau)\right]\right\} = 0 \qquad t>t'>t_0 \tag{77}$$

i efectuant la derivada funcional indicada

$$i \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\,\mathcal{D}p(\tau) \left[\dot{q}^\mu(t') - \frac{\partial H_0(p(t'),q(t'))}{\partial p_\mu(t')} + J^{*\mu}(t')\right] \exp\left\{ i\int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_\mu(\tau)\dot{q}^\mu(\tau) - H_0(p(\tau),q(\tau)) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + J_\mu(\tau) q^\mu(\tau) + J^{*\mu}(\tau) p_\mu(\tau)\right]\right\} = 0 \tag{78}$$

o equivalentment

$$\partial/\partial t' \; 1/i \; \frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J_\mu(t')} + J^{*\mu}(t') Z_0(J,J^*) - \lambda_{(\mu)}\, 1/i\; \frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J_\mu(t')} + i\, D_0^{\mu\nu}\, 1/i\; \frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J^{*\nu}(t')} = 0 \tag{79}$$

on s'ha tingut en compte l'expressió per a H_0 (74) així com el caràcter simètric de D_0. Reescrivim (79)

$$\left(\partial/\partial t' - \lambda_{(\mu)} \right) 1/i\; \frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J_\mu(t')} = - J^{*\mu}(t') Z_0(J,J^*) - D_0^{\mu\nu}\, \frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J^{*\nu}(t')} \tag{80}$$

$$\mu = 1,\ldots,m$$

Si féssim el mateix per a $\delta/\delta q^\mu(t')$, un cop realitzada la derivació funcional, arribaríem a

$$i \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\,\mathcal{D}p(\tau) \left[-\dot{p}_\mu(t') - \frac{\partial H_0(p(t'),q(t'))}{\partial q^\mu(t')} + J_\mu(t')\right] \exp\left\{ i\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\quad \right]\right\} = 0 \qquad t>t'>t_0 \tag{81}$$

o equivalentment

$$-\frac{\partial}{\partial t'}\; 1/i\; \frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J^{*\mu}(t')} - \lambda_{(\mu)}\, 1/i\; \frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J^{*\mu}(t')} + J_\mu(t') Z_0(J,J^*) = 0 \tag{82}$$

i aleshores serà

$$\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{(\mu)} \right) 1/i\; \frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J^{*\mu}(t')} = J_\mu(t') Z_0(J,J^*) \qquad \mu = 1,\ldots,m \tag{83}$$

Resolguem aquesta segona equació. Sens cap mena de dificultat establim

$$1/i\; \frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J^{*\mu}(t')} = \left[C_\mu + \int_{t_0}^{t'} d\tau\, J_\mu(\tau) Z_0(J,J^*) \exp\{\lambda_{(\mu)}\tau\}\right] \exp\{-\lambda_{(\mu)} t'\} \tag{84}$$

on C_μ és una constant arbitrària que determinem amb la condició de contorn (69)

$$C_\mu = -\int_{t_0}^{t} d\tau \, J_\mu(\tau) \exp\{\lambda_{(\mu)} \tau\} \, Z_0(J.J^*) \tag{85}$$

i substituint a (84)

$$1/i \, \frac{\delta Z_0(J.J^*)}{\delta J^{*\mu}(t')} = -\int_{t}^{t'} d\tau \, \exp\{\lambda_{(\mu)} (\tau - t')\} \, J_\mu(\tau) \, Z_0(J.J^*) \tag{86}$$

Podem definir a partir de Garrido i San Miguel (1978a) una funció $R_{o\,\mu}^{\nu}(t)$ per

$$R_{o\mu}^{\nu}(t) \equiv \theta(t) \, \delta_\mu^\nu \, \exp\{\lambda_{(\mu)} t\} \tag{87}$$

on $\theta(t)$ és la funció d´Heaviside.

En 10 veurem que la funció introduïda d´aquesta manera coincideix amb la funció resposta lliure, i d´aquí ve la notació emprada. D´acord amb (87) reescrivim (86) com

$$1/i \, \frac{\delta Z_0(J.J^*)}{\delta J^{*\mu}(t')} = -\int_{t_0}^{t} d\tau \, R_{o\mu}^{\nu}(\tau - t') \, J_\nu(\tau) \, Z_0(J.J^*) \tag{88}$$

d´on

$$Z_0(J.J^*) = Z_0(J.0) \exp\left\{ -i \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau' \, J_\nu(\tau) \, R_{o\mu}^{\nu}(\tau - \tau') \, J^{*\mu}(\tau') \right\} \tag{89}$$

Centrem-nos ara amb (80). Tal i com hem fet abans, establim

$$1/i \, \frac{\delta Z_0(J.J^*)}{\delta J_\mu(t')} = \left[\bar{C}^\mu - \int_{t_0}^{t'} d\tau \left(J^{*\mu}(\tau) \, Z_0(J.J^*) + D_0^{\mu\nu} \frac{\delta Z_0(J.J^*)}{\delta J^{*\nu}(\tau)} \right) \exp\{-\lambda_{(\mu)} \tau\} \right] \exp\{\lambda_{(\mu)} t'\} \tag{90}$$

on $\bar{C}^\mu$ és una nova constant d´integració que fixem amb (67)

$$1/i \, \frac{\delta Z_0(J.J^*)}{\delta J_\mu(t_0)} = \bar{C}^\mu \exp\{\lambda_{(\mu)} t_0\} = q_0^\mu \, Z_0(J.J^*) \tag{91}$$

i per conseqüent

$$\bar{C}^\mu = q_0^\mu \exp\{-\lambda_{(\mu)} t_0\} \, Z_0(J.J^*) \tag{92}$$

Si substituïm (88) i (92) en (90) arribem a

$$1/i \, \frac{\delta Z_0(J.J^*)}{\delta J_\mu(t')} = \left[q_0^\mu \exp\{\lambda_{(\mu)} (t' - t_0)\} - \int_{t_0}^{t} d\tau \, R_{o\nu}^{\mu}(t' - \tau) \, J^{*\nu}(\tau) + i \, D_0^{\mu\nu} \int_{t_0}^{t'} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau' \, R_{o\nu}^{\rho}(\tau' - \tau) \, J_\rho(\tau') \exp\{-\lambda_{(\mu)} (\tau - t')\} \right] Z_0(J.J^*) \tag{93}$$

Si en aquesta expressió prenem $J^* = 0$ ens queda

$$\frac{1}{i}\,\frac{\delta Z_0(J,0)}{\delta J_\mu(t')} = \left[q_0^{\mu} \exp\{\lambda_{(\mu)}(t'-t_0)\} + i\, D_0^{\mu\rho}\int_{t_0}^{t} d\tau' \int_{t_0}^{t'} d\tau\, R_{\rho\rho}^{\nu}(\tau'-\tau) \exp\{-\lambda_{(\mu)}(\tau-t')\}\, J_\nu(t')\right] Z_0(J,0) \tag{94}$$

on per comoditat s'han canviat els índexs muts.

Definim ara la matriu $\Delta(t',\tau')$ d'elements

$$\Delta^{\mu\nu}(t',\tau') \equiv D_0^{\mu\rho}\int_{t_0}^{t'} d\tau\, R_{\rho\rho}^{\nu}(\tau'-\tau)\, \exp\{-\lambda_{(\mu)}(\tau-t')\} \tag{95}$$

i tenint en compte (87)

$$\Delta^{\mu\nu}(t',\tau') = -\theta(\tau'-t')\, D_0^{\mu\nu} \exp\{\lambda_{(\nu)}\tau' + \lambda_{(\mu)}t'\}\, \frac{\exp\{-(\lambda_{(\nu)}+\lambda_{(\mu)})t'\} - \exp\{-(\lambda_{(\nu)}+\lambda_{(\mu)})t_0\}}{\lambda_{(\nu)}+\lambda_{(\mu)}}$$

$$-\theta(t'-\tau')\, D_0^{\mu\nu} \exp\{\lambda_{(\nu)}\tau' + \lambda_{(\mu)}t'\}\, \frac{\exp\{-(\lambda_{(\nu)}+\lambda_{(\mu)})\tau'\} - \exp\{-(\lambda_{(\nu)}+\lambda_{(\mu)})t_0\}}{\lambda_{(\nu)}+\lambda_{(\mu)}}$$

i finalment

$$\Delta^{\mu\nu}(t',\tau') = -\frac{D_0^{\mu\nu}}{\lambda_{(\mu)}+\lambda_{(\nu)}}\Big[\theta(\tau'-t')\exp\{\lambda_{(\nu)}(\tau'-t')\} + \theta(t'-\tau')\exp\{\lambda_{(\mu)}(t'-\tau')\} - \exp\{\lambda_{(\nu)}\tau' + \lambda_{(\mu)}t' - (\lambda_{(\nu)}+\lambda_{(\mu)})t_0\}\Big] \tag{96}$$

Directament a partir de (96) es comprova la seva simetria davant d'intercanvis d'índexs i arguments

$$\Delta^{\mu\nu}(t',\tau') = \Delta^{\nu\mu}(\tau',t') \tag{97}$$

A més a partir de (95) o (96) es verifiquen indistintament les identitats

$$\begin{aligned} \Delta^{\mu\nu}(t_0,\tau') &= 0 = \Delta^{\nu\mu}(\tau',t_0) \\ \Delta^{\mu\nu}(t',t_0) &= 0 = \Delta^{\nu\mu}(t_0,t') \end{aligned} \tag{98}$$

Un valor límit és aquell en què

$$\Delta^{\mu\nu}(t',t') = -\frac{D_0^{\mu\nu}}{\lambda_{(\nu)}+\lambda_{(\mu)}}\left[1 - \exp\{(\lambda_{(\nu)}+\lambda_{(\mu)})(t'-t_0)\}\right] \tag{99}$$

la magnitud $\Delta(t'',t')$ coincideix amb la que Garrido i

San Miguel defineixen com a propagador estocàstic; cal però, tenir en compte a efectes d'una estricta comparació que allà es pren $t_0 = 0$ i que altrament la seva matriu de difusió correspon a una meitat de la que s'introdueix aquí.

Tornant a (94) l'escrivim com

$$\frac{1}{Z_0(J,0)} \frac{1}{i} \frac{\delta Z_0(J,0)}{\delta J_\mu(t')} = q_0^\mu \exp\{\lambda_{(\mu)}(t'-t_0)\} + i\int_{t_0}^{t} d\tau' \Delta^{\mu\nu}(t',\tau') J_\nu(t') \qquad (100)$$

d'on obtindríem $Z_0(J,0)$ que substituiríem en (89) per a obtenir finalment $Z_0(J, J^*)$ com

$$Z_0(J,J^*) = \exp\left\{ i q_0^\mu \int_{t_0}^{t} d\tau \exp\{\lambda_{(\mu)}(\tau-t_0)\} J_\mu(\tau) - i\int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau' J_\mu(\tau) R^\mu_{\sigma\nu}(\tau-\tau') J^{*\nu}(\tau') - \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau' J_\mu(\tau) \Delta^{\mu\nu}(\tau,\tau') J_\nu(\tau') \right\} \qquad (101)$$

que és l'expressió final buscada.

Recordem que la dependència en t és irrellevant mentre que pel que fa a l'instant inicial t_0 comprovaríem que deixa d'intervenir en $\Delta^{\mu\nu}(\tau,\tau')$ amb la hipòtesi $t_0 \to -\infty$ juntament amb la condició $\lambda_{(\mu)} < 0$ necessària per tal que la dinàmica lliure estigui ben definida. Per altra banda en aquest cas, el terme en què intervenen explícitament les condicions inicials en $Z_0(J,J^*)$ s'anul.la idènticament, i correspon a la idea que desplaçant les condicions inicials fins a un infinit remot, el sistema regit per la dinàmica lliure considerada aquí, s'oblida completament d'aquelles condicions inicials, amb el transcurs del temps.

Pot ser d'interès considerar el límit determinista per al sistema lliure, fàcilment recuperable en prendre com a nul.la la matriu de difusió D. En aquest cas parlarem d'un funcional generador lliure determinista, que notem $Z_0^d(J,J^*)$, i que obtindrem de $Z_0(J,J^*)$ en prendre el propagador estocàstic $\Delta(\tau,\tau')$ idènticament nul, car de (96) se'n treu que és manifestament proporcional a D. D'aquí ve el qualificatiu d'estocàstic. Així doncs serà

$$Z_0^d(J,J^*) \equiv \exp\left\{ i\, q_0^{\mu} \int_{t_0}^{t} d\tau\, \exp\{\lambda_{\mu\nu}(\tau-t_0)\}\, J_\mu(\tau) - i \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, J_\mu(\tau)\, R^{\mu}_{\nu\nu}(\tau-\tau')\, J^{*\nu}(\tau') \right\} \tag{102}$$

Anàlogament podríem definir la contribució estocàstica a $Z_0(J,J^*)$ com

$$Z_0^s(J) = \exp\left\{ -1/2 \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, J_\mu(\tau)\, \Delta^{\mu\nu}(\tau,\tau')\, J_\nu(\tau') \right\} \tag{103}$$

amb la qual cosa hem aconseguit una partició de $Z_0(J,J^*)$ en dues components ben diferenciades i el funcional complet ens resulta com al producte d'ambdues.

$$Z_0(J,J^*) = Z_0^d(J,J^*)\, Z_0^s(J) \tag{104}$$

1.8 MITJANA SOBRE CONDICIONS INICIALS.

En la secció 4 parlàvem de la possibilitat d'incorporar una mitjana sobre condicions inicials a la intrínsecament generada per la dinàmica estocàstica. Fins ara els propagadors han estat calculats suposant una condició inicial fixa i coneguda, però en cas que el sistema obeís una distribució estadística de condicions inicials, suposaríem aquestes condicions com expressades mitjançant una densitat de probabilitat $P(q_0)$ que prendríem convenientment normalitzada

$$\int_{\Gamma} d^n q_0\, P(q_0) = 1 \tag{105}$$

En aquest cas l'efecte estadístic engendrat per $P(q_0)$ s'ha d'acoblar al de caràcter estocàstic considerat fins aquí, cosa que ens mena a definir propagadors on s'hagin tingut en compte ambdues mitjanes. Els notarem afegint un superíndex P

$$\langle \ldots \rangle^P \equiv \int_{\Gamma} d^n q_0\, \langle \ldots \rangle\, P(q_0) \tag{106}$$

i corresponentment introduirem un nou funcional generador $Z^P(J,J^*)$

$$\mathcal{Z}^P(J,J^*) \equiv \langle \mathcal{Z}(J,J^*) \rangle^P = \int_\Gamma d^m q_0 \; \mathcal{Z}(J,J^*)\, P(q_0) \tag{107}$$

del qual n'obtindrem els propagadors en la forma usual, i ens resultaran amitjanats amb $P(q_0)$ tal i com volíem. A partir de (105) i de (107) i de la definició de $Z(0,0)$ resulta clara la condició de normalització

$$\mathcal{Z}^P(0,0) = 1 \tag{108}$$

En tot el que s'estudiarà a partir d'ara i mentre es manifesti explícitament amb la notació emprada, s'entendrà que el sistema subjecte d'estudi obeeix aquesta distribució de condicions inicials.

1.9 OBTENCIÓ DEL FUNCIONAL GENERADOR A PARTIR DEL CORRESPONENT A LA DINÀMICA LLIURE.

En la secció 7 fórem capaços d'obtenir una expressió per a $Z_0(J,J^*)$ continguda en (101). El fet d'aconseguir-la ens haria servit com a exercici formal si no fóssim ara capaços d'establir $Z(J,J^*)$ a partir de $Z_0(J,J^*)$ car el primer d'aquests és el que correspon veritablement al problema considerat. Aquesta qüestió és la que pretenem tractar ara i de fet constitueix el punt de partida en la construcció pertorbativa no renormalitzada dels propagadors. Cas aquest que veurem en 11 i 12.

Tenint en compte la partició de $H(p,q,t)$ establerta en (73) i de la pròpia definició de $Z(J,J^*)$ se'n treu

$$\mathcal{Z}(J,J^*) = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\,\mathcal{D}p(\tau)\, \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_\mu(\tau)\dot{q}^\mu(\tau) - H_0(p(\tau),q(\tau)) + J_\mu(\tau) q^\mu(\tau) + J^{*\mu}(\tau) p_\mu(\tau) \right] \right\} \exp\left\{ -i \int_{t_0}^{t} d\tau\, H_1(p(\tau),q(\tau),\tau) \right\} \tag{109}$$

que podem escriure de manera més compacte si tenim en compte (75) com

$$\mathcal{Z}(J,J^*) = \exp\left\{ -i \int_{t_0}^{t} d\tau\, H_1\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^*(\tau)}, \frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \tau \right) \right\} \mathcal{Z}_0(J,J^*) \tag{110}$$

Aquesta és formalment la relació buscada. En l'expressió anterior s'haurà d'entendre que per a obtenir $Z(J,J^*)$ hem d'escriure primer l'expressió per a H_1 havent substituït $p(\tau)$ i $q(\tau)$ respectivament per $\frac{1}{i}\,\delta/\delta J^*(\tau)$ i $\frac{1}{i}\,\delta/\delta J(\tau)$, per a després fer actuar exponencialment l'operador resultant sobre $Z_o(J,J^*)$.

Centrem-nos ara amb la mitjana sobre condicions inicials de què parlavem en la secció anterior. Si, tal i com és de suposar, la pertorbació $H_1(p, q, t)$ no depèn de les condicions inicials, expressarem $Z^P(J,J^*)$ a partir de (107) i (110) en la forma

$$Z^P(J,J^*) = \exp\left\{-i\int_{t_0}^{t} d\tau\, H_1\left(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^*(\tau)}, \tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \tau\right)\right\}\int_{\Gamma} d^m q_0\, P(q_0)\, Z_0(J,J^*) \qquad (111)$$

on per conveniència hem escrit les derivades funcionals fora de la integral ja que implícitament assumirem que l'operació de derivació funcional i la que correspon a amitjanar sobre condicions inicials commuten.

Introduint anàlogament a (107)

$$Z_0^P(J,J^*) \equiv \int_{\Gamma} d^m q_0\, P(q_0)\, Z_0(J,J^*) \qquad (112)$$

reescrivim (111) de forma equivalent a (110) com

$$Z^P(J,J^*) = \exp\left\{-i\int_{t_0}^{t} d\tau\, H_1\left(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^*(\tau)}, \tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \tau\right)\right\} Z_0^P(J,J^*) \qquad (113)$$

Intentem expressar $Z_0^P(J,J^*)$ com més compacte millor. Definim doncs $\widetilde{P}(x)$ com la transformació de Fourier de $P(q_0)$ segons

$$\widetilde{P}(x) \equiv \int_{\Gamma} d^m q_0\, P(q_0)\, \exp\left\{i\, q_0^{\mu} x_{\mu}\right\} \qquad (114)$$

amb la qual cosa a partir de (105) és obvia la condició en l'origen

$$\widetilde{P}(0) = 1 \qquad (115)$$

Identificant

$$x_{\mu} \equiv \int_{t_0}^{t} d\tau\, \exp\left\{\lambda_{(\mu)}(\tau - t_0)\right\} J_{\mu}(\tau) \qquad (116)$$

obtindrem $Z_0^P(J,J^*)$ a partir de (101) i (112) com

$$Z_0^P(J,J^*) = \widetilde{P}\left(\int_{t_0}^{t} d\tau \exp\{\lambda(\tau-t_0)\} J(\tau)\right) \exp\Big\{-i\int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau' J_\mu(\tau) R^{\mu}_{0\nu}(\tau-\tau') J^{*\nu}(\tau') - \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau' J_\mu(\tau) \Delta^{\mu\nu}(\tau,\tau') J_\nu(\tau')\Big\} \qquad (117)$$

on el factor $\widetilde{P}(\int_{t_0}^{t} d\tau \exp\{\lambda(\tau-t_0)\} J(\tau))$ inclou en la seva totalitat l'efecte estadístic associat a la distribució de condicions inicials.

Altrament, l'expressió (113) amb $Z_0^P(J,J^*)$ donat per (117) és suficient per a desenvolupar una teoria pertorbativa no renormalitzada de càlcul de propagadors. Així qualsevol d'aquests, i a partir de la seva pròpia definició, s'obtindrà desenvolupant l'exponencial en (113)

$$\langle p_{\mu_n}(t_n) \dots q^{\nu_1}(t'_1)\rangle^P =$$
$$= \frac{1}{i^{n+m}} \frac{\delta^{n+m}}{\delta J^{*\mu_n}(t_n)\dots\delta J_{\nu_1}(t'_1)} \left(\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-i)^l}{l!} \prod_{k=1}^{l} \int_{t_0}^{t} d\tau_k\, H_1\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^*(\tau_k)}, \frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J(\tau_k)}, \tau_k\right) Z_0^P(J,J^*)\right)\Bigg|_{J=J^*=0} \qquad (118)$$

on cada terme de la suma conté un producte de derivades funcionals aplicades a $Z_0^P(J,J^*)$, que es calcularan en $J = J^* = 0$

Per a avaluar les contribucions obtingudes quan les derivades funcionals actuen sobre $P(\int_{t_0}^{t} d\tau \exp\{\lambda(\tau-t_0)\} J(\tau))$ establim sense cap dificultat

$$\frac{1}{i^n} \frac{\partial^n P\left(\int_{t_0}^{t} d\tau \exp\{\lambda(\tau-t_0)\} J(\tau)\right)}{\delta J_{\alpha_1}(\tau_1)\, \delta J_{\alpha_2}(\tau_2) \dots \delta J_{\alpha_n}(\tau_n)}\Bigg|_{J=0} = \frac{1}{i^n} \frac{\partial^n \widetilde{P}(x)}{\partial x_{\alpha_1}\dots\partial x_{\alpha_n}}\Bigg|_{x=0} \prod_{k=1}^{n} \exp\{\lambda_{(\alpha_k)}(\tau_k-t_0)\} \qquad (119)$$

i de (114)

$$\frac{1}{i^n} \frac{\partial^n \widetilde{P}(x)}{\partial x_{\alpha_1}\dots\partial x_{\alpha_n}}\Bigg|_{x=0} = \int_{\Gamma} d^m q_0\, q_0^{\alpha_1} \dots q_0^{\alpha_n} P(q_0) \equiv \langle q_0^{\alpha_1} \dots q_0^{\alpha_n}\rangle^P \qquad (120)$$

que representa la mitjana sobre condicions inicials del producte de variables especificat, reescrivint per tant (119) en la forma

$$\left. 1/i^{n} \frac{\partial^{n} p\left(\int_{t_0}^{t} d\tau \exp\{\lambda(\tau - t_0)\} J(\tau) \right)}{\partial J_{\alpha_1}(\tau_1) \cdots\cdots \delta J_{\alpha_n}(\tau_n)} \right|_{J=0} = \langle q_0^{\alpha_1} \cdots q_0^{\alpha_n} \rangle^{p} \prod_{k=1}^{n} \exp\{\lambda(\alpha_k)(\tau_k - t_0)\} \qquad (121)$$

1.10 PROPAGADORS LLIURES. INTRODUCCIÓ A LA REPRESENTACIÓ DIAGRAMÀTICA.

Un cop vista, en la secció anterior, la forma en que els propagadors poden ser obtinguts a partir de $Z_0^P(J,J^*)$ mitjançant tècniques pertorbatives convencionals, no ens ha de fer estrany que en els desenvolupaments corresponents, la funció de correlació i de resposta hi realitzin un paper preponderant. En aquesta secció les obtindrem a partir de l'expressió per a $Z_0^P(J,J^*)$ donada en (117).

Estudiem primerament la funció resposta lliure. Segons la definició establerta de manera general en (56) serà

$$R_{0\mu}^{\nu\,,P}(t',t'') \equiv -i \langle q^{\nu}(t')\, p_{\mu}(t'') \rangle_0^{P} \qquad (122)$$

on el subíndex indica clarament que es tracta d'un propagador lliure, i el superíndex fa referència a la mitjana sobre condicions inicials. Obtindrem el propagador que figura en (122) en la forma usual

$$R_{0\mu}^{\nu\,,P}(t',t'') = -i\, 1/i^{2} \frac{\delta}{\delta J_{\nu}(t')} \frac{\delta}{\delta J^{*\mu}(t'')} Z_0^{P}(J,J^{*}) \Big/_{J=J^{*}=0} \qquad (123)$$

i tenint en compte (117) arribem a

$$R_{0\mu}^{\nu\,,P}(t',t'') = R_{0\mu}^{\nu\,,P}(t'-t'') = \theta(t'-t'')\, \delta_{\mu}^{\nu} \exp\{\lambda(\mu)(t'-t'')\} \qquad (124)$$

on s'ha tingut en compte (87). D'aquesta manera es veu clar el perquè d'escriure el terme de la dreta en (87) com la funció resposta lliure.

A partir de (124) fixem-nos que la funció resposta lliure és completament independent de la distribució de condicions inicials, del temps en que foren prescrites, i també de la matriu de difusió D. Quant a coordenades temporals, depèn únicament de la diferència entre els instants en què es pertorba el sistema i aquell instant en què es considera la resposta, i com a tal presenta manifestament la propietat de simetria sota desplaçaments temporals.

Pel que fa a la funció de correlació i partint directament de la seva definició (61) serà

$$\mathcal{G}_0^{\mu\nu,P}(t',t'') = \langle q^\mu(t')\, q^\nu(t'')\rangle_0^P = 1/i^2 \frac{\delta}{\delta J_\mu(t')} \frac{\delta}{\delta J_\nu(t'')} Z_0^P(J,J^*)\Big|_{J=J^*=0} \qquad (125)$$

que arribarem a expressar tenint en compte (117) i (121)

$$\mathcal{G}_0^{\mu\nu,P}(t',t'') = \langle q_0^\mu\, q_0^\nu\rangle^P \exp\{\lambda_{(\mu)}(t'-t_0) + \lambda_{(\nu)}(t''-t_0)\} + \Delta^{\mu\nu}(t',t'') \qquad (126)$$

Observem en aquest cas la presència de dues contribucions perfectament diferenciades. Per una banda el primer terme reflecteix la mitjana estadística sobre condicions inicials, mentre que $\Delta^{\mu\nu}(t',t'')$ dóna compte de la mitjana estocàstica. I encara més, resulta convenient de definir

$$g_0^{\mu\nu}(t',t'') = \langle q_0^\mu\, q_0^\nu\rangle^P \exp\{\lambda_{(\mu)}(t'-t_0) + \lambda_{(\nu)}(t''-t_0)\} \qquad (127)$$

amb què

$$\mathcal{G}_0^{\mu\nu,P}(t',t'') = g_0^{\mu\nu}(t',t'') + \Delta^{\mu\nu}(t',t'') \qquad (128)$$

amb el significat ja comentat per a cadascun dels termes explícitament escrits.

Les expressions obtingudes per a les funcions de correlació i de resposta lliures coincideixen del tot amb les de Garrido i San Miguel (1978a).

Només per simple inspecció de les expressions és evident la simetria

$$\not{G}_0^{\mu\nu,\rho}(t',t'') = \not{G}_0^{\nu\mu,\rho}(t'',t') \tag{129}$$

puix que de (127)

$$g_0^{\mu\nu}(t',t'') = g_0^{\nu\mu}(t'',t') \tag{130}$$

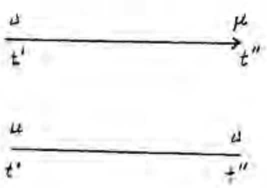
i respecte a $\Delta^{\mu\nu}(t', t'')$ ja la veiérem en (97).

Serà d'utilitat posterior disposar d'una representació diagramàtica per als propagadors, relacionada amb la que empraren Enz i Garrido (1976), i que ens permetrà d'escriure els desenvolupaments pertorbatius mitjançant tals diagrames, de manera semblant a com feren Dyson (1951) i Simanzik (1961) en Teoria Quàntica de Camps i que en l'actualitat ha esdevingut convencional. Tot i que en aquesta secció ens limitarem a tractar els propagadors lliures, en fixarem els diagrames tant per als lliures com per als complets i així quedaran establerts en llur totalitat per quan calgui fer-ne ús.

Així, representem els propagadors lliures mitjançant

$R_{0\mu}^{\nu}(t',t'')$

$\not{G}_0^{\mu\nu,\rho}(t',t'')$

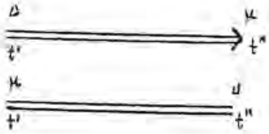


(131)

i els complets per

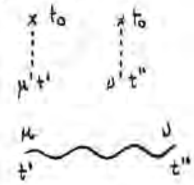
$R_{\mu}^{\nu\ \rho}(t',t'')$

$\not{G}^{\mu\nu,\rho}(t',t'')$



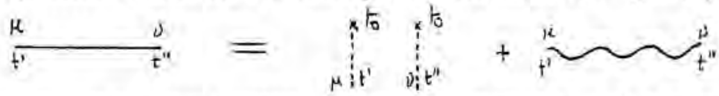
(132)

Així designem els propagadros en la dinàmica lliure per una línia senzilla, mentre que els complets, o vestits com a vegades se'ls qualifica, ho fem per línies dobles. Les que corresponen a funcions resposta porten una fletxa que apunta cap al passat. A partir de (127) hi ha també la possibilitat de partir el diagrama corresponent a $\not{g}_0(t',t'')$ en altres dos, cadascun d'ells representant respectivament a $g_0(t', t'')$ i a $\Delta(t', t'')$

$g_0^{\mu\nu}(t', t'')$  (133)

$\Delta^{\mu\nu}(t', t'')$

Aleshores podem escriure diagramàticament (128) com

 (134)

1.11 SISTEMES PURAMENT DETERMINISTES. CÀLCUL PERTORBATIU MITJANÇANT EL FUNCIONAL GENERADOR.

En les dues seccions vinents ens proposem d'esquematitzar el càlcul pertorbatiu no renormalitzat de les funcions de correlació i de resposta, almenys en els seus ordres més baixos, a partir de l'expressió genèrica (118). En aquesta secció tractarem un cas límit corresponent a sistemes purament deterministes i deixarem per a la següent la consideració d'un problema estocàstic.

Per a sistemes purament deterministes havíem trobat ja una expressió explícita per al funcional generador $Z_0^d(J,J^*)$ que venia donat per

$$Z_0^d(J,J^*) = \exp\left\{ i\, g_0^{\mu} \int_{t_0}^{t} d\tau\, \exp\{\lambda_{(\mu)}(\tau - t_0)\}\, J_\mu(\tau) - i \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, J_\mu(\tau)\, R^{\mu}_{0\nu}(\tau-\tau')\, J^{*\nu}(\tau') \right\} \qquad (102)$$

a partir del qual obteníem $Z^d(J,J^*)$ en la forma usual (110)

$$Z^d(J,J^*) = \exp\left\{ -i \int_{t_0}^{t} d\tau\, H_1\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^*(\tau)}, \frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \tau \right) \right\} Z_0^d(J,J^*) \qquad (135)$$

o prenent mitjanes sobre condicions inicials

$$Z^{d,P}(J,J^*) = \exp\left\{-i\int_{t_0}^{t} d\tau\, H_1\left(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^*(\tau)}, \tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \tau\right)\right\} Z_0^{d\,P}(J,J^*) \qquad (136)$$

Fixem-nos en aquest moment en un fet important que concorre en $Z_0^d\,(J,J^*)$ i evidentment en $Z_0^{d\;P}(J,\ J^*)$, que no és més que el caràcter lineal en $J(\tau)$, $J^*(\tau)$ de l'argument de l'exponencial en (102). En aquest cas i essent $\mathcal{F}$ una funció arbitrària d'arguments $\tfrac{1}{i}\,\delta/\delta J^*(\tau)$ o $\tfrac{1}{i}\,\delta/\delta J(\tau)$ la seva actuació sobre $Z_0^d(J,\ J^*)$ vindrà donada per

$$\mathcal{F}\left(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t'')}\right) Z_0^d(J,J^*) = Z_0^d(J,J^*)\, \mathcal{F}\left[\varphi_0^\mu \exp\{\lambda_{(\mu)}(t''-t_0)\} - \int_{t_0}^{t} d\tau'\, R_{0\nu}^{\mu}(t''-\tau')\, J^{*\nu}(\tau') + \tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t'')}\right] \qquad (137)$$

$$\mathcal{F}\left(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\mu}(t'')}\right) Z_0^d(J,J^*) = Z_0^d(J,J^*)\, \mathcal{F}\left[-\int_{t_0}^{t} d\tau\, J_\nu(\tau)\, R_{0\mu}^{\nu}(\tau-t'') + \tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\mu}(t'')}\right] \qquad (138)$$

amb això definirem uns operadors $\hat{\varphi}\,(t'')$ i $\hat{\phi}\,(t'')$ segons

$$\hat{\varphi}^\mu(t'') \equiv \left[Z_0^d(J,J^*)\right]^{-1} \tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t'')}\, Z_0^d(J,J^*) \qquad (139)$$

$$\hat{\phi}_\mu(t'') \equiv \left[Z_0^d(J,J^*)\right]^{-1} \tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\mu}(t'')}\, Z_0^d(J,J^*) \qquad (140)$$

on

$$\left[Z_0^d(J,J^*)\right]^{-1} \equiv 1/Z_0^d(J,J^*) \qquad (141)$$

i que vindran donats segons (137) i (138) per

$$\hat{\varphi}^\mu(t'') = \varphi_0^\mu \exp\{\lambda_{(\mu)}(t''-t_0)\} - \int_{t_0}^{t} d\tau'\, R_{0\nu}^{\mu}(t''-\tau')\, J^{*\nu}(\tau') + \tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t'')} \qquad (142)$$

$$\hat{\phi}_\mu(t'') = -\int_{t_0}^{t} d\tau\, J_\nu(\tau)\, R_{0\mu}^{\nu}(\tau-t'') + \tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\mu}(t'')} \qquad (143)$$

Ben aviat veurem la utilitat dels operadors introduïts d'aquesta manera. De moment considerem els primers termes en el desenvolupament de la funció de correlació. Particularitzant (118) per a $\mathcal{G}^{\mu\nu\;P}(t'',t')$, i escrivint explícitament la mitjana sobre condicions inicials

$$\mathcal{G}^{\mu\nu,P}(t'',t') = \left(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t'')}\right)\left(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\nu(t')}\right)\left\langle \left(\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(-i)^l}{l!}\prod_{k=1}^{l}\int_{t_0}^{t} d\tau_k\, H_1\left(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^*(\tau_k)}, \tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J(\tau_k)}, \tau_k\right) Z_0^d(J,J^*)\right\rangle^{P}\Bigg|_{J=J^*=0} \qquad (144)$$

Introduint les derivades funcionals dintre de la mitjana i desenvolupant l'exponencial fins a primer ordre

$$\mathcal{G}^{\mu\nu,P}(t'',t') = \left\langle \left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t'')}\right)\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\nu(t')}\right)\left[1 - i\int_{t_0}^{t} d\tau\, H_1\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^*(\tau)}, \frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \tau\right)\right] Z_0^d(J,J^*)\right\rangle^P_{J=J^*=0} + O(H_1^2) =$$

$$= \left\langle \left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t'')}\right)\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\nu(t')}\right) Z_0^d(J,J^*)\right\rangle^P_{J=J^*=0} - i\left\langle \int_{t_0}^{t} d\tau\, H_1\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^*(\tau)}, \frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \tau\right)\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t'')}\right)\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\nu(t')}\right) Z_0^d(J,J^*)\right\rangle^P_{J=J^*=0} + O(H_1^2) \tag{145}$$

El terme d'ordre zero en la pertorbació ens ha de donar lògicament el propagador lliure $\mathcal{G}_0^{\mu\nu,P}(t'',t')$, i en ser un sistema estrictament determinista obtindríem únicament la contribució no estocàstica $g_0^{\mu\nu}(t'',t')$. Això pot demostrar-se sens cap mena de dificultat. Tractem doncs el terme en primer ordre. D'antuvi haurem d'especificar H_1. Suposem el cas més senzill possible d'una pertorbació quadràtica; és a dir sigui

$$F^\sigma(q,t) \equiv \gamma^\sigma_{\gamma\delta}\, q^\gamma q^\delta \tag{146}$$

sense dependència explícita en el temps. En aquest cas

$$H_1(p,q,t) = p_\sigma F^\sigma(q,t) = \gamma^\sigma_{\gamma\delta}\, p_\sigma q^\gamma q^\delta \tag{147}$$

Per tant escriuríem el terme corresponent a primer ordre com

$$-i\left\langle \gamma^\sigma_{\gamma\delta}\int_{t_0}^{t} d\tau \left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\sigma}(\tau)}\right)\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\gamma(\tau)}\right)\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\delta(\tau)}\right)\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t'')}\right)\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\nu(t')}\right) Z_0^d(J,J^*)\right\rangle^P_{J=J^*=0} \tag{148}$$

o equivalentment

$$-i\left\langle \gamma^\sigma_{\gamma\delta}\left[Z_0^d(J,J^*)\right]\int_{t_0}^{t} d\tau \left[Z_0^d(J,J^*)\right]^{-1}\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\sigma}(\tau)}\right)\left[Z_0^d(J,J^*)\right]\left[Z_0^d(J,J^*)\right]^{-1}\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\gamma(\tau)}\right)\left[Z_0^d(J,J^*)\right] \cdots\right.$$

$$\left.\cdots \left[Z_0^d(J,J^*)\right]^{-1}\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\nu(t')}\right)\left[Z_0^d(J,J^*)\right]\right\rangle^P_{J=J^*=0} \tag{149}$$

A partir de (139),(140),(142) i (143) reescriurem (149) amb la prèvia introducció dels operadors $\hat{\psi}$, $\hat{\phi}$, i prèvia substitució per llurs expressions corresponents, per a obtenir fàcilment

$$-i\,\Gamma^{\sigma}_{\gamma\delta}\left\langle Z_0^{d}(J,J^*)\int_{t_0}^{t}d\tau\left[-\int_{t_0}^{t}d\tau'\,J_\nu(\tau')\,R^{\nu}_{0\sigma}(\tau'-\tau)+\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\sigma}(\tau)}\right]\left[q_0^{\gamma}\exp\{\lambda_{(\gamma)}(\tau-t_0)\}-\right.\right.$$
$$\left.-\int_{t_0}^{t}d\tau'\,R^{\gamma}_{0\nu}(\tau-\tau')\,J^{*\nu}(\tau')+\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\gamma(\tau)}\right]\cdots\cdots\left[q_0^{\nu}\exp\{\lambda_{(\nu)}(t'-t_0)\}-\right.$$
$$\left.\left.-\int_{t_0}^{t}d\tau'\,R^{\nu}_{0\xi}(t'-\tau')\,J^{*\xi}(\tau')+\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\nu(t')}\right]\right\rangle^{P}\Bigg|_{J=J^*=0} \qquad (150)$$

expressió molt aparatosa però ben senzilla de calcular. Efectivament, els termes que contenen derivades funcionals no proporcionen cap tipus de contribució, llevat el de $\delta/\delta J^*(\tau)$ car a la seva dreta no hi ha res que sigui funció de J. Per tant reescrivim (150) com

$$-i\left\langle Z_0^{d}(J,J^*)\,\Gamma^{\sigma}_{\gamma\delta}\int_{t_0}^{t}d\tau\left[-\int_{t_0}^{t}d\tau'\,J_\nu(\tau')\,R^{\nu}_{0\sigma}(\tau'-\tau)+\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\sigma}(\tau)}\right]\left[q_0^{\gamma}\exp\{\lambda_{(\gamma)}(\tau-t_0)\}-\right.\right.$$
$$\left.\left.-\int_{t_0}^{t}d\tau'\,R^{\gamma}_{0\nu}(\tau-\tau')\,J^{*\nu}(\tau')\right]\cdots\cdots\left[q_0^{\nu}\exp\{\lambda_{(\nu)}(t'-t_0)\}-\int_{t_0}^{t}d\tau'\,R^{\nu}_{0\xi}(t'-\tau')\,J^{*\xi}(\tau')\right]\right\rangle^{P}\Bigg|_{J=J^*=0} \qquad (151)$$

que podem posar en la forma

$$-i\left\langle Z_0^{d}(J,J^*)\,\Gamma^{\sigma}_{\gamma\delta}\int_{t_0}^{t}d\tau\left\{\left[-\int_{t_0}^{t}d\tau'\,J_\nu(\tau')\,R^{\nu}_{0\sigma}(\tau'-\tau)\right]\left[q_0^{\gamma}\exp\{\lambda_{(\gamma)}(\tau-t_0)\}-\int_{t_0}^{t}d\tau'\,R^{\gamma}_{0\nu}(\tau-\tau')\,J^{*\nu}(\tau')\right]\right.\right.$$
$$\cdots\left[q_0^{\nu}\exp\{\lambda_{(\nu)}(t'-t_0)\}-\int_{t_0}^{t}d\tau'\,R^{\nu}_{0\xi}(t'-\tau')\,J^{*\xi}(\tau')\right]+\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\sigma}(\tau)}\left[-q_0^{\mu}q_0^{\nu}\exp\{\lambda_{(\mu)}(t''-t_0)+\right.$$
$$+\lambda_{(\nu)}(t'-t_0)\}\left(q_0^{\gamma}\exp\{\lambda_{(\gamma)}(\tau-t_0)\}\int_{t_0}^{t}d\tau'\,R^{\delta}_{0\nu}(\tau-\tau')\,J^{*\nu}(\tau')+q_0^{\delta}\exp\{\lambda_{(\delta)}(\tau-t_0)\}\int_{t_0}^{t}d\tau'\,R^{\gamma}_{0\nu}(\tau-\tau')\,J^{*\nu}(\tau')\right)$$
$$-q_0^{\gamma}q_0^{\delta}\exp\{\lambda_{(\gamma)}(\tau-t_0)+\lambda_{(\delta)}(\tau-t_0)\}\left(q_0^{\mu}\exp\{\lambda_{(\mu)}(t''-t_0)\}\int_{t_0}^{t}d\tau'\,R^{\nu}_{0\xi}(t'-\tau')\,J^{*\xi}(\tau')+\right.$$
$$\left.\left.\left.+q_0^{\nu}\exp\{\lambda_{(\nu)}(t'-t_0)\}\int_{t_0}^{t}d\tau'\,R^{\mu}_{0\nu}(t''-\tau')\,J^{*\nu}(\tau')\right)+\cdots\cdots\right]\right\}\right\rangle^{P}\Bigg|_{J=J^*=0} \qquad (152)$$

Els termes no explícitament escrits corresponen als que contindrien la font J^* en forma no lineal o no la contindrien, i en qualsevol cas llur contribució és nul.la si es té en compte que rera les oportunes derivacions sobre J^* hauríem de prendre $J = J^* = 0$. Podem simplificar (152) si tenim en compte que la primera de les contribucions a la integral en la variable τ , és a dir, aquella que conté com a factor $(-\int_{t_0}^{t} d\tau J'_\nu(\tau') R^{\nu}_{0\sigma}(\tau'-\tau))$, és idènticament nul.la quan es pren J = 0, i en conseqüència ens queda

$$-i \left\langle Z_0^{\delta}(J,J^*) \Gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \int_{t_0}^{t} d\tau \, \tfrac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J^{*\sigma}(\tau)} \Big[-q_0^{\mu} q_0^{\nu} \exp\{\lambda_{(\mu)}(t''-t_0) + \lambda_{(\nu)}(t'-t_0)\} \right.$$
$$\Big(q_0^{\gamma} \exp\{\lambda_{(\gamma)}(\tau-t_0)\} \int_{t_0}^{t} d\tau' R^{\delta}_{0\alpha}(\tau-\tau') J^{*\alpha}(\tau') + q_0^{\delta} \exp\{\lambda_{(\delta)}(\tau-t_0)\} \int_{t_0}^{t} d\tau' R^{\gamma}_{0\alpha}(\tau-\tau') J^{*\alpha}(\tau') \Big) -$$
$$- q_0^{\gamma} q_0^{\delta} \exp\{\lambda_{(\gamma)}(\tau-t_0) + \lambda_{(\delta)}(\tau-t_0)\} \Big(q_0^{\mu} \exp\{\lambda_{(\mu)}(t''-t_0)\} \int_{t_0}^{t} d\tau' R^{\nu}_{0\xi}(t'-\tau') J^{*\xi}(\tau') +$$
$$\left. + q_0^{\nu} \exp\{\lambda_{(\nu)}(t'-t_0)\} \int_{t_0}^{t} d\tau' R^{\mu}_{0\alpha}(t''-\tau') J^{*\alpha}(\tau') \Big) \Big] \right\rangle^{P}_{|J=J^*=0} \qquad (153)$$

Si en fer la derivada funcional recordem que amb la discretització prepuntual prescrita aquí, la funció resposta a temps igual és nul.la, arribem finalment a expressar el terme de primer ordre en la forma

$$\Gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \left\langle Z_0^{d}(J,J^*) \int_{t_0}^{t} d\tau \, q_0^{\gamma} q_0^{\delta} \exp\{\lambda_{(\gamma)}(\tau-t_0) + \lambda_{(\delta)}(\tau-t_0)\} \right.$$
$$\left. \Big[q_0^{\mu} \exp\{\lambda_{(\mu)}(t''-t_0)\} R^{\nu}_{0\sigma}(t'-\tau) + q_0^{\nu} \exp\{\lambda_{(\nu)}(t'-t_0)\} R^{\mu}_{0\sigma}(t''-\tau) \Big] \right\rangle^{P}_{|J=J^*=0} \qquad (154)$$

i per tant fins aquest ordre la funció de correlació ve donada per

$$G^{\mu\nu,P}(t'',t') = g_0^{\mu\nu}(t'',t') +$$
$$+ \Gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \Big[\langle q_0^{\gamma} q_0^{\delta} q_0^{\mu} \rangle^{P} \int_{t_0}^{t} d\tau \exp\{\lambda_{(\gamma)}(\tau-t_0) + \lambda_{(\delta)}(\tau-t_0) + \lambda_{(\mu)}(t''-t_0)\} R^{\nu}_{0\sigma}(t'-\tau) +$$
$$+ \langle q_0^{\gamma} q_0^{\delta} q_0^{\nu} \rangle^{P} \int_{t_0}^{t} d\tau \exp\{\lambda_{(\gamma)}(\tau-t_0) + \lambda_{(\delta)}(\tau-t_0) + \lambda_{(\nu)}(t'-t_0)\} R^{\mu}_{0\sigma}(t''-\tau) \Big] + O(\Gamma^2)$$
$$(155)$$

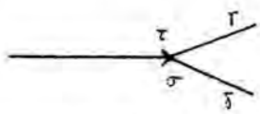
Es usual de considerar la distribució de condicions inicials de tipus Gaussià; en aquest cas ja se sap que els moments d'ordre senar d'aquesta distribució són nuls, i per tant, per a aquest cas en particular, no existeix contribució no nul.la en primer ordre de teoria de pertorbacions per a $\mathcal{G}^{\mu\nu\,P}(t'', t')$; és a dir

$$\mathcal{G}_r^{\mu\nu,P}(t'',t') = g_0^{\mu\nu}(t'',t') + O(\gamma^2) \tag{156}$$

El càlcul prosseguiria ara de la meteixa manera fins arribar a l'ordre desitjat; en el tractament de les expressions resultants augmentaria l'extensió però no la dificultat.

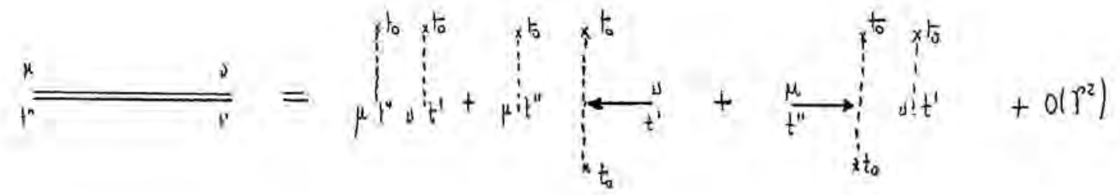
Pel que fa a la funció resposta, un càlcul completament anàleg ens demostraria que també en aquest cas no hi hauria cap contribució en primer ordre sota la hipòtesi de condicions inicials gaussianament distribuïdes.

Per a generar la representació diagramàtica, tindrem en compte que en els diagrames corresponents a l'n-èssim ordre de la pertorbació, apareixeran n vèrtexs que corresponen cadascun d'ells a un H_1 en un instant diferent. Cada vertex el representarem per un punt i porta associada la constant d'acoblament γ . A partir de l'estructura de H_1 comprovaríem que en cada vèrtex hi acaba necessàriament una funció resposta; amb això cadascun d'ells es pot representar com



i les línies emergents del vèrtex amb índexs γ i δ poden correspondre indistintament a funcions de correlació i de resposta lliures. El temps τ va integrat entre t_0 i t, i finalment els índexs σ, γ, δ, van contrets amb els corresponents índexs a la constant d'acoblament, amb la qual cosa i per a qualsevol diagrama, sigui quin sigui l'ordre a què correspongui, només figuren com a índexs rellevants, els del propagador que estiguem calculant i de forma anàloga, les úniques coordenades temporals que no s'integren són les que especifica aquell propagador.

Així per exemple el desenvolupament (155) el representarem per



(157)

Fixem-nos per acabar en un aspecte molt interessant que es revela immediatament en realitzar un calcul pertorbatiu de propagadors en sistemes purament deterministes. En efecte, si prescindim per un moment de la influencia de les condicions inicials i si observem l'expressió per a $Z_o^d(J, J^*)$ en (102), no ens sera difícil d'adonar-nos que l'element essencial en la construcció pertorbativa de $\mathcal{G}$ i R, sera en tots dos casos la funció resposta lliure R_o. Si representem en forma diagramàtica, el que hem dit anteriorment, és el mateix que afirmar que les línies bàsiques en la construcció de diagrames seran fletxes apuntant vers el passat. Per a un desenvolupament pertorbatiu diagramàtic d'un sistema qualsevol, no estrictament determinista, sembla altrament obvi que no podrem trobar-nos mai amb diagrames que continguin circuits tancats ("loops") on únicament hi intervinguin funcions resposta, precisament per la direccionalitat en el temps que aquestes funcions resposta presuposen. Tornant a considerar el cas comentat de sistemes purament deterministes, hem d'arribar necessàriament a la conclusió que no podem trobar cap diagrama que contingui "loops", car en cas que aquests "loops" existissin haurien d'involucrar necessàriament funcions resposta. Tot aixo dóna lloc a estructures diagramàtiques totalment ramificades, característica essencial d'un sistema determinista. Aquest resultat es coneix amb el nom d'aproximació arbre, ("tree apromimations"), puix que el tractament purament determinista en un sistema amb característiques estocàstiques establertes, pot considerar-se com una vertadera aproximació. Així en el context de la Mecànica Estadística de Transicions de fase, l'esmentada aproximació correspon al model de Ginzburg-Landau. De totes maneres es pot trobar tractada per Kadanoff i col. (1967) de forma més general. Per a més detalls sobre aquest punt es pot consultar el llibre d'Amit (1978).

1.12 SISTEMES NO DETERMINISTES: MATRIU DE DIFUSIÓ CONSTANT.

Per a il.lustrar el desenvolupament pertorbatiu en el cas més general de sistemes no purament deterministes, en aquesta secció tractarem el problema amb soroll additiu. Recordem que això suposava prendre la matriu de difusió constant

$$D^{\mu\nu}(q,t) = D_0^{\mu\nu} \tag{158}$$

i en conseqüència H_1 vindrà completament determinat pels termes no lineals del drift. Considerem la no linealitat (146), i per tant també aquí

$$H_1(p,q,t) = \gamma^{\sigma}_{\tau\delta}\, p_\sigma q^\tau q^\delta \tag{159}$$

Ja que en la secció anterior es desenvolupà la funció de correlació, fem-ho en aquesta secció per a la funció resposta. En aquest cas serà

$$R^{\nu\,P}_{\mu}(t',t'') = -i\left\langle q^\nu(t')\, p_\mu(t'')\right\rangle^P = -i\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\nu(t')}\right)\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\mu}(t'')}\right)\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(-i)^l}{l!}\prod_{k=1}^{l}\int_{t_0}^{t}d\tau_k\,\gamma^{\sigma}_{\tau\delta}\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\sigma}(\tau_k)}\right)\cdots\left(\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\delta(\tau_k)}\right)Z_0^P(J,J^*)\Big|_{J=J^*=0} \tag{160}$$

amb $Z_0^P(J, J^*)$ donat per (117). Recordem també la descomposició de $Z_0(J,J^*)$ en les seves parts determinista i estocàstica respectivament, donades per (102) i (103). En aquestes condicions reescriurem (160) fins a segon ordre en la forma

$$= (-i)\Big[\Big\langle \Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t')}\Big)\Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\mu}(t'')}\Big) Z_0^d(J,J^*)\, Z_0^s(J) \Big\rangle^P_{|J=J^*=0} +$$

$$+ \Big\langle \Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t')}\Big)\Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\mu}(t'')}\Big) (-i)\int_{t_0}^{t} d\tau_1\, \gamma^\sigma_{\gamma\delta}\Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\sigma}(\tau_1)}\Big)\Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\gamma(\tau_1)}\Big)\Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\delta(\tau_1)}\Big) Z_0^d(J,J^*)\, Z_0^s(J) \Big\rangle^P_{|J=J^*=0} +$$

$$+ \Big\langle \Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t')}\Big)\Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\mu}(t'')}\Big) \frac{i^2}{2!}\int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{t} d\tau_2\, \gamma^\sigma_{\gamma\delta}\, \gamma^\alpha_{\beta\rho}\Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J^{*\sigma}(\tau_1)}\Big)\cdots\Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\rho(\tau_2)}\Big) Z_0^d(J,J^*)\, Z_0^s(J) \Big\rangle^P_{|J=J^*=0}$$

$$+ \; O(\gamma^3) \qquad (161)$$

El terme en ordre zero contribueix com $R_{0\,\mu}^{\;\nu}$ $(t' - t'')$. El de primer ordre l'escrivim com

$$= i^2 \Big\langle \int_{t_0}^{t} d\tau_1\, \gamma^\sigma_{\gamma\delta}\, [Z_0^d(J,J^*)]\, [Z_0^d(J,J^*)]^{-1}\Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\mu(t')}\Big)[Z_0^d(J,J^*)] \cdots\cdots$$

$$\cdots [Z_0^d(J,J^*)]^{-1}\Big(\tfrac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_\xi(\tau_1)}\Big)[Z_0^d(J,J^*)]\, Z_0^s(J)\Big\rangle^P_{|J=J^*=0} \qquad (162)$$

i a partir de (139) i (140)

$$= i^2 \Big\langle \int_{t_0}^{t} d\tau_1\, \gamma^\sigma_{\gamma\delta}\, [Z_0^d(J,J^*)]\, \hat{\psi}^\mu(t')\, \hat{\phi}_\mu(t'')\, \hat{\psi}^\gamma(\tau_1)\, \hat{\psi}^\delta(\tau_1)\, \hat{\phi}_\sigma(\tau_1)\, Z_0^s(J)\Big\rangle^P_{|J=J^*=0} \qquad (163)$$

Tenint en compte les expressions per als operadors $\hat{\psi}$ i $\hat{\phi}$ donades en (142) i (143) i la corresponent a $Z_0^S(J)$ en (102) resulta ser

$$[Z_0^s(J)]^{-1}\, \hat{\psi}^\delta(\tau_1)\, [Z_0^s(J)] = \hat{\psi}^\delta(\tau_1) - \tfrac{1}{i}\int_{t_0}^{t} d\tau'\, \Delta^{\delta\nu}(\tau_1,\tau')\, J_\nu(\tau') \qquad (164)$$

$$[Z_0^s(J)]^{-1}\, \hat{\phi}_\sigma(\tau_1)\, [Z_0^s(J)] = \hat{\phi}_\sigma(\tau_1) \qquad (165)$$

amb la qual cosa reescrivim el terme en primer ordre tenint també en compte el caràcter commutatiu dels operadors $\hat{\psi}$ i $\hat{\phi}$ per a qualssevol índexs discrets i qualssevol coordenades temporals, directament comprovable a partir de (142) i (143). Consegüentment aquell terme serà

$$i^2 \Big\langle \int_{t_0}^{t} d\tau_1\, \gamma^\sigma_{\gamma\delta}\, [Z_0^d(J,J^*)]\, [Z_0^s(J)]\, \hat{\phi}_\mu(t'')\, \hat{\phi}_\sigma(\tau_1)\Big[\hat{\psi}^\mu(t') - \tfrac{1}{i}\int_{t_0}^{t} d\tau'\, \Delta^{\mu\xi}(t',\tau')\, J_\xi(\tau')\Big]\cdots$$

$$\cdots\Big[\hat{\psi}^\delta(\tau_1) - \tfrac{1}{i}\int_{t_0}^{t} d\tau'\, \Delta^{\delta\xi}(\tau_1,\tau')\, J_\xi(\tau')\Big]\Big\rangle^P_{|J=J^*=0} \qquad (166)$$

on els operadors $\hat{\psi}$ i $\hat{\phi}$ serien substituïts per llurs expressions explícites (142) i (143). Abans però, ens cal introduir una nova notació pel que fa a $\hat{\psi}$ en el terme que depèn de les condicions inicials,

$$q_0^{\mu}(t'') \equiv q_0^{\mu} \exp\{ \lambda_{(\mu)} (t''-t_0)\} \tag{167}$$

amb això (142) s'escriu en forma més compacta com

$$\hat{\psi}^{\mu}(t'') = q_0^{\mu}(t'') - \int_{t_0}^{t} d\tau' R^{\mu}_{0\nu} (t''-\tau') J^{*\nu}(\tau') + 1/i \frac{\delta}{\delta J_{\mu}(t'')} \tag{168}$$

Tenint present aquesta forma expressem el terme de primer ordre (166) com

$$i^2 \Big\langle \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \Gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \Big[-\int_{t_0}^{t} d\tau' J_{\nu}(\tau') R^{\mu}_{0\mu}(\tau'-t'') + 1/i \,\delta/\delta J^{*\mu}(t'') \Big] \Big[-\int_{t_0}^{t} d\tau' J_{\nu}(\tau') R^{\nu}_{0\sigma}(\tau'-\tau_1) + 1/i \,\delta/\delta J^{*\sigma}(\tau_1) \Big]$$
$$\Big[q_0^{\nu}(t') - \int_{t_0}^{t} d\tau' R^{\nu}_{0\xi}(t'-\tau') J^{*\xi}(\tau') - 1/i \int_{t_0}^{t} d\tau' \Delta^{\nu\xi}(t',\tau') J_{\xi}(\tau') + 1/i \,\delta/\delta J_{\nu}(t') \Big] \cdots\cdots$$
$$\cdots \Big[q_0^{\delta}(\tau_1) - \int_{t_0}^{t} d\tau' R^{\delta}_{0\nu}(\tau_1-\tau') J^{*\nu}(\tau') - 1/i \int_{t_0}^{t} d\tau' \Delta^{\delta\xi}(\tau_1,\tau') J_{\xi}(\tau') \Big] \Big\rangle^{P}_{\big| J=J^*=0} \tag{169}$$

on hem prescindit del factor $Z_0(J, J^*)$ idènticament la unitat en prendre $J = J^* = 0$. Efectuant les operacions indicades finalment arribaríem a expressar-lo com

$$\Big\langle \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \Gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} R^{\nu}_{0\sigma}(t'-\tau_1) \Big[R^{\gamma}_{0\mu}(\tau_1-t'') q_0^{\delta}(\tau_1) + R^{\delta}_{0\mu}(\tau_1-t'') q_0^{\gamma}(\tau_1) \Big] \Big\rangle^{P} \tag{170}$$

o equivalentment

$$\Gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \Big[\langle q_0^{\delta} \rangle^{P} \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \exp\{ \lambda_{(\gamma)} (\tau_1-t_0) \} R^{\nu}_{0\sigma}(t'-\tau_1) R^{\gamma}_{0\mu}(\tau_1-t'') + \langle q_0^{\gamma} \rangle^{P} \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \exp\{ \lambda_{(\delta)} (\tau_1-t_0) \} R^{\nu}_{0\sigma}(t'-\tau_1) R^{\delta}_{0\mu}(\tau_1- \tag{171}$$

El de segon ordre el calcularíem de la mateixa manera, cosa que no farem aquí explícitament ja que de fer-ho, el desenvolupament no representaria cap aportació nova, pero sí que indicarem les contribucions que hi apareixen, les quals són del tipus

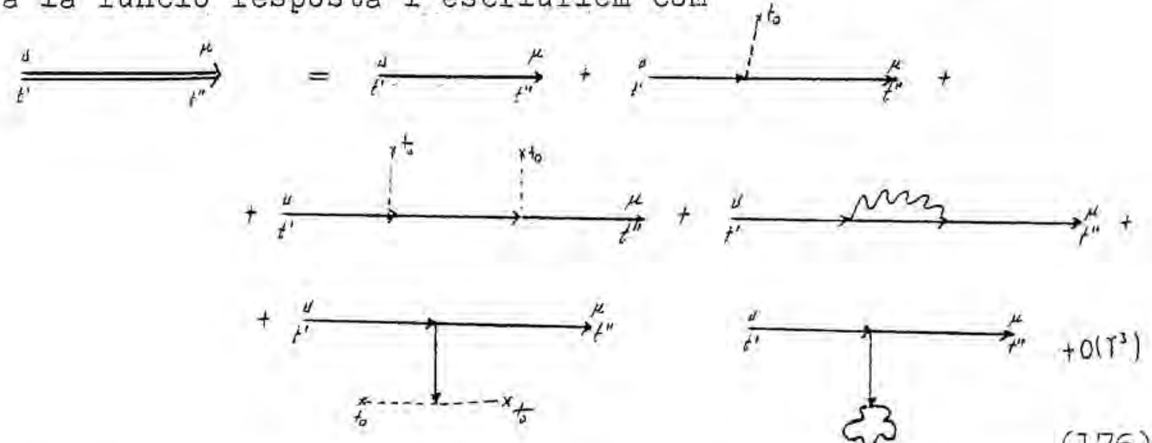
$$\left\langle \int_{t_0}^{t} d\tau_1 d\tau_2 \; \gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \, \gamma^{\alpha}_{\beta\rho} \, R^{\nu}_{0\alpha}(t'-\tau_2) \, R^{\gamma}_{0\mu}(\tau_1-t'') \, R^{\beta}_{0\sigma}(\tau_2-\tau_1) \, \varphi_0^{\delta}(\tau_1) \, \varphi_0^{\rho}(\tau_2) \right\rangle^{P} \qquad (172)$$

$$\left\langle \int_{t_0}^{t} d\tau_1 d\tau_2 \; \gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \, \gamma^{\alpha}_{\beta\rho} \, R^{\nu}_{0\alpha}(t'-\tau_2) \, R^{\gamma}_{0\mu}(\tau_1-t'') \, R^{\beta}_{0\sigma}(\tau_2-\tau_1) \, \Delta^{\rho\delta}(\tau_2,\tau_1) \right\rangle^{P} \qquad (173)$$

$$\left\langle \int_{t_0}^{t} d\tau_1 d\tau_2 \; \gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \, \gamma^{\alpha}_{\beta\rho} \, R^{\nu}_{0\alpha}(t'-\tau_2) \, R^{\beta}_{0\mu}(\tau_2-t'') \, R^{\rho}_{0\sigma}(\tau_1-\tau_1) \, \varphi_0^{\gamma}(\tau_1) \, \varphi_0^{\delta}(\tau_1) \right\rangle^{P} \qquad (174)$$

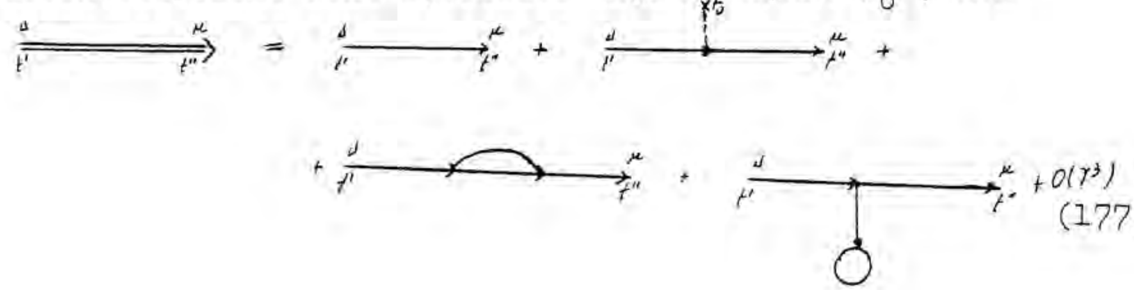
$$\left\langle \int_{t_0}^{t} d\tau_1 d\tau_2 \; \gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \, \gamma^{\alpha}_{\beta\rho} \, R^{\nu}_{0\alpha}(t'-\tau_2) \, R^{\beta}_{0\mu}(\tau_2-t'') \, R^{\rho}_{0\sigma}(\tau_2-\tau_1) \, \Delta^{\gamma\delta}(\tau_1,\tau_1) \right\rangle^{P} \qquad (175)$$

En diagrames, el desenvolupament anterior per a la funció resposta l'escriuríem com



(176)

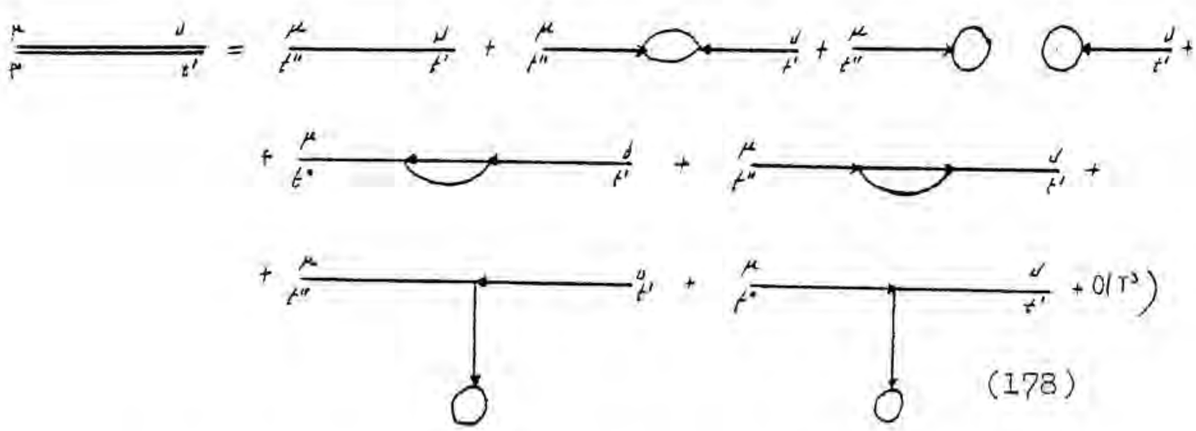
Cadascun dels diagrames anteriors ocasiona diverses contribucions topològicament idèntiques, corresponents als índexs muts units a les línies internes, que per tal de simplificar la notació, no hem escrit explícitament. Així el diagrama corresponent a primer ordre representa els dos termes que figuren en (170). Cal que ens adonem també que els parells de diagrames tercer , quart , cinquè i sise poden sumar-se i tenint en compte (134) reescrivim el desenvolupament fent aparèixer explícitament $\varnothing_0^P$, com



(177)

Cas d'estar considerant condicions inicials gaussianament distribuïdes no apareixeria el terme en primer ordre. En aquestes circumstàncies el desenvolupament coincideix amb el que va obtenir San Miguel en la seva tesi doctoral on emprà el teorema de Wick. De fet allí s'obtingueren només els termes anomenats normals, tot i que el teorema esmentat permet d'obtenir a l'ensems els qualificats d'espuris. Aquests darrers foren eliminats sota hipòtesi de gaussianitat en les condicions inicials. Per tant comprovem la identitat entre els dos esquemes pertorbatius quant als resultats finals assolits i mentre es considerin, òbviament, les mateixes hipòtesis de partida.

De la mateixa manera a com s'ha fet per a la funció resposta, podria repetir-se per a la de correlació. No ho farem amb detall, car entenem que la metodologia del càlcul haurà quedat suficientment clarificada amb els exemples presentats. En el cas particular de prendre condicions inicials gaussianes, el desenvolupament fins a segon ordre és de la forma



(178)

1.13 RELACIÓ AMB ALTRES ESQUEMES PERTORBATIUS NO RENORMALITZATS.

Fins ara s'han considerat mètodes pertorbatius no renormalitzats per al càlcul de propagadors, basats en un esquema funcional que suposa l'aplicació reiterada de derivades funcionals actuant sobre un funcional generador. Aquesta manera de procedir suposa una alternativa a l'ús potser més tradicional d'esquemes desenvolupats a partir del teorema de Wick que, formulat inicialment per a sistemes quàntics a temperatura zero (Wick (1950)), estableix una relació operacional per a productes d'operadors ordenats temporalment. En qualsevol text de Teoria Quàntica de Camps poden trobar-se explicacions més detallades, i en particular es troba ben demostrat i ben establert en Fetter i Walecka (1971).

Fou manifestament constatada la necessitat d'ampliar el marc de la seva aplicació i en aquest sentit Enz i Garrido ho reformularen per a sistemes clàssics deterministes i canònics. Per altra part, per a dinàmiques estocàstiques, un tal teorema fou objecte d'estudi en la tesi doctoral de San Miguel, i en el treball de Garrido i San Miguel (1978a) poden trobar-se referències abastament. Bàsicament el teorema demostrat allà conté dues parts : una operacional i una altra d'estadística. En el desenvolupament de la primera hi apareix el propagador estocàstic $\Delta(t', t'')$, mentre que el de la segona es basa fonamentalment en la contribució determinista $g_o(t', t'')$ relacionada directament amb la distribució de condicions inicials prescrita per al sistema. Tots dos termes, després d'una sèrie de ressumacions, es combinen per a donar la funció $\not{g}_o^P$.

En realitat aquesta partició de contribucions apareix trivialment a partir de l'expressió per al funcional generador lliure.

Resumint, ens atrevim a considerar el formulisme funcional proposat aquí com d'utilització més directa i diàfana que el que prové del teorema de Wick, malgrat que tots dos condueixen a resultats idèntics, tal i com apuntàrem en la secció anterior, per al cas particular de la funció resposta considerada en aquella secció. És evident que aquesta conclusió és vàlida en el context en què han estat comparats ambdós tractaments ; és a dir considerant-los quant a la formulació de teories pertorbatives com les que s'han presentat fins ara. Creiem que és necessari fer aquest incís ja que tal i com veurem en la segona part d'aquest treball, l'avantatge en l'ús d'un formulisme funcional podria establir-se pel que fa a la possibilitat que ofereix de poder desenvolupar les anomenades teories pertorbatives renormalitzades.

1.14 PROPAGADORS ESTACIONARIS.

Entendrem que un sistema es troba en un règim estacionari quan totes les seves propietats siguin invariants davant d'una operació de traslació temporal. Això suposa, en particular, que els propagadors on intervé una sola variable hauran de ser independents del temps, mentre que les funcions de correlació i de resposta hauran de dependre únicament de la diferència entre llurs arguments temporals. En II.3.3, veurem que són dues les condicions sota les quals s'ha de parlar d'aquests estats estacionaris. Per una banda i pel que fa a la contribució estocàstica, l'operador $\hat{H}$ no ha de presentar dependència temporal explícita. I respecte a la part estadística, la mitjana sobre condicions inicials s'haurà de realitzar amb la distribució de probabilitat estacionària, solució de la FPE.

Estudiar el caràcter estacionari dels propagadors lliures prèviament introduïts, resulta especialment interessant i il.lustratiu. Pel que fa a la primera de les condicions és ben clara la seva validesa per a la dinàmica lliure engendrada per $\hat{H}_0$ a partir de (74). Recordem també del què parlavem a propòsit de la funció resposta lliure en el sentit que no depenia de la distribució de condicions inicials, amb la qual cosa la seva condició de propagador estacionari és del tot garantitzada, i per tant té simetria sota desplaçants temporals, tal i com ho comentàrem.

Pel que fa a la funció de correlació lliure, aquesta invariància no és en absolut manifesta en cap de les seves contribucions g_0 i Δ, com es pot comprovar a partir de (96) i (127). Això no obstant, hi ha una forma senzilla d'aconseguir que $\not{g}_0^P$ resulti estacionària. Efectivament, només cal desplaçar l'instant inicial t_0 en què es prepara el sistema, fins a un infinit remot per tal que la dinàmica lliure el condueixi a una situació típicament estacionària on s'haurà oblidat del tot del seu estat de partida. Tot el que s'ha expressat anteriorment pot comprovar-se explícitament si prenem $t_0 \longrightarrow -\infty$ i en la hipòtesi $\lambda_{(\mu)} < 0$ necessària, per altra banda, perquè l'evolució lliure estigui ben definida. Amb aquestes hipòtesis es té

$$g_0^{\mu\nu}(t', t'') \xrightarrow[t_0 \to -\infty]{} 0 \tag{179}$$

mentre

$$\Delta^{\mu\nu}(t', t'') \xrightarrow[t_0 \to -\infty]{} \Delta^{\mu\nu}_{st}(t'-t'') = -\frac{D_0^{\mu\nu}}{\lambda_{(\mu)}+\lambda_{(\nu)}}\left[\theta(t'-t'')\exp\left\{\lambda_{(\mu)}(t'-t'')\right\}+\theta(t''-t')\exp\left\{\lambda_{(\nu)}(t''-t')\right\}\right] \tag{180}$$

Pel que fa als propagadors complets del sistema es discutirà posteriorment la qüestió de llur caràcter estacionari en relació amb el teorema de fluctuació-dissipació.

2. DESCRIPCIÓ FUNCIONAL DE LA DINÀMICA DE FOKKER-PLANCK EN REPRESENTACIÓ LAGRANGIANA.

2.1 INTRODUCCIÓ.

La formulació per integrals de camí de la dinàmica de Fokker-Planck en termes d'una Lagrangiana, no és gens recent, car una descripció tal, fou ja proposada per Onsager i Machlup (1953), els quals obtingueren la densitat de probabilitat d'una trajectòria per al cas particular d'un procés lineal i gaussià. En aquestes hipòtesis, Onsager i Machlup demostraren que aquella formulació podia escriure's en termes d'un funcional

$$\mathcal{W}(q(\tau)) \propto \exp\left\{-\int_{-\infty}^{\infty} d\tau\, \mathcal{L}(q(\tau),\dot{q}(\tau))\right\} \tag{1}$$

amb

$$\mathcal{L}(q,\dot{q}) = \tfrac{1}{2}\, Q_{\mu\nu}\left(\dot{q}^{\mu}-A^{\mu}_{\lambda}q^{\lambda}\right)\left(\dot{q}^{\nu}-A^{\nu}_{\sigma}q^{\sigma}\right) \tag{2}$$

essent Q i A matrius constants relacionades amb les característiques del procés considerat, i on la proporcionalitat en (1) es convertiria en igualtat, amb la prèvia introducció d'un factor de normalització. A la funció $\mathcal{L}(q(\tau),\dot{q}(\tau))$ es coneix com a funció d'Onsager-Machlup, i de forma més comuna com a funció Lagrangiana o simplement Lagrangiana; el qualificatiu en aquest cas és adequat ja que tal i com veurem en la secció següent, coincidirà amb la c-funció definida en 1.2, eq. (1.19), a què ens referíem de la mateixa forma, car per a obtenir-la es transformava per Legendre la funció Hamiltoniana de forma usual a com es procedeix en Mecànica Clàssica. Quant a la notació emprada ens avancem a la demostració de la identitat entre la funció d'Onsager-Machlup i la Lagrangiana (1.19) notant-les de la mateixa manera.

Després d'aquell estudi inicial en seguiren molts d'altres el propòsit dels quals era fer extensiva una representació de la forma (1) a processos més generals que no pas els lineals i els gaussians considerats en aquell primer estudi. Podem doncs esmentar, entre altres, els treballs d' Stratonovich (1971), Horsthemke i Back (1975), o els que ja han estat citats de Graham (1977a , 1977b), Dekker (1978a,1978b) o Tirapegui (1977,1978a,1978b).

Abans d'entrar de ple a establir la representació Lagrangiana buscada, voldríem comentar alguns dels principals avantatges que suposa quant a la descripció de sistemes macroscòpics fluctuants. Comprovarem que alguns d'aquests avantatges són també vàlids per a una descripció funcional en termes d'un Hamiltonià que és allò a què ens referíem en el capítol anterior.

i) Una descripció basada en un funcional tal com (1) ens proporciona informació sobre trajectòries completes del sistema en l'interval $[t_0, t]$ objecte d'obsrvació, mentre que la formulació d'una FPE establerta per a $P(q_2, t_2/q_1,t_1)$fa referència únicament a dos instants de la seva evolució. Així per exemple, a partir de (1) la condició per al camí més probable entre dos punts extrems vindrà donada per

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} d\tau \, \mathcal{L}(q(\tau), \dot{q}(\tau)) = 0 \tag{3}$$

amb una adequada tria de $\mathcal{L}(q(\tau), \dot{q}(\tau))$. Per altra banda una condició extremal com (3) ens permetria d'establir un conjunt d'equacions d'Euler-Lagrange referides a la trajectoria més probable del sistema.

ii) D'altra banda la introducció d'un funcional (1) ens permetrà d'escriure la dinàmica estocàstica d'una manera similar a com ho solem fer per a estats d'equilibri estadístic. Efectivament, en l'equilibri es pretén definir un potencial termodinàmic S(q) i tal que $P_{st}(q) \propto S(q)$, essent $P_{st}(q)$ la distribució de probabilitat estacionària per al problema que hem considerat. Per tant podríem esperar que la descripció Lagrangiana que aquí es proposa, ens servís per a formular de manera raonable la termodinàmica de no equilibri, entenent que,en aquest context,la Lagrangiana assumiria el paper d'un potencial termodinàmic de no equilibri. Per a sistemes que evolucionen prop d'aquest e - quilibri,la Lagrangiana està molt relacionada amb la producció d'entropia,i el principi de producció mínima d'entropia formulat per Glansdorff i Prigogine(1973) es realitzaria a través de la propietat extremal (3).

iii) Per mitjà de (1), i de forma anàloga a com veiérem en el capítol anterior, serà possible d'expressar qualsevol mitjana de les variables macroscòpiques del sistema mitjançant integrals funcionals, amb la qual cosa,per a calcular-les tenim al nostre abast les tècniques aproximades per a l'avaluació de les integrals esmentades. (Feynmam i Hibbs (1965)). Ens serà també útil de definir un funcional generador anàleg a $Z(J,J^*)$ del qual se'n podran obtenir els propagadors per derivació funcional amb procediments idèntics als que ja s'han comentat.

iv) Finalment, resulta interessant de recuperar la sabuda i original formulació proposada per Feynman (1948) per a sistemes quàntics, que de fet fou establerta en termes d'una Lagrangiana.

2.2 INTEGRAL DE CAMÍ PER A LA DENSITAT DE PROBABILITAT CONDICIONAL.

En aquesta secció obtindrem una expressió per a $P(q,t/q_o,t_o)$ en forma d'una integral de camí, a partir de la corresponent a la de caràcter elemental $P(q_j, t_j/q_{j-1},t_{j-1})$ definida en (1.43). Per tal d'aconseguir-ho emprarem la dependència quadràtica de la funció Hamiltoniana en les variables p. Aquesta funció fou introduïda en (1.18). Recordem l'expressió per a $P(q_j,t_j/q_{j-1},t_{j-1})$ i la de $H(p,q,t)$

$$P(q_j,t_j/q_{j-1},t_{j-1}) = \int \frac{d^m p}{(2\pi)^m} \exp\{ip_\mu (q_j^\mu - q_{j-1}^\mu)\} \tilde{U}(p, q_{j-1}, t_j, t_{j-1})$$

$$H(p, q_{j-1}, t_{j-1}) = p_\mu f^\mu(q_{j-1}, t_{j-1}) - i/_2\, p_\mu p_\nu D^{\mu\nu}(q_{j-1}, t_{j-1})$$

i substituïm aquesta segona en la primera

$$P(q_j,t_j/q_{j-1},t_{j-1}) = \int \frac{d^m p}{(2\pi)^m} \exp\left\{i\epsilon\left[p_\mu \frac{q_j^\mu - q_{j-1}^\mu}{\epsilon} - p_\mu f^\mu(q_{j-1},t_{j-1}) + i/_2\, p_\mu p_\nu D^{\mu\nu}(q_{j-1},t_{j-1})\right]\right\} \tag{4}$$

La integral en (4) pot realitzar-se fàcilment si es té en compte el caràcter quadràtic de $H(p,q_{j-1}, t_{j-1})$ en p. Procedim primer amb un sistema unidimensional

$$P(q_j,t_j/q_{j-1},t_{j-1}) = \int \frac{dp}{2\pi} \exp\left\{-1/_2\, \epsilon p^2 D(q_{j-1},t_{j-1}) + i\epsilon p\left[\frac{q_j - q_{j-1}}{\epsilon} - f(q_{j-1},t_{j-1})\right]\right\} \tag{5}$$

Emprant la integral de Fresnel ja coneguda

$$\int_{-\infty}^{\infty} ds \exp\{-1/_2\, As^2 + qs\} = \sqrt{2\pi}\,\frac{1}{\sqrt{A}} \exp\{1/_2\, q^2/A\} \tag{6}$$

escrivim (5) en la forma

$$P(q_j,t_j/q_{j-1},t_{j-1}) = [2\pi\epsilon D(q_{j-1},t_{j-1})]^{-1/2} \exp\left\{-1/_2 \frac{\epsilon}{D(q_{j-1},t_{j-1})}\left[\frac{q_j - q_{j-1}}{\epsilon} - f(q_{j-1},t_{j-1})\right]^2\right\} \tag{7}$$

Generalitzant el resultat anterior a m-dimensions,

$$P(q_j,t_j/q_{j-1},t_{j-1}) = \int \frac{d^m p}{(2\pi)^m} \exp\left\{-1/_2\, \epsilon p_\mu D^{\mu\nu}(q_{j-1},t_{j-1}) p_\nu + i\epsilon p_\mu\left[\frac{q_j^\mu - q_{j-1}^\mu}{\epsilon} - f^\mu(q_{j-1},t_{j-1})\right]\right\} \tag{8}$$

Tal i com veiérem en (1.23), el caràcter no singular de $D(q,\tau)$ permet de referir-nos a la seva inversa $D^{-1}(q,\tau)$ d'elements $D_{\mu\nu}(q,\tau)$

$$D_{\mu\nu}(q,\tau)\, D^{\nu\sigma}(q,\tau) = \delta_\mu^\sigma \tag{9}$$

Altrament escriurem la identitat (6) per a integrals m-dimensionals com

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^m s \exp\{-1/_2\, s_\mu A^{\mu\nu} s_\nu + q^\mu s_\mu\} = (2\pi)^{m/2}\, \|A\|^{-1/2} \exp\{1/_2\, q^\mu A_{\mu\nu} q^\nu\} \tag{10}$$

on $\|A\|$ fa referència al determinant de la matriu A.

Emprant (10) en (8)

$$P(q_j,t_j\,/\,q_{j-1},t_{j-1}) = \left[(2\pi\epsilon)^m \| D(q_{j-1},t_{j-1})\|\right]^{-1/2} \exp\left\{-\epsilon/2 \left[\frac{q_j^\mu - q_{j-1}^\mu}{\epsilon} - f^\mu(q_{j-1},t_{j-1})\right] D_{\mu\nu}(q_{j-1},t_{j-1}) \left[\frac{q_j^\nu - q_{j-1}^\nu}{\epsilon} - f^\nu(q_{j-1},t_{j-1})\right]\right\} \qquad (11)$$

Un cop establerta la probabilitat elemental, s'obté la corresponent a l'interval finit $[t_0\ ,\ t]$ tal com ja veiérem en 1.3, emprant l'equació de Chapman-Kolmogorov (1.38) deduïble directament del caràcter Markovià del procés en consideració. Prenent el límit contínu $n\to\infty (\epsilon\to 0)$

$$P(q,t/q_0,t_0) = \lim_{\substack{n\to\infty\\(\epsilon\to 0)}} \int_\Gamma \left(\prod_{j=1}^{n} d^m q_j\right)\left(\prod_{j=1}^{n+1}\left[(2\pi\epsilon)^m \| D(q_{j-1},t_{j-1})\|\right]^{-1/2}\right) \exp\left\{-\epsilon/2 \sum_{j=1}^{n+1}\left[\frac{q_j^\mu - q_{j-1}^\mu}{\epsilon} - f^\mu(q_{j-1},t_{j-1})\right] D_{\mu\nu}(q_{j-1},t_{j-1}) \left[\frac{q_j^\nu - q_{j-1}^\nu}{\epsilon} - f^\nu(q_{j-1},t_{j-1})\right]\right\} \qquad (12)$$

on Γ representa la regió de l'espai de configuracions del problema. L'expressió de la dreta de la igualtat permet de definir la integral de camí com

$$P(q,t/q_0,t_0) \equiv \int_{q(t_0)=q_0}^{q(t)=q} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{-1/2 \int_{t_0}^{t} d\tau \left[\dot q^\mu(\tau) - f^\mu(q(\tau),\tau)\right] D_{\mu\nu}(q(\tau),\tau) \left[\dot q^\nu(\tau) - f^\nu(q(\tau),\tau)\right]\right\} \qquad (13)$$

expressió, repetim-ho, purament formal que només adquireix sentit ple en la seva versió discretitzada (12). La interpretació que cal donar a la integral en (13) i als límits d'integració que hi apareixen és anàloga a la que ja es va comentar en relació amb (1.46).

Definint

$$W(q(\tau)) \equiv \exp\left\{-1/2 \int_{t_0}^{t} d\tau \left[\dot q^\mu(\tau) - f^\mu(q(\tau),\tau)\right] D_{\mu\nu}(q(\tau),\tau) \left[\dot q^\nu(\tau) - f^\nu(q(\tau),\tau)\right]\right\} \qquad (14)$$

hem caracteritzat el funcional $W(q(\tau))$ de la secció precedent, i la funció d'Onsager-Machlup vindrà donada, per consegüent, per l'integrant de (14). $\mathcal{D}(q(\tau))$ és una mesura en l'espai de funcions $q(\tau)$ que podem escriure com

$$\mathcal{D}q(\tau) \equiv \lim_{n\to\infty} \left(\prod_{j=1}^{n} \frac{d^m q_j}{\left[(2\pi\epsilon)^m D(q_{j-1},t_{j-1})\right]^{1/2}}\right) \frac{1}{\left[(2\pi\epsilon)^m D(q_n,t_n)\right]^{1/2}} \qquad (15)$$

Recordant la definició de funció Lagrangiana donada en (1.26), podem establir sens cap mena de dificultat la identitat

$$\mathcal{W}(q(\tau)) = \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}(q(\tau), \dot{q}(\tau), \tau) \right\} \tag{16}$$

o el que és equivalent

$$P(q,t/q_0,t_0) = \int_{q(t_0)=q_0}^{q(t)=q} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}(q(\tau), \dot{q}(\tau), \tau) \right\} \tag{17}$$

que constitueix la representació de $P(q,t/q_0,t_0)$ cercada.

Abans d'acabar aquesta secció voldríem insistir en dos aspectes importants que fan referència al resultat que hem obtingut.

i) La propietat essencial que ens ha permès d'establir (14) ha estat el caràcter quadràtic en les variables p per part del c-Hamiltonià $H(p,q,\tau)$ construït a partir de l'operador corresponent $\hat{H}(p,q,\tau)$. Aquest darrer està directament relacionat amb la FPE del procés estocàstic considerat; per tant si pretenem d'estudiar processos més generals, l'obtenció d'una representació Lagrangiana com la que s'ha considerat aquí, pot resultar força difícil, si no impossible, davant la molt probable pèrdua d'aquell caràcter quadràtic per part dels operadors hamiltonians associats a equacions dinàmiques establertes eventualment per a $P(q,t/q_0,t_0)$.

ii) Per tal d'obtenir una expressió més anàloga a les usuals en Mecànica Estadística, serà convenient de treballar amb una nova Lagrangiana a valors reals, que notarem $\mathcal{L}_R(q,\dot{q},\tau)$, i que definirem per mitjà de

$$\mathcal{L}_R(q,\dot{q},\tau) \equiv 1/i\, \mathcal{L}(q,\dot{q},\tau) = -i\, \mathcal{L}(q,\dot{q},\tau) \tag{18}$$

a partir de la qual expressem $P(q,t/q_0,t_0)$ com

$$P(q,t/q_0,t_0)=\int_{q(t_0)=q_0}^{q(t)=q}\mathcal{D}q(\tau)\,\exp\left\{-\int_{t_0}^{t}d\tau\,\mathcal{L}_R(q(\tau),\dot{q}(\tau),\tau)\right\} \tag{19}$$

amb $\mathcal{L}_R(q,\dot{q},\tau)$ donada, a partir de (1.26) i (18), per

$$\mathcal{L}_R(q,\dot{q},\tau)=1/2\left[\dot{q}^{\mu}-f^{\mu}(q,\tau)\right]D_{\mu\nu}(q,\tau)\left[\dot{q}^{\nu}-f^{\nu}(q,\tau)\right] \tag{20}$$

En tot el que segueix emprarem gairebé sempre $\mathcal{L}_R(q,\dot{q},\tau)$; prescindirem però del subíndex que indica el seu caràcter a valors reals, amb el benentès que, sens possibilitat de confusió, ens referirem a $\mathcal{L}$ si en l'expressió per a $P(q,t/q_0,t_0)$ apareix la unitat imaginària en l'exponent segons (17), o bé i d'acord amb (19) ens referirem a $\mathcal{L}_R$ si en l'expressió corresponent no hi figura.

2.3 NO UNICITAT EN LA LAGRANGIANA: INFLUÈNCIA DE LES DIFERENTS DISCRETITZACIONS.

No cal revisar gaires articles dels que composen l'extensa bibliografia a propòsit de la descripció per integrals de camí de la dinàmica de Fokker-Planck, per adonar-se de la gran quantitat de resultats quant a la Lagrangiana que apareix en l'integrant. Aquesta diversistat pot semblar d'antuvi sorprenent, però és fàcilment explicable si recordem que per arribar a tals representacions funcionals hem introduït prèviament un operador Hamiltonià i un operador d'evolució temporal, en les expressions dels quals és fonamental l'ordre amb què apareixen els operadors $\hat{p}$ i $\hat{q}$. Aquesta circumstància ja fou comentada en 1.2, a l'ensems que ens decidíem per una prescripció concreta, la prepuntual, connectada amb l'anomenada ordenació normal d'operadors. En aquella secció la discussió sobre aquest punt només hi fou apuntada, i pretenem tractar-la aquí amb més detall perquè és a nivell de la representació en termes d'una Lagrangiana on l'esmentada no unicitat hi queda més patent, i a aquest mateix nivell també han estat realitzades amb més profunditat la controvèrsia i l'analisi correspo - nent.

L'ambigüitat de les expressions de les integrals de camí ja fou esmentada per Haken (1976) i per Dekker (1976a, 1976b), però foren Enz (1977) i Leschke i Schmutz (1977), amb Dowker(1976) i Cohen (1970), els qui la relacio naren amb el problema de l'ordenació d'operadors en processos estocàstics els tres primers, i en processos quàntics els dos darrers. Tirapegui i col.(1978a) relacionaren la denominada discretització amb l'ordenació d'operadors, emprant una tècnica general introduïda per Agarwal i Wolf (1970), utilitzada també per Leschke i Schmutz (1977). Aquí no discutirem aquest punt car ens limitarem a la discussió de la no unicitat en la Lagrangiana com a conseqüencia de l'arbitrarietat en la discretització emprada en la integral de camí, bó i acceptant que aquella discretització està relacionada al seu torn amb una particular ordenació dels operadors $\hat{p}$ i $\hat{q}$.

Per començar situem-nos en un cas amb matriu de difusió constant, i prenguem per comoditat D = 1, suposant el sistema unidimensional i sense dependència temporal explícita en f(q). Per aquest cas escrivim (7) en la forma

$$P(q_j,t_j / q_{j-1},t_{j-1}) = (2\pi\epsilon)^{-1/2} \exp\left\{-\tfrac{1}{2}\epsilon\left[\frac{q_j-q_{j-1}}{\epsilon} - f(q_{j-1})\right]^2\right\} \qquad (21)$$

expressió pròpiament vàlida a $O(\epsilon)$ i més estrictament

$$P(q_j,t_j / q_{j-1},t_{j-1}) = (2\pi\epsilon)^{-1/2} \exp\left\{-\tfrac{1}{2}\epsilon\left[\frac{q_j-q_{j-1}}{\epsilon} - f(q_{j-1})\right]^2 + O(\epsilon^{3/2})\right\} \qquad (22)$$

A partir de (21)

$$P(q,t / q_0,t_0) = (2\pi\epsilon)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} \left(\prod_{j=1}^{n} \frac{dq_j}{\sqrt{2\pi\epsilon}}\right) \exp\left\{-\frac{\epsilon}{2}\sum_{j=1}^{n+1}\left[\frac{q_j-q_{j-1}}{\epsilon} - f(q_{j-1})\right]^2\right\} \qquad (23)$$

i prenent el límit $n \to \infty$ ($\epsilon \to 0$) ens queda

$$P(q,t/q_0,t_0) = \int_{q(t_0)=q_0}^{q(t)=q} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{-\tfrac{1}{2}\int_{t_0}^{t} d\tau\, [\dot{q}(\tau) - f(q(\tau))]^2\right\} \tag{24}$$

on la mesura $\mathcal{D}q(\tau)$ ve donada per

$$\mathcal{D}q(\tau) \equiv \lim_{n\to\infty} (2\pi\epsilon)^{-1/2} \left(\prod_{j=1}^{n} \frac{dq_j}{\sqrt{2\pi\epsilon}} \right) \tag{25}$$

En aquest límit, i si recordem el que s'ha dit en 1.3, els temps discrets τ_j es converteixen en un de continu, q_{j-1} s'ha de substituir per $q(\tau)$, mentre $q_j - q_{j-1}/\epsilon \to \dot{q}(\tau)$, amb la qual cosa hem adoptat la discretització prepuntual, associada a l'ús d'ordenació normal d'operadors. La Lagrangiana seria al seu torn en aquest cas

$$\mathcal{L}^{(0)}(q(\tau), \dot{q}(\tau)) = \tfrac{1}{2}\, [\dot{q}(\tau) - f(q(\tau))]^2 \tag{26}$$

on el superíndex indica precisament la prescripció emprada. Si comparem aquesta expressió per a la Lagrangiana, amb la que obtingué Graham (1977a), observarem en aquesta darrera la presència d'un terme addicional: $\frac{1}{2}$ df(q)/dq. De fet aquest terme ha estat reclamat per alguns autors com Janssen (1976) o Bausch i Wagner (1976) en el sentit de mantenir les propietats de causalitat en la funció resposta,malgrat que Tirapegui i col. (1977) rebutjaren aquest argument. Seguint l'argument d'aquests autors en (1978a), demostrarem aquí que aquesta contribució addicional apareix com a conseqüència directa d'un canvi en la discretització.

En efecte, introduïm un punt intermedi en l'interval $[q_{j-1}, q_j]$, $q_{j-1}^{(\alpha)}$ segons

$$q_{j-1}^{(\alpha)} \equiv q_{j-1} + \alpha\,(q_j - q_{j-1}) \qquad 0 \le \alpha \le 1 \tag{27}$$

i desenvolupant $f(q_{j-1})$ en un entorn de $q_{j-1}^{(\alpha)}$

$$f(q_{j-1}) = f(q_{j-1}^{(\alpha)}) - \alpha\,(q_j - q_{j-1})\, \frac{df(q_{j-1}^{(\alpha)})}{dq_{j-1}^{(\alpha)}} + O\left[(q_j - q_{j-1})^2\right] \tag{28}$$

que substituïm en (22) tenint en compte que $(q_j - q_{j-1})$ és d'ordre $\epsilon^{\frac{1}{2}}$ en el context de la integral múltiple(23), segons que remarcà Graham (1977c). Així doncs

$$P(q_j,t_j/q_{j-1},t_{j-1}) = (2\pi\epsilon)^{-1/2} \exp\Big\{ -\tfrac{1}{2\epsilon}(q_j-q_{j-1})^2 + (q_j-q_{j-1})f(q_{j-1}^{(\alpha)}) - \tfrac{1}{2}\epsilon f^2(q_{j-1}^{(\alpha)}) - \\ -\alpha\epsilon \frac{df(q_{j-1}^{(\alpha)})}{dq_{j-1}^{(\alpha)}} + O(\epsilon^{3/2}) \Big\} \tag{29}$$

i per tant

$$P(q,t/q_0,t_0) = (2\pi\epsilon)^{-1/2} \int_{\Pi} \Big(\prod_{j=1}^{n} \frac{dq_j}{\sqrt{2\pi\epsilon}}\Big) \exp\Big\{ -\epsilon \sum_{j=1}^{n+1} \Big[\tfrac{1}{2}\Big(\frac{q_j-q_{j-1}}{\epsilon} - f(q_{j-1}^{(\alpha)})\Big)^2 + \alpha \frac{df(q_{j-1}^{(\alpha)})}{dq_{j-1}^{(\alpha)}} \Big] + O(\epsilon^{3/2}) \Big\} \tag{30}$$

Si passem al límit continu $\epsilon \to 0$, posant $q_j - q_{j-1}/\epsilon \to \dot{q}(\tau)$, $q_{j-1}^{(\alpha)} \to q(\tau)$, en lloc de $q_{j-1} \to q(\tau)$ com abans, podem escriure

$$P(q,t/q_0,t_0) = \int_{q(t_0)=q_0}^{q(t)=q} {}_{(\alpha)}\mathcal{D}q(\tau) \exp\Big\{ -\int_{t_0}^{t} d\tau \Big[\tfrac{1}{2}(\dot{q}(\tau) - f(q(\tau)))^2 + \alpha \frac{\delta f(q(\tau))}{\delta q(\tau)} \Big] \Big\} \tag{31}$$

on la mesura ve donada per (25) però el subíndex indica que la integral funcional és definida discretitzant l'integrant d'acord amb les regles establertes darrerament. En realitat la integral funcional en (24) correspon a $\alpha = 0$ i en aquest sentit s'hauria de notar $\int_{(0)} \mathcal{D}q(\tau)$. A partir de (31) definirem una Lagrangiana depenent del paràmetre α segons

$$\mathcal{L}^{(\alpha)}(q,\dot{q}) = \tfrac{1}{2}(\dot{q} - f(q))^2 + \alpha \frac{df(q)}{dq} \tag{32}$$

Entenem que l'origen del terme addicional df(q)/dq, queda clar; apareix per tal que el valor de la integral funcional romangui constant i igual al valor únic $P(q,t/p_0,t_0)$ quan canviem de discretització.

Les anteriors conclusions poden generalitzar-se al cas de matriu de difusió no constant. Per qüestió de poder abreujar, només ens referirem al cas unidimensional, i suposarem que no hi ha dependència temporal explícita ni en

$D(q)$, ni en $\mathcal{L}(q,\dot{q})$. En el treball de Tirapegui (1978b) pot trobar-se l'anàlisi exhaustiva dels resultats, que aquí tan sols anunciem. En aquell treball es manté la discretització α, que aquí referim com $\gamma_1(\alpha)$, i seguint procediments anàlegs als que s'han emprat anteriorment, arriben a una expressió per a la integral funcional dependent de la discretització en la forma

$$P(q,t\,|\,q_0,t_0) = \int_{q(t_0)=q_0}^{q(t)=q} {}_{\gamma_1(\alpha)}\mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{ \int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}^{(\gamma_1(\alpha))}(q(\tau),\dot{q}(\tau)) \right\} \tag{33}$$

amb

$$\mathcal{L}^{(\gamma_1(\alpha))}(q,\dot{q}) \equiv -1/2D(q)\,\left[\dot{q} - f(q) + \alpha D'(q)\right]^2 + \alpha\left[-f'(q) + \alpha/2\, D''(q)\right] \tag{34}$$

i

$$_{\gamma_1(\alpha)}\mathcal{D}q(\tau) \equiv \lim_{n\to\infty} \prod_{j=1}^{n} dq_j \prod_{j=1}^{n+1} \left[2n\epsilon\, D(q_{j-1}^{(\alpha)})\right]^{-1/2} \tag{35}$$

essent la discretització que s'ha comentat anteriorment; és a dir, $q_{j-1}^{(\alpha)} \longrightarrow q(\tau)$, $q_j - q_{j-1}/\epsilon \longrightarrow \dot{q}(\tau)$, i amb el mateix significat per a $q_{j-1}^{(\alpha)}$ que ja s'ha vist. Observem que si prenem $\alpha = 0$, recuperem els resultats (13) i (15), particularitzats a $m = 1$, tal com era de preveure.

Encara hauríem de parlar d'altres discretitzacions. Per exemple a la que varen introduir Leschke i Schmutz (1977), (27) podríem afegir-hi la que consideraren el grup de Tirapegui (1977) notada en aquest context com $\gamma_2(\alpha)$, definida per mitjà de

$$f(q) \longrightarrow (1-\alpha)\, f(q_{j-1}) + \alpha\, f(q_j) \qquad 0 \le \alpha \le 1 \tag{36}$$

de la qual se'n deriven expressions per a la Lagrangiana

$$\mathcal{L}^{(\gamma_2(\alpha))} \equiv -1/2D(q)\,\left[\dot{q} - f(q) + \alpha D'(q)\right]^2 + \alpha\left[-f'(q) + (\alpha - 1/2)\, D''(q)\right] \tag{37}$$

i la mesura

$$_{\gamma_2(\alpha)}\mathcal{D}q(\tau) \equiv \lim_{n\to\infty} \prod_{j=1}^{n} dq_j \prod_{j=1}^{n+1} \left[2n\epsilon\left((1-\alpha)D(q_{j-1}) + \alpha D(q_j)\right)\right]^{-1/2} \tag{38}$$

Totes dues discretitzacions $\gamma_1(\alpha)$ i $\gamma_2(\alpha)$ coincideixen en $\alpha = 0$. Si en consideréssim d'altres de les establertes en l'article de Tirapegui (1978a), recuperaríem bona part de les expressions per a la funció Lagrangiana que existeixen en la literatura.

Fent un resum de tot el que s'ha tractat en aquesta secció, concluirem que la integral funcional té un significat precís mentre la discretització emprada figuri explícitament especificada. Donada una expressió per a una magnitud físicament ben definida, en el nostre cas $P(q,t/q_0,t_0)$, en termes d'una tal integral, el resultat d'efectuar-la ha d'estar únivocament determinat; per tant discretitzacions diferents correspondran a Lagrangianes diferents. Aquesta afirmació pot resumir-se escrivint

$$P(q,t/q_0,t_0) = \int_{q(t_0)=q_0}^{q(t)=q} {}_{\gamma(\alpha)}\mathcal{D}q(\tau) \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}^{(\gamma(\alpha))}(q(\tau),\dot{q}(\tau),\tau)\right\} \tag{39}$$

Pel que fa al treball presentat aquí, i si volem ser coherents amb el que prescrivírem en el capítol anterior, entendrem, malgrat que no ho notem explícitament, que adoptem la prescripció $\gamma_1(0)$ segons la qual estan escrites la Lagrangiana (20) i la mesura (15).

2.4. FUNCIONAL GENERADOR

Semblantment a com féiem en 1.5, on introduïrem un funcional generador de propagadors $Z(J,J^*)$, procedirem amb la definició d'un funcional anàleg $Z(J)$ corresponent a la representació Lagrangiana considerada aquí. No insistirem en les particularitats associades a la seva definició; ens limitarem a establir les característiques que diferencien els dos funcionals.

Observem primerament que $Z(J)$ depèn d'una única font exterior $J(\tau)$, en lloc de dependre de dues fonts tal com en depenia $Z(J,J^*)$. Això és de fàcil comprensió si atenem al que hem aconseguit amb la introducció de la representació Lagrangiana. En termes d'un Hamiltonià són dues les variables que apareixen en la descripció; les variables autèntiques dél sistema i altres de caràcter auxiliar $p(\tau)$, que tal i com comentàrem servien per donar compte de la resposta lineal del sistema davant de pertorbacions internes o externes al sistema. La introducció d'una Lagrangiana, s'ha realitzat amb la integració prèvia de les variables auxiliars esmentades, i per tant ja no apareixeran en la nostra descripció. Hem de fer constatar que no hem perdut per això gens d'informació, car les variables $p(\tau)$ no en contenien i en aquest sentit haurem de ser capaços d'avaluar qualsevol propagador anteriorment definit on poguessin aparèixer variables $p(\tau)$. Assenyalem que en II.31 trobarem una expressió explícita per a la funció resposta i si generalitzem, sense dificultat, el que s'hi estableix, podrem confirmar la utilitat d'una representació Lagrangiana a l'hora de calcular propagadors qualssevol.

Amb tot el que hem dit anteriorment i recordant-nos que en la definició de $Z(J,J^*)$, la font $J^*(\tau)$ estava precisament associada a $p(\tau)$, creurem que podrem entendre la dependència única de $Z(J)$ en la font $J(\tau)$.

Definim $Z(J)$ de forma anàloga a com ho féiem per a $Z(J,J^*)$, (1.63); això és

$$Z(J) \equiv \left\langle \exp\left\{ \int_{t_0}^{t} d\tau \, J_\mu(\tau)\, q^\mu(\tau) \right\} \right\rangle \tag{40}$$

on la mitjana s'haurà de realitzar amb $P(q,t/q_0,t_0)$ solució aquesta de la FPE. Tenint en compte que el funcional corresponent a aquesta densitat de probabilitat ve donat segons (16) i (18) per

$$W(q(\tau)) = \exp\left\{ - \int_{t_0}^{t} d\tau \, \mathcal{L}(q(\tau), \dot{q}(\tau), \tau) \right\} \tag{41}$$

escriurem formalment Z(J) com

$$Z(J) = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{ -\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}(q(\tau), \dot{q}(\tau), \tau) - J_\mu(\tau)\, q^\mu(\tau) \right] \right\} \tag{42}$$

on el fet de figurar tan sols el límit d'integració corresponent a q_0, recordem que indicava la integració sobre la variable q(t)=q. De manera que

$$Z(0) = \int_{\Gamma} d^m q\; P(q,t/q_0,t_0) = 1 \tag{43}$$

en la hipòtesi que la densitat de probabilitat condicional estigués convenientment normalitzada.

Els propagadors associats a les variables del sistema $q^{\mu_i}(t_i)$, vindran expressats ara com

$$\langle q^{\mu_m}(t_m) \ldots q^{\mu_1}(t_1) \rangle = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\; q^{\mu_m}(t_m) \ldots q^{\mu_1}(t_1)\, \exp\left\{ -\int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}(q(\tau), \dot{q}(\tau), \tau) \right\} \tag{44}$$

i en funció de Z(J) serà igualment

$$\langle q^{\mu_m}(t_m) \ldots q^{\mu_1}(t_1) \rangle = \left. \frac{\delta^m Z(J)}{\delta J_{\mu_m}(t_m) \ldots \delta J_{\mu_1}(t_1)} \right|_{J=0} \tag{45}$$

En cas de no imposar la condició de normalització (43) reescriurem (45) com

$$\langle q^{\mu_m}(t_m) \ldots q^{\mu_1}(t_1) \rangle = Z^{-1}(J) \left. \frac{\delta^m Z(J)}{\delta J_{\mu_m}(t_m) \ldots \delta J_{\mu_1}(t_1)} \right|_{J=0} \tag{46}$$

Havent incorporat en el funcional generador Z(J), a través de la seva pròpia definició, tot el caràcter estocàstic de la dinàmica associada a la FPE, és evident que les mitjanes contindran íntegrament aquesta mateixa component estocàstica. La contribució estadística que prové d'una eventual distribució de condicions inicials s'hi podrà afegir fàcilment. En efecte, en aquest cas i si designem per $P(q_0)$ l'esmentada distribució, definirem un nou funcional $Z^P(J)$

$$Z^P(J) \equiv \int_{\Gamma} d^m q_0\; P(q_0)\, Z(J) \tag{47}$$

del qual n'obtindrem els propagadors amitjanats ja amb $P(q_0)$.

Evidentment, també aquí, la normalització d'aquella distribució, implica la de $Z^p(J)$, amb la qual cosa en aquestes hipòtesis $Z^p(0) = 1$, i cas de no ser així establiríem en general

$$\langle q^{\mu_m}(t_m) \cdots q^{\mu_1}(t_1) \rangle^p = \left[Z^p(J)\right]^{-1} \frac{\delta^m Z^p(J)}{\delta J_{\mu_m}(t_m) \cdots \delta J_{\mu_1}(t_1)}\Big|_{J=0} \qquad (48)$$

En aquest moment és oportú de precisar que aquí es continua verificant tot el que diguerem a proposit de la independencia dels propagadors així calculats respecte a l'instant t.

Abans d'acabar aquesta secció voldríem insistir en dos aspectes relacionats amb la introducció del funcional generador Z(J).

Per una banda el seu significat i la seva utilització resulten manifestos en Mecànica Estadística. Així, en un estudi de transicions de fase se sol introduir un camp de caràcter fluctuant $\vec{\phi}(\vec{x})$, eventualment dependent del temps si estem interessats en qüestions dinàmiques, i que se l'anomena paràmetre d'ordre. El tractament dels aspectes rellevants del problema sol estar basat en el càlcul de fluctuacions, correlacions, etc.,de $\vec{\phi}(\vec{x})$. Per a fer-ho una metodologia possible consisteix en definir un pes estadístic per a una distribució espacial donada del paràmetre d'ordre, juntament amb una mesura en l'espai de les esmentades distribucions. El pes estadístic es defineix usualment en termes d'una Lagrangiana, establerta fenomenològicament en la major part d'ocasions, en la forma

$$W(\vec{\phi}(\vec{x})) \propto \exp\left\{-\int d\vec{x}\, \mathcal{L}(\vec{\phi}(\vec{x}))\right\} \qquad (49)$$

En el cas de sistemes magnètics o de líquids, per posar un exemple, es pren un camp escalar real $\phi(\vec{x})$ com a paràmetre d'ordre, en funció del qual s'escriu $\mathcal{L}(\phi)$ com a un polinomi en $\phi(\vec{x})$ i $(\vec{\nabla}\phi(\vec{x}))^2$. Algunes vegades, qüestions de simetria o altres consideracions del problema, permeten de restringir d'entrada les possibles eleccions per a $\mathcal{L}(\phi)$. Així, en el model d'Ising, en el polinomi només hi poden intervenir potències parells de $\phi(\vec{x})$.

Si, per altra banda, el sistema es troba sota la influència d'un agent exterior, s'haurà de modificar la Lagrangiana per a incorporar-la-hi. Aquesta influència externa per al cas d'un sistema d'spines, podria molt ben ser un camp magnètic, $h(\vec{x})$, acoblat linealment al paràmetre d'ordre $\phi(\vec{x})$. D'aquesta manera la nova Lagrangiana vindrà donada per

$$\mathcal{L}_h(\phi, h) = \mathcal{L}(\phi) - h\,\phi \tag{50}$$

generalitzable trivialment per al cas de camps vectorials $\vec{\phi}(\vec{x})$ com

$$\mathcal{L}_{\vec{h}}(\vec{\phi}, \vec{h}) = \mathcal{L}(\phi) - \vec{h}\cdot\vec{\phi} \tag{51}$$

on . indica producte escalar.

En aquestes circumstàncies, si designem per $W_{\vec{h}}(\vec{\phi})$ la distribució de probabilitat en l'espai de funcions $\vec{\phi}(\vec{x})$, podrem escriure un funcional generador de les mitjanes que involucrin el paràmetre d'ordre, en la forma

$$Z(\vec{h}) = \int \mathcal{D}\vec{\phi}(\vec{x})\, W_{\vec{h}}(\vec{\phi}(\vec{x})) = \int \mathcal{D}\vec{\phi}(\vec{x}) \exp\left\{ - \int d\vec{x} \left[\mathcal{L}(\vec{\phi}(\vec{x})) - \vec{h}(\vec{x})\cdot\vec{\phi}(\vec{x}) \right] \right\} \tag{52}$$

Llur paral.lelisme amb (42) és ben manifest. $Z(\vec{h})$, tal i com està definit en (52), representaria la funció de partició del sistema en presència del camp magnètic exterior.

Amb aquesta senzilla presentació ens adonem de com la Mecànica Estadística ens proporciona la possibilitat de caracteritzar físicament aquella font externa $J(\tau)$, presentada en aquesta secció com a variable útil en tant que ens permet de definir-ne funcionals, dels quals un cop anul-

Lada llur presència n'obtenim els propagadors físics. Per a una discussió més extensa sobre aquest aspecte, se'n poden trobar referències en el text d'Amit (1978).

Per altra banda en Teoria Quàntica de Camps, estem generalment interessats en valors esperats d'operadors ordenats en el temps, i prenent com a estat de referència el buit, notat generalment $|0\rangle$. Per al cas d'un camp bosònic, per exemple, és possible de definir un operador $\hat{T}(J)$ per mitjà de

$$\hat{T}(J) \equiv T \exp\left\{ i \int_{-\infty}^{\infty} d^4x \, J(x) \, \hat{\phi}(x) \right\} \tag{53}$$

essent T l'operador d'ordenació temporal; J(x) és una font c-número, i $\hat{\phi}(x)$ l'operador corresponent en imatge d'Heisenberg. La variable x d'integració engloba en aquest cas les tres coordenades de posició i la temporal. Amb aquesta formulació és possible de demostrar que els valors esperats en l'estat de buit de productes ordenats d'operadors associats al camp $\phi(x)$, poden generar-se sense dificultat per derivades funcionals d'un funcional definit com

$$Z(J) \equiv \langle 0 | \hat{T}(J) | 0 \rangle \tag{54}$$

segons

$$\left. \frac{\delta^n Z(J)}{\delta J(x_1) \, \delta J(x_2) \ldots \delta J(x_n)} \right|_{J=0} = (i)^n \langle 0 | T [\hat{\phi}(x_1) \hat{\phi}(x_2) \ldots \hat{\phi}(x_n)] | 0 \rangle \tag{55}$$

No ens extendrem en aquest punt car pot trobar-se analitzat més detalladament en el llibre d'Amit (1978) esmentat abans, o també en el de Fried (1972). Altrament per a qüestions relacionades en general amb l'aplicació de tècniques funcionals en Teoria Quàntica de Camps es pot revisar també el resum de Faddeev (1976).

2.5 DEDUCCIÓ DE L'EQUACIÓ EN DERIVADES FUNCIONALS QUE SATISFÀ EL FUNCIONAL GENERADOR Z(J).

Després d'haver definit Z(J) en la secció anterior, en aquesta ens proposem d'obtenir-li una equació en derivades funcionals, semblantment a com férem per a $Z(J,J^*)$, tot i que allí recurrírem finalment a establir-la restringint-nos a la dinàmica lliure, i obtinguérem $Z(J,J^*)$ de $Z_0(J,J^*)$ per tècniques pertorbatives convencionals. Es aquesta una estratègia també possible aquí, però que aprofitarem més endavant en 8; primer ens ocuparem de formular-la de manera general per a Z(J). Això ens permetrà en el capítol següent de desenvolupar un esquema anàleg al de Martin Siggia i Rose (1973), i que serà el primer pas en la formulació de desenvolupaments pertorbatius renormalitzats.

Recordem l'expressió (42) per a Z(J)

$$Z(J) = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau) \exp\left\{ - \int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}(q(\tau), \dot{q}(\tau), \tau) - J_\mu(\tau) q^\mu(\tau) \right] \right\} \tag{42}$$

i indiquem que en tot el que segueix suposarem la matriu de difusió constant, mentre no s'indiqui res en contra. En aquest cas reescriurem la Lagrangiana (20) com

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, \tau) = \tfrac{1}{2} \left[\dot{q}^\mu - f^\mu(q,\tau) \right] D_{\mu\nu} \left[\dot{q}^\nu - f^\nu(q,\tau) \right] \tag{56}$$

on $f(q,\tau)$ suposarem que admet la descomposició considerada ja anteriorment

$$f^\mu(q,\tau) = \lambda_{(\mu)} q^\mu + F^\mu(q,\tau) \tag{57}$$

Corresponent a la partició anterior, podrem escriure'n una altra per a la Lagrangiana

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, \tau) = \mathcal{L}_0(q, \dot{q}) + \mathcal{L}_1(q, \dot{q}, \tau) \tag{58}$$

on $\mathcal{L}_0$ indicarà la part corresponent al problema lineal i es prendrà com a Lagrangiana lliure, mentre que $\mathcal{L}_1$ contindrà la contribució pertorbativa. A més resulta convenient de fer una nova partició de $\mathcal{L}_1(q,\dot{q},\tau)$, en la forma

$$\mathcal{L}_1(q,\dot{q},\tau) \equiv \mathcal{L}_1^{I}(q,\tau) + \mathcal{L}_1^{II}(q,\dot{q},\tau) \tag{59}$$

Substituint (57) en (56) obtenim fàcilment expressions per a $\mathcal{L}_0$, $\mathcal{L}_1^{I}$ i $\mathcal{L}_1^{II}$. En efecte

$$\mathcal{L}_0(q,\dot{q}) \equiv \tfrac{1}{2}\left[\dot{q}^{\mu} - \lambda_{(\mu)} q^{\mu}\right] D_{\mu\nu}\left[\dot{q}^{\nu} - \lambda_{(\nu)} q^{\nu}\right] \tag{60}$$

$$\mathcal{L}_1(q,\dot{q},\tau) \equiv -F^{\nu}(q,\tau)\, D_{\nu\mu}\left[\dot{q}^{\mu} - \lambda_{(\mu)} q^{\mu} - \tfrac{1}{2} F^{\mu}(q,\tau)\right] \tag{61}$$

$$\mathcal{L}_1^{I}(q,\tau) \equiv \tfrac{1}{2} F^{\mu}(q,\tau)\, D_{\mu\nu}\, F^{\nu}(q,\tau) \tag{62}$$

$$\mathcal{L}_1^{II}(q,\dot{q},\tau) \equiv -F^{\mu}(q,\tau)\, D_{\mu\nu}\left[\dot{q}^{\nu} - \lambda_{(\nu)} q^{\nu}\right] \tag{63}$$

on s'ha fet ús del caràcter simètric de D^{-1} quant a l'intercanvi dels seus índexs covariants.

De forma completament anàloga a com procedírem per a $Z_0(J, J^*)$ en 1.7, l'ús del lema d'integració per parts, (1.76), ens permetrà, també aquí, d'obtenir l'equació en derivades funcionals volguda per a $Z(J)$.

En aquest cas, aplicant-lo a (42) tenim

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \frac{\delta}{\delta q^{\mu}(t')} \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}(q(\tau),\dot{q}(\tau),\tau) - J_{\mu}(\tau)\, q^{\mu}(\tau)\right]\right\} = 0 \qquad t > t' > t_0 \tag{64}$$

Ara pretenem relitzar aquella derivada funcional de forma explícita, tenint en compte les expressions per a $\mathcal{L}_0$, $\mathcal{L}_1^{I}$ i $\mathcal{L}_1^{II}$ donades en (60), (62) i (63)

$$\begin{aligned}
&\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}_1^{I} + \mathcal{L}_1^{II} - J_{\mu} q^{\mu}\right]\right\} \frac{\delta}{\delta q^{\mu}(t')} \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}_0\right\} + \\
&+ \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1^{II} - J_{\mu} q^{\mu}\right]\right\} \frac{\delta}{\delta q^{\mu}(t')} \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}_1^{I}\right\} + \\
&+ \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1^{I} - J_{\mu} q^{\mu}\right]\right\} \frac{\delta}{\delta q^{\mu}(t')} \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}_1^{II}\right\} + J_{\mu}(t')\, Z(J) = 0
\end{aligned} \tag{65}$$

on per comoditat hem fet ús d'una notació abreujada.

Avaluem les tres derivades funcionals, i comencem per la contribució de $\mathcal{L}_0$. A partir de (60)

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau) \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}_1^{I} + \mathcal{L}_1^{II} - J_\mu q^\mu\right]\right\} \frac{\delta}{\delta q^\mu(t')} \exp\left\{-\tfrac{1}{2}\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\dot{q}^\alpha(\tau) - \lambda_{(\alpha)} q^\alpha(\tau)\right] D_{\alpha\beta} \left[\dot{q}^\beta(\tau) - \lambda_{(\beta)} q^\beta(\tau)\right]\right\} =$$

$$= \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau) \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L} - J_\mu q^\mu\right]\right\} \left\{ D_{\mu\nu} \left[\ddot{q}^\nu(t') - \lambda_{(\nu)} \dot{q}^\nu(t')\right] + \lambda_{(\mu)} D_{\mu\nu} \left[\dot{q}^\nu(t') - \lambda_{(\nu)} q^\nu(t')\right] \right\} \quad (66)$$

La contribució anterior pot escriure's de manera molt més compacta com

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau) \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L} - J_\mu q^\mu\right]\right\} D_{\mu\nu} \left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{(\mu)}\right) \left(\frac{\partial}{\partial t'} - \lambda_{(\nu)}\right) q^\nu(t') \quad (67)$$

Calculem ara la contribució de $\mathcal{L}_1^{I}$. A partir de (62)

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau) \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1^{II} - J_\mu q^\mu\right]\right\} \frac{\delta}{\delta q^\mu(t')} \exp\left\{-\tfrac{1}{2}\int_{t_0}^{t} d\tau \, F^\alpha(q(\tau),\tau) D_{\alpha\beta} F^\beta(q(\tau),\tau)\right\} \quad (68)$$

Realitzant la derivada funcional, s'arriba fàcilment a expressar aquella contribució com

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau) \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L} - J_\mu q^\mu\right]\right\} \left\{ -\frac{\partial F^\alpha(q(t'),t')}{\partial q^\mu(t')} D_{\alpha\beta} F^\beta(q(t'),t') \right\} \quad (69)$$

on $\partial F^\alpha(q(t'),t')/\partial q^\mu(t')$ té el sentit usual de derivació parcial respecte a $q^\mu(t')$. Només ens resta calcular el darrer dels termes en la derivada funcional, és a dir, el que prové de $\mathcal{L}_1^{II}$. A partir de (63)

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau) \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1^{I} - J_\mu q^\mu\right]\right\} \frac{\delta}{\delta q^\mu(t')} \exp\left\{\int_{t_0}^{t} d\tau \, F^\alpha(q(\tau),\tau) D_{\alpha\beta} \left(\dot{q}^\beta(\tau) - \lambda_{(\beta)} q^\beta(\tau)\right)\right\} \quad (70)$$

Calculant aquella derivada funcional, s'arriba sense dificultat a

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau) \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L} - J_\mu q^\mu\right]\right\} \left\{ \frac{\partial F^\alpha(q(t'),t')}{\partial q^\mu(t')} D_{\alpha\beta} \left(\dot{q}^\beta(t') - \lambda_{(\beta)} q^\beta(t')\right) - \left(\frac{d}{dt'} + \lambda_{(\mu)}\right) D_{\mu\alpha} F^\alpha(q(t'),t') \right\} \quad (71)$$

on la derivació respecte a t' de $F^\alpha(q(t'),t')$ ha d'incorporar la contribució implícita a través de $q(t')$ i l'eventual dependència explícita, cas d'existir. Sumant les contribucions (67), (69), (71) i substituint en (65) arribem a

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau) \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L} - J_\mu q^\mu\right]\right\} \left\{ \hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t') q^\nu(t') - \frac{\partial \mathcal{L}_1}{\partial q^\mu(t')} + \frac{d}{dt'} \left(\frac{\partial \mathcal{L}_1^{II}}{\partial \dot{q}^\mu(t')}\right) + J_\mu(t') \right\} = 0 \quad (72)$$

on hem definit un operador diferencial $\hat{\Lambda}(t)$ per mitjà de

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t') \equiv D_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial t'}+\lambda_{\mu}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t'}-\lambda_{\nu}\right) \tag{73}$$

Altrament, si reagrupem les derivades respecte a $\mathcal{L}_1$ i $\mathcal{L}_1^{II}$ mitjançant

$$\mathcal{L}_{1,\mu}(q,\dot{q},t') \equiv \frac{\partial \mathcal{L}_1(q,\dot{q},t')}{\partial q^{\mu}} - \frac{d}{dt'}\frac{\partial \mathcal{L}_1(q,\dot{q},t')}{\partial \dot{q}^{\mu}} \tag{74}$$

podem escriure (72) de forma més compacta com

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L} - J_{\mu} q^{\mu}\right]\right\} \left\{\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t') q^{\nu}(t') - \mathcal{L}_{1,\mu}\left(q(t'),\dot{q}(t'),t'\right) + J_{\mu}(t')\right\} = 0 \tag{75}$$

que podem convertir en una equació en derivades funcionals per a Z(J)

$$\left[\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\frac{\delta}{\delta J_{\nu}(t')} - \mathcal{L}_{1,\mu}\left(\frac{\delta}{\delta J(t')}, \frac{d}{dt'}\frac{\delta}{\delta J(t')}, t'\right) + J_{\mu}(t')\right] Z(J) = 0 \tag{76}$$

on $\mathcal{L}_{1\mu}\left(\delta/\delta J(t'), \frac{d}{dt'}\delta/\delta J(t'), t'\right)$ indica l'operador corresponent a $\mathcal{L}_{1\mu}(q, \dot{q}, t')$ definida en (74), i on se substitueixen les derivacions respecte a q^{μ} i $\dot{q}^{\mu}$, q^{μ} per $\delta/\delta J_{\mu}$ i $\dot{q}$ per $\frac{d}{d\tau}\delta/\delta J_{\mu}$. D'aquesta manera hem arribat a establir l'equació per a Z(J) que buscavem.

Per altra banda si ens interessés treballar amb $Z^{P}(J)$, els resultats anteriors es generalitzarien sense dificultat, car considerar l'esmentada distribució no modifica en cap manera la deducció de (76). Així, amitjanant directament amb $P(q_0)$ l'equació (76), arribaríem a

$$\int_{\Gamma} d^{n}q_0\, P(q_0)\left[\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\frac{\delta}{\delta J_{\nu}(t')} - \mathcal{L}_{1,\mu}\left(\frac{\delta}{\delta J(t')}, \frac{d}{dt'}\frac{\delta}{\delta J(t')}, t'\right) + J_{\mu}(t')\right] Z(J) = 0 \tag{77}$$

i commutant l'acció de les derivades funcionals amb la mitjana sobre condicions inicials, escrivim (77) com

$$\left[\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\frac{\delta}{\delta J_{\nu}(t')} - \mathcal{L}_{1,\mu}\left(\frac{\delta}{\delta J(t')}, \frac{d}{dt'}\frac{\delta}{\delta J(t')}, t'\right) + J_{\mu}(t')\right] Z^{P}(J) = 0 \tag{78}$$

segons la pròpia definició de $Z^P(J)$.

2.6 CONDICIONS DE CONTORN.

En la secció anterior hem arribat a escriure una equació per a $Z(J)$, (76), a la qual podem aplicar una condició de contorn, de manera anàloga a com ho férem per a $Z(J,J^*)$. Efectivament, a partir de la pròpia definició de $Z(J)$ en (42)

$$\frac{\delta Z(J)}{\delta J_\mu(t_0)} = q_0^\mu Z(J) \tag{79}$$

vàlida sigui quina sigui la Lagrangiana que estiguem considerant, o el que és el mateix per a qualsevol $Z(J)$ objecte de resolució. En particular ho serà òbviament per a l'associat a la dinàmica lliure del sistema, $Z_0(J)$.

2.7 RELACIÓ ENTRE FUNCIONALS GENERADORS CORRESPONENTS A AMBDUES REPRESENTACIONS.

Cal que establim ara la relació que existeix entre $Z(J,J^*)$ i $Z(J)$. Per a això recordem que la definició de $Z(J,J^*)$ donada en (1.64) era

$$Z(J,J^*) = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\,\mathcal{D}p(\tau)\, \exp\left\{ i\int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_\mu \dot{q}^\mu(\tau) - H(p(\tau),q(\tau),\tau) + J_\mu(\tau)\, q^\mu(\tau) + J^{*\mu}(\tau)\, p_\mu(\tau) \right] \right\} \tag{1.64}$$

Prenent $J^*(\tau)$ idènticament nul.la

$$Z(J,0) = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\,\mathcal{D}p(\tau)\, \exp\left\{ i\int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_\mu \dot{q}^\mu(\tau) - H(p(\tau),q(\tau),\tau) + J_\mu(\tau)\, q^\mu(\tau) \right] \right\} \tag{80}$$

Realitzant sobre $Z(J,0)$ la integració sobre $p(\tau)$ la transformaríem a.

$$Z(J,0) = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{ - \int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}(q(\tau),\dot{q}(\tau),\tau) - i\, J_\mu(\tau)\, q^\mu(\tau) \right] \right\} \tag{81}$$

on cal precisar, tot i que suposem que no haurà passat pas desapercebut, que l'element de mesura referit a l'espai de funcions $q(\tau)$ en (81) no coincideix, malgrat notarlos de igual forma, amb el que apareix a (80) ja que el segon ve realitzat en la seva versió discretitzada per (1.45), mentre que el primer correspon a (15). Si ara comparem (81) amb l'expressió per a Z(J) donada en (42),

$$Z(J) = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}(q(\tau),\dot{q}(\tau),\tau) - J_\mu(\tau)\, q^\mu(\tau)\right]\right\} \tag{42}$$

establim sens cap mena de dificultat la següent relació entre funcionals

$$Z(iJ) = Z(J,0) \tag{82}$$

que serà útil de recordar en tot l'estudi que segueix.

Pel que fa als funcionals lliures, la identitat anterior es continua verificant de la mateixa manera

$$Z_0(iJ) = Z_0(J,0) \tag{83}$$

car només ens cal adonar-nos que, per la seva mateixa definició, la Lagrangiana $\mathcal{L}_0$ associada a $Z_0(J)$ correspon, tal com li pertoca, a l'Hamiltonià H_0. En aquestes condicions l'equació en derivades funcionals per a $Z_0(J)$, s'hauria de poder obtenir directament de la corresponent a $Z_0(J,J^*)$ particularitzada al cas $J^*=0$. Fem-ho aquí explícitament, i en la secció següent comprovarem com efectivament el resultat assolit coincideix amb el resultat obtingut a partir de l'equació per a Z(J), (76), prenent-la per a la dinàmica lliure del sistema.

Operant (1.80) amb $\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{\nu\nu}\right)$ arribem a

$$\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{\nu\nu}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t'} - \lambda_{\mu\mu}\right)\frac{1}{i}\,\frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J_\mu(t')} = -\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{\nu\nu}\right) J^{*\mu}(t')\, Z_0(J,J^*) - D_0^{\mu\bar{\nu}}\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{\nu\nu}\right)\frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J^{*\nu}(t')} \tag{84}$$

bescanviant els índexs μ,ν i multiplicant per $\frac{1}{i}$ ambdós costats de la igualtat

$$\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{\mu\mu}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t'} - \lambda_{\nu\nu}\right)\frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J_\nu(t')} = \frac{1}{i}\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{\mu\mu}\right) J^{*\nu}(t')\, Z_0(J,J^*) + D_0^{\nu\bar{\mu}}\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{\mu\mu}\right)\frac{1}{i}\,\frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J^{*\mu}(t')} \tag{85}$$

Contraent amb D_0

$$D_{0\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial t'}+\lambda_{\mu'}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t'}-\lambda_{\nu'}\right)\frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J_\nu(r')} - D_{0\mu\nu}\, 1/i\left(\frac{\partial}{\partial t'}+\lambda_{\mu'}\right) J^{*\nu}(r')\, Z_0(J,J^*) + \left(\frac{\partial}{\partial t'}+\lambda_{\mu'}\right) 1/i\, \frac{\delta Z_0(J,J^*)}{\delta J^{*\mu}(r')} \quad (86)$$

i tenint en compte (1.83), per a prendre finalment $J^* = 0$ arribem a

$$D_{0\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial t'}+\lambda_{\mu'}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t'}-\lambda_{\nu'}\right)\frac{\delta Z_0(J,0)}{\delta J_\nu(r')} = J_\mu(r')\, Z_0(J,0) \quad (87)$$

Si recordem ara la definició per a $\hat{\Lambda}(t')$ donada en (73), on caldrà que tinguem en compte que la inversa de la matriu de difusió que hi intervé per a prendre-la constant correspon a D_0, reescrivim (87) en la forma

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(r')\, \frac{\delta Z_0(J,0)}{\delta J_\nu(r')} = J_\mu(r')\, Z_0(J,0) \quad (88)$$

i tenint en compte (83)

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(r')\, \frac{\delta Z_0(iJ)}{\delta J_\nu(r')} = J_\mu(r')\, Z_0(J) \quad (89)$$

o equivalentment

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(r')\, \frac{\delta Z_0(iJ)}{\delta (iJ_\nu(r'))} = -i\, J_\mu(r')\, Z_0(J) \quad (90)$$

i fent un canvi trivial de variables (i J) per J, establim

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(r')\, \frac{\delta Z_0(J)}{\delta J_\nu(r')} = -J_\mu(r')\, Z_0(J) \quad (91)$$

que és l'equació cercada.

2.8 RESOLUCIÓ DEL FUNCIONAL GENERADOR LLIURE.

L'estratègia formulada en 1.9, que plantejava un càlcul pertorbatiu de propagadors a partir del funcional lliure $Z_0(J,J^*)$ és també d'aplicació aquí, i amb idèntics procediments. Per tant, cal tenir una expressió explícita per a $Z_0(J)$.

En aquest cas (76) es redueix a

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(r')\, \frac{\delta Z_0(J)}{\delta J_\nu(r')} = -J_\mu(r')\, Z_0(J) \quad (92)$$

clarament idèntica a (91), tal i com s'havia anunciat. La condició de contorn (79) serà ara expressable com

$$\frac{\delta Z_0(J)}{\delta J_\mu(t_0)} = q_0^{\mu} Z_0(J) \tag{93}$$

Pretenem en aquest moment de resoldre (92) amb la condició (93). Definim per a això la funció contravariant $\Delta(t', t'')$ suposadament simètrica en el sentit usual

$$\Delta^{\nu\mu}(t', t'') = \Delta^{\mu\nu}(t'', t') \tag{94}$$

solució de l'equació diferencial

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\, \Delta^{\nu\rho}(t', t'') = -\delta_\mu^{\ \rho}\, \delta(t'-t'') \tag{95}$$

Establim ara com a solució per al funcional $Z_0(J)$ l'expressió

$$Z_0(J) = \exp\left\{ \tfrac{1}{2} \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, J_\alpha(\tau)\, \Delta^{\alpha\mu}(\tau,\tau')\, J_\mu(\tau') + q_0^{\alpha} \int_{t_0}^{t} d\tau\, J_\alpha(\tau)\, \Delta_{(\alpha)}(\tau - t_0) \right\} \tag{96}$$

que oprtunament caldrà verificar-se, i on haurem de trobar una expressió concreta per a la funció covariant $\Delta(\tau - t_0)$ que hem incorporat en (96). A partir de (96)

$$\frac{\delta Z_0(J)}{\delta J_\nu(t')} = \left\{ \int_{t_0}^{t} d\tau' \left[\Delta^{\nu\mu}(t', \tau')\, J_\mu(\tau') \right] + q_0^{\nu}\, \Delta_{(\nu)}(t' - t_0) \right\} Z_0(J) \tag{97}$$

on s'ha fet ús de la simetria de $\Delta(t', t'')$, (94). La condició de contorn (93) es tradueix en les corresponents a $\Delta(t', \tau')$ i $\Delta(t' - t_0)$ en la forma

$$\Delta^{\nu\mu}(t_0, \tau') \underset{\tau' > t_0}{=} 0 \ ; \ \Delta_{(\nu)}(0) = 1 \tag{98}$$

A partir de (97), i aplicant l'operador $\hat{\Lambda}(t')$ a ambdós costats de la igualtat ens queda

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\, \frac{\delta Z_0(J)}{\delta J_\nu(t')} = \left\{ \int_{t_0}^{t} d\tau' \left[\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\, \Delta^{\nu\rho}(t', \tau')\, J_\rho(\tau') \right] + q_0^{\nu}\, \hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\, \Delta_{(\nu)}(t' - t_0) \right\} Z_0(J) \tag{99}$$

Si imposem ara

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\, \Delta_{(\nu)}(t' - t_0) = 0 \quad \forall \mu, \nu,\ \forall t' \tag{100}$$

podem establir una solució per a $\Delta(t' - t_0)$ en la forma

$$\Delta_{(\nu)}(t' - t_0) = \exp\left\{ \lambda_{(\nu)}(t' - t_0) \right\} \tag{101}$$

com és fàcilment comprovable substituint-la en (100), i tenint en compte l'expressió de $\hat{\Lambda}(t')$ donada en (73). Si tornem a (99) i emprant (100) i (95) ens queda

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t') \frac{\delta Z_0(J)}{\delta J_\nu(t')} = \left[-\int_{t_0}^{t} d\tau' \, \delta_\mu^{\ \rho} \, \delta(t'-\tau') \, J_\rho(\tau') \right] Z_0(J) = -J_\mu(t') \, Z_0(J) \tag{102}$$

amb la qual cosa verifiquem l'expressió per a $Z_0(J)$ donada en (96) com a solució de (92), tal com havia d'ésser.

Havent obtingut una forma explícita per a $\Delta(\tau)$, (101), i comprovada l'expressió (96) per a $Z_0(J)$, només ens resta per a determinar-lo completament, trobar una solució per a $\Delta(\tau,\tau')$ corresponent a (95) amb la característica especificada en (98). Tractem-ho, i reescrivim (95) fent aparèixer explícitament l'expressió per a $\hat{\Lambda}(t')$,

$$D_{\mu\nu} \left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{(\mu)} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t'} - \lambda_{(\nu)} \right) \Delta^{\nu\rho}(t',t'') = -\delta_\mu^{\ \rho} \, \delta(t'-t'') \tag{103}$$

de la qual una possible solució pren la forma

$$\Delta^{\nu\rho}(t',t'') = -\frac{D^{\nu\rho}}{\lambda_{(\nu)} + \lambda_{(\rho)}} \Big[\theta(t'-t'') \exp\{\lambda_{(\nu)}(t'-t'')\} + \theta(t''-t') \exp\{\lambda_{(\rho)}(t''-t')\} -$$
$$- \exp\{\lambda_{(\nu)} t' + \lambda_{(\rho)} t'' - (\lambda_{(\mu)} + \lambda_{(\rho)}) t_0\} \Big] \tag{104}$$

satisfent les condicions imposades de simetria (94) i de contorn (98). Comprovem a més que efectivament és solució de (103)

$$D_{\mu\nu} \left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{(\mu)} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t'} - \lambda_{(\nu)} \right) \Delta^{\nu\rho}(t',t'') = -\frac{\delta_\mu^{\ \rho}}{\lambda_{(\nu)} + \lambda_{(\rho)}} \left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{(\mu)} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t'} - \lambda_{(\nu)} \right) \Big[\theta(t'-t'') \exp\{\lambda_{(\nu)}(t'-t'')\} +$$
$$\theta(t''-t') \exp\{\lambda_{(\rho)}(t''-t')\} \Big] = -\frac{\delta_\mu^{\ \rho}}{\lambda_{(\nu)} + \lambda_{(\rho)}} \left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{(\mu)} \right) \Big[\delta(t'-t'') \exp\{\lambda_{(\nu)}(t'-t'')\} + \theta(t'-t'') \left(\frac{\partial}{\partial t'} - \lambda_{(\nu)} \right)$$
$$\exp\{\lambda_{(\nu)}(t'-t'')\} - \delta(t''-t') \exp\{\lambda_{(\rho)}(t''-t')\} + \theta(t''-t') \left(\frac{\partial}{\partial t'} - \lambda_{(\nu)} \right) \exp\{\lambda_{(\rho)}(t''-t')\} \Big] =$$
$$= \frac{\delta_\mu^{\ \rho}}{\lambda_{(\nu)} + \lambda_{(\rho)}} \left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{(\mu)} \right) \theta(t''-t') \left(\lambda_{(\nu)} + \lambda_{(\rho)} \right) \exp\{\lambda_{(\rho)}(t''-t')\}$$
$$= \delta_\mu^{\ \rho} \Big[-\delta(t''-t') \exp\{\lambda_{(\rho)}(t''-t')\} + \theta(t''-t') \left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{(\mu)} \right) \exp\{\lambda_{(\rho)}(t''-t')\} \Big]$$

$$= -\delta_\mu{}^\rho\, \delta(t'-t'') \exp\{\lambda_{(\rho)}(t''-t')\}$$
$$= -\delta_\mu{}^\rho\, \delta(t'-t'') \tag{105}$$

tal com preteníem de demostrar.

Substituint (104) i (101) en (96) arribem finalment a expressar $Z_o(J)$ en la forma

$$Z_o(J) = \exp\left\{ q_o^\nu \int_{t_o}^{t} d\tau\, J_\nu(\tau) \exp\{\lambda_{(\nu)}(\tau - t_o)\} + \tfrac{1}{2} \int_{t_o}^{t} d\tau \int_{t_o}^{t} d\tau'\, J_\nu(\tau)\, \Delta^{\nu\mu}(\tau,\tau')\, J_\mu(\tau') \right\} \tag{106}$$

amb $\Delta(\tau,\tau')$ definida segons (104). A més, si comparem amb l'expressió per a $Z_o(J,0)$ obtinguda en (1.101), es comprovaria idènticament (83) i certament el propagador donat per (104) coincideix amb el propagador estocàstic que havíem introduït en 1.7, (1.95), que per això havíem notat de la mateixa manera des del principi.

2.9 OBTENCIÓ DEL FUNCIONAL GENERADOR A PARTIR DEL CORRESPONENT A LA DINÀMICA LLIURE.

De manera totalment idèntica a com obteníem $Z(J, J^*)$ a partir de $Z_o(J,J^*)$, formularem aquí $Z(J)$ en termes de $Z_o(J)$. Efectivament, tenint en compte la partició de la Lagrangiana proposada en (58), és evident d'adonar-se immediatament que es verificarà

$$Z(J) = \exp\left\{ -\int_{t_o}^{t} d\tau\, \mathcal{L}_1\left(\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \frac{d}{d\tau}\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \tau \right) \right\} Z_o(J) \tag{107}$$

amb el significat que es comentava a propòsit de (1.110). Per altra banda una relació idèntica expressaria $Z^P(J)$ en termes de $Z_o^P(J)$.

2.10 CÀLCUL PERTORBATIU DE LA FUNCIÓ DE CORRELACIÓ

En les seccions que resten per acabar aquest segon capítol, s'analitza detalladament el desenvolupament pertorbatiu de la funció de correlació, a partir de l'expressió trobada per a $Z_o^P(J)$. Tal i com és de preveure, la tècnica que emprarem no presenta grans diferències amb la que hem esquematitzat en les darreres seccions del capítol anterior; presenta però, algunes particularitats en les quals centrarem primordialment la nostra atenció.

Tenint en compte la definició adoptada per a la funció de correlació, i expressada en termes de $Z^P(J)$ serà

$$\mathcal{G}^{\mu\nu,P}(t'',t') = \langle q^{\mu}(t'')\, q^{\nu}(t') \rangle^{P} = \left. \frac{\delta^2 Z^P(J)}{\delta J_{\mu}(t'')\, \delta J_{\nu}(t')} \right|_{J=0} \tag{108}$$

on com és usual s'ha pres el funcional $Z^P(J)$ convenientment normalitzat. En termes de $Z_o^P(J)$ l'escrivim com

$$\mathcal{G}^{\mu\nu,P}(t'',t') = \frac{\delta^2}{\delta J_{\mu}(t'')\delta J_{\nu}(t')} \exp\left\{ -\int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}_1\left(\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \frac{d}{d\tau}\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \tau \right) \right\} Z_o^P(J) \Big|_{J=0} \tag{109}$$

o de forma equivalent

$$\mathcal{G}^{\mu\nu,P}(t'',t') = \left\langle \frac{\delta}{\delta J_{\mu}(t'')} \frac{\delta}{\delta J_{\nu}(t')} \exp\left\{ -\int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}_1\left(\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \frac{d}{d\tau}\frac{\delta}{\delta J(\tau)}, \tau \right) \right\} Z_o(J) \right\rangle^{P}_{J=0} \tag{110}$$

El cas particular corresponent a la funció de correlació lliure és particularment simple

$$\mathcal{G}_o^{\mu\nu,P}(t'',t') = \left\langle \frac{\delta}{\delta J_{\mu}(t'')} \frac{\delta}{\delta J_{\nu}(t')} Z_o(J) \right\rangle^{P}_{J=0} = g_o^{\mu\nu}(t'',t') + \Delta^{\mu\nu}(t'',t') \tag{111}$$

obtenint d'aquesta manera el resultat ja conegut de (1.128).

Si desenvolupem l'exponencial en (110) generaríem el desenvolupament pertorbatiu corresponent a $\mathcal{G}^P(t'',t')$. Cal també fer una factorització de $Z_o(J)$ en les seves parts determinista $Z_o^d(J)$ i estocàstica $Z_o^s(J)$, que vindran donades respectivament per

$$Z_o^d(J) = \exp\left\{ q_o^{\nu} \int_{t_0}^{t} d\tau \exp\{\lambda_{\nu\nu}(\tau - t_0)\}\, J_{\nu}(\tau) \right\} \tag{112}$$

$$Z_0^s(J) = \exp\left\{ \tfrac{1}{2}\int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, J_\mu(\tau)\, \Delta^{\mu\nu}(\tau,\tau')\, J_\nu(\tau') \right\} \tag{113}$$

El caràcter lineal de $Z_0^d(J)$ en la font $J(\tau)$ indueix a la definició d'un operador diferencial $\hat{\varphi}(t")$, de forma anàloga a com féiem en (1.139), segons

$$\hat{\varphi}^\mu(t") = \left[Z_0^d(J)\right]^{-1} \frac{\delta}{\delta J_\mu(t")} Z_0^d(J) \tag{114}$$

amb la definició usual per a $\left[Z_0^d(J)\right]^{-1}$

$$\left[Z_0^d(J)\right]^{-1} = 1/Z_0^d(J) \tag{115}$$

Expressant (114) a partir de (112)

$$\hat{\varphi}^\mu(t") = q_0^\mu \exp\{\lambda_{\mu)}(t"-t_0)\} + \delta/\delta J_\mu(t") \tag{116}$$

on l'única diferència, pel que fa a l'expressió equivalent (1.142), consisteix en l'absència del terme en $J^+(\tau)$. Així mateix, i per motius idèntics, no cal definir aquí un altre operador anàleg al $\hat{\phi}(t")$ que s'ha considerat en (1.140). Emprant la notació $q_0(t")$ introduïda en (1.167), expressem (116) de forma més compacta com

$$\hat{\varphi}^\mu(t") = q_0^\mu(t") + \delta/\delta J_\mu(t") \tag{117}$$

Si tornem a (110), podem escriure la funció de correlació $\mathscr{G}^P(t", t')$ de manera que hi apareguin els operadors que s'han introduït recentment,

$$\mathscr{G}^{\mu\nu,P}(t",t') = \left\langle \hat{\varphi}^\mu(t")\, \hat{\varphi}^\nu(t')\, \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathscr{L}_1(\hat{\varphi}(\tau), d/d\tau\, \hat{\varphi}(\tau), \tau)\right\}\right\rangle^P Z_0^s(J)\Big|_{J=0} \tag{118}$$

on, donada la independència de $Z_0^s(J)$ quant a la distribució de condicions inicials, cal precisar que pot aparèixer indistintament dintre o fora de la mitjana que s'hi refereix.

Tenint en compte la partició de $\mathscr{L}_1$ considerada en (59), creiem interessant d'avaluar per separat les contribucions que provenen de $\mathscr{L}_1^{I}$ i de $\mathscr{L}_1^{II}$.

2.11 CONTRIBUCIONS DE $\mathcal{L}_1^{\,I}$.

A partir de l'expressió per a $\mathcal{L}_1^{\,I}$ donada en (62), que reproduïm en termes de l'operador $\hat{f}$ com,

$$\mathcal{L}_1^{I}(\hat{f},\tau) = \tfrac{1}{2}\, F^{\mu}(\hat{f},\tau)\, D_{\mu\nu}\, F^{\mu}(\hat{f},\tau) \tag{119}$$

i si tenim en compte que les funcions F seran en general polinomis de les variables $\hat{f}$, ens adonem fàcilment que l'expansió pertorbativa de $\mathcal{G}^{P}(t'', t')$ contindrà termes del tipus

$$\langle \hat{f}^{1}(\tau_1) \ldots \hat{f}^{m}(\tau_m) \rangle^{P} Z_0^{s}(J)\big|_{J=0} \tag{120}$$

Abans ja comentàrem que $Z_0^S(J)$ pot estar dintre o fora de la mitjana sobre condicions inicials, segons què ens convingui. Ara ens convé considerar-l'hi dintre. Per altra banda podem realitzar aquella mitjana un cop hagim efectuat les derivades funcionals, i per tant escrivim els termes com (120) en la forma

$$\langle \hat{f}^{1}(\tau_1) \ldots \hat{f}^{m}(\tau_m)\, Z_0^{s}(J)\big|_{J=0} \rangle^{P} \tag{121}$$

Calculem primer el resultat d'aplicar un nombre arbitrari m de binomis $\hat{f}$ a $Z_S^O(J)$

$$\hat{f}^{1}(\tau_1) \ldots \hat{f}^{m}(\tau_m)\, Z_0^{s}(J) \tag{122}$$

Tenint en compte l'expressió dels operadors $\hat{f}$ escriurem (122) en la forma

$$\sum_{j=0}^{m} \sum_{\substack{\text{subconj.}\\ \text{de } j \text{ índexs}\\ \text{dels } m \text{ totals}}} q_0^{1}(\tau_1) \ldots q_0^{j}(\tau_j) \frac{\delta}{\delta J_{j+1}(\tau_{j+1})} \ldots \frac{\delta}{\delta J_m(\tau_m)}\, Z_0^{s}(J) \tag{123}$$

Per altra banda a partir de l'expressió per a $Z_0^S(J)$, (115), observem de seguida el seu caràcter quadràtic respecte a la font $J(\tau)$, cosa que traduïm que en prendre'n derivades funcionals avaluades en $J(\tau) = 0$, només les contribucions que continguin un nombre parell de derivades seran no nul·les. A més el resultat obtingut en operar una cadena de derivades funcionals sobre $Z_0^S(J)$ en $J(\tau) = 0$, equival a considerar-les agrupades o contretes en parells de totes les formes possibles, i com si cada parell actués sobre $Z_0^S(J)$ com si estigués sol. Per a cada parell de derivades funcionals respecte a $J_1(\tau_1)$ i $J_2(\tau_2)$, apareix un factor $\Delta^{12}(\tau_1,\tau_2)$, tal i com podem comprovar directament de (113)

$$\frac{\delta}{\delta J_1(\tau_1)} \frac{\delta}{\delta J_2(\tau_2)} Z_0^S(J)\Big/_{J=0} = \Delta^{12}(\tau_1,\tau_2) \tag{124}$$

amb la qual cosa reescrivim (122) en la forma

$$\hat{\psi}^1(\tau_1) \ldots \hat{\psi}^m(\tau_m)\, Z_0^S(J)\Big/_{J=0} = \sum_{j=0}^{m} \sum_{\substack{\text{particions}\\ \text{de } m \text{ índexs}\\ \text{en } (j) \text{ i } (m-j)}} q_0^1(\tau_1) \ldots q_0^j(\tau_j) \sum_{\substack{\text{contraccions}\\ \text{dels } (m-j) \text{ índexs}\\ \text{a parells}}} \Delta^{j+1,j+2}(\tau_{j+1},\tau_{j+2}) \ldots \Delta^{m-1,m}(\tau_{m-1},\tau_m) \tag{125}$$

Una primera conseqüència de tot el que hem dit, fa referència al caràcter necessàriament parell de m-j . Si fem la mitjana sobre condicions inicials, (121) es converteix en

$$\left\langle \hat{\psi}^1(\tau_1) \ldots \hat{\psi}^m(\tau_m)\, Z_0^S(J)\Big/_{J=0} \right\rangle^P = \sum_{j=0}^{m} \sum_{\substack{\text{particions}\\ \text{de } m \text{ índexs}\\ m(j) \text{ i } (m-j)}} \left\langle q_0^1(\tau_1) \ldots q_0^j(\tau_j) \right\rangle^P \sum_{\substack{\text{contrac.}\\ \text{dels } (m-j)\\ \text{índexs a parells}}} \Delta^{j+1,j+2}(\tau_{j+1},\tau_{j+2}) \ldots \Delta^{m-1,m}(\tau_{m-1},\tau_m) \tag{126}$$

En aquell cas en que la distribució de condicions inicials fos gaussiana, ja se sap que els moments senars de la distribució són nuls, i que els parells factoritzen en productes de moments d'ordre inferior, amb la qual cosa poden expressar-se finalment com a producte de moments d'ordre dos. En aquestes hipòtesis

$$\left\langle q_0^1(\tau_1) \ldots q_0^j(\tau_j) \right\rangle^P = \sum_{\substack{\text{contrac. } (j)\\ \text{índexs a parells}}} \left\langle q_0^1(\tau_1)\, q_0^2(\tau_2) \right\rangle^P \ldots \left\langle q_0^{j-1}(\tau_{j-1})\, q_0^j(\tau_j) \right\rangle^P \tag{127}$$

És ben clar que en aquest cas j ha de ser necessàriament parell, i pel que diguérem quant a m-j, arribem a la mateixa conclusió per a m.

Per altra banda si tenim en compte que per la seva pròpia definició

$$\langle q_0^1(\tau_1)\, q_0^2(\tau_2) \rangle^P = g_0^{12}(\tau_1,\tau_2) \tag{128}$$

expressem finalment (126) en la forma

$$\langle \hat{\phi}^1(\tau_1) \dots \hat{\phi}^m(\tau_m)\, Z_0^S(J)\big|_{J=0} \rangle^P = \sum_{j=0}^{m} \sum_{\substack{\text{part.} \\ \text{en } m!/j!(m-j)!}} \sum_{\substack{\text{contracc.} \\ (j) \text{ a parells}}} \sum_{\substack{\text{contracc.} \\ (m-j) \text{ a} \\ \text{parells}}} g_0^{12}(\tau_1,\tau_2) \dots g_0^{j-1,j}(\tau_{j-1},\tau_j)\, \Delta^{j+1,j+2}(\tau_{j+1},\tau_{j+2}) \dots \Delta^{m-1,m}(\tau_{m-1},\tau_m) \tag{129}$$

la qual cosa pot escriure's de manera molt més compacta com

$$\langle \hat{\phi}^1(\tau_1) \dots \hat{\phi}^m(\tau_m)\, Z_0^S(J)\big|_{J=0} \rangle^P = \sum_{\substack{\text{contracc.} \\ m \text{ índexs 2 parells}}} \left[g_0^{12}(\tau_1,\tau_2) + \Delta^{12}(\tau_1,\tau_2)\right] \dots \left[g_0^{m-1,m}(\tau_{m-1},\tau_m) + \Delta^{m-1,m}(\tau_{m-1},\tau_m)\right] \tag{130}$$

on no podem oblidar que aquesta expressió només és vàlida en les condicions de distribució de condicions inicials gaussianes. Per tal d'il.lustrar la fórmula anterior amb un exemple senzill, suposem m = 4 ; en aquest cas

$$\begin{aligned} \langle \hat{\phi}^1(\tau_1)\, \hat{\phi}^2(\tau_2)\, \hat{\phi}^3(\tau_3)\, \hat{\phi}^4(\tau_4)\, Z_0^S(J)\big|_{J=0} \rangle^P = {} & \left[g_0^{12}(\tau_1,\tau_2) + \Delta^{12}(\tau_1,\tau_2)\right]\left[g_0^{34}(\tau_3,\tau_4) + \Delta^{34}(\tau_3,\tau_4)\right] + \\ & + \left[g_0^{13}(\tau_1,\tau_3) + \Delta^{13}(\tau_1,\tau_3)\right]\left[g_0^{24}(\tau_2,\tau_4) + \Delta^{24}(\tau_2,\tau_4)\right] + \\ & + \left[g_0^{14}(\tau_1,\tau_4) + \Delta^{14}(\tau_1,\tau_4)\right]\left[g_0^{23}(\tau_2,\tau_3) + \Delta^{23}(\tau_2,\tau_3)\right] \end{aligned} \tag{131}$$

2.12 CONTRIBUCIONS DE $\mathcal{L}_1^{II}$.

Recordem l'expressió per a $\mathcal{L}_1^{II}$ donada en (63), que escrivim en termes de l'operador $\hat{\phi}$ com

$$\mathcal{L}_1^{II}\left(\hat{\phi}, \frac{d}{d\tau}\hat{\phi}, \tau\right) = -F^{\mu}(\hat{\phi},\tau)\, D_{\mu\nu} \left[\frac{d\hat{\phi}^{\nu}}{d\tau} - \lambda_{\nu\sigma}\, \hat{\phi}^{\sigma} \right] \tag{132}$$

El terme entre claudàtors podem calçular-lo a partir de (117)

$$\frac{d\hat{\varphi}^{\nu}(\tau)}{d\tau} - \lambda_{(\nu)}\hat{\varphi}^{\nu}(\tau) = \frac{d}{d\tau}\left(q_0^{\nu}(\tau) + \frac{\delta}{\delta J_{\nu}(\tau)}\right) - \lambda_{(\nu)}\left(q_0^{\nu}(\tau) + \frac{\delta}{\delta J_{\nu}(\tau)}\right) \tag{133}$$

i tenint en compte que de la definició de $q_0^{\nu}(\tau)$ serà

$$\frac{d q_0^{\nu}(\tau)}{d\tau} = \lambda_{(\nu)} q_0^{\nu}(\tau) \tag{134}$$

ens queda

$$\frac{d\hat{\varphi}^{\nu}(\tau)}{d\tau} - \lambda_{(\nu)}\hat{\varphi}^{\nu}(\tau) = \left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\nu)}\right)\frac{\delta}{\delta J_{\nu}(\tau)} \tag{135}$$

i si substituïm en (132)

$$\mathcal{L}_1^{II}(\hat{\varphi}, d/d\tau\,\hat{\varphi}, \tau) = -F^{\mu}(\hat{\varphi}, \tau)\, D_{\mu\nu}\left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\nu)}\right)\frac{\delta}{\delta J_{\nu}} \tag{136}$$

Així doncs, el desenvolupament pertorbatiu de $\not{Z}^{P}(t'', t')$ contindrà termes del tipus

$$\frac{\delta}{\delta J_{\sigma}(\tau')}\, D_{\mu\nu}\left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\nu)}\right)\frac{\delta}{\delta J_{\nu}(\tau)}\, Z_0^{S}(J)\Big|_{J=0} \tag{137}$$

que pretenem d'avaluar; per això fem actuar les derivades funcionals i obtenim

$$D_{\mu\nu}\left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\nu)}\right)\Delta^{\nu\sigma}(\tau, \tau') \tag{138}$$

i tenint en compte la definició de propagador estocàstic donada en (104), allò obtingut anteriorment ens queda

$$D_{\mu\nu}\left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\nu)}\right)\left[-\frac{D^{\nu\sigma}}{\lambda_{(\nu)}+\lambda_{(\sigma)}}\left(\theta(\tau-\tau')\exp\{\lambda_{(\nu)}(\tau-\tau')\} + \theta(\tau'-\tau)\exp\{\lambda_{(\sigma)}(\tau'-\tau)\}\right)\right]$$

$$= -\delta_{\mu}^{\ \sigma}\frac{1}{\lambda_{(\nu)}+\lambda_{(\sigma)}}\left[-(\lambda_{(\sigma)}+\lambda_{(\nu)})\,\theta(\tau'-\tau)\exp\{\lambda_{(\sigma)}(\tau'-\tau)\}\right]$$

$$= \delta_{\mu}^{\ \sigma}\,\theta(\tau'-\tau)\exp\{\lambda_{(\sigma)}(\tau'-\tau)\} \tag{139}$$

i tenint en compte la definició de funció resposta lliure donada en (1.87), arribem a la conclusió que

$$\frac{\delta}{\delta J_\tau(\tau')} D_{\mu\nu}\left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\omega)}\right) \frac{\delta}{\delta J_\nu(\tau)} Z_0^S(J)\Big/_{J=0} = R^\sigma_{0\mu}(\tau'-\tau) \tag{140}$$

Observem que aquest és un resultat important, perquè si bé les funcions resposta no s'han definit fins ara en la representació Lagrangiana, i de fet no ha calgut fer-ho, també és cert que els vèrtexs associats a $\mathcal{L}_1^{II}$, en el desenvolupament de $\mathcal{G}^P$, incorporen la presencia de les funcions resposta lliure. Amb això estem en una situació anàloga a la que considerarem en la representació Hamiltoniana, on ambdós propagadors intervenien de manera igual en els desenvolupaments de $\mathcal{G}^P$ i R^P.

2.13 OBTENCIÓ DELS TERMES FINS A SEGON ORDRE. COMPARACIÓ AMB ESQUEMES ANÀLEGS CONSIDERATS EN 1.12.

Per acabar aquest capítol, calcularem ara els termes del desenvolupament pertorbatiu de $\mathcal{G}^P(t'', t')$ fins a segon ordre, amb cert detall. Ho fem per dos motius fonamentals. En primer lloc com aplicació del que hem vist en les dues darreres seccions, i per altra banda, per a verificar la identitat dels resultats assolits amb els que obtinguérem en 1.12; així es confirma de forma explícita l'equivalència de representacions.

Prenguem la part no lineal del drift

$$F^\sigma(q,\tau) = F^\sigma(q) = \Gamma^\sigma_{\gamma\delta}\, q^\gamma q^\delta \tag{141}$$

A partir de (118) i desenvolupant l'exponencial serà

$$\mathcal{G}^{\mu\nu,P}(t'',t') = \langle \hat{q}^{\mu}(t'')\hat{q}^{\nu}(t') Z_0^S(J)/_{J=0} \rangle^P - \langle \hat{q}^{\mu}(t'')\hat{q}^{\nu}(t') \int_{t_0}^{t} d\tau \, \mathcal{L}_1(\hat{q}(\tau), \frac{d}{d\tau}\hat{q}(\tau), \tau) Z_0^S(J)/_{J=0} \rangle^P +$$

$$+ \tfrac{1}{2} \langle \hat{q}^{\mu}(t'')\hat{q}^{\nu}(t') \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau' \, \mathcal{L}_1(\hat{q}(\tau), \frac{d}{d\tau}\hat{q}(\tau), \tau) \mathcal{L}_1(\hat{q}(\tau'), \frac{d}{d\tau'}\hat{q}(\tau'), \tau') Z_0^S(J)/_{J=0} \rangle^P + O(\mathcal{L}_1^3)$$

(142)

Fem atenció de moment al terme de primer ordre en $\mathcal{L}_1$

$$-\langle \hat{q}^{\mu}(t'')\hat{q}^{\nu}(t') \int_{t_0}^{t} d\tau \, \mathcal{L}_1^{I}(\hat{q}(\tau), \frac{d}{d\tau}\hat{q}(\tau), \tau) Z_0^S(J)/_{J=0} \rangle^P - \langle \hat{q}^{\mu}(t'')\hat{q}^{\nu}(t') \int_{t_0}^{t} d\tau \, \mathcal{L}_1^{II}(\hat{q}(\tau), \frac{d}{d\tau}\hat{q}(\tau), \tau) Z_0^S(J)/_{J=0} \rangle^P$$

(143)

Dels dos termes que apareixen en (143), el que correspon a $\mathcal{L}_1^{I}$ és d'ordre γ^2, per pròpia definició de $\mathcal{L}_1^{I}$, mentre que el que prové de $\mathcal{L}_1^{II}$ és d'ordre γ. De fet aquest és l'únic terme a $O(\gamma)$, car aquells que provenen de considerar potències de $\mathcal{L}_1$ d'ordre superior a u són manifestament d'ordre superior a u en γ. Tractem l'avaluació a $O(\gamma)$

$$\langle \hat{q}^{\mu}(t'')\hat{q}^{\nu}(t') \int_{t_0}^{t} d\tau \, F^{\rho}(\hat{q}(\tau), \tau) \, D_{\rho\sigma}\left(\frac{d}{d\tau} - \lambda(\tau)\right) \frac{\delta}{\delta J_{\sigma}(\tau)} Z_0^S(J)/_{J=0} \rangle^P \tag{144}$$

on s'ha tingut en compte (136). Tenint el cas particular (141),

$$\langle \gamma^{\rho}_{\alpha\beta} \int_{t_0}^{t} d\tau \left(q_0^{\mu}(t'') + \frac{\delta}{\delta J_{\mu}(t'')} \right) \cdots\cdots \left(q_0^{\beta}(\tau) + \frac{\delta}{\delta J_{\beta}(\tau)} \right) D_{\rho\sigma}\left(\frac{d}{d\tau} - \lambda(\tau)\right) \frac{\delta}{\delta J_{\sigma}(\tau)} Z_0^S(J)/_{J=0} \rangle^P \tag{145}$$

on s'ha tingut en compte (117). Si efectuem el producte de binomis indicat, i abreujant serà

$$\langle \gamma^{\rho}_{\alpha\beta} \int_{t_0}^{t} d\tau \Big[q_0^{\mu}(t'') q_0^{\nu}(t') q_0^{\alpha}(\tau) q_0^{\beta}(\tau) + q_0^{\mu}(t'') q_0^{\nu}(t') q_0^{\alpha}(\tau) \frac{\delta}{\delta J_{\beta}(\tau)} + \cdots + q_0^{\nu}(t') q_0^{\alpha}(\tau) q_0^{\beta}(\tau) \frac{\delta}{\delta J_{\mu}(t'')} +$$

$$+ q_0^{\mu}(t'') q_0^{\nu}(t') \frac{\delta}{\delta J_{\alpha}(\tau)} \frac{\delta}{\delta J_{\beta}(\tau)} + \cdots + q_0^{\alpha}(\tau) q_0^{\beta}(\tau) \frac{\delta}{\delta J_{\mu}(t'')} \frac{\delta}{\delta J_{\nu}(t')} + q_0^{\mu}(t'') \frac{\delta}{\delta J_{\nu}(t')} \frac{\delta}{\delta J_{\alpha}(\tau)} \frac{\delta}{\delta J_{\beta}(\tau)} +$$

$$+ \cdots + q_0^{\beta}(\tau) \frac{\delta}{\delta J_{\mu}(t'')} \frac{\delta}{\delta J_{\nu}(t')} \frac{\delta}{\delta J_{\alpha}(\tau)} + \frac{\delta}{\delta J_{\mu}(t'')} \frac{\delta}{\delta J_{\nu}(t')} \frac{\delta}{\delta J_{\alpha}(\tau)} \frac{\delta}{\delta J_{\beta}(\tau)} \Big]$$

$$D_{\rho\sigma}\left(\frac{d}{d\tau} - \lambda(\tau)\right) \frac{\delta}{\delta J_{\sigma}(\tau)} Z_0^S(J)/_{J=0} \rangle^P \tag{146}$$

Si recordem el que diguérem a propòsit de (124) i (125), i si observem que en (146) els termes que contenen un nombre parell de derivades funcionals, el contenen senar de variables q_0 subjectes a mitjana, arribem a la conclusió que en la hipòtesi de condicions inicials gaussianes, no hi haurà contribució no nul.la a $O(\gamma)$, que coincideix amb el que ja observàrem en el desenvolupament diagramàtic (1. 178) .

Tractem ara les contribucions a $O(\gamma^2)$. Per una banda haurem de considerar la que prové de (143)

$$-\left\langle \hat{\phi}^{\mu}(t'')\,\hat{\phi}^{\nu}(t') \int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}_1^{I}\left(\hat{\phi}(\tau), \frac{d}{d\tau}\hat{\phi}(\tau), \tau\right) Z_0^{S}(J)\Big|_{J=0} \right\rangle^{P} \tag{147}$$

i a més el corresponent a la contribució de segon ordre en $\mathcal{L}_1^{II}$, que escrivim com

$$\tfrac{1}{2}\left\langle \hat{\phi}^{\mu}(t'')\,\hat{\phi}^{\nu}(t') \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, \mathcal{L}_1^{II}\left(\hat{\phi}(\tau), \frac{d}{dt}\hat{\phi}(\tau), \tau\right) \mathcal{L}_1^{II}\left(\hat{\phi}(\tau'), \frac{d}{d\tau'}\hat{\phi}(\tau'), \tau'\right) Z_0^{S}(J)\Big|_{J=0} \right\rangle^{P} \tag{148}$$

Calculem (147)

$$-\left\langle \hat{\phi}^{\mu}(t'')\,\hat{\phi}^{\nu}(t') \int_{t_0}^{t} d\tau\, \tfrac{1}{2}\,\gamma^{\rho}_{\alpha\beta}\,\hat{\phi}^{\alpha}(\tau)\,\hat{\phi}^{\beta}(\tau)\, D_{\rho\sigma}\,\gamma^{\sigma}_{\gamma\delta}\,\hat{\phi}^{\gamma}(\tau)\,\hat{\phi}^{\delta}(\tau)\, Z_0^{S}(J)\Big|_{J=0} \right\rangle^{P} \tag{149}$$

on hem tingut en compte (119), juntament amb (141). Segons el que hem dit anteriorment, aquesta contribució seria no nul.la perquè conté un nombre parell d'operadors

$$-\tfrac{1}{2}\,\gamma^{\rho}_{\alpha\beta}\, D_{\rho\sigma}\,\gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \int_{t_0}^{t} d\tau \sum_{\substack{\text{contrac. conj. índexs} \\ (\mu\nu\alpha,\beta,\gamma,\delta)\ \text{i les seves corresp.} \\ \text{coord. temporals a parells}}} \left[q_0^{\mu\nu}(t'',t') + \Delta^{\mu\nu}(t'',t') \right] \left[q_0^{\alpha\beta}(\tau,\tau) + \Delta^{\alpha\beta}(\tau,\tau) \right] \left[q_0^{\gamma\delta}(\tau,\tau) + \Delta^{\gamma\delta}(\tau,\tau) \right] \tag{150}$$

Calculem ara (148)

$$\tfrac{1}{2}\left\langle \hat{\phi}^{\mu}(t'')\,\hat{\phi}^{\nu}(t') \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, \gamma^{\rho}_{\alpha\beta}\,\hat{\phi}^{\alpha}(\tau)\,\hat{\phi}^{\beta}(\tau)\, D_{\rho\xi}\left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\xi)}\right) \frac{\delta}{\delta J_{\xi}(\tau)}\,\gamma^{\sigma}_{\gamma\delta}\,\hat{\phi}^{\gamma}(\tau')\,\hat{\phi}^{\delta}(\tau')\, D_{\sigma\phi}\left(\frac{d}{d\tau'} - \lambda_{(\phi)}\right) \right.$$
$$\left. \frac{\delta}{\delta J_{(\phi)}(\tau')}\, Z_0^{S}(J)\Big|_{J=0} \right\rangle^{P} \tag{151}$$

Si efectuéssim la primera de les derivades funcionals

$$\frac{1}{2}\left\langle \gamma^{\rho}_{\alpha\beta}\, D_{\rho\xi}\, \gamma^{\sigma}_{\gamma\delta}\, D_{\sigma\phi}\int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, \hat{\psi}^{\mu}(t'')\, \hat{\psi}^{\nu}(t')\, \hat{\psi}^{\alpha}(\tau)\, \hat{\psi}^{\beta}(\tau) \left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\xi)}\right) \frac{\delta}{\delta J_{\xi}(\tau)}\, \hat{\psi}^{\gamma}(\tau')\, \hat{\psi}^{\delta}(\tau') \right.$$

$$\left. \left(\frac{d}{dt'} - \lambda_{(\phi)}\right) \int_{t_0}^{t} d\tau''\, J_{\phi}(\tau'')\, \Delta^{\phi\phi}(\tau'',\tau')\, Z_0^{s}(J)\Big/_{J=0} \right\rangle^{P} \tag{152}$$

i fent actuar $\left(d/dt' - \lambda_{(\phi)}\right)$ sobre el propagador estocàstic $\Delta^{\phi\phi}$ (τ'', τ'), amb la incorporació prèvia de $D_{\sigma\phi}$, apareixerien funcions resposta lliures

$$\frac{1}{2}\left\langle \gamma^{\rho}_{\alpha\beta}\, D_{\rho\xi}\, \gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, \hat{\psi}^{\mu}(t'')\, \hat{\psi}^{\nu}(t')\, \hat{\psi}^{\alpha}(\tau)\, \hat{\psi}^{\beta}(\tau) \left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\xi)}\right) \frac{\delta}{\delta J_{\xi}(\tau)}\, \hat{\psi}^{\gamma}(\tau')\, \hat{\psi}^{\delta}(\tau') \right.$$

$$\left. \int_{t_0}^{t} d\tau''\, J_{\phi}(\tau'')\, R^{\phi}_{0\sigma}(\tau''-\tau')\, Z_0^{s}(J)\Big/_{J=0} \right\rangle^{P} \tag{153}$$

Ara prosseguiríem, i donada la commutativitat entre els operadors $\hat{\psi}$ i les derivades funcionals, reescriuríem (153) com

$$\frac{1}{2}\left\langle \gamma^{\rho}_{\alpha\beta}\, D_{\rho\xi}\, \gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, \hat{\psi}^{\mu}(t'')\, \hat{\psi}^{\nu}(t')\, \hat{\psi}^{\alpha}(\tau)\, \hat{\psi}^{\beta}(\tau) \left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\xi)}\right) \hat{\psi}^{\gamma}(\tau')\, \hat{\psi}^{\delta}(\tau') \left[\int_{t_0}^{t} d\tau''\, J_{\phi}(\tau'')\, R^{\phi}_{0\sigma}(\tau''-\tau) \right.\right.$$

$$\left.\left. \int_{t_0}^{t} d\tau'''\, J_{\omega}(\tau''')\, \Delta^{\omega\xi}(\tau''',\tau)\, Z_0^{s}(J) + R^{\xi}_{0\sigma}(\tau-\tau')\, Z_0^{s}(J) \right] \right\rangle^{P}_{J=0} \tag{154}$$

Fixem-nos ara en una circumstància important. Efectivament, si separem les dues contribucions a (154) que corresponen respectivament als dos sumands dins del claudàtor

$$\frac{1}{2}\left\langle \gamma^{\rho}_{\alpha\beta}\, D_{\rho\xi}\, \gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, \hat{\psi}^{\mu}(t'')\, \hat{\psi}^{\nu}(t')\, \hat{\psi}^{\alpha}(\tau)\, \hat{\psi}^{\beta}(\tau) \left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\xi)}\right) \hat{\psi}^{\gamma}(\tau')\, \hat{\psi}^{\delta}(\tau') \int_{t_0}^{t} d\tau''\, J_{\phi}(\tau'')\, R^{\phi}_{0\sigma}(\tau''-\tau') \right.$$

$$\left. \int_{t_0}^{t} d\tau'''\, J_{\omega}(\tau''')\, \Delta^{\omega\xi}(\tau''',\tau)\, Z_0^{s}(J)\Big/_{J=0} \right\rangle^{P} \tag{155}$$

$$\frac{1}{2}\left\langle \gamma^{\rho}_{\alpha\beta}\, D_{\rho\xi}\, \gamma^{\sigma}_{\gamma\delta} \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, \hat{\psi}^{\mu}(t'')\, \hat{\psi}^{\nu}(t')\, \hat{\psi}^{\alpha}(\tau)\, \hat{\psi}^{\beta}(\tau) \left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\xi)}\right) R^{\xi}_{0\sigma}(\tau-\tau')\, \hat{\psi}^{\gamma}(\tau')\, \hat{\psi}^{\delta}(\tau')\, Z_0^{s}(J)\Big/_{J=0} \right\rangle^{P} \tag{156}$$

Tenint en compte la definició de funcions R_0 donada en (1.87)

$$\left(\frac{d}{d\tau} - \lambda_{(\xi)} \right) R^{\xi}_{0\sigma}(\tau-\tau') = \delta^{\xi}_{\sigma}\, \delta(\tau-\tau') \exp\{ \lambda_{(\xi)} (\tau-\tau') \} \tag{157}$$

i substituint en (156), l'escrivim com

$$\begin{aligned} &\tfrac{1}{2} \left\langle \Upsilon^{\rho}_{\alpha\beta}\, D_{\rho\xi}\, \Upsilon^{\sigma}_{\gamma\delta} \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{t} d\tau'\, \hat{\phi}^{\mu}(t'')\, \hat{\phi}^{\nu}(t')\, \hat{\phi}^{\alpha}(\tau)\, \hat{\phi}^{\beta}(\tau)\, \delta^{\xi}_{\sigma}\, \delta(\tau-\tau') \exp\{ \lambda_{(\xi)} (\tau-\tau') \}\, \hat{\phi}^{\gamma}(\tau')\, \hat{\phi}^{\delta}(\tau')\, Z^{s}_{0}(J) \Big|_{J=0} \right\rangle^{p} \\ &= \tfrac{1}{2} \left\langle \Upsilon^{\rho}_{\alpha\beta}\, D_{\rho\sigma}\, \Upsilon^{\sigma}_{\gamma\delta} \int_{t_0}^{t} d\tau\, \hat{\phi}^{\mu}(t'')\, \hat{\phi}^{\nu}(t')\, \hat{\phi}^{\alpha}(\tau)\, \hat{\phi}^{\beta}(\tau)\, \hat{\phi}^{\gamma}(\tau)\, \hat{\phi}^{\delta}(\tau)\, Z^{s}_{0}(J) \Big|_{J=0} \right\rangle^{p} \end{aligned} \tag{158}$$

que coincideix amb (149) i a més apareix amb signe invers, per la qual cosa s'anul.len mútuament. Amb això la contribució única a $O(\Upsilon^2)$ és la corresponent a (155).

Creiem que aquest és un resultat important, car a l'hora de buscar representacions diagramàtiques per als desenvolupaments esquematitzats aquí, els diagrames associats a termes com (149) no apareixen en el corresponent desenvolupament pertorbatiu considerat en 1.12, amb la qual cosa podríem concloure erròniament que ambdós desenvolupaments no coincideixen almenys en llur transcripció en diagrames. Comprovem doncs que no és pas així i que no és més que un problema de paciència obtenir les contribucions no nul.les en $O(\Upsilon^2)$ a partir de (155), que en termes de diagrames, construïts segons què s'ha dit en I.12, ens permetrien de recuperar idènticament el desenvolupament (1.178)

PART II : TEORIES PERTORBATIVES EN TERMES DE PROPAGADORS COMPLETS.

INTRODUCCIÓ.

Presentem en aquesta segona part del treball un tractament pertorbatiu de la dinàmica estocàstica de Fokker-Planck, però que té una diferència fonamental amb el que vèiem en la primera part. Així, ara, el paper rellevant pertocarà als propagadors vestits o complets del sistema, mentre que abans els elements essencials n'eren els propagadors lliures o despullats.

El punt central d'aquest nou tractament, pot considerar-se sense cap mena de dubtes, la formulació d'una equació de Dyson per a la funció de correlació, o més exactament pel propagador connectat de dos punts exteriors, que n'és la part totalment connectada. Una tal equació és ben coneguda en el context de la Teoria Quàntica de Camps,(Fetter i Walecka (1971)), i constitueix, així mateix, una etapa intermitja en esquemes tipus MSR (1973).

Avancem ja, que poden considerar-se dues alternatives per a la formulació d'una tal equació. La primera consistiria en una resumació dels termes corresponents a un desenvolupament pertorbatiu convencional en termes de propagadors lliures, i més concretament, la resumació s'extendria a les contribucions a l'anomenada autoenergia pròpia. La segona alternativa seria la formulació directa d'aquella equació, alternativa que pot tractar- se, també, des de dos punts de vista. El primer pren com a punt de partida l'equació dinàmica pel doble conjunt d'operadors, en imatge de Heisenberg, constituït, per una banda, pels representatius de les variables macroscòpiques dels sistema, i per l'altra, pels seus conjugats, associats a les variables no mesurables anomenades moment. Aquest pot considerar- se el plantejament típic del formalisme MSR.El segon punt de vista, es fonamenta en el plantejament funcional, i més concretament, consisteix en l'aplicació del lema d'integració per parts a l'expressió del funcional generador de propagadors, per tal d'obtenir, primer, una equació d'evolució temporal pels valors mitjans de les variables del sistema, $G_{(1)}$, i posterior reconversió a una equació dinàmica pel propagador connectat de dos punts. Aquest segon és el procediment que hem seguit nosaltres. Val a dir, que tant en el plantejament MSR, com en el rostre, arribàrem a una expressió per l'operador autoenergia, peça central de l'equació de Dyson, no expressat parcialment i en termes de propagadors lliures, tal com seria per aquella resumació de la que parlavem abans, sino que l'obtindrem en la seva forma completa i en termes de propagadors vestits, amb la qual cosa és lícit de plantejar-se l'oportunitat d'esquemes renormalitzats.

També s'ha de precisar que això darrer ho aconseguim mitjançant la introducció d'unes noves components de la dinàmica estocàstica del sistema, que són les anomenades funcions vèrtex. En efecte, el tractament de problemes no lineals, com els que aquí proposem, i que d'altra banda són els més interessants per la possibilitat que ofereixen de descriure sistemes amb transformacions notables del seu comportament, té com a contrapartida, l'aparició de les conegudes estructures jeràrquiques en les equacions d'evolució de qualsevol propagador. Volem dir amb això, que referint-nos, per exemple, a aquesta equació dinàmica pel propagador de dos punts, $G_{(2)}$, ens hi intervenen propagadors d'un nombre superior de punts, $G_{(m)}$, amb la qual cosa esdevé una notable complexificació del problema. Doncs bé, és a partir de les funcions vèrtex que aconseguim desacoblar $G_{(m)}$, i podem expresar finalment l'operador autoenergia en termes de $G_{(1)}$, $G_{(2)}$, i les funcions vèrtex, que notem $\Gamma_{(m)}$.

Cal també indicar que en la presentació que fem de les funcions vèrtex, seguim les idees d'Amit (1978), lleugerament diferent de la que en fan De Dominicis i Martin (1964a), encara que equivalents en les expressions finals per a $\Gamma_{(m)}$ amb $m>2$.

Un cop establert l'operador autoenergia en termes de les funcions vèrtex, ens cal tancar el sistema mitjançant la formulació d'equacions per a aquelles funcions. Així, ens és necessari establir relacions autoconsistents per a $\Gamma_{(m)}$, amb $6 \geq m \geq 3$, relacions que estudiem, també, en relació amb la tàctica de la seva resolució.

No creiem que poguem disimular l'extraordinària complexitat de les expressions pel operador autoenegia, vegis com a exemple (II.2.73), o de les equacions autoconsistents plantejades pels vèrtexs. Això no obstant, aconseguim una particular reducció d'aquella dificultat d'una forma ben senzilla, en la hipòtesi, d'altra banda molt normal, que consisteix en pendre $G_{(1)}=0$.

Finalment, i ja per acabar aquesta introducció, ens referirem a una de les qüestions que creiem més importants, d'entre les contingudes en el treball presentat.

De forma semblant a com ens atreia la possibilitat de fer servir la representació funcional en termes de la Lagrangiana, per tal d'aconseguir, si era possible, una reducció en la dificultat associada als desenvolupaments pertorbatius en termes de propagadors lliures, així mateix ens vàrem adonar que l'equació de Dyson a què nosaltres arribàvem de forma natural a partir de la representació funcional Lagrangiana, s'expressava com una única equació, per a un únic propagador, i en termes d'un únic operador autoenergia. En l'esquema tipus MSR, d'altra banda, forçosament el tractament havia de ser matricial, davant el paper equivalent que pertocava a la dualitat d'operadors emprada, i així,efectivament, hom tracta allà amb una equació de Dyson plantejada per a un propagador expressat com una matriu 2×2, els components de la qual són justament la funció de correlació i de resposta, i igualment l'operador autoenergia té tres components no nul.les.

No creiem que valgui la pena insistir en la superior dificultat, a primera vista, associada a un tal plantejament. Tanmateix, per tal d'ensorrar aquella estructura matricial esdevenen essencials les anomenades relacions de fluctuació-dissipació, establertes bé entre les funcions de correlació i de resposta, bé entre les mateixes components de l'operador autoenergia. Nosaltres no tenim, en principi la limitació de l'existència de les esmentades relacions, tot i que no les oblidarem per prudència. En aquest sentit vàrem considerar oportú de formularles, prèvia caracterització de la funció resposta en la representació Lagrangiana considerada, encara que resten apartades del formalisme presentat en aquesta segona part.

En tres capitols desenvolupem el contingut d'allò que acabem d'exposar. El primer conclou amb la formulació de l'equació de Dyson, el segon esmerçat en la introducció i posterior incorporació al formalisme de les funcions vèrtex. I el darrer en què ens referim a la funció resposta, a les relacions de fluctuació-dissipació, i comparem l'esquema aquí presentat amb el de Martin, Siggia i Rose.

1. EQUACIÓ DE DYSON PER AL PROPAGADOR CONNECTAT DE DOS PUNTS.

1.1 EQUACIÓ EN DERIVADES FUNCIONALS PER A Z(J) : PERTORBACIÓ CÚBICA.

En començar la secció I.2.5 vàrem dir que ens proposàvem d'obtenir una equació en derivades funcionals per a Z(J), amb el doble motiu que consistia per una banda, en l'eventual restricció a la dinàmica lliure i a la posterior resolució, i per altra banda, en establir un punt de partida en la construcció d'un formalisme anàleg al MSR (1973). Avançant en aquest darrer objectiu, considerarem ara la particularització de l'equació que s'hi ha obtingut per a un sistema no lineal particular que conté una pertorbació cúbica.

Suposem doncs f(q,t) sense dependència temporal explícita i donat per

$$f^{\mu}(q) = \lambda_{(\mu)} q^{\mu} + 1/3\, \Gamma^{\mu}_{\nu\sigma\lambda}\, q^{\nu} q^{\sigma} q^{\lambda} \tag{1}$$

on el coeficient de la part no lineal el suposarem invariant enfront a qualsevol permutació dels seus índexs covariants

$$\Gamma^{\mu}_{\nu\sigma\lambda} = \Gamma^{\mu}_{\sigma\nu\lambda} = \Gamma^{\mu}_{\lambda\sigma\nu} = \cdots\cdots \tag{2}$$

En aquest cas

$$F^{\mu}(q) = 1/3\, \Gamma^{\mu}_{\nu\sigma\lambda}\, q^{\nu} q^{\sigma} q^{\lambda} \tag{3}$$

i conseqüentment, les diferents contribucions a la Lagrangiana $\mathcal{L}(q,\dot{q})$ vindran donades segons (I.2.60), (I. 2.62) i (I.2.63) per

$$\mathcal{L}_{0}(q,\dot{q}) = 1/2\, [\dot{q}^{\mu} - \lambda_{(\mu)} q^{\mu}]\, D_{\mu\nu}\, [\dot{q}^{\nu} - \lambda_{(\nu)} q^{\nu}] \tag{4}$$

$$\mathcal{L}_1^{I}(q) = 1/18\ \gamma^{\mu}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\mu\upsilon}\ \gamma^{\upsilon}_{\beta\rho\tau}\ q^{\alpha} q^{\sigma} q^{\lambda} q^{\beta} q^{\rho} q^{\tau} \tag{5}$$

$$\mathcal{L}_1^{II}(q,\dot q) = -1/3\ \gamma^{\mu}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\mu\upsilon}\ [\dot q^{\upsilon} - \lambda_{(\upsilon)} q^{\upsilon}]\ q^{\alpha} q^{\sigma} q^{\lambda} \tag{6}$$

Amb aquestes expressions explícites per a $\mathcal{L}_0, \mathcal{L}_1^{I}, \mathcal{L}_1^{II}$ passem a calcular $\mathcal{L}_{1,\mu}(q,\dot q)$ definida en (I.2.74)

$$\frac{\partial \mathcal{L}_1(q,\dot q)}{\partial q^{\mu}} = \frac{\partial \mathcal{L}_1^{I}(q)}{\partial q^{\mu}} + \frac{\partial \mathcal{L}_1^{II}(q,\dot q)}{\partial q^{\mu}} \tag{7}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}_1^{I}(q,\dot q)}{\partial q^{\mu}} = 1/3\ \gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\delta\upsilon}\ \gamma^{\upsilon}_{\mu\rho\tau}\ q^{\alpha} q^{\sigma} q^{\lambda} q^{\rho} q^{\tau} \tag{8}$$

on hem emprat (2), i prèviament del caràcter simètric de la inversa de la matriu de difusió;

$$\frac{\partial \mathcal{L}_1^{II}(q,\dot q)}{\partial q^{\mu}} = 1/3\ \gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\delta\mu}\ \lambda_{(\mu)}\ q^{\alpha} q^{\sigma} q^{\lambda} - \gamma^{\delta}_{\mu\sigma\lambda}\ D_{\delta\upsilon}\ [\dot q^{\upsilon} - \lambda_{(\upsilon)} q^{\upsilon}]\ q^{\sigma} q^{\lambda} \tag{9}$$

on hem fet ús novament del caràcter simètric de $\gamma^{\mu}_{\alpha\sigma\lambda}$ enfront de permutacions dels seus índexs covariants. Per altra banda

$$\frac{\partial \mathcal{L}_1(q,\dot q)}{\partial \dot q^{\mu}} = \frac{\partial \mathcal{L}_1^{II}(q,\dot q)}{\partial \dot q^{\mu}} = -1/3\ \gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\delta\mu}\ q^{\alpha} q^{\sigma} q^{\lambda} \tag{10}$$

i per consegüent

$$\frac{d}{dt'} \frac{\partial \mathcal{L}_1(q,\dot q)}{\partial \dot q^{\mu}} = -\gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\delta\mu}\ \dot q^{\alpha} q^{\sigma} q^{\lambda} \tag{11}$$

Sumant totes les contribucions

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{1,\mu}(q,\dot q) = {} & 1/3\ \gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\delta\upsilon}\ \gamma^{\upsilon}_{\mu\rho\tau}\ q^{\alpha} q^{\sigma} q^{\lambda} q^{\rho} q^{\tau} + 1/3\ \gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\delta\mu}\ \lambda_{(\mu)}\ q^{\alpha} q^{\sigma} q^{\lambda} - \\ & - \gamma^{\delta}_{\mu\sigma\lambda}\ D_{\delta\upsilon}\ [\dot q^{\upsilon} - \lambda_{(\upsilon)} q^{\upsilon}]\ q^{\sigma} q^{\lambda} + \gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\delta\mu}\ \dot q^{\alpha} q^{\sigma} q^{\lambda}\end{aligned} \tag{12}$$

Substituint en (I.2.75)

$$\begin{aligned}\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\ \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\, [\mathcal{L} - J_{\mu} q^{\mu}]\right\} \Big\{ & \hat\Lambda_{\mu\upsilon}\, q^{\upsilon}(t') - 1/3\ \gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\delta\upsilon}\ \gamma^{\upsilon}_{\mu\rho\tau}\ q^{\alpha}(t') q^{\sigma}(t') q^{\lambda}(t') q^{\rho}(t') q^{\tau}(t') - \\ & - 1/3\ \gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\delta\mu}\ \lambda_{(\mu)}\ q^{\alpha}(t') q^{\sigma}(t') q^{\lambda}(t') + \gamma^{\delta}_{\mu\sigma\lambda}\ D_{\delta\upsilon}\ [\dot q^{\upsilon}(t') - \lambda_{(\upsilon)}\, q^{\upsilon}(t')]\ q^{\sigma}(t') q^{\lambda}(t') - \\ & - \gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\ D_{\delta\mu}\ \dot q^{\alpha}(t') q^{\sigma}(t') q^{\lambda}(t') + J_{\mu}(t') \Big\} = 0\end{aligned} \tag{13}$$

i agrupant termes semblants

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L} - J_\mu q^\mu\right]\right\} \Big\{ \hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\, q^\nu(t') - \tfrac{1}{3}\, \Gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\, D_{\delta\nu}\, \Gamma^{\nu}_{\mu\rho\gamma}\, q^\alpha(t') q^\sigma(t') q^\lambda(t') q^\rho(t') q^\gamma(t') -$$

$$- \left[\tfrac{1}{3}\, \Gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\, D_{\delta\mu}\, \lambda_{(\mu)} + \Gamma^{\delta}_{\mu\sigma\lambda}\, D_{\delta\alpha}\, \lambda_{(\alpha)}\right] q^\alpha(t') q^\sigma(t') q^\lambda(t') +$$

$$+ \left[\Gamma^{\delta}_{\mu\sigma\lambda}\, D_{\delta\alpha} - \Gamma^{\delta}_{\alpha\sigma\lambda}\, D_{\delta\mu}\right] \dot{q}^\alpha(t') q^\sigma(t') q^\lambda(t') + J_\mu(t') \Big\} = 0 \qquad (14)$$

L'expressió anterior pot fer-se més compacta si definim tres potencials en la forma

$$\gamma_{\mu\sigma\lambda\alpha\beta\gamma} \equiv -\tfrac{1}{3}\, \Gamma^{\rho}_{\mu\sigma\lambda}\, D_{\rho\nu}\, \Gamma^{\nu}_{\alpha\beta\gamma} \qquad (15)$$

$$\gamma_{\mu\nu\sigma\lambda} \equiv -\tfrac{1}{3}\, \lambda_{(\mu)}\, D_{\mu\rho}\, \Gamma^{\rho}_{\nu\sigma\lambda} - \lambda_{(\nu)}\, D_{\nu\rho}\, \Gamma^{\rho}_{\mu\sigma\lambda} \qquad (16)$$

$$\bar{\gamma}_{\mu\nu\sigma\lambda} \equiv -D_{\mu\rho}\, \Gamma^{\rho}_{\nu\sigma\lambda} + D_{\nu\rho}\, \Gamma^{\rho}_{\mu\sigma\lambda} \qquad (17)$$

En funció d'aquests mateixos, reescrivim (14) com

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L} - J_\mu q^\mu\right]\right\} \Big\{ \hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\, q^\nu(t') + \gamma_{\mu\rho\gamma\alpha\sigma\lambda}\, q^\rho(t') q^\gamma(t') q^\alpha(t') q^\sigma(t') q^\lambda(t') +$$

$$+ \gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}\, q^\alpha(t') q^\sigma(t') q^\lambda(t') + \bar{\gamma}_{\mu\alpha\sigma\lambda}\, \dot{q}^\alpha(t') q^\sigma(t') q^\lambda(t') + J_\mu(t') \Big\} = 0 \qquad (18)$$

Per altra banda en termes de Z(J), l'equació anterior es converteix en

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\, \frac{\delta Z(J)}{\delta J_\nu(t')} + \gamma_{\mu\rho\gamma\alpha\sigma\lambda}\, \frac{\delta^5 Z(J)}{\delta J_\rho(t') \ldots\ldots \delta J_\lambda(t')} + \gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}\, \frac{\delta^3 Z(J)}{\delta J_\alpha(t') \delta J_\sigma(t') \delta J_\lambda(t')} +$$

$$+ \bar{\gamma}_{\mu\alpha\sigma\lambda}\, \frac{\delta^2}{\delta J_\sigma(t') \delta J_\lambda(t')}\, \frac{d}{dt'}\, \frac{\delta Z(J)}{\delta J_\alpha(t')} + J_\mu(t')\, Z(J) = 0 \qquad (19)$$

que no és més que (I.2.76), per al cas particular del drift que s'hi ha considerat.

L'equació anterior adoptaria exactament la mateixa forma en cas de tenir una distribució inicial de condicions inicials, només substituint Z(J) per $Z^{P}(J)$. En tot l'estudi que segueix ens oblidarem una mica del problema de condicions inicials, i en aquest sentit treballarem fonamentalment amb Z(J), amb el benentès que cas de caldre, n'incorporaríem el tractament de la forma més convenient.

Òbviament el cas particular de sistemes amb drift lineal, pot obtenir-se directament de (19) tenint en compte que els potencials introduïts en (15),(16) i (17), serien en aquest cas idènticament nuls; amb això (19) es reduiria a

$$D_{\mu\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial t'}+\lambda_{\mu\nu}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t'}-\lambda_{\nu\nu}\right)\frac{\delta Z_0(J)}{\delta J_\alpha(t')}+J_\mu(t')\,Z_0(J)=0 \tag{20}$$

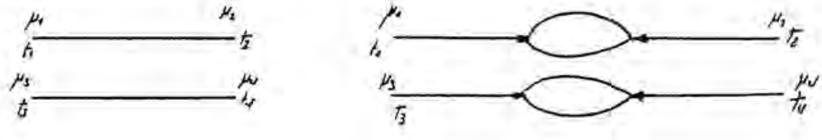
on hem explicitat l'operador diferencial $\hat{\Lambda}_{\mu\alpha}(t')$ definit a (I.2.73). Aquesta és l'equació en derivades funcionals corresponent al sistema lliure, que ja tinguérem ocasió de resoldre en I.2.8.

1.2 PROPAGADORS CONNECTATS.

Fins ara la nostra intenció fonamental era establir una equació en derivades funcionals per a Z(J), entenent que si es conegués tindríem la possibilitat d'obtenir qualsevol propagador per simple derivació funcional respecte a $J(\tau)$. Això no obstant resulta més convenient desenvolupar el nostre formalisme en termes dels anomenats propagadors connectats, i consegüentment treballar amb un funcional generador nou, $Z_c(J)$, tal que aquells propagadors s'obtinguin per derivació funcional d'aquest darrer generador. Primer establim breument la raó de l'esmentada conveniència.

En qualsevol desenvolupament pertorbatiu diagramàtic que plantegem, sigui quin sigui el propagador que intentem de calcular, i independentment de la Lagrangiana que estiguem considerant, ens adonem de seguida d'una característica que augmenta enormement la complexitat dels càlculs, sens afegir propietats intrínsecament rellevants. Aquesta circumstància consisteix en l'aparició de diagrames desconnectats, és a dir aquells on hi existeixen punts exteriors no units amb tots els punts interiors per línies internes. Podríem definir amb més propietat els diagrames desconnectats si déiem que són aquells en què no és possible de construir-hi una trajectòria contínua que uneixi qualsevol parell de punts exteriors. És ben clar que les propietats d'un diagrama desconnectat són les mateixes que les corresponents al producte de les seves parts disjuntes. Per tant sembla raonable d'intentar reconstruir els desenvolupaments, en termes únicament de les parts connectades dels propagadors, entenent que si les multipliquem adequadament, podem conèixer finalment el propagador complet.

Per tal que la terminologia emprada en el paràgraf anterior no resulti confusa, aclarirem que per punts exteriors d'un diagrama s'entenen els arguments o variables del propagador que apareixen en el seu desenvolupament, mentre que els punts interiors estan associats amb els vèrtexs, els índexs dels quals, discrets o continus, són muts, en el sentit que apareixen respectivament sumats i integrats. Per altra banda el concepte de diagrama desconnectat és fàcilment visualitzable; així, i si suposem el sistema sotmès a una pertorbació quadràtica del tipus de les que s'han considerat anteriorment, apareixeran per a $\langle q^{\mu_1}(t_1) \ldots\ldots q^{\mu_4}(t_4)\rangle$ diagrames desconnectats del tipus



i encara més, tots aquells que poden construir-se juxtaposant els diagrames corresponents a propagadors de menys de quatre punts.

Els propagadors connectats els notarem amb un subíndex (c); és a dir

$$\left\langle q^{\mu_m}(t_m) \cdots q^{\mu_j}(t_j) \cdots q^{\mu_1}(t_1) \right\rangle_c \tag{21}$$

i aquest indicarà justament la part totalment connectada de la mitjana

$$\left\langle q^{\mu_m}(t_m) \cdots q^{\mu_j}(t_j) \cdots q^{\mu_1}(t_1) \right\rangle \tag{22}$$

Associat als propagadors connectats (21) podem definir un nou funcional generador $Z_c(J)$ mitjançant

$$\left\langle q^{\mu_m}(t_m) \cdots q^{\mu_1}(t_1) \right\rangle_c \equiv \left. \frac{\delta^m Z_c(J)}{\delta J_{\mu_m}(t_m) \cdots \delta J_{\mu_1}(t_1)} \right|_{J=0} \tag{23}$$

Allò primer que podem qüestionar-nos és a propòsit de la relació existent entre els funcionals Z(J) i $Z_c(J)$. No és excessivament difícil d'establir la següent identitat.

$$Z(J) = \exp\left\{ Z_c(J) \right\} \tag{24}$$

Per altra banda aquesta relació permet d'assignar un significat precís a $Z_c(J)$. Així, i amb les definicions usuals en Mecànica Estadística, $Z_c(J)$ representarà l'energia lliure canviada de signe, conseqüentment amb que Z(J) representa a la funció de partició.

No intentem d'obtenir construccions formals aplicables a $Z_c(J)$ de característiques anàlogues a les emprades per a Z(J), quan l' expressàvem a partir de $Z_o(J)$ i aquest era de resolució coneguda. Desafortunadament podria molt ben ser que ni tan sols existissin. Ens limitarem, únicament, a reescriure l'equació en derivades funcionals per a Z(J), (19), en termes de derivades operant sobre $Z_c(J)$, o el que és el mateix, substituir en aquella equació els propagadors que hi intervenen per les seves corresponents parts connectades. Treballarem amb aquests propagadors connectats en tot el desenvolupament posterior del formalisme, i deixant a part els avantatges que suposa el seu tractament, apuntats ja breument, el seu ús ens serà de gran utilitat quan en el capítol següent introduirem la noció de funcions vèrtex.

Per acabar, i a tall d'exemple, escriguem les parts connectades corresponents als propagadors amb un menor nombre de variables. Així

$$\langle q^{\mu_1}(t_1)\rangle_c = \langle q^{\mu_1}(t_1)\rangle \tag{25}$$

$$\langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_2}(t_2)\rangle_c = \langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_2}(t_2)\rangle - \langle q^{\mu_1}(t_1)\rangle\langle q^{\mu_2}(t_2)\rangle \tag{26}$$

$$\begin{aligned}\langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_2}(t_2)\, q^{\mu_3}(t_3)\rangle_c &= \langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_2}(t_2)\, q^{\mu_3}(t_3)\rangle - \langle q^{\mu_1}(t_1)\rangle\langle q^{\mu_2}(t_2)\, q^{\mu_3}(t_3)\rangle - \\ &- \langle q^{\mu_2}(t_2)\rangle\langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_3}(t_3)\rangle - \langle q^{\mu_3}(t_3)\rangle\langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_2}(t_2)\rangle + 2\langle q^{\mu_1}(t_1)\rangle\langle q^{\mu_2}(t_2)\rangle\langle q^{\mu_3}(t_3)\rangle\end{aligned} \tag{27}$$

o invertint els desenvolupaments anteriors

$$\langle q^{\mu_1}(t_1)\rangle = \langle q^{\mu_1}(t_1)\rangle_c \tag{28}$$

$$\langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_2}(t_2)\rangle = \langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_2}(t_2)\rangle_c + \langle q^{\mu_1}(t_1)\rangle\langle q^{\mu_2}(t_2)\rangle \tag{29}$$

$$\begin{aligned}\langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_2}(t_2)\, q^{\mu_3}(t_3)\rangle &= \langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_2}(t_2)\, q^{\mu_3}(t_3)\rangle_c + \langle q^{\mu_1}(t_1)\rangle\langle q^{\mu_2}(t_2)\, q^{\mu_3}(t_3)\rangle_c + \\ &+ \langle q^{\mu_2}(t_2)\rangle\langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_3}(t_3)\rangle_c + \langle q^{\mu_3}(t_3)\rangle\langle q^{\mu_1}(t_1)\, q^{\mu_2}(t_2)\rangle_c + \langle q^{\mu_1}(t_1)\rangle\langle q^{\mu_2}(t_2)\rangle\langle q^{\mu_3}(t_3)\rangle\end{aligned} \tag{30}$$

Finalment assenyalem que en llenguatge de probabilitats, els propagadors connectats són als propagadors, allò que els cumulants són als moments d'una variable aleatòria. En Meeron (1957) i en Stratonovich (1963) poden trobar-se expressions més generals que les anteriors per a ordres superiors.

1.3 EQUACIÓ DINÀMICA PER ALS VALORS MITJANS.

Primerament ens convé introduir unes funcions de $J(\tau)$, relacionades amb els propagadors connectats introduïts en la secció anterior, mitjançant

$$G(\mu_m,t_m;\dots;\mu_j,t_j;\dots;\mu_1,t_1) \equiv \frac{\delta^m Z_c(J)}{\delta J_{\mu_m}(t_m)\dots\delta J_{\mu_j}(t_j)\dots\delta J_{\mu_1}(t_1)} \tag{31}$$

que comparant amb (23) observem que verifiquen

$$G(\mu_m,t_m;\dots;\mu_j,t_j;\dots;\mu_1,t_1)\Big|_{J=0} = \langle q^{\mu_m}(t_m)\dots q^{\mu_j}(t_j)\dots q^{\mu_1}(t_1)\rangle_c \tag{32}$$

En la definició (31) hem relaxat manifestament la notació estrictament covariant mantinguda fins ara, cosa que proposem per comoditat. Precisem també que no hi ha d'haver cap mena de confusió entre les funcions $G_{(m)}$ introduïdes aquí i la funció de correlació $\mathcal{G}$ definida abans. Efectivament i a partir de les seves definicions respectives serà

$$\mathcal{G}^{\mu_1\mu_2}(t_1,t_2) = G(\mu_1,t_1;\mu_2,t_2)\big|_{J=0} + G(\mu_1,t_1)\big|_{J=0}\,G(\mu_2,t_2)\big|_{J=0} \tag{33}$$

En aquest sentit, el símbol emprat per a caracteritzar la funció de correlació ens haurà de recordar el seu caràcter no estrictament connectat.

Procedim ara a expressar (19) en termes de les funcions $G(\mu_m,t_m;\dots;\mu_1,t_1)$. Abans però, dividim els dos membres de (19) per $Z(J)$.

$$D_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial t'}+\lambda_{(\mu)}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t'}-\lambda_{(\nu)}\right)\frac{1}{Z(J)}\frac{\delta Z(J)}{\delta J_\nu(t')} + \Gamma_{\mu\rho\tau\alpha\sigma\lambda}\frac{1}{Z(J)}\frac{\delta^5 Z(J)}{\delta J_\rho(t')\dots\delta J_\lambda(t')} +$$

$$+\Gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}\frac{1}{Z(J)}\frac{\delta^3 Z(J)}{\delta J_\alpha(t')\dots\delta J_\lambda(t')} + \mathcal{F}_{\mu\alpha\sigma\lambda}\frac{1}{Z(J)}\frac{\delta^2}{\delta J_\sigma(t')\delta J_\lambda(t')}\frac{d}{dt'}\frac{\delta Z(J)}{\delta J_\alpha(t')} + J_\mu(t') = 0 \tag{34}$$

Emprant les funcions $G_{(m)}$ definides anteriorment, on el subíndex entre parèntesi precisa el número dels seus arguments quan aquests no s'hi indiquen explícitament,

$$\frac{1}{Z(J)} \frac{\delta^5 Z(J)}{\delta J_\rho(t') \cdots\cdots \delta J_\lambda(t')} = G(\rho,t';\gamma,t';\alpha,t';\sigma,t';\lambda,t') +$$
$$+ G(\rho,t';\gamma,t';\alpha,t';\sigma,t')\, G(\lambda,t') + \cdots +$$
$$+ G(\rho,t';\gamma,t';\alpha,t')\, G(\sigma,t';\lambda,t') + \cdots +$$
$$+ G(\rho,t';\gamma,t';\alpha,t')\, G(\sigma,t')\, G(\lambda,t') + \cdots +$$
$$+ G(\rho,t';\gamma,t')\, G(\alpha,t';\sigma,t')\, G(\lambda,t') + \cdots +$$
$$+ G(\rho,t';\gamma,t')\, G(\alpha,t')\, G(\sigma,t')\, G(\lambda,t') + \cdots +$$
$$+ G(\rho,t')\, G(\gamma,t')\, G(\alpha,t')\, G(\sigma,t')\, G(\lambda,t') \qquad (35)$$

on els punts suspensius indiquen els termes deduïbles de l'explícitament escrit per permutacions dels arguments de les funcions $G_{(m)}$, amb el benentès que no es consideraran diferents aquells termes que difereixin per permutacions dels arguments interiors d'una o més d'una de les funcions $G_{(m)}$, ni tampoc aquells que difereixin per l'ordre de col.locació d'aquelles funcions. És un senzill problema d'anàlisi combinatòria deduir que existeixen un total de cinc termes corresponents a la partició $G_{(4)}\ G_{(1)}$; deu termes per a $G_{(3)}\ G_{(2)}$; i també deu termes per a $G_{(3)}\ G_{(1)}\ G_{(1)}$; quinze termes per a $G_{(2)}\ G_{(2)} G_{(1)}$; i finalment deu termes per a $G_{(2)}\ G_{(1)}\ G_{(1)}\ G_{(1)}$.

Per altra banda

$$\frac{1}{Z(J)} \frac{\delta^3 Z(J)}{\delta J_\alpha(t')\, \delta J_\sigma(t')\, \delta J_\lambda(t')} = G(\alpha,t';\sigma,t';\lambda,t') +$$
$$+ G(\alpha,t';\sigma,t')\, G(\lambda,t') + G(\alpha,t';\lambda,t')\, G(\sigma,t') + G(\sigma,t';\lambda,t')\, G(\alpha,t')$$
$$+ G(\alpha,t')\, G(\sigma,t')\, G(\lambda,t') \qquad (36)$$

Calculem ara el terme que conté la derivada temporal en (34)

$$\frac{1}{Z(J)} \frac{\delta^2}{\delta J_\sigma(t')\delta J_\lambda(t')} \frac{d}{dt'} \frac{\delta Z(J)}{\delta J_\alpha(t')} = \frac{1}{Z(J)} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\delta^3 Z(J)}{\delta J_\sigma(t')\,\delta J_\lambda(t')\,\delta J_\alpha(t)}\Big|_{t=t'} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{Z(J)} \frac{\delta^3 Z(J)}{\delta J_\sigma(t')\,\delta J_\lambda(t')\,\delta J_\alpha(t)}\Big|_{t=t'} \tag{37}$$

i mitjançant (36)

$$= \frac{\partial}{\partial t}\left[G(\sigma,t';\lambda,t';\alpha,t) + G(\sigma,t';\lambda,t')\,G(\alpha,t) + \dots + G(\sigma,t')\,G(\lambda,t')\,G(\alpha,t) \right]\Big|_{t=t'} \tag{38}$$

Si substituïm (35), (36) i (38) en (34) obtenim

$$D_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{\mu\mu}'\right)\left(\frac{\partial}{\partial t'} - \lambda_{\nu\nu}\right) G(\nu,t') + \gamma_{\mu\rho\gamma\alpha\sigma\lambda}\left[G(\rho,t';\gamma,t';\alpha,t';\sigma,t';\lambda,t') + \dots + \right.$$

$$\left. + G(\rho,t')\,G(\gamma,t')\,G(\alpha,t')\,G(\sigma,t')\,G(\lambda,t') \right] + \gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}\left[G(\alpha,t';\sigma,t';\lambda,t') + \dots + G(\alpha,t')\,G(\sigma,t')\,G(\lambda,t') \right] +$$

$$+ \Upsilon_{\mu\alpha\sigma\lambda} \frac{\partial}{\partial t}\left[G(\sigma,t';\lambda,t';\alpha,t) + \dots + G(\sigma,t')\,G(\lambda,t')\,G(\alpha,t) \right]\Big|_{t=t'} + J_\mu(t') = 0 \tag{39}$$

En l'equació anterior mantenim el conveni que índexs repetits van sumats. Insistint en la qüestió de la notació, ens agradaria ara, canviar-la lleugerament, de tal manera que s'hi inclogui també una integració sobre la variable temporal, quan considerem el temps com a índex repetit. En altres mots, definirem uns nous índexs, notats amb números i que contindran una component discreta, α, β, etc., i una de contínua que correspon a la variable temporal. Amb això adoptarem el conveni segons el qual índexs numèrics repetits n'indicaran la suma sobre la part discreta i la integració sobre el temps. Com a exemple, considerem el terme de (39)

$$\gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}\, G(\alpha,t';\sigma,t';\lambda,t') \equiv \sum_{\alpha,\sigma,\lambda} \gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}\, G(\alpha,t';\sigma,t';\lambda,t') = \sum_{\alpha,\sigma,\lambda} \int dt_2\, dt_3\, dt_4\; \gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}\, \delta(t'-t_2)\,\delta(t'-t_3)\,\delta(t'-t_4)\; G(\alpha,t_2;\sigma,t_3;\lambda,t_4) \tag{40}$$

Notant

$$\mu,t' \equiv 1 \quad ; \alpha,t_2 \equiv 2 \; ; \sigma,t_3 \equiv 3 \quad ; \lambda,t_4 \equiv 4 \tag{41}$$

i definint

$$\gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}\, \delta(t'-t_2)\,\delta(t'-t_3)\,\delta(t'-t_4) \equiv \gamma_{1234} \tag{42}$$

escriurem aquell terme com

$$\sum_{\alpha,\sigma,\lambda} \gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}\, G(\alpha,t';\sigma,t';\lambda,t') \equiv \gamma_{1234}\, G(234) \tag{43}$$

Per a expressar totalment (39) amb aquesta nova notació, hem d'introduir dos parells d'índexs nous

$$\rho,t_5 \equiv 5 \qquad ; \; \tau,t_6 \equiv 6 \tag{44}$$

i redefinir els potencials $\gamma_{\mu\rho\tau\alpha\sigma\lambda}$ i $\digamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}$ anàlogament a (42). D'aquesta manera introduïm

$$\gamma_{\mu\rho\tau\alpha\sigma\lambda}\, \delta(t'-t_5)\,\delta(t'-t_6)\,\delta(t'-t_2)\,\delta(t'-t_3)\,\delta(t'-t_4) \equiv \gamma_{156234} \tag{45}$$

$$\digamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}\, \delta(t'-t_2)\,\delta(t'-t_3)\,\delta(t'-t_4) \equiv \digamma_{1234} \tag{46}$$

i de manera similar

$$J_\mu(t') \equiv J(1) \tag{47}$$

$$D_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \lambda_{\mu}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t'} - \lambda_{\nu}\right)\delta(t'-t_2) \equiv \hat{\Lambda}(12) \tag{48}$$

Tenint en compte el caràcter mut de l'índex ν en el primer terme de (39), i també la simetria enfront a permutacions dels índexs interiors per a les funcions $G_{(m)}$, deduïble directament de la seva definició (31), i amb els potencials definits a (42), (45) i (46) juntament amb (47) i (48), reescrivim (39) en la forma

$$\hat{\Lambda}(12)G(2)+\gamma_{156234}\left[G(56234)+\ldots+G(5)G(6)G(2)G(3)G(4)\right] + \\ +\gamma_{1234}\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right] + \digamma_{1234}\,\partial/\partial t_2\left[G(234)+\ldots+ \\ +G(2)G(3)G(4)\right] +J(1) = 0 \tag{49}$$

que encara pot ser escrita de manera més ordenada, si tenim en compte el caràcter mut de tots els arguments, exceptuant l'1, com

$$\hat{\Lambda}(12)G(2)+\gamma_{123456}\left[G(23456)+\ldots+G(2)G(3)G(4)G(5)G(6)\right] + \\ +\gamma_{1234}\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right]+\digamma_{1234}\,\partial/\partial t_2\left[G(234)+\ldots+\right.$$

$+G(2)G(3)G(4)\Big] + J(1) = 0$ (50)

Un cop arribats a aquest punt, observem que contrariament al que ocorre amb les funcions $G_{(m)}$, els potencials introduïts segons (42),(45) i (46) no són simètrics sota permutacions dels seus arguments. Per a fer més fàcil un desenvolupament posterior del formalisme, resulta convenient de simetritzar aquells potencials respecte als índexs que es contreuen amb les funcions $G_{(m)}$ respectives. Per això haurem de tenir en compte les definicions de les seves parts independents del temps donades en (15),(16) i (17), juntament amb les simetries que de fet ja posseeixen com a conseqüència de les pròpies de $\Gamma^{\mu}_{\alpha\beta\gamma}$ i $D_{\mu\nu}$. D'acord amb el que acabem de dir, i simetritzant el potencial Γ_{123456} pel que fa a permutacions qualssevol dels seus índexs muts (2,...,6), escriurem el terme corresponent en (50) en la forma

$$\Gamma_{123456}\Big[G(23456)+\ldots+G(2)G(3)G(4)G(5)G(6)\Big] = 1/10\,(\Gamma_{123456}+\Gamma_{124356}+\Gamma_{125346}+\Gamma_{126345}+\Gamma_{134256}+\Gamma_{135246}+\Gamma_{136245}+\Gamma_{145236}+\Gamma_{146235}+\Gamma_{156234})\,\Big[G(23456)+\ldots+G(2)\ldots G(6)\Big] \qquad (51)$$

Adonem-nos que les contribucions escrites són les úniques rellevants, car de (15) és immediat comprovar-ne la simetria de $\Gamma_{\mu\sigma\lambda\alpha\beta\gamma}$ respecte dels tres primers índexs entre si, i dels tres segons igualment entre ells; resulta també manifestament invariant enfront a una transposició global entre el grup dels tres primers índexs i els que constitueixen la resta.

$$\Gamma_{\mu\sigma\lambda\alpha\beta\gamma} = \Gamma_{\mu\lambda\sigma\alpha\beta\gamma} = \cdots = \Gamma_{\mu\sigma\lambda\beta\alpha\gamma} = \cdots = \Gamma_{\mu\lambda\sigma\beta\alpha\gamma} = \cdots = \Gamma_{\alpha\beta\gamma\mu\sigma\lambda} \qquad (52)$$

Per la seva banda $\Gamma_{\mu\nu\sigma\lambda}$ és clarament invariant davant d'una transposició dels dos darrers índexs

$$\Gamma_{\mu\nu\sigma\lambda} = \Gamma_{\mu\nu\lambda\sigma} \qquad (53)$$

i finalment $\mathcal{F}_{\mu\nu\sigma\lambda}$ presenta la mateixa simetria que $\gamma_{\mu\nu\sigma\lambda}$.

A partir de (51) definim doncs el potencial simetritzat corresponent a γ_{123456} com

$$\tilde{\gamma}(123456) \equiv 1/10\left[\gamma_{123456}+\gamma_{124356}+\cdots+\gamma_{156234}\right] \qquad (54)$$

amb la qual cosa finalment

$$\gamma_{123456}\left[G(23456)+\ldots+G(2)\ldots G(6)\right]=\tilde{\gamma}(123456)\left[G(23456)+\ldots+G(2)\ldots G(6)\right] \qquad (55)$$

Idènticament procediríem amb els termes que resten en (50). Així

$$\gamma_{1234}\left[G(234)+\ldots G(2)G(3)G(4)\right]=1/3\,(\gamma_{1234}+\gamma_{1324}+\gamma_{1423})\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right] \qquad (56)$$

i definint el potencial corresponent simetritzat com

$$\tilde{\gamma}(1234)\equiv 1/3\,(\gamma_{1234}+\gamma_{1324}+\gamma_{1423}) \qquad (57)$$

expressem (56) en la forma

$$\gamma_{1234}\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right]=\tilde{\gamma}(1234)\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right] \qquad (58)$$

Hem de procedir amb més prudència per al terme en $\mathcal{F}_{1234}$. En primer lloc integrant per parts, i tenint en compte la definició de $\mathcal{F}_{1234}$ en (46), no és difícil d'establir

$$\mathcal{F}_{1234}\,\partial/\partial t_2\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right]=(-\partial/\partial t_2\mathcal{F}_{1234})\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right] \qquad (59)$$

i simetritzant idènticament a com ho féiem en (57)

$$\mathcal{F}_{1234}\,\partial/\partial t_2\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right]=-1/3(\partial/\partial t_2\mathcal{F}_{1234}+\partial/\partial t_3\mathcal{F}_{1324}+\partial/\partial t_4\mathcal{F}_{1423})\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right] \qquad (60)$$

cosa que permet de definir un nou potencial a quatre punts:

$$\tilde{\mathcal{F}}(1234)\equiv -1/3(\partial/\partial t_2\mathcal{F}_{1234}+\partial/\partial t_3\mathcal{F}_{1324}+\partial/\partial t_4\mathcal{F}_{1423}) \qquad (61)$$

amb la qual cosa (60) es converteix en

$$\mathcal{F}_{1234}\,\partial/\partial t_2\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right]=\tilde{\mathcal{F}}(1234)\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right] \qquad (62)$$

Tenint en compte totes les contribucions en (50) obtenim

$$\hat{\Lambda}(12)G(2)+\gamma(123456)\left[G(23456)+..+G(2)..G(6)\right]+\tilde{\gamma}(1234)\left[G(234)+..+ +G(2)G(3)G(4)\right]+\tilde{\mathcal{F}}(1234)\left[G(234)+..+G(2)G(3)G(4)\right]+J(1)=0 \tag{63}$$

que podem encara fer més compacta, redefinint un potencial de quatre punts (1234) com la suma de $\tilde{\gamma}(1234)$ i $\tilde{\mathcal{F}}(1234)$:

$$\gamma(1234)=\tilde{\gamma}(1234)+\tilde{\mathcal{F}}(1234) \tag{64}$$

i (63) esdevé

$$\hat{\Lambda}(12)G(2)+\gamma(123456)\left[G(23456)+..+G(2)..G(6)\right]+\gamma(1234)\left[G(234)+ +...+G(2)G(3)G(4)\right]+J(1)=0 \tag{65}$$

Ara ja podem explicitar els punts suspensius que apareixen en les expressions anteriors, sense cap mena de risc d'ocupar massa línies. Efectivament, aprofitant un com més el caràcter mut dels arguments de les funcions $G_{(m)}$, així com la simetria dels potencials $\gamma_{(4)}$ i $\gamma_{(6)}$ respecte a aquests mateixos índexs muts, és molt facil d'adonar-se que totes le contribucions pertanyents a la mateixa partició en els desenvolupaments (35) i (36) tenen idènticament el mateix valor, i per tant en (65) escriurem aquells desenvolupaments indicant un sol terme per a cada una de les particions, juntament amb un factor numèric que tingui en compte la seva degeneració. Així

$$\gamma(123456)\left[G(23456)+...+G(2)..G(6)\right] = \gamma(123456)\left[G(23456)+ +5\ G(2345)G(6)+10\ G(234)G(56)+10\ G(234)G(5)G(6)+15\ G(23) G(45)G(6)+10\ G(23)G(4)G(5)G(6)+G(2)G(3)G(4)G(5)G(6)\right] \tag{66}$$

i corresponentment

$$\gamma(1234)\left[G(234)+..+G(2)G(3)G(4)\right]=\gamma(1234)\left[G(234)+3\ G(23)G(4)+ G(2)G(3)G(4)\right] \tag{67}$$

amb que substituint en (65) arribem finalment a

$$\hat{\Lambda}(12)G(2)+\gamma(123456)\left[G(23456)+5\ G(2345)G(6)+10\ G(234)G(56)+ 10\ G(234)G(5)G(6)+15\ G(23)G(45)G(6)+10\ G(23)G(4)G(5)G(6)+G(2) G(3)G(4)G(5)G(6)\right]+\gamma(1234)\left[G(234)+3\ G(23)G(4)+G(2)G(3)G(4)\right]+ +J(1)=0 \tag{68}$$

que és l'equació que cercavem. Fixem-nos que és valida independentment del valor de J(1). En particular si fem J(1)=0, haurem obtingut una llei d'evolució dinàmica per al valor mitjà de qualsevol de les variables macroscòpiques, en funció de les parts connectades de mitjanes on hi intervénen més d'una variable. Per altra banda, si l'equació esmentada la suposem implícitament considerada en $J(1)=0$, ens servirà com a punt de partida per a desenvolupar una teoria pertorbativa no basada en l'ús de propagadors lliures, tal com veiérem anteriorment, sinó que considerarem les parts connevtades dels propagadors complets o vestits, en termes dels quals està escrit tot aquest formalisme.

1.4 OPERADOR AUTOENERGIA. EQUACIÓ DE DYSON.

Donada la importància que té l'avaluació de la funció de correlació per al coneixement estocàstic d'un sistema, serà bo intentar d'establir a partir de l'equació d'evolució temporal per a $G_{(1)}$, (68), la corresponent a $G_{(2)}$. Avancem d'antuvi que arribarem a una equació de Dyson, ben coneguda en el context de la Teoria Quàntica de Camps (Fetter i Walecka (1971)), i també etapa prèvia per la que passen en el formalisme MSR, i De Dominicis i Martin (1964a), en la construcció de teories pertorbatives renormalitzades anàlogues a la que aquí es pretén d'establir.

Per això derivem funcionalment quant a la font exterior l'equació (68) i emprarem la propietat que l'acció d'una tal derivada sobre una funció qualsevol $G_{(m)}$ incrementa en un dels seus arguments. Així en general

$$G(\mu_m,t_m;\mu_{m-1},t_{m-1};\dots;\mu_1,t_1) = \delta G(\mu_{m-1},t_{m-1};\dots;\mu_1,t_1) \,/\, \delta J\mu_m(t_m) \qquad (69)$$

tal i com es pot deduir directament de (31). Derivem doncs funcionalment respecte a $J(7)$, amb la qual cosa establim

$\lambda(12)G(27)+\Upsilon(123456)[G(234567)+5\ G(23457)G(6)+5\ G(2345)G(67)+$
$+10\ G(2347)G(56)+10\ G(234)G(567)+10\ G(2347)G(5)G(6)+20\ G(234)$
$G(57)G(6)+30\ G(237)G(45)G(6)+15\ G(23)G(45)G(67)+10\ G(237)$

$$G(4)G(5)G(6)+30\ G(23)G(47)G(5)G(6)+5\ G(27)G(3)G(4)G(5)G(6)\Big]$$
$$+\ \Gamma(1234)\Big[G(2347)+3\ G(237)G(4)+3\ G(23)G(47)+3\ G(27)G(3)G(4)\Big]$$
$$+\ \delta(17) = 0 \tag{70}$$

on hem emprat la simetries de $\Gamma_{(6)}$ y de $\Gamma_{(4)}$. Per a arribar finalment a una equació tipus Dyson, només ens resta per transformar (70) de forma que apareixi explícitament com a factor una funció $G_{(2)}$. Per això fem com a exemple, la transformació necessària en un dels termes de (70)

$$\Gamma(123456)G(234567)=\Gamma(1\bar{2}3456)G(\bar{2}34567)G^{-1}(72)G(27) \tag{71}$$

on hem introduit la funció recíproca o inversa $G^{-1}(72)$, de forma que satisfaci

$$G^{-1}(72)G(27) = \delta(77) \tag{72}$$

Fent igual amb cadascun dels termes de (70), arribaríem finalment a escriure-la com

$$\hat{\Lambda}(12)G(27)+\Gamma(1\bar{2}3456)\Big[G(\bar{2}34567)G^{-1}(72)+5\ G(\bar{2}345\bar{7})G(6)G^{-1}(72)$$
$$+5\ G(\bar{2}345)\delta(62)+10\ G(\bar{2}34\bar{7})G(56)G^{-1}(72)+10\ G(\bar{2}34)G(56\bar{7})$$
$$G^{-1}(72)+10\ G(\bar{2}34\bar{7})G(5)G(6)G^{-1}(72)+20\ G(\bar{2}34)G(6)\delta(52)+$$
$$+30\ G(\bar{2}3\bar{7})G(45)G(6)G^{-1}(72)+15\ G(\bar{2}3)G(45)\delta(62)+10\ G(\bar{2}3\bar{7})$$
$$G(4)G(5)G(6)G^{-1}(72)+30\ G(\bar{2}3)G(5)G(6)\delta(42)+5\ G(3)G(4)G(5)$$
$$G(6)\delta(\bar{2}2)\Big]\ G(27)+\Gamma(1\bar{2}34)\Big[G(\bar{2}34\bar{7})G^{-1}(72)+3\ G(\bar{2}3\bar{7})G(4)$$
$$G^{-1}(72)+3\ G(\bar{2}3)\delta(42)+3\ G(3)G(4)\delta(\bar{2}2)\Big]\ G(27)+\delta(17) = 0 \tag{73}$$

Definint l'operador autoenergia $\Sigma(12)$ a partir de (73) mitjançant

$$\begin{aligned}\Sigma(12) \equiv\ & \Upsilon(1\bar{2}3456)\big[G(\bar{2}34567\bar{7})G^{-1}(\bar{7}2)+5\ G(\bar{2}3457\bar{7})G(6)G^{-1}(\bar{7}2)+ \\ & +5\ G(\bar{2}345)\delta(62)+10\ G(\bar{2}347\bar{7})G(56)G^{-1}(\bar{7}2)+10\ G(\bar{2}34)G(56\bar{7}) \\ & G^{-1}(\bar{7}2)+10\ G(\bar{2}34\bar{7})G(5)G(6)G^{-1}(\bar{7}2)+20\ G(\bar{2}34)G(6)\delta(52)+30 \\ & G(\bar{2}3\bar{7})G(45)G(6)G^{-1}(\bar{7}2)+15\ G(\bar{2}3)G(45)\delta(62)+10\ G(\bar{2}3\bar{7})G(4) \\ & G(5)G(6)G^{-1}(\bar{7}2)+30\ G(\bar{2}3)G(5)G(6)\delta(42)+5\ G(3)G(4)G(5)G(6) \\ & \delta(\bar{2}2)\big]+\Upsilon(1\bar{2}34)\big[G(\bar{2}34\bar{7})G^{-1}(\bar{7}2)+3\ G(\bar{2}3\bar{7})G(4)G^{-1}(\bar{7}2)+3\ G(\bar{2}3) \\ & \delta(42)+3\ G(\bar{3})G(4)\delta(\bar{2}2)\big]\end{aligned} \qquad (74)$$

i introduint la funció inversa del propagador lliure $G_0^{-1}(1;2)$, per mitjà de la identitat

$$-\hat{\Lambda}(12) \equiv G_0^{-1}(12) \qquad (75)$$

la (73) admet una expressió extraordinàriament més compacta com

$$-G_0^{-1}(12)G(27) + \Sigma(12)G(27) + \delta(17) = 0 \qquad (76)$$

que encara ens recordarà més una equació de Dyson si la reescrivim com

$$G_0^{-1}(12)G(27)=\delta(17) + \Sigma(12)G(27) \qquad (77)$$

i admet a més, altres múltiples formes com les que donem a continuació, sense explicitar-ne els arguments

$$\begin{aligned} G^{-1} &= G_0^{-1} - \Sigma \\ G &= G_0 + G_0\Sigma G \end{aligned} \qquad (78)$$

En realitat, i per a ser més precisos, probablement hauríem de limitar el nom d'equació de Dyson a l'esquematitzada per la segona en (78), mentre que l'equació integrodiferencial (77) correspondria més aviat a equacions del tipus de Baym-Kadanoff (1962) usuals en teories quàntiques.

Assenyalem que la (77) és un cop més una equació vàlida tot i J(1) no ser idènticament nul.la, encara que lògicament només serà una equació dinàmica per a magnituds físicament reals quan anul.lem aquella. Per altra banda, l'operador autoenergia $\sum$, o operador massa, com se'l designa a vegades, depèn de J(1) implícitament a través de les funcions $G_{(m)}$.

Ja per acabar indiquem que és del tot adequat notar l'operador $\hat{\Lambda}$ com G_0^{-1}, tal com es proposa a (75), car si tenim en compte que per a un sistema lliure $\gamma_{(4)}$ i $\gamma_{(6)}$ seran idènticament nuls, amb la qual cosa passarà el mateix amb Σ , i per això escriuríem (73) en aquest cas com

$$\hat{\Lambda}(12)G_0(27) = -\delta(17) \tag{79}$$

traient d'aquí la notació emprada.

2. INCORPORACIÓ DE LES FUNCIONS VÈRTEX AL FORMALISME.

2.1 FUNCIONS VÈRTEX: INTRODUCCIÓ.

Si en 1.2 deiem que la presència de diagrames desconnectats era directament responsable d'una complexitat notable en els desenvolupaments diagramàtics de qualsevol propagador, sens que aportessin, per això, informació addicional rellevant, aquí insistirem en un fet que té unes conseqüències semblants. Aquesta circumstància consisteix en la presència dels anomenats diagrames reduïbles a una partícula; és a dir, diagrames tals que poden separar-se en dos tallant només una línia interior, i cadascuna de les parts resultants conté punts exteriors del diagrama original. Per tal de simplificar tot el nostre formalisme, ens podríem preguntar si considerant només els gràfics que fossin irreduïbles a una partícula (1PI), la qual cosa disminueix considerablement el nombre de diagrames per considerar, podríem reconstruir sistemàticament qualsevol desenvolupament pertorbatiu en què estiguéssim interessats. La resposta és que no únicament poden reescriure's els desenvolupaments esmentats en termes únicament de parts (1PI), sinó que aquesta forma de procedir és molt més elegant, i pot considerar-se fonamental per a l'estudi de molts altres aspectes, en particular, posem per exemple, qüestions de renormalització. Aleshores doncs, anomenarem funcions vèrtex a aquestes parts irreduïbles d'una partícula. (Amit (1978)). Com a exemple d'un diagrama reduïble a una particula podríem considerar

que apareixeria en ordre quatre del desenvolupament diagramàtic corresponent a la funció de correlació en presència de pertorbació quadràtica.

En el paràgraf anterior afirmàvem que si ressumàvem convenientment totes aquelles contribucions (1PI) que aparaguin en el desenvolupament pertorbatiu d'un propagador, aquest resta determinat amb precisió. Cal que ho vegem en un cas concret. Considerem l'operador autoenergia introduït en 1.4. És ben sabut que aquest operador admet una representació diagramàtica on intervenen tots els gràfics irreduïbles a una partícula associats al propagador connectat de dos punts exteriors. Per altra banda aquest últim satisfà una equació íntegro-diferencial del tipus (1.77), en què el nucli de la part integral és precisament l'operador autoenergia. Així doncs, un cop conegut aquest operador, o equivalentment totes les contribucions (1PI) del propagador connectat de dos punts, podrem conèixer aquest darrer, resolent prèviament l'equació íntegro-diferencial corresponent.

El procés de generalització del concepte de funcions vèrtex per a incloure el tractament de qualsevol propagador, sigui quin sigui el nombre dels seus punts exteriors, ens mena a un desenvolupament formal elegant i concís, cosa que pretenem indicar a continuació. Seguirem bàsicament les idees donades en la referència d'Amit (1978), car entenem que presenta els desenvolupaments necessaris de forma breu i precisa.

2.2 FUNCIONAL GENERADOR DE LES FUNCIONS VÈRTEX $\Gamma(G_{(1)})$.

Abans que res, ens interessa veure si és possible obtenir un funcional generador de les funcions vèrtex, $\Gamma(G_{(1)})$, tal i com abans havíem introduït funcionals generadors per als propagadors i per a les seves parts connectades, $Z(J)$ i $Z_c(J)$ respectivament. En tot el treball que segueix $G_{(1)}$ indicarà de manera abreujada la funció G d'un sol argument

$$G(1)= \delta Z_c(J) /\delta J(1) \qquad (1)$$

En ocasions anteriors ja hem insistit que $G_{(1)}$ i en general les funcions $G_{(m)}$ seran funcions de la font J, i preses en J=0 ens proporcionen les parts totalment connectades dels propagadors corresponents a un nombre igual de punts. En particular, $G_{(1)}|_{J=0}$ sovint es coneix amb el nom de propagador condensat, i no representa més que el valor mitjà d'una de les variables del sistema pres en un instant determinat de la seva evolució

$$G(1)|_{J=0} = q^{\mu_1}(t_1) \qquad (2)$$

on $1 \equiv \mu_1 , t_1$

Definirem el funcional $\Gamma(G_{(1)})$ a través d'una transformació de Legendre a partir de $Z_c(J)$

$$\Gamma(G_{(1)}) \equiv Z_c(J) - J(1)G(1) \qquad (3)$$

on com sempre índexs repetits suposen suma sobre els discrets i suposen integració per als continus. D'acord amb ells escrivim explícitament (3) com

$$\Gamma(G_{(1)}) \equiv Z_c(J) - \sum_{\mu} \int dt_1 J_{\mu}(t_1)\, G(\mu, t_1) \qquad (4)$$

Hem de notar respecte a (3) que en la definició $\Gamma(G_{(1)})$, s'hi ha introduït un canvi de signe pel que fa a la forma com procedeix Amit(1978). Això respon al propòsit d'adequar els nostres resultats als que obtenen De Dominicis i Martin (1964a).

La transformació (3) pot invertir-se i aleshores obtenim sense dificultat

$$\delta\Gamma(G_{(1)})/\delta G(1) \quad = -J(1) \qquad (5)$$

Efectivament, si realitzem aquella derivada funcional tenint en compte (3)

$$\delta\Gamma(G_{(1)})/\delta G(1) = G(2)\delta J(2)/\delta G(1) - G(2)\delta J(2)/\delta G(1) - J(1) = -J(1) \qquad (6)$$

Diferenciem ara funcionalment (1) respecte a G(2)

$$\delta(12) = \delta^2 Z_c(J)/\delta G(2)\delta J(1) = \left(\delta^2 Z_c(J)/\delta J(3)\delta J(1)\right)\delta J(3)/\delta G(2) \qquad (7)$$

Per altra banda a partir de (5)

$$-\delta^2\Gamma(G_{(1)})/\delta G(2)\delta G(3) \;=\delta J(3)/\delta G(2) \qquad (8)$$

i substituint en (7) establim

$$\delta(12)= -\left(\delta^2 Z_c(J)/\delta J(3)\delta J(1)\right) \delta^2\Gamma(G_{(1)})/\delta G(2)\delta G(3) \qquad (9)$$

equació vàlida per a qualsevol valor de la font exterior. L'expressió anterior ens indica a més a més que $\delta^2 Z_c(J)/\delta J^2$ i $\delta^2\Gamma(G_{(1)})/\delta G^2_{(1)}$, són magnituds inverses l'una de l'altra, llevat per un canvi de signe. Per altra banda, si recordem que segons (I.31)

$$\delta^2 Z_c(J)/\delta J(3)\delta J(1) = G(31) \qquad (10)$$

escrivim (9) com

$$\delta(12)= -G(13)\,\delta^2\Gamma(G_{(1)})/\delta G(3)\delta G(2) \qquad (11)$$

d'on i per la definició de funció inversa donada en (I.72), serà

$$-\delta^2\Gamma(G_{(1)})/\delta G(2)\delta G(3) = G^{-1}(23) \qquad (12)$$

que especialitzada per a J=0

$$-\delta^2\Gamma(G_{(1)})/ G(2)\; G(3)|_{J=0} = G^{-1}(23)|_{J=0} \qquad (13)$$

L'equació anterior ens servirà per a definir la funció vèrtex de dos punts, justament com el terme més a l'esquerra de les igualtats, canviat de signe

$$\Gamma_f(23) \equiv \delta^2\Gamma(G_{(1)})/\delta G(2)\delta G(3)|_{J=0} \qquad (14)$$

i segons (13) correspon a l'invers canviat de signe del propagador connectat de dos punts. El subíndex f indica el seu caràcter lliure d'influències de J. Si comparem amb l'equació (I.78) serà

$$\Gamma_f(23)= -G_0^{-1}(23)+\Sigma(23)|_{J=0} \qquad (15)$$

i per tant, deixant a part l'operador G_0^{-1}, resulta manifestament que $\Gamma_{(2),f}$ només involucra contribucions (1PI) a $G_{(2)}$, totes elles contingudes en l'operador autoenergia.

Si novament prenem derivades funcionals en (9) respecte a J(4) obtenim

$$0 = -\frac{\delta^3 Z_c(J)}{\delta J(4)\delta J(3)\delta J(1)} \frac{\delta^2 \Gamma(G_{(1)})}{\delta G(2)\delta G(3)} - \frac{\delta^2 Z_c(J)}{\delta J(3)\delta J(1)} \frac{\delta^3 \Gamma(G_{(1)})}{\delta J(4)\delta G(2)\delta G(3)} \qquad (16)$$

donat que δ (12) sempre és independent del valor de J. Passant a l'altra banda un dels termes, establim.

$$\frac{\delta^3 Z_c(J)}{\delta J(4)\delta J(3)\delta J(1)} \frac{\delta^2 (G_{(1)})}{\delta G(2)\delta G(3)} = -\frac{\delta^2 Z_c(J)}{\delta J(3)\delta J(1)} \frac{\delta^3 \Gamma(G_{(1)})}{\delta J(4)\delta G(2)\delta G(3)} \qquad (17)$$

transformant el terme de la dreta segons

$$-\frac{\delta^2 Z_c(J)}{\delta J(3)\delta J(1)} \frac{\delta^3 \Gamma(G_{(1)})}{\delta G(5)\delta G(2)\delta G(3)} \frac{\delta G(5)}{\delta J(4)} \qquad (18)$$

i emprant (1) l'escrivim

$$\frac{\delta^2 Z_c(J)}{\delta J(3)\delta J(1)} \frac{\delta^3 \Gamma(G_{(1)})}{\delta G(5)\delta G(2)\delta G(3)} \frac{\delta^2 Z_c(J)}{\delta J(4)\delta J(5)} \qquad (19)$$

Substituint en (17)

$$\frac{\delta^3 Z_c(J)}{\delta J(4)\delta J(3)\delta J(1)} \frac{\delta^2 \Gamma(G_{(1)})}{\delta G(2)\delta G(3)} = -\frac{\delta^2 Z_c(J)}{\delta J(3)\delta J(1)} \frac{\delta^3 \Gamma(G_{(1)})}{\delta G(5)\delta G(2)\delta G(3)} \frac{\delta^2 Z_c(J)}{\delta J(4)\delta J(5)} \qquad (20)$$

i prenent-la en J=0, recordant a més a més (13)

$$G(134)|_{J=0}\; G^{-1}(23)|_{J=0} = G(13)|_{J=0} \frac{\delta^3 \Gamma(G_{(1)})}{\delta G(5)\delta G(2)\delta G(3)}\Big|_{J=0} G(54)|_{J=0} \qquad (21)$$

Contraent a ambdós costats de la igualtat amb $G(26)|_{J=0}$ arribem a

$$G(164)|_{J=0} = \frac{\delta^3 \Gamma(G_{(1)})}{\delta G(5)\delta G(2)\delta G(3)}\Big|_{J=0} G(13)|_{J=0} G(54)|_{J=0} G(26)|_{J=0} \qquad (22)$$

i definint

$$\frac{\delta^3 \Gamma(G_{(1)})}{\delta G(5)\delta G(2)\delta G(3)}\Big|_{J=0} \equiv \Gamma_f(523) \qquad (23)$$

ens queda

$$G(164)|_{J=0} = \Gamma_f(523)G(13)|_{J=0}G(62)|_{J=0}G(45)|_{J=0} \quad (24)$$

cosa que podem reescriure tenint en compte la simetria assumida per a les funcions vèrtex deduïble directament de la seva definició (23)

$$G(164)|_{J=0} = \Gamma_f(325)G(13)|_{J=0}G(62)|_{J=0}G(45)|_{J=0} \quad (25)$$

o posant , per comoditat, la funció vèrtex al final

$$G(123)|_{J=0} = G(1\bar{1})|_{J=0}G(2\bar{2})|_{J=0}G(3\bar{3})|_{J=0}\,\Gamma_f(\bar{1}\bar{2}\bar{3}) \quad (26)$$

A la funció $\Gamma_{(3)\,f}$ definida a (23) l'anomenarem vèrtex de tres punts, i directament de (26) concluïm que representa la part (1PI) del propagador connectat de tres punts.

Les definicions anteriors (14) i (23) poden generalitzar-se sense dificultat, i d'aquesta manera introduïrem funcions vèrtex d'un nombre arbitrari d'arguments

$$\Gamma_f(12...m) \equiv \left.\frac{\delta^m \Gamma(G_{(1)})}{\delta G(1)\delta G(2)....\ \delta G(m)}\right|_{J=0} \quad (27)$$

Evidentment, les definicions anteriors permeten d'expressar $\Gamma(G_{(1)})$ en sèrie Taylor, els coeficients dels quals serien precisament $\Gamma_{f\,(m)}$. D'aquesta consideració poden derivar-se interessants arguments relacionats amb qüestions com ruptura espontània de simetria, i altres, que poden veure's tractades en Amit (1978).

Amb els vèrtexs introduïts en (27), el propagador connectat de m punts exteriors amb $m > 3$, admet una expressió en la forma

$$G(12..m)|_{J=0} = G(1\bar{1})|_{J=0} \ ...\ G(m\bar{m})|_{J=0}\,\Gamma_f(\bar{1}\bar{2}..\bar{m}) + Q(12..m) \quad (28)$$

L'equació anterior la interpretem, entenent que el primer terme conté tots els diagrames de $G_{(m)}|_{J=0}$ que únicament poden ser reduïbles a una partícula si es talla una línia exterior, mentre que $Q_{(m)}$ inclou aquells termes que són reduïbles a una partícula per talls interiors. L'aparició d'una contribució tipus $Q_{(m)}$ és una particularitat pròpia de les funcions $G_{(m)}$ amb $m > 3$. Per a $G_{(3)}|_{J=0}$, l'equació anàloga a (28) és (26) i en aquest sentit $Q_{(3)} = 0$. Per a $G_{(2)}$ no hem indicat encara una equació del tipus (28), pero és fàcilment deduïble de (13). Així

$$G(12)|_{J=0} = -G(13)|_{J=0}G(24)|_{J=0}\ \Gamma_f(34) \qquad (29)$$

i per tant tampoc en aquest cas hi apareix cap terme corresponent a $Q_{(2)}$. Indiquem també ara que en $Q_{(m)}$ hi apareixeran justament els propagadors $G_{(2)}|_{J=0}$, acoblats amb vèrtexs amb nombre d'arguments inferior a m. Això correspon clarament al significat atribuït a $Q_{(m)}$ en el paràgraf següent a (28).

Abans de cloure aquesta secció voldríem comentar breument la forma en què les funcions vèrtexs foren introduïdes per De Dominicis i Martin (1964a). Aquests autors defineixen el de dos punts de manera idèntica a l'operador autoenergia

$$\Gamma(12) \equiv \Sigma(21) \qquad (30)$$

i a partir de $\Gamma_{(2)}$ generen la resta per derivació funcional respecte a $G_{(1)}$ de forma idèntica a com nosaltres hem proposat

$$\Gamma(12\ldots m) \equiv \delta/\delta G(m) \ldots\ldots \delta/\delta G(3)\ \Sigma(21) \qquad (31)$$

A partir de (27) i (31) és ben clar que totes dues definicions coincidiran per a $m > 2$, car G_0^{-1} és independent de $G_{(1)}$. La diferència rau únicament en $\Gamma_{(2)}$. Evidentment, l'equació genèrica (28) continuarà essent vàlida en l'esquema de De Dominicis i Martin.

Hem d'assenyalar també que en aquell treball se suposa la presència de fonts exteriors juntament amb els propis potencials del problema, però amb tot, les funcions vèrtex hi figuren definides sense prescriure J=0. De fet si aquí haguéssim donat una definició anàloga per a $\Gamma_{(m)}$, no hauria representat cap mena de dificultat conceptual, i en aquestes circumstàncies representarien les contribucions (1PI) per als propagadors connectats avaluats en presència de la font exterior. No obstant això, fins ara no ho hem fet així, car tal i com s'ha indicat, $J_{(1)}$, per a nosaltres no té significat físic, i únicament suposa un recurs matemàtic per a generar els propagadors reals del sistema, per derivació funcional avaluada en abscència d'aquesta darrera. Hem remarcat també que en altres disciplines afins en què tals procediments són lícits, $J_{(1)}$ podria dotar-se de ple significat, i en aquest cas prendre-la nul.la o no prendre-la-hi correspondria a situacions ben diferents. És sota aquest últim supòsit que entendrem que serà vàlida la generalització de les definicions de $\Gamma_{(m)}$ sense prescriure $J_{(1)}=0$, i així procedirem en la secció següent.

2.3 CÀLCUL DE $Q_{(m)}$.

Podem avançar que un cop introduïts els vèrtexs, la nostra intenció serà de fer-los aparèixer explícitament en l'expressió per a l'operador $\Sigma(12)$ definit en (1.74), a través de la reducció de les funcions $G_{(m)}$ amb $m \geqslant 3$. Observant (1.74) ens adonem immediatament que ens cal avaluar $Q_{(m)}$ amb m = 4,5,6. Aquesta secció, doncs, la hi dediquem.

Per tal que la notació de les funcions $G_{(m)}$ resulti consistent amb la que hem prescrit per a $\Gamma_{(m)}$ ens hi cal introduir una petita modificació. Així notarem

$$G_{(m)}|_{J=0} \equiv G_{(m)\,f} \tag{32}$$

o més explícitament

$$G(12..m)|_{J=0} \equiv G_f(12..m) = \langle q^{\mu_1}(t_1)\ldots q^{\mu_m}(t_m)\rangle_c \qquad \begin{matrix} 1 \equiv \mu_1, t_1 \\ \vdots \\ m \equiv \mu_m, t_m \end{matrix} \tag{33}$$

i d'acord amb ella escrivim, per exemple (26), com

$$G_f(123) = G_f(1\bar{1})G_f(2\bar{2})G_f(3\bar{3})\Gamma_f(\bar{1}\bar{2}\bar{3}) \tag{34}$$

Enllaçant amb el que dèiem al final de 2 ampliem la definició de vèrtexs sense suposar-los avaluats en J=0; així

$$\Gamma(12..m) \equiv \frac{\delta^m \Gamma(G_{(1)})}{\delta G(1)\ldots\ldots\delta G(m)} \tag{35}$$

Tenint present (12), serà segons (35)

$$\Gamma(12) = -G^{-1}(12) \tag{36}$$

i escriurem (15) com

$$\Gamma(12) = -G_0^{-1}(12)+\Sigma(12) \tag{37}$$

on ara Σ (12) seria l'operador autoenergia en presència de fonts exteriors. Anàlogament (29) es convertiria en

$$G(12) = -\, G(13)G(24)\Gamma(34) \tag{38}$$

La generalització de (34) per a $J\neq 0$ és immediata. El procediment és anàleg al que empràrem per arribar a (22).

$$G(123) = G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})\ (\bar{1}\bar{2}\bar{3}) \tag{39}$$

Derivem aquesta darrera respecte a J(4)

$$G(1234) = G(1\bar{1}4)G(2\bar{2})G(3\bar{3})\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}) + G(1\bar{1})G(2\bar{2}4)G(3\bar{3})\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}) + G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3}4)\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}) + G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})\frac{\delta\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3})}{\delta J(4)} \tag{40}$$

Substituint $G_{(3)}$ per (39) i tenint en compte que

$$\frac{\delta\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3})}{\delta J(4)} = G(4\bar{4})\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4}) \tag{41}$$

tindrem per a $G_{(4)}$

$$G(1234) = G(15)G(\bar{1}6)G(47)\ (567)G(2\bar{2})G(3\bar{3})\ (\bar{1}\bar{2}\bar{3})+G(1\bar{1})G(25)\, G(\bar{2}6)G(47)\ (567)G(3\bar{3})\ (\bar{1}\bar{2}\bar{3})+G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(35)G(\bar{3}6)G(47)\ (567)\ (\bar{1}\bar{2}\bar{3})+G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})\ (\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4}) \tag{42}$$

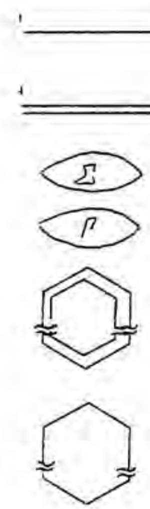
que pot escriure's de forma més adequada canviant oportunament arguments muts.

$$G(1234) = G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})\Big[\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)G(55)\Gamma(\bar{2}\bar{3}5) + \Gamma(\bar{2}\bar{4}5)G(55)\Gamma(\bar{1}\bar{3}5) + \Gamma(\bar{3}\bar{4}5)G(55)\Gamma(\bar{1}\bar{2}5) + \Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4})\Big] \tag{43}$$

i considerada en J=0 adoptaria la meteixa forma amb totes les magnituds afectades del subíndex f. Posant-ne només un globalment, i comparant amb (28) establim $Q_{(4)}$

$$Q(1234) = G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})\Big[\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)G(55)\Gamma(\bar{2}\bar{3}5) + \Gamma(\bar{2}\bar{4}5)G(55)\Gamma(\bar{1}\bar{3}5) + \Gamma(\bar{3}\bar{4}5)G(55)\Gamma(\bar{1}\bar{2}5)\Big]_f \tag{44}$$

Resultarà convenient de disposar d'una representació diagramàtica per a les funcions $G_{(m)}$ i els seus vèrtexs respectius $\Gamma_{(m)}$. Els elements fonamentals en llur construcció seran les funcions $G_{(2)}$ i els vèrtexs $\Gamma_{(m)}$, que representarem mitjançant una doble línia recta les primeres i mitjançant un polígon, els segons, amb un nombre de vèrtexs igual al dels seus arguments. Les funcions $G_{(m)}$ també les representarem per polígons tancats, essent els seus costats representats per línies dobles, per a indicar, primerament el seu caràcter connectat, i en segon lloc, per a indicar llur condició de propagadors del problema complet. Assenyalem, tanmateix, que en tot l'estudi que segueix no s'indicaran en general els índexs no rellevants o muts, i finalment precisem que tot i que s'empraran els mateixos símbols per a representar $G_{(2)}$ i $G_{o(2)}$, que els que prescrivírem en la primera part per a la funció de correlació $\varnothing$ i la seva component lliure $\varnothing_o$, no hauran de confondre's, de cap manera les magnituds que allà i aquí es representen, car no hem d'oblidar que ara treballem únicament amb les parts connectades dels propogadors, mentre que en els capítols I i II no havíem introduït encara aquest concepte. Segons el que hem dit més amunt establim



$G_0(12)$

$G(12)$

$\Sigma(12)$

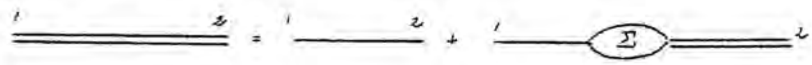
$\Gamma(12)$

$G(12\ldots m)$

$\Gamma(12\ldots m)$

(45)

Diagramàticament la segona de les formes d'equació de Dyson (1.78) apareixeria com

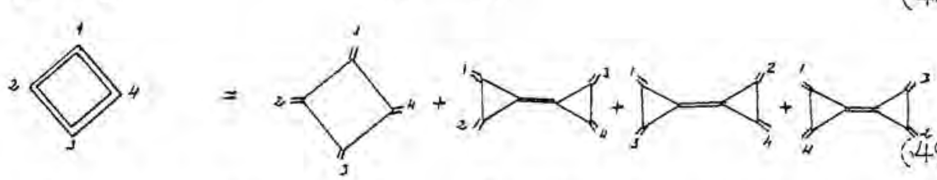


(46)

mentrestant representaríem (38),(39), i (43) en la forma

(47)

(48)



(49)

Procedim ara a obtenir $Q_{(5)}$. Partim per a tal objectiu de (43) i derivem respecte a J(6),

$$\begin{aligned} G(12346) = {} & G(1\bar{1}6)G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})\left[\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)G(5\bar{5})\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{5})+\ldots+\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4}\right. \\ & +G(1\bar{1})G(2\bar{2}6)G(3\bar{3})G(4\bar{4})\left[\quad \text{''} \right. \\ & +G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3}6)G(4\bar{4})\left[\quad \text{''} \right. \\ & +G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4}6)\left[\quad \text{''} \right. \\ & +G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})\left[(G(6\bar{6})\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{6})G(5\bar{5})\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{5})+\right. \end{aligned}$$

$$+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)G(55\bar{6})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)G(55)G(6\bar{6})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5\bar{6})+(\bar{1},\bar{2})+$$
$$+(\bar{1},\bar{3}))+G(6\bar{6})\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4}\bar{6}) \tag{50}$$

on en derivar el claudàtor en (43) s'ha tingut en compte repetidament (41) i on s'ha introduït una notació abreujada

$$(A(12...ij...m)+(i,j)+...)=A(12..ij..m)+A(12..ji..m)+.. \tag{51}$$

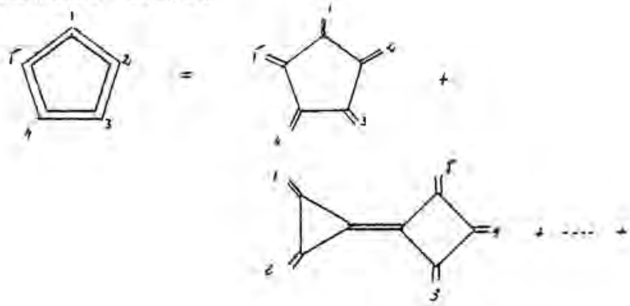
Reagrupant termes semblants i tenint en compte (39)

$$\begin{aligned}G(12346) = {} & G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(6\bar{6})G(7\bar{7})\Big\{\Big(\Gamma(\bar{1}\bar{6}7)\\
& \big[\Gamma(7\bar{4}5)G(5\bar{5})\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{5})+\Gamma(\bar{2}\bar{4}5)G(5\bar{5})\Gamma(7\bar{3}\bar{5})+\Gamma(\bar{3}\bar{4}5)G(5\bar{5})\\
& \Gamma(7\bar{2}\bar{5})+\Gamma(7\bar{2}\bar{3}\bar{4})\big]+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})+(\bar{1},\bar{4})\Big)\Big\}+\\
& +G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(5\bar{5})G(6\bar{6})\Big[\Big(\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{6})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5)+\\
& +\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}5\bar{6})+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})\Big)\Big]+\\
& +G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(5\bar{5})G(6\bar{6})G(7\bar{7})\\
& \Big[\Big(\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)\Gamma(5\bar{6}7)\Gamma(\bar{2}\bar{3}7)+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})\Big)\Big]+\\
& +G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(6\bar{6})\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4}\bar{6})\end{aligned} \tag{52}$$

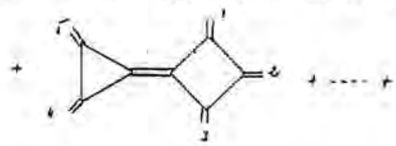
que podem escriure de forma més compacta com

$$\begin{aligned}G(12346) = {} & G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(6\bar{6})\Big\{\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4}\bar{6})+\\
& +G(5\bar{5})\Big[\Big(\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{6})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}5\bar{6})+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})\Big)+\\
& +\Big(\Gamma(\bar{1}\bar{6}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{4}5)+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})+(\bar{1},\bar{4})\Big)\Big]+\\
& +G(5\bar{5})G(7\bar{7})\Big[\Big(\Gamma(\bar{1}\bar{6}7)\Gamma(7\bar{4}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{6}7)\Gamma(\bar{2}\bar{4}5)\\
& \Gamma(7\bar{3}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{6}7)\Gamma(\bar{3}\bar{4}5)\Gamma(7\bar{2}5)+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})+(\bar{1},\bar{4})\Big)+\\
& +\Big(\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)\Gamma(5\bar{6}7)\Gamma(\bar{2}\bar{3}7)+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})\Big)\Big]\Big\}\end{aligned} \tag{53}$$

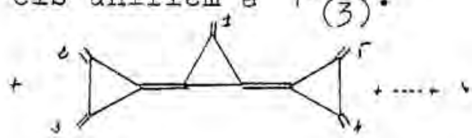
amb la qual cosa $Q_{(5)}$ s'obtindria de l'equació anterior restant-li el terme $\Gamma_{(5)}$. Diagramàticament l'equació anterior seria



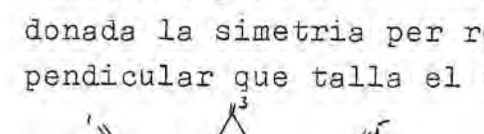
fins a un total de quatre termes corresponents a connectar totes les parelles possibles amb un argument fix sobre els vèrtexs de $\Gamma_{(3)}$.



fins a un total de sis termes corresponents a fixar un argument sobre $\Gamma_{(4)}$ i prendre combinacions possibles en parells de la resta i els uniríem a $\Gamma_{(3)}$.



fins a un total de tres termes corresponents a situar un dels arguments fixat al $\Gamma_{(3)}$ interior i considerant la meitat de les combinacions possibles sobre la resta d'arguments, donada la simetria per reflexió en un pla perpendicular que talla el triangle interior



(54)

fins a un total de dotze termes corresponents a fixar un argument sobre un dels vèrtexs d'un dels triangles exteriors i unir la resta a les posicions lliures, i donada la simetria de $\Gamma_{(3)}$, els dos vèrtexs dels triangle extern restant ens resulten equivalents.

Per a $G_{(6)}$ partirem de (53) i derivarem respecte a J(8)

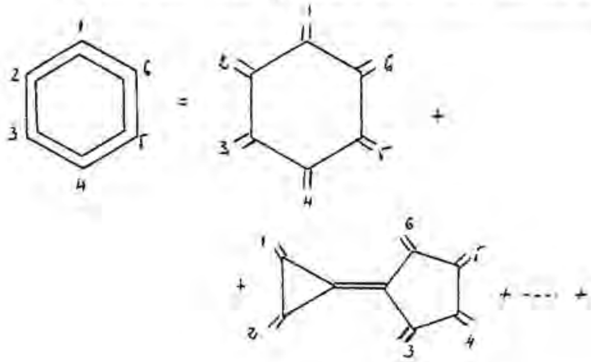
$$
\begin{aligned}
G(123468)=\; & G(1\bar{1}8)G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(6\bar{6})\{\quad\} + G(1\bar{1})G(2\bar{2}8)G(3\bar{3}) \\
& G(4\bar{4})G(6\bar{6})\{\quad\} + G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3}8)G(4\bar{4})G(6\bar{6})\{\quad\} + \\
& G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4}8)G(6\bar{6})\{\quad\} + G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4}) \\
& G(6\bar{6}8)\{\quad\} + G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(6\bar{6})G(8\bar{8}) \\
& \Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4}\bar{6}\bar{8}) + G(1\bar{1})\ldots G(6\bar{6})G(5\bar{5}8)\Big[(\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{6})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5)+\ldots+ \\
& (\bar{1},\bar{3})) + (\Gamma(\bar{1}\bar{6}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{4}5)+\ldots+(\bar{1},\bar{4}))\Big] + G(1\bar{1})G(2\bar{2})\ldots \\
& G(6\bar{6})G(5\bar{5})\Big[(G(8\bar{8})\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{6}\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{6})G(8\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5\bar{8}) \\
& +G(8\bar{8})\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5\bar{6})+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)G(8\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5\bar{6}\bar{8})+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3} \\
& +(G(8\bar{8})\Gamma(\bar{1}\bar{6}5\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{4}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{6}5)G(8\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{4}5\bar{8})+(\bar{1},\bar{2})+ \\
& +(\bar{1},\bar{3})+(\bar{1},\bar{4})\Big] \quad + \\
& +G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(6\bar{6})G(5\bar{5}8)G(7\bar{7})\Big[(\Gamma(\bar{1}\bar{6}7)\Gamma(7\bar{4}5) \\
& \Gamma(\bar{2}\bar{3}5)+\ldots) + (\ldots+(\bar{1},\bar{3}))\Big] + G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(6\bar{6}) \\
& G(5\bar{5})G(7\bar{7}8)\Big[\quad \text{id.}\quad\Big] + \\
& +G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(5\bar{5})G(6\bar{6})G(7\bar{7})\Big[(G(8\bar{8})\Gamma(\bar{1}\bar{6}7\bar{8}) \\
& \Gamma(7\bar{4}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{6}7)G(8\bar{8})\Gamma(7\bar{4}5\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{6}7)\Gamma(7\bar{4}5) \\
& G(8\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5\bar{8})+G(8\bar{8})\Gamma(\bar{1}\bar{6}7\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{4}5)\Gamma(7\bar{3}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{6}7)G(8\bar{8}) \\
& \Gamma(\bar{2}\bar{4}5\bar{8})\Gamma(7\bar{3}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{6}7)\Gamma(\bar{2}\bar{4}5)G(8\bar{8})\Gamma(7\bar{3}5\bar{8})+ \\
& +G(8\bar{8})\Gamma(\bar{1}\bar{6}7\bar{8})\Gamma(\bar{3}\bar{4}5)\Gamma(7\bar{2}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{6}7)G(8\bar{8})\Gamma(\bar{3}\bar{4}5\bar{8})\Gamma(7\bar{2}5 \\
& +\Gamma(\bar{1}\bar{6}7)\Gamma(\bar{3}\bar{4}5)G(8\bar{8})\Gamma(7\bar{2}5\bar{8})+ (\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})+(\bar{1},\bar{4}))+ \\
& +(G(8\bar{8})\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{8})\Gamma(5\bar{6}7)\Gamma(\bar{2}\bar{3}7)+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)G(8\bar{8})\Gamma(5\bar{6}7\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3} \\
& +\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)\Gamma(5\bar{6}7)G(8\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}7\bar{8}) + (\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})\Big]
\end{aligned}
\qquad (55)
$$

on s'ha emprat (41), i tenint en compte (39)

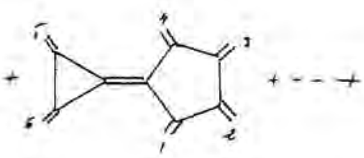
$$G(12468)=G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(6\bar{6})G(8\bar{8})G(9\bar{9})\{(\Gamma(\bar{1}3\bar{9})\Gamma(9\bar{2}\bar{3}\bar{4}\bar{6})+$$
$$\Gamma(\bar{1}8\bar{9})G(5\bar{5})[(\Gamma(9\bar{4}5\bar{6})\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{5})+\Gamma(9\bar{4}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{5}\bar{6})+(9,\bar{2})+(9,\bar{3}))+$$
$$(\Gamma(9\bar{6}\bar{5})\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{4}5)+(9,\bar{2})+(9,\bar{3})+(9,\bar{4}))]+\Gamma(\bar{1}8\bar{9})G(5\bar{5})G(7\bar{7})$$
$$[(\Gamma(96\bar{7})\Gamma(7\bar{4}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{5})+\Gamma(96\bar{7})\Gamma(\bar{2}\bar{4}5)\Gamma(7\bar{3}\bar{5})+\Gamma(96\bar{7})\Gamma(\bar{3}\bar{4}5)$$
$$\Gamma(7\bar{2}\bar{5})+(9,\bar{2})+(9,\bar{3})+(9,\bar{4}))+(\Gamma(9\bar{4}5)\Gamma(56\bar{7})\Gamma(\bar{2}\bar{3}7)+(9,\bar{2})$$
$$+(9,\bar{3}))]+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})+(\bar{1},\bar{4})+(\bar{1},\bar{6}))\}+G(\bar{1}\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3}$$
$$G(4\bar{4})G(6\bar{6})G(8\bar{8})\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4}\bar{6}\bar{8})+G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(5\bar{5})G($$
$$6\bar{6})G(8\bar{8})G(9\bar{9})[(\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{6})\Gamma(\bar{2}\bar{3}9)\Gamma(5\bar{8}\bar{9})+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)\Gamma(5\bar{8}\bar{9})$$
$$\Gamma(\bar{2}\bar{3}9\bar{6})+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3}))+(\Gamma(\bar{1}\bar{6}9)\Gamma(5\bar{8}\bar{9})\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{4}5)+(\bar{1},\bar{2})+$$
$$(1,\bar{3})+(1,\bar{4}))]+G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(5\bar{5})G(6\bar{6})G(8\bar{8})[($$
$$\Gamma(\bar{1}\bar{4}56\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{5})+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{6})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5\bar{8})+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}5\bar{6})+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5$$
$$\Gamma(\bar{2}\bar{3}56\bar{8})+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3}))+(\Gamma(\bar{1}\bar{6}5\bar{8})\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{4}5)+\Gamma(\bar{1}\bar{6}\bar{5})\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{4}5\bar{8}$$
$$+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})+(\bar{1},\bar{4}))]+(G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(5\bar{5})G(6\bar{6}$$
$$G(7\bar{7})G(8\bar{8})G(9\bar{9})[(\Gamma(\bar{1}6\bar{7})\Gamma(7\bar{4}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}9)\Gamma(5\bar{8}\bar{9})+\Gamma(\bar{1}6\bar{7})\Gamma(\bar{2}\bar{4}5$$
$$\Gamma(7\bar{3}9)\Gamma(5\bar{8}\bar{9})+\Gamma(\bar{1}6\bar{7})\Gamma(\bar{3}\bar{4}5)\Gamma(7\bar{2}9)\Gamma(5\bar{8}\bar{9})+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})$$
$$+(\bar{1},\bar{4}))+(\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)\Gamma(96\bar{7})\Gamma(\bar{2}\bar{3}7)\Gamma(5\bar{8}\bar{9})+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3}))]+$$
$$+G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})G(5\bar{5})G(6\bar{6})G(7\bar{7})G(8\bar{8})G(9\bar{9})[($$
$$\Gamma(\bar{1}69)\Gamma(7\bar{4}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{5})\Gamma(78\bar{9})+\Gamma(\bar{1}69)\Gamma(\bar{2}\bar{4}5)\Gamma(7\bar{3}\bar{5})\Gamma(78\bar{9})+$$
$$\Gamma(\bar{1}69)\Gamma(\bar{3}\bar{4}5)\Gamma(7\bar{2}\bar{5})\Gamma(78\bar{9})+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})+(\bar{1},4))+(\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)$$
$$\Gamma(569)\Gamma(\bar{2}\bar{3}7)\Gamma(78\bar{9})+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3}))]+G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4$$
$$G(5\bar{5})G(6\bar{6})G(7\bar{7})G(8\bar{8})[(\Gamma(\bar{1}6\bar{7}8)\Gamma(7\bar{4}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}5)+\Gamma(\bar{1}6\bar{7})$$
$$\Gamma(7\bar{4}58)\Gamma(\bar{2}\bar{3}\bar{5})+\Gamma(\bar{1}6\bar{7})\Gamma(7\bar{4}5)\Gamma(\bar{2}\bar{3}5\bar{8})+\Gamma(\bar{1}6\bar{7}8)\Gamma(\bar{2}\bar{4}5)$$
$$\Gamma(7\bar{3}\bar{5})+\Gamma(\bar{1}6\bar{7})\Gamma(\bar{2}\bar{4}58)\Gamma(7\bar{3}\bar{5})+\Gamma(\bar{1}6\bar{7})\Gamma(\bar{2}\bar{4}5)\Gamma(7\bar{3}5\bar{8})+$$
$$\Gamma(\bar{1}6\bar{7}8)\Gamma(\bar{3}\bar{4}5)\Gamma(7\bar{2}\bar{5})+\Gamma(\bar{1}6\bar{7})\Gamma(\bar{3}\bar{4}58)\Gamma(7\bar{2}\bar{5})+\Gamma(\bar{1}6\bar{7})$$
$$\Gamma(\bar{3}\bar{4}5)\Gamma(7\bar{2}5\bar{8})+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3})+(\bar{1},\bar{4}))+(\Gamma(\bar{1}\bar{4}5\bar{8})\Gamma(56\bar{7})$$
$$\Gamma(\bar{2}\bar{3}7)+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)\Gamma(56\bar{7}8)\Gamma(\bar{2}\bar{3}7)+\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)\Gamma(56\bar{7})\Gamma(\bar{2}\bar{3}7\bar{8})+$$
$$+(\bar{1},\bar{2})+(\bar{1},\bar{3}))]$$

(56)

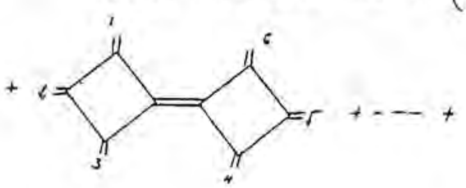
Podem escriure diagramaticament l'expressió anterior, cosa que ens en permetra un maneig més facil,



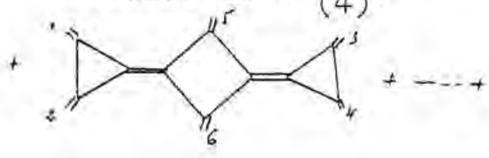
fins a un total de cinc termes obtinguts en situar un dels arguments escollits arbitrariament unit a $\Gamma_{(3)}$ i podem variar sobre la resta el qua ha d'acompanyar-lo en el vèrtex esmentat



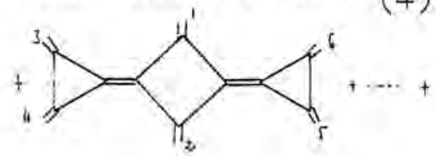
fins a un total de deu termes en que aquell argument s'hi col.loca connectat a $\Gamma_{(5)}$ i considerem totes les parelles possibles sobre els arguments restants units a $\Gamma_{(3)}$ o als índexs lliures de $\Gamma_{(5)}$.



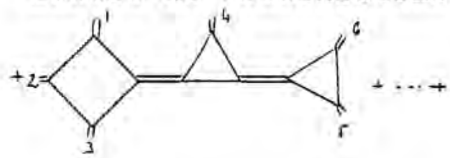
fins a un total de deu termes que obtrindríem amb un argument fix sobre un dels $\Gamma_{(4)}$ i prenent la resta en parells units als vèrtexs lliures de $\Gamma_{(4)}$.



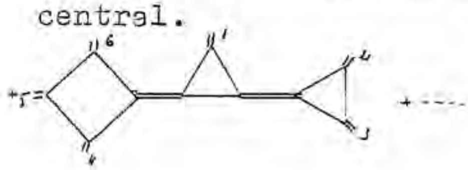
fins a un total de trenta termes en que un argument és fix sobre un $\Gamma_{(3)}$, i sobre els cinc que resten varia únicament el que l'acompanya en aquest triangle, i considerem per a cada una d'aquestes disposicions les combinacions en parells sobre els quatre arguments restants, parells dels quals se'n connectara un a $\Gamma_{(4)}$ i l'altre a l'altre $\Gamma_{(3)}$



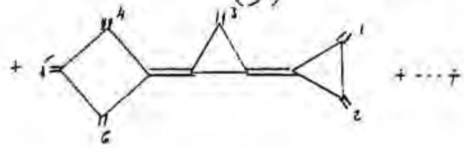
fins a un total de quinze termes amb un índex fix unit a $\Gamma_{(4)}$, sobre la resta en variarem el seu company sobre aquest mateix vèrtex, i per a cada una d'aquestes disposicions prendrem la resta en parells, malgrat que donada l'equivalencia dels dos $\Gamma_{(3)}$ que són extrems entre si, només podrà ser en la meitat de combinacions possibles.



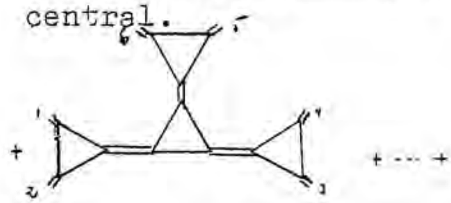
aquí apareixeran trenta termes corresponents per a prendre un argument fix en $\Gamma_{(4)}$, formarem combinacions en parells sobre la resta i les unirem als índexs lliures de $\Gamma_{(4)}$, i per a cada una d'aquestes disposicions considerarem tres diagrames segons quin sigui, dels tres restants, el que estigui unit al $\Gamma_{(3)}$ central.



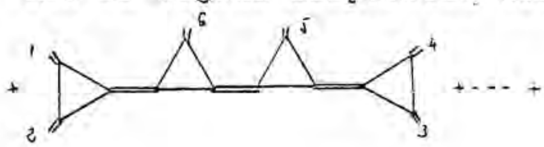
fins a un total de deu termes, en que l'argument arbitrari esta unit al $\Gamma_{(3)}$ central, i la resta d'arguments els prendrem en parells fixos al $\Gamma_{(3)}$ extrem.



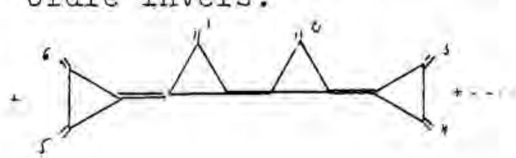
fins a un total de vint termes on fixem un argument al $\Gamma_{(3)}$ extrem, variem sobre els cinc restants el company en $\Gamma_{(3)}$, i considerarem en cada cas les quatre possibilitats de fixar els quatre arguments que resten sobre el $\Gamma_{(3)}$ central.



aquí també hi apareixen quinze termes, que poden obtenir-se de forma identica a com ho féiem amb la segona disposició del rombe central.



fins a un total de seixanta termes on un argu ment arbitrari va fixat a un $\Gamma_{(3)}$ extrem, variem per parells la resta i els connectem a l'altre $\Gamma_{(3)}$ extrem, i per a cadascuna d'aquestes disposicions es consideren totes dues amb els arguments centrals en un ordre o en el seu ordre invers.



(57)

fins a un total de trenta termes on un argument arbitrari va unit a un dels dos $\Gamma_{(3)}$ interiors, variem sobre els cinc que queden aquell que va sobre el $\Gamma_{(3)}$ restant, interior, i per a cadascuna d'aquestes disposicions es consideren les sis combinacions dels restants quatre arguments en parells connectats al $\Gamma_{(3)}$ exterior contigu a aquell on va fixat l'argument arbitràriament escollit fix.

Evidentment les prescripcions que hem donat aquí no són de cap manera les úniques. En realitat és un senzill problema topologic determinar d'antuvi quins són els polígons que intervenen i com estan connectats entre si, i no és més que un problema combinatori el que se'ns planteja després per a poder determinar la manera com unir els arguments de $G_{(m)}$ als vertexs lliures d'aquells polígons. Aquí hem donat les prescripcions que hem emprat per a obtenir els 236 termes del desenvolupament.

2.4 INCORPORACIÓ DE LES FUNCIONS VÈRTEX A L'OPERADOR Σ (12).

Havent aconseguit de reduir les funcions $G_{(m)}$ a combinacions de productes de funcions $G_{(2)}$ per mitjà de les funcions vèrtex, en aquesta secció ens proposem emprar aquest resultat en l'expressió de $\Sigma(12)$ que donarem en (1.74).

Considerem primer la part afectada de $\Upsilon_{(4)}$:

$$\Sigma(12)=\ldots+\Upsilon(1\bar{2}34)\Big[G(\bar{2}347)G^{-1}(\bar{7}2)+3\,G(\bar{2}3\bar{7})G(4)G^{-1}(\bar{7}2)+3\,G(\bar{2}3)\,\delta(42)+3\,G(3)G(4)\,\delta(\bar{2}2)\Big] \tag{58}$$

Emprant (39) i (43) desacoblem $G_{(4)}$ i $G_{(3)}$ escrivint allò anterior en la forma:

$$\begin{aligned}\Sigma(12)=\ldots+\Upsilon(1\bar{2}34)\Big[&G(\bar{2}2')G(33')G(44')G(\bar{7}7')\Big(\Gamma(2'3'4'7')+\Gamma(2'3'5)G(55')\\&\Gamma(5'4'7')+\Gamma(2'4'5)G(55')\,\Gamma(5'3'7')+\Gamma(2'7'5)G(55')\,\Gamma(5'3'4')\Big)G^{-1}(\bar{7}2)+\\&+3\,G(\bar{2}2')G(33')G(\bar{7}7')\,\Gamma(2'3'7')G(4)G^{-1}(\bar{7}2)+3\,G(\bar{2}3)\,\delta(42)+\\&+3\,G(3)G(4)\,\delta(\bar{2}2)\Big]\end{aligned} \tag{59}$$

Contraent amb $G^{-1}(\bar{7}2)$

$$\begin{aligned}\Sigma(12)=\ldots+\Upsilon(1\bar{2}34)\Big[&G(\bar{2}2')G(33')G(44')\Big(\Gamma(2'3'4'2)+\Gamma(2'3'5)G(55')\,\Gamma(5'4'2)+\\&+\Gamma(2'4'5)G(55')\,\Gamma(5'3'2)+\Gamma(2'25)G(55')\,\Gamma(5'3'4')\Big)+3\,G(\bar{2}2')G(33')\\&\Gamma(2'3'2)G(4)+3\,G(\bar{2}3)\,\delta(42)+3\,G(3)G(4)\,\delta(\bar{2}2)\Big]\end{aligned} \tag{60}$$

i reagrupant termes semblants;

$$\begin{aligned}\Sigma(12)=\ldots+\Upsilon(1\bar{2}34)\Big[&G(\bar{2}2')G(33')G(44')\,\Gamma(2'3'4'2)+3\,G(\bar{2}2')G(33')G(44')\\&G(55')\,\Gamma(2'3'5)\,\Gamma(5'4'2)+3\,G(\bar{2}2')G(33')G(4)\,\Gamma(2'3'2)+3\,G(\bar{2}3)\\&\delta(42)+3\,G(3)G(4)\,\delta(\bar{2}2)\Big]\end{aligned} \tag{61}$$

,hem escrit aquesta darrera expressió de la forma més compacta possible, i hi hem tingut en compte el caràcter mut dels arguments repetits, així com el caràcter simètric de

$\Gamma(4)$ davant de permutacions d'aquells arguments.

Procedim ara amb el terme en $\Upsilon_{(6)}$. Considerem primer el desacoblament de les funcions $G_{(3)}$. Emprant (39)

$$\begin{aligned}\Sigma(12)=\Upsilon(1\bar{2}3456)\Big[&\ldots+10\ G(\bar{2}2')G(33')G(44')\Gamma(2'3'4')G(55')G(66')\\ &G(\bar{7}7')\Gamma(5'6'7')G^{-1}(\bar{7}2)+20\ G(\bar{2}2')G(33')G(44')\Gamma(2'3'4')G(6)\delta(52)+\\ &+30\ G(\bar{2}2')G(33')G(\bar{7}7')\Gamma(2'3'7')G(45)G(6)G^{-1}(\bar{7}2)+10\ G(\bar{2}2')\\ &G(33')G(\bar{7}7')\Gamma(2'3'7')G(4)G(5)G(6)G^{-1}(\bar{7}2)+15\ G(\bar{2}3)G(45)\\ &\delta(62)+30\ G(\bar{2}3)G(5)G(6)\delta(42)+5\ G(3)G(4)G(5)G(6)\delta(\bar{2}2)\Big]+\\ &+\ldots\end{aligned} \tag{62}$$

Contraent en aquells en què és possible amb $G^{-1}(\bar{7}2)$

$$\begin{aligned}\Sigma(12)=\Upsilon(1\bar{2}3456)\Big[&\ldots+10\ G(\bar{2}2')G(33')G(44')\Gamma(2'3'4')G(55')G(66')\\ &\Gamma(5'6'2)+20\ G(\bar{2}2')G(33')G(44')\Gamma(2'3'4')G(6)\delta(52)+30\ G(\bar{2}2')G(33')\\ &\Gamma(2'3'2)G(45)G(6)+10\ G(\bar{2}2')G(33')\Gamma(2'3'2)G(4)G(5)G(6)+15\\ &G(\bar{2}3)G(45)\delta(62)+30\ G(\bar{2}3)G(5)G(6)\delta(42)+5\ G(3)G(4)\\ &G(5)G(6)\delta(\bar{2}2)\Big]+\ldots\end{aligned} \tag{63}$$

Procedim ara a desacoblar les funcions $G_{(4)}$. Mitjançant (43)

$$\begin{aligned}\Sigma(12)=\Upsilon(1\bar{2}3456)\Big\{&\ldots+5\ G(\bar{2}2')G(33')G(44')G(55')\Big[\Gamma(2'3'4'5')+\Gamma(2'3'8)\\ &G(88')\Gamma(8'4'5')+\Gamma(2'4'8)G(88')\Gamma(8'3'5')+\Gamma(2'5'8)G(88')\Gamma(8'3'4')\Big]\delta(62)+\\ &+10\ G(\bar{2}2')G(33')G(44')G(\bar{7}7')\Big[\Gamma(2'3'4'7')+\Gamma(2'3'8)G(88')\Gamma(8'4'7')+\\ &+\Gamma(2'4'8)G(88')\Gamma(8'3'7')+\Gamma(2'7'8)G(88')\Gamma(8'3'4')\Big]\Big[G(56)+G(5)G(6)\Big]\\ &G^{-1}(\bar{7}2)+\ldots\Big\}+\ldots\end{aligned} \tag{64}$$

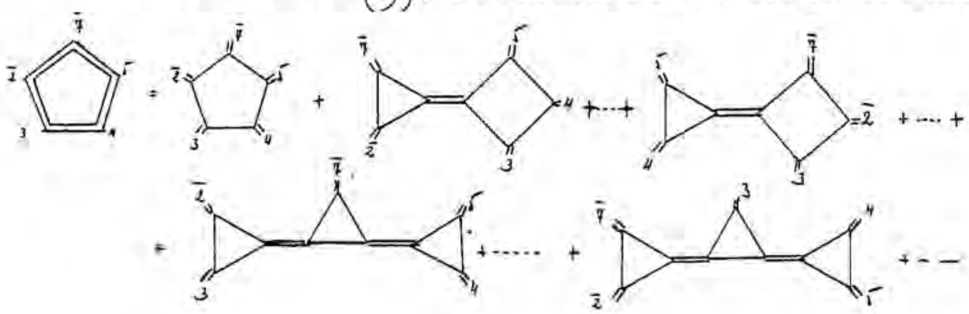
$$\begin{aligned}\Sigma(12)=\Upsilon(1\bar{2}3456)\Big\{&\ldots+5\ G(\bar{2}2')G(33')G(44')G(55')\Big[\Gamma(2'3'4'5')+3\ \Gamma(2'3'8)\\ &G(88')\Gamma(8'4'5')\Big]\delta(62)+10\ G(\bar{2}2')G(33')G(44')G(\bar{7}7')\Big[\Gamma(2'3'4'7')+\\ &+3\ \Gamma(2'3'8)G(88')\Gamma(8'4'7')\Big]\Big[G(56)+G(5)G(6)\Big]G^{-1}(\bar{7}2)+\ldots\Big\}+\ldots\end{aligned} \tag{65}$$

Contraent com abans amb $G^{-1}(\bar{7}2)$ arribem finalment a

$$\begin{aligned}\Sigma(12)=\Upsilon(1\bar{2}3456)\Big\{&\ldots+5\ G(\bar{2}2')G(33')G(44')G(55')\Big[\Gamma(2'3'4'5')+3\ \Gamma(2'3'8)\\ &G(88')\Gamma(8'4'5')\Big]\delta(62)+10\ G(\bar{2}2')G(33')G(44')\Big[\Gamma(2'3'4'2)+3\ \Gamma(2'3'8)\\ &G(88')\Gamma(8'4'2)\Big]\Big[G(56)+G(5)G(6)\Big]+\ldots\Big\}+\ldots\end{aligned} \tag{66}$$

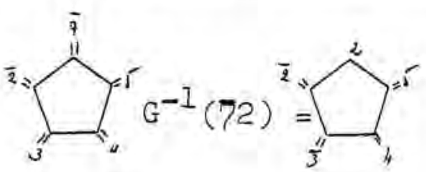
Ara hauríem de fer el mateix amb els termes que resten de $\int(12)$, concretament amb aquells que involucren $G_{(5)}$ i $G_{(6)}$. Per això, hauríem d'emprar les expressions (53) i (56), procurant finalment de sumar tots els termes equivalents. No obstant això, resultarà més convenient de ferho en termes de les representacions diagramàtiques construïdes anteriorment.

Així per a $G_{(5)}$, recordem-ne la descomposició (54)



(67)

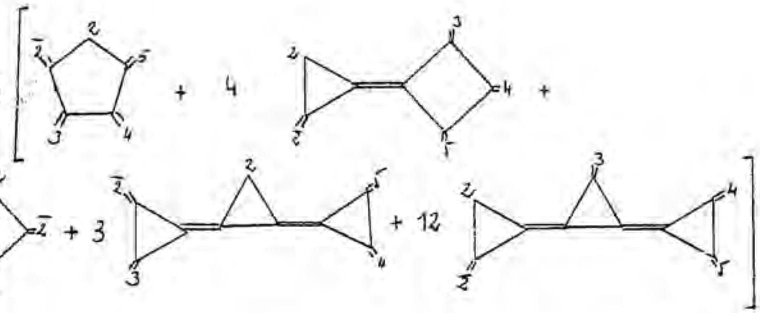
on solament s'han dibuixat aquells diagrames base a partir dels quals poden obtenir-se tota la resta. La contracció amb $G^{-1}(\overline{7}2)$ gràficament suposa eliminar la doble línia que té per extrem l'argument contret $\overline{7}$, i en l'altre escriure-hi l'argument 2 explícitament. Així



(68)

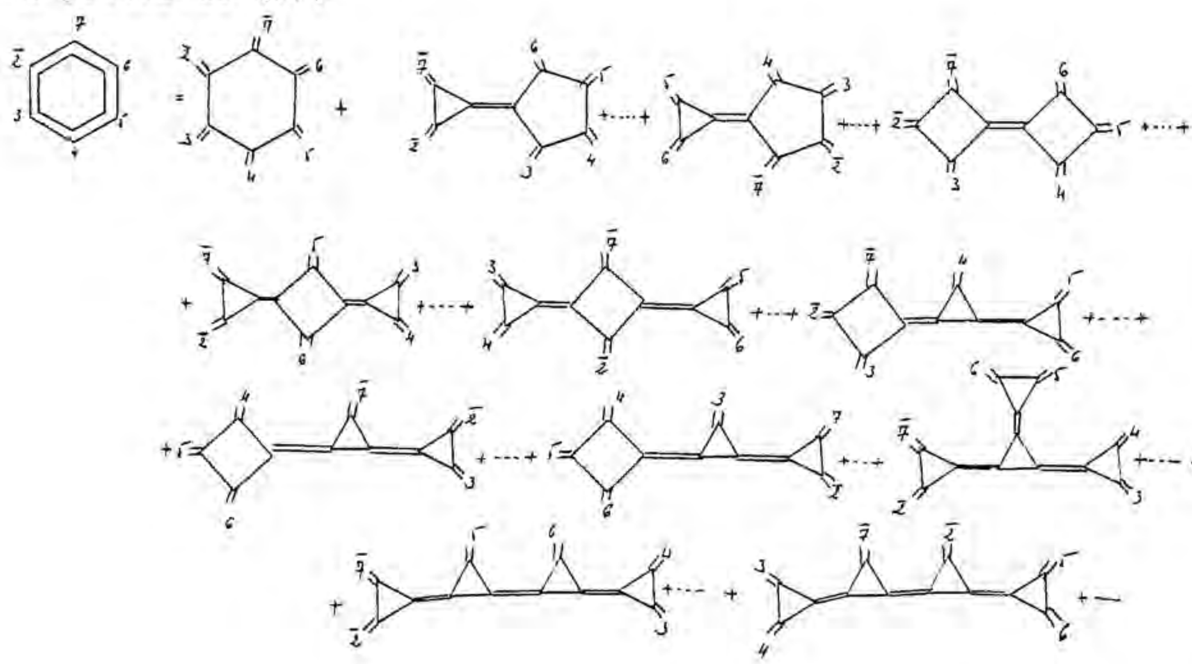
Faríem el mateix amb tots i cadascun dels diagrames restants en (67). Degut al caràcter simètric del potencial $\gamma_{(6)}$ no és massa difícil d'adonar-se que els diagrames no representats explícitament en aquell desenvolupament donarien la mateixa contribució que el que s'hi representa explícitament, del qual provenen. Així doncs la contribució a $\Sigma(12)$ del terme en $\Upsilon_{(6)}\, G_{(5)}$ diagramàticament l'escriuríem com

$$\Sigma(12) = \ldots + 5\Upsilon(1\bar{2}3456)G(6)$$



(69)

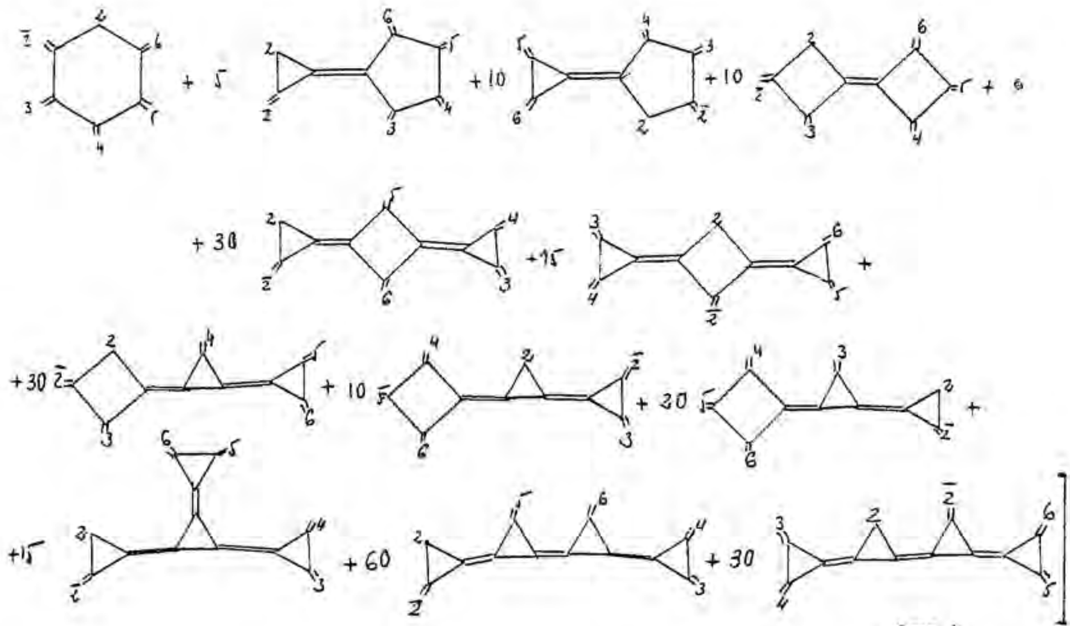
Finalment fem el mateix amb el terme en $\Upsilon_{(6)}\, G_{(6)}$. Per això escrivim primer els diagrames fonamentals de $G_{(6)}$. A partir de (57)



(70)

Contraent amb $G^{-1}(\bar{7}2)$ i sumant els termes que donen la mateixa contribució arribarem finalment a

$$\Sigma(12) = \Upsilon(1\bar{2}3456) \Bigg[$$

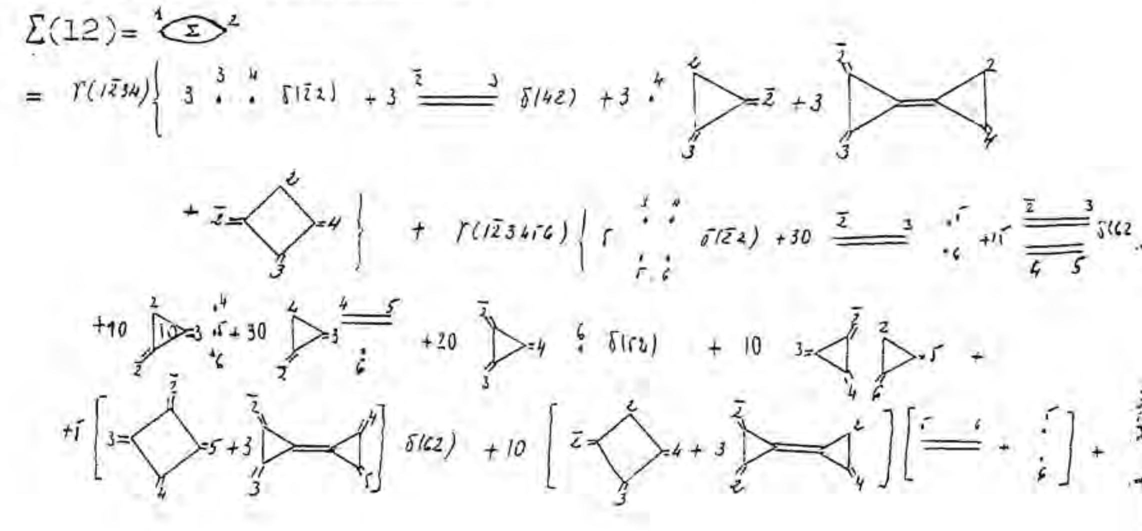


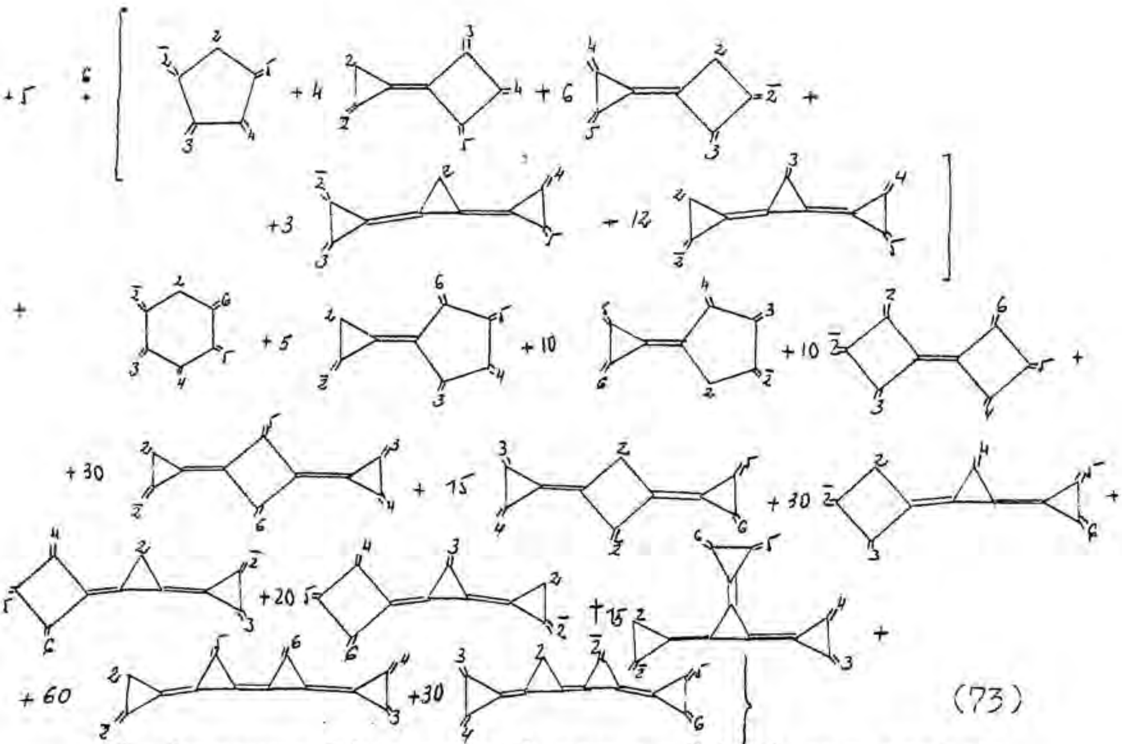
(71)

Un cop calculades totes i cadascuna de les contribucions a $\Sigma(12)$, hem de reagrupar-les. Així, tenint en compte (61), (63) i (66), juntament amb les expressions diagramàtiques (69) i (71), podem procedir a donar una expressió completa de l'operador autoenergia $\Sigma(12)$. Pel fet que les darreres contribucions les hem calculades de forma gràfica, certament, seria més convenient d'expressar d'aquesta manera tots els termes que intervenen en $\Sigma(12)$. Per això cal que introduïm un nou símbol per a representar $G_{(1)}$. El propagador condensat el representarem per un punt.

$$G(1) \qquad \bullet\ 1 \qquad (72)$$

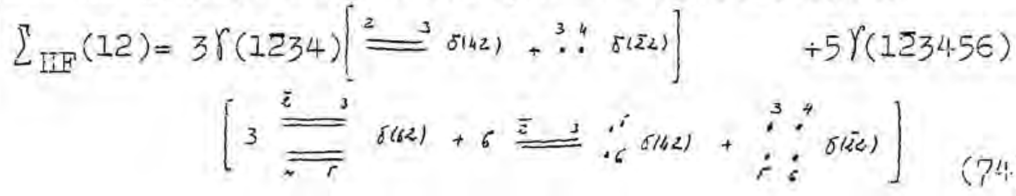
Amb això arribem finalment a





(73)

Si observem l'expressió per a $\Sigma(12)$ que acabem de donar resulta ben clara la presència de dos tipus de contribucions ben diferenciades. Per una banda la que està constituïda pels termes on no hi apareixen les funcions vèrtex, i per altra banda la que prové de la resta de sumands en que hi intervenen explícitament. D'acord amb tot això que acabem d'assenyalar, i amb la mateixa nomenclatura que Dekker i Haake (1975b), proposem una partició de $\Sigma(12)$ en una part anomenada Hartree-Fock, $\Sigma_{HF}(12)$, i en una altra part anomenada de col.lisió $\Sigma_c(12)$. La primera es caracteritza per la seva no dependència explícita de les funcions vèrtex, i agrupem en la segona la resta de termes de $\Sigma(12)$. Per al cas que hem tractat seria



(74)

2.5 EQUACIONS AUTOCONSISTENTS PER A LES FUNCIONS VÈRTEX.

En aquesta secció pretenem tractar la determinació de les funcions vèrtex. Abans de començar ens agradaria discutir de manera breu el que s'ha aconseguit introduint-les i incorporant-les posteriorment a l'expressió de $\Sigma(12)$.

Ja hem afirmat anteriorment, que en la formulació que proposem aquí, el coneixement del propagador connectat de dos punts passa per la resolució de l'equació íntegro-diferencial (1.77). Allò primer de què hom s'adona en considerar-la, juntament amb l'expressió de $\Sigma(12)$ donada una mica abans, (1.74), és el caracter no tâncat d'aquella equació. És a dir, en l'expressió de l'operador integral $\Sigma(12)$, i prescindint de moment de $G_{(1)}$, no únicament apareix el propagador connectat de dos punts que pretenem trobar, sinó que hi apareixen també propagadors connectats d'ordre superior. El problema que això suposa es pot imaginar fàcilment. Per una banda conèixer el propagador suposa, a part del problema de la pròpia resolució de (1.77), un coneixement previ de l'operador $\Sigma(12)$. El fet que aquest darrer depengui d'aquell propagador suposa una complexitat addicional a aquella resolució, però el que encara és més greu és que $\Sigma(12)$ depengui també de propagadors d'ordre superior. Per a avaluar $G_{(m)}$ amb m= 3,4,5,6 etc., hauríem de recòrrer molt probablement a formular noves equacions d'evolució dinàmica del tipus de les que hem considerat per a $G_{(2)}$ però ara per a propagadors amb un nombre més gran de punts exteriors. La dificultat que això suposa és fàcilment comprensible, tot i que en teoria el problema podria resoldre's, si no fos perquè, i gairebé amb tota seguretat, els inconvenients que hem comentat per a $G_{(2)}$ reapareixerien per a $G_{(m)}$ amb $m > 2$.

Tot el que acabem de plantejar és una manifestació dels típics problemes de jerarquies, que apareixen en els sistemes regits per dinàmiques no lineals, i que en poques paraules podríem enunciar-los dient que en les equacions per a un cert propagador, hi apareixen també els d'ordre superior a aquest propagador, amb la qual cosa les equacions rarament són tancades, a no ser que es trunquin aquestes jerarquies. Podríem dir que això era la situació plantejada en finalitzar el capítol 1 d'aquesta segona part.

El problema ara ha variat una mica. Efectivament en 2.2 introduïrem les funcions vèrtex, mentre que en la secció anterior completàrem la reducció de les funcions $G_{(m)}$ amb $m>2$ que apareixien en l'expressió deduïda per a $\Sigma(12)$. S'endevina fàcilment el que hem aconseguit. L'objectiu continua essent el mateix, és a dir la resolució de l'equació íntegro- diferencial (1.77), però ara en l'expressió de Σ (12) pel que fa a propagadors, només hi apareixen explícitament $G_{(1)}$ i $G_{(2)}$. No ens hem preocupat amb detall del primer, tot i que si hem de ser sincers, li tenim establerta una equació d'evolució temporal, (1.68), a la que podrien incorporar-se fàcilment les funcions vèrtex. El que ens resta, és obviament, trobar expressions explícites per a les funcions vèrtex esmentades. Aquesta secció la dediquem a aquesta finalitat.

Primerament veurem com l'avaluació d'aquelles funcions passa primer per la formulació d'un conjunt d'equacions autoconsistents, i després es discuteix breument l'estratègia de llur resolució.

Procedim primer amb $\Gamma_{(3)}$. A partir de (35) i (37) i tenint en compte la no dependència de G_0^{-1} en $G_{(1)}$ escrivim

$$\Gamma(123)=\delta\Sigma(12)/\delta G(3) \tag{75}$$

on en fer aquesta derivada funcional haurem de considerar la dependència explícita de Σ (12) en $G_{(1)}$, juntament amb la implícita a través de $G_{(2)}$. Així

$$\Gamma(123)=(\delta\Sigma(12)/\delta G(3))_{G_{(2)}}+(\delta\Sigma(12)/\delta G(45))_{G_{(1)}}(\delta G(45)/\delta G(3)) \tag{76}$$

Calcularem $(\delta G_{(2)}/\delta G_{(1)})$. Per això reescrivim (36) com

$$-\Gamma(12)G(23)=\delta(13) \tag{77}$$

derivant funcionalment respecte a G(4)

$$-(\delta\Gamma(12)/\delta G(4))G(23)-\Gamma(12)(\delta G(23)/\delta G(4))=0 \tag{78}$$

Tenint en compte (35) escrivim allò anterior com

$$\Gamma(124)G(23)=-\Gamma(12)\delta G(23)/\delta G(4) \tag{79}$$

i emprant novament (77), aclariríem la derivada funcional que ens interessa en la forma

$$\delta G(23)/\delta G(4)=G(25)G(36)\Gamma(456) \tag{80}$$

Substituint en (76) obtenim l'equació autoconsistent buscada

$$\Gamma(123)=(\delta\Sigma(12)/\delta G(3))_{G_{(2)}}+(\delta\Sigma(12)/\delta G(45))_{G_{(1)}}G(46)G(57)\Gamma(367) \tag{81}$$

Per a $\Gamma_{(4)}$ l'equació anàloga a (81) és d'una elaboració més complicada, cosa que figura en l'apendix A. Aquí ens limitem a donar l'expressió final que s'escriu com

$$\tfrac{1}{2}D(1234)=(\delta\Sigma(12)/\delta G(34))_{G_{(1)}}+\tfrac{1}{2}(\delta\Sigma(12)/\delta G(78))_{G_{(1)}}G(77)G(88)D(7834) \tag{82}$$

on hem introduït la magnitud $D_{(4)}$ definida com

$$D(1234)=\Gamma(1234)+\Gamma(135)G(56)\Gamma(624)+\Gamma(154)G(56)\Gamma(623) \tag{83}$$

Per altra banda en el mateix apèndix ens ocupem també de l'equació corresponent per a $\Gamma_{(6)}$, i només ens restarà per obtenir la que fa referència a $\Gamma_{(5)}$, la qual no ens preocuparem d'establir, car tal i com es veurà en la secció següent, aquest vèrtex, sota circumstàncies que ja precisarem, no intervé en el desenvolupament posterior.

Havent aconseguit ja de formular equacions autoconsistents per a les funcions vèrtex, ara el que ens preocupa essencialment és llur resolució, principalment quan per simple inspecció observem que caldrà l'elaboració d'una certa estratègia. Efectivament, les equacions obtingudes (81) i (83), amb la corresponent a $\Gamma_{(6)}$, a part del seu caràcter autoconsistent, contenen derivades funcionals de l'operador autoenergia, en la definició del qual hi intervenen les pròpies funcions vèrtex. Veient això podríem pensar en recórrer a una seqüència d'aproximacions a $\Sigma(12)$ mitjançant les quals fóssim capaços de determinar autoconsistentment successives funcions vèrtex, i vindrien expressades les d'ordre superior en termes de les inferiors determinades previament i autoconsistent.

De fet, el resultat d'inserir (81) i (82), juntament amb les equacions anàlogues per als vèrtexs restants en l'expressió de Σ (12), només ens mena a l'establiment d'una equació en derivades funcionals per a Σ(12) en termes de $G_{(1)}$, $G_{(2)}$ i els potencials del problema. De Dominicis i Martin en (1964a) plantegen formalment tal com això podria ser realitzat. Les esmentades equacions en derivades funcionals s'haurien de resoldre iterativament, i la presència d'operador tals com

$$\Lambda^{-1} \equiv 1-G_{(2)}G_{(2)}(\delta\Sigma/\delta G_{(2)})G_{(1)} \qquad (84)$$

definits a partir de (81), i sense tenir, conseqüentment, cap relació amb l'operador diferencial que apareixia en la definició de G_0^{-1}, mitjançant

$$\Gamma_{(3)}=\Lambda(\delta\Sigma/\delta G_{(1)})G_{(2)} \qquad (85)$$

i altres combinacions anàlogues adequades a les equacions per a $\Gamma_{(4)}$ i vèrtexs d'ordre superior, generarien sens cap mena de dubte Σ, com una sèrie de potències en $G_{(1)}$, $G_{(2)}$ i els potencials del problema. Voldríem exemplificar una mica el que acabem de dir, desenvolupant les sèries esmentades en llurs ordres més baixos.

Per això suposem una reducció en l'expressió per a $\Sigma(12)$ donada en (73), que consistiria en prendre $\Upsilon_{(6)}$ nul, així com també prendríem com a nuls $G_{(1)}$ i el vèrtex $\Gamma_{(3)}$. El primer pas és per un simple afany de simplificar els desenvolupaments, mentre que el segon pas admet altres justificacions. Així doncs,

$$\Sigma(12)=\Upsilon(1\bar{2}\bar{3}\bar{4})\left[G(\bar{2}\bar{2}')G(\bar{3}\bar{3}')G(\bar{4}\bar{4}')\Gamma(2\bar{2}'\bar{3}'\bar{4}')+3G(\bar{2}\bar{3})\delta(\bar{2}\bar{4})\right] \qquad (86)$$

mentre

$$\Gamma(1234)=2(\delta\Sigma(12)/\delta G(34)) +(\delta\Sigma(12)/\delta G(78))G(7\bar{7})G(8\bar{8})\Gamma(\bar{7}\bar{8}34) \qquad (87)$$

Prenguem com a primera aproximació a $\Sigma(12)$, que notarem $\Sigma^{(o)}(12)$, la part $\Sigma_{HF}(12)$; és a dir que suposarem el vèrtex nul en l'aproximació d'ordre zero. Així

$$\Sigma^{(o)}(12) =3\,\Upsilon(12\bar{3}\bar{4})G(\bar{3}\bar{4}) \qquad (88)$$

i

$$\delta\Sigma^{(o)}(12)/\delta G(34) = 3\,\Upsilon(1234) \qquad (89)$$

que podem substituir en (87) per a obtenir una primera aproximació a $\Gamma_{(4)}$

$$\Gamma^{(1)}(1234) = 6\,\Upsilon(1234) \qquad (90)$$

i si el portem novament a (86) generem una nova aproximació a $\Sigma(12)$

$$\Sigma^{(1)}(12)=3\gamma(12\bar{3}\bar{4})G(\bar{3}\bar{4})+6\gamma(12\bar{3}\bar{4})G(\bar{2}\bar{2})G(\bar{3}\bar{3})G(\bar{4}\bar{4})\gamma(2234) \tag{91}$$

i novament calculem la derivada funcional en (87)

$$\delta\Sigma^{(1)}(12)/\delta G(34)=3\gamma(1234)+9\gamma(13\bar{3}\bar{4})G(\bar{3}3')G(\bar{4}4')\gamma(243'4')+$$
$$+9\gamma(14\bar{3}\bar{4})G(\bar{3}3')G(\bar{4}4')\gamma(233'4') \tag{92}$$

que podríem substituir en (87)

$$\Gamma^{(2)}(1234)=6\gamma(1234)+18\gamma(13\bar{3}\bar{4})G(\bar{3}3')G(\bar{4}4')\gamma(243'4')+18$$
$$\gamma(14\bar{3}\bar{4})G(\bar{3}3')G(\bar{4}4')\gamma(233'4')+6\Big[3\gamma(1278)+$$
$$+9\gamma(17\bar{3}\bar{4})G(\bar{3}3')G(\bar{4}4')\gamma(283'4')+9\gamma(18\bar{3}\bar{4})G(\bar{3}3')G(\bar{4}4')$$
$$\gamma(273'4')\Big]G(77')G(88')\gamma(7'8'34) \tag{93}$$

i així successivament.

L'estratègia que hem esquematitzat breument aquí, o bé la més formal, tot i ser equivalent, que figura en l'article de De Dominicis i Martin a què ens referíem abans, no exhaureixen les possibilitats. Concretament Martin, Siggia i Rose en desenvolupar el formalisme MSR insisteixen en la conveniència de susbtituir en les successives aproximacions a $\Sigma(12)$, els potencials del problema pels propis vèrtexs, als que qualifiquen també de potencials vestits o renormalitzats. En aquest sentit es parla, en aquest cas, de teories pertorbatives plenament renormalitzades. (Dekker i Haake (1975b)).

2.6 REDUCCIÓ PER ELIMINACIÓ DEL PROPAGADOR CONDENSAT.

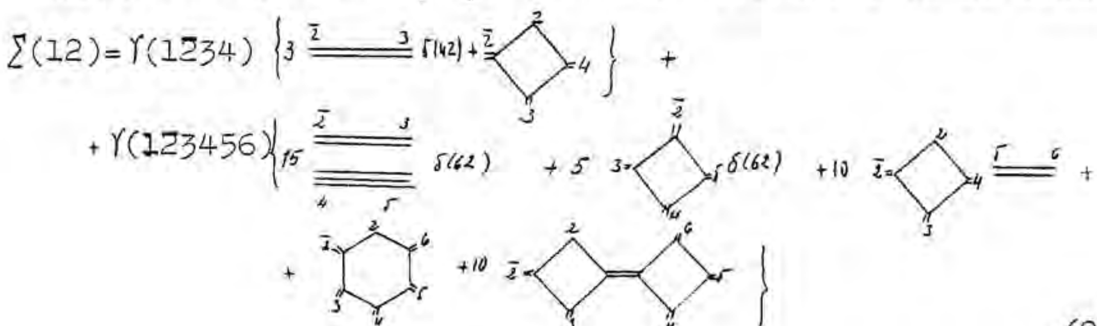
En aquesta secció i en tot el que ve, mentre no diguem el contrari, entendrem que hem eliminat completament l'efecte de les fonts exteriors, i conseqüentment, tant les funcions $G_{(m)}$ com els propis vèrtexs, així com l'operador autoenergia, se'n consideraran lliures; en aquest sentit totes les magnituds anteriors són les reals o físiques corresponents al sistema estudiat. D'acord amb el que hem establert anteriorment, s'haurien de caracteritzar amb un subíndex f, però per brevetat no ho farem, amb la confiança que això no presentarà cap mena de confusió. A tot això que hem dit anteriorment, només hi farem una única excepció, i la constituiran algunes expressions que donarem a continuació, corresponents a etapes intermèdies en l'obtenció de les equacions autoconsistents per a les funcions vèrtex. Així , i per a obtenir una connexió més gran amb les fórmules anàlogues que establirem en l'apendix A, es respectaran quan interessin les prescripcions referents a l'avaluació de derivades funcionals amb les fonts exteriors fixades a uns valors constants que, d'acord amb el que hem establert més amunt, entendrem que corresponen a l'anul.lació de totes elles.

Sota hipòtesis força generals relacionades tant amb les pròpies característiques del sistema, com amb certes prescripcions en la distribució de condicions inicials, el propagador condensat és idènticament nul. En tot l'estudi que segueix ens situem en aquesta hipòtesi, i ens interessa estudiar la simplificació que introdueix en la formulació desenvolupada fins ara. Suposem doncs

$$G(1)=0 \qquad (94)$$

En primer lloc i en aquestes condicions, els vèrtexs d'un número senar de punts són nuls. Efectivament, per a un cas general, per exemple l'expressió per a $\Gamma_{(3)}$ en successius ordres d'aproximació suposa, tal i com es digué, un desenvolupament on hi intervenen $G_{(1)}$, $G_{(2)}$, i els potencials $\gamma_{(4)}$ i $\gamma_{(6)}$. Per altra banda consta explícitament que aquests darrers involucren un nombre parell d'arguments, així mateix fo fa $G_{(2)}$, amb la qual cosa i tenint present que la contracció d'índexs es realitza sempre en parells, és ben clar que en l'expressió d'un vèrtex com $\Gamma_{(3)}$, manifestament funció d'un nombre senar d'arguments, no hi podrà apareixer mai un terme on no hi figuri $G_{(1)}$ i per tant en la hipòtesi (94), $\Gamma_{(3)}$ és idènticament nul. Aquest argument s'aplicaria de la mateixa manera amb $\Gamma_{(5)}$, i conclouríem doncs que també en aquest cas $\Gamma_{(5)} = 0$.

Amb el que hem exposat anteriorment, és ben evident que podem aconseguir una reducció dràstica en l'expressió per a l'operador autoenergia $\Sigma(12)$ que figura en (73), i diagramàticament quedaria establerta en la forma



(95)

expressió certament molt més manejable, i amb la qual treballarem amb molta més fluïdesa.

Per altra banda de (83) resulta que en la hipòtesi actual

$$D(1234) = \Gamma(1234) \tag{96}$$

i consegüentment l'equació autoconsistent per a $D_{(4)}$ (82), esdevé pròpiament la de $\Gamma_{(4)}$

$$\Gamma(1234)=2(\delta\Sigma(12)/\delta G(34))+(\delta\Sigma(12)/\delta G(78))G(77')G(88')\Gamma(7'8'34) \tag{97}$$

on hem prescindit de la prescripció quant a prendre aquelles derivades funcionals avaluades amb $G_{(1)}$ constant, irrellevant en les circumstàncies actuals.

Per altra banda, creiem que ara s'entendrà perquè no ens hem preocupat de l'equació autoconsistent per a $\Gamma_{(5)}$ en la secció anterior, mentre que ara la corresponent a $\Gamma_{(6)}$ se simplifica suficientment com perquè puguem explicitar-la sense el risc d'ocupar massa pàgines. Vegem-ho. Escrivim (A.35) en la forma

$$(\delta G(1234)/\delta J(56))_{J_{(1)}} = \tfrac{1}{2}\left[G(123456)+G(2345)G(16)+G(1345)\right.$$
$$G(26)+G(1245)G(36)+G(1235)G(46)+G(2346)G(15)+$$
$$\left.+G(1346)G(25)+G(1246)G(35)+G(1236)G(45)\right] \qquad (98)$$

mentre que en (A.36) prescindim completament dels vèrtexs $\Gamma_{(3)}$, i queda reduïda a

$$(\delta G(1234)/\delta J(56))_{J_{(1)}} = (\delta/\delta J(56)\ G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})$$
$$\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4}))_{J_{(1)}} \qquad (99)$$

Per altra banda $(\delta G_{(2)}/\delta J_{(2)})_{J_{(1)}}$ pren una forma molt més senzilla, que s'obté directament de (A.19)

$$(\delta G(12)/\delta J(34))_{J_{(1)}} = \tfrac{1}{2}\left[G(1234)+G(23)G(14)+G(13)G(24)\right] \qquad (100)$$

o introduint $\Gamma_{(4)}$

$$(\delta G(12)/\delta J(34))_{J_{(1)}} = \tfrac{1}{2}\left[G(13)G(24)+G(23)G(14)+\right.$$
$$\left.G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4})\right] \qquad (101)$$

Efectuant les derivades funcionals en (99) i tenint en compte (101) resulta

$$(\delta G(1234)/\delta J(56))_{J_{(1)}} = (\tfrac{1}{2}\left[G(15)G(1'6)+G(16)G(1'5)+G(1\bar{1})G(1'\bar{2}\right.$$
$$\left.G(5\bar{5})G(6\bar{6})\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{5}\bar{6})\right]\ G(22')G(33')G(44')\Gamma(1'2'3'4')\ +$$
$$+(1,2;1',2')+(1,3;1',3')+(1,4;1',4')) \qquad +$$

$$+G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})\,\left(\delta\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4})/\delta J(56)\right)_{J_{(1)}} \qquad (102)$$

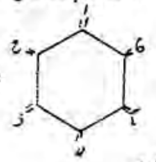
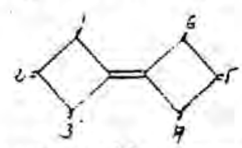
$\Gamma_{(4)}$ pot considerar-se com una funció explícita de $G_{(2)}$, la qual cosa ens permet d'escriure

$$\left(\delta\Gamma(1'2'3'4')/\delta J(56)\right)_{J_{(1)}} = \left(\delta\Gamma(1'2'3'4')/\delta G(78)\right)\left(\delta G(78)/\delta J(56)\right)$$
$$=\tfrac{1}{2}\left[G(75)G(86)+G(76)G(85)+G(7\bar{7})G(8\bar{8})G(5\bar{5})G(6\bar{6})\,\Gamma(\bar{7}\bar{8}\bar{5}\bar{6})\right]\,\delta\Gamma(1'2'3'4')/\delta G(78)$$

(103)

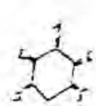
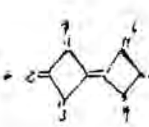
que substituiríem en (102).

Per altra banda en (98) hauríem d'introduir $\Gamma_{(4)}$ i $\Gamma_{(6)}$ d'acord amb el desacoblament de $G_{(4)}$ i $G_{(6)}$. Si ho realitzem mitjançant diagrames serà

G(123456)=  +  +(nou permutacions d'aquest diagrama)

(104)

amb la qual cosa a partir de (98)

$(\delta G(1234)/\delta J(56))_{J_{(1)}} = \tfrac{1}{2}\Big[$  +  + - - -

$$+G(22')G(33')G(44')G(55')G(16)\,\Gamma(2'3'4'5')+\ldots+$$
$$+G(11')G(22')G(33')G(66')G(45)\,\Gamma(1'2'3'6')\Big]$$

(105)

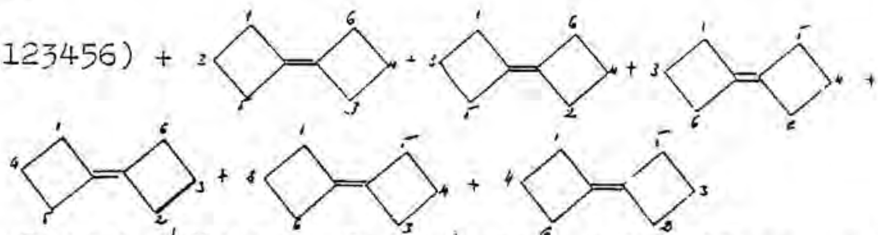
el terme de la dreta del qual pot expressar-se igualment tenint en compte (102) i (103) com

$$= \tfrac{1}{2}\left[G(15)G(1'6)+\dots+G(1\bar{1})G(1'\bar{2})G(5\bar{5})G(6\bar{6})\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{5}\bar{6})\right]$$
$$G(22')G(33')G(44')\Gamma(1'2'3'4') + \dots +$$
$$+\tfrac{1}{2}G(11')G(22')G(33')G(44')\left[G(75)G(86)+G(76)G(85)\right.$$
$$\left.+G(7\bar{7})G(8\bar{8})G(5\bar{5})G(6\bar{6})\Gamma(\bar{7}\bar{8}\bar{5}\bar{6})\right]\delta\Gamma(1'2'3'4')/\delta G(78)$$

(106)

Finalment, anul.lant contribucions idèntiques, i contraent convenientment per a aïllar $\Gamma_{(6)}$, l'obtenim en la forma

$\Gamma(123456)$ +



$$= 2\,\delta\Gamma(1234)/\delta G(56) + \left(\delta\Gamma(1234)/\delta G(78)\right) G(7\bar{7})G(8\bar{8})\Gamma(\bar{7}\bar{8}56) \quad (107)$$

que no constitueix pròpiament una equació autoconsistent per a $\Gamma_{(6)}$, però sí una identitat útil per a obtenir expressions aproximades per a $\Gamma_{(6)}$ a partir de determinacions succesives per a $\Gamma_{(4)}$.

3. FUNCIÓ RESPOSTA. PROPAGADORS ESTACIONARIS I TEOREMA DE FLUCTUACIÓ-DISSIPACIÓ.

3.1 DEFINICIÓ DE FUNCIÓ RESPOSTA EN REPRESENTACIÓ LAGRANGIANA.

Fins ara i des que introduïrem en I.2 una representació Lagrangiana, no ens hem preocupat en absolut de la funció resposta. Una de les seves característiques essencials rau en el fet que en una representació tal, s'hi prenguin com a base únicament propagadors on tan sols hi intervenen les variables macroscòpiques del sistema. Com a conseqüència d'això, en aquesta segona part hem estat capaços de desenvolupar una formulació pertorbativa concretada fonamentalment en una equació íntegro-diferencial per a $G_{(2)}$, una expressió per a l'operador autoenergia Σ que hi intervé, i unes equacions autoconsistents per a les funcions vèrtex en termes de les quals expressem Σ . Tot això ho hem plantejat explícitament en termes de propagadors $G_{(m)}$ sense que en principi hi apareguin propagadors diferents. En realitat podem afirmar que aquesta circumstància distingeix l'esquema que presentem aquí d'altres en la mateixa línia desenvolupats per altres autors. En la secció següent insistirem en aquest punt.

Amb tot, i tal com precisàrem en I.2.4 qualsevol propagador definit en la representació equivalent de tipus Hamiltonià, s'ha de poder expressar igualment aquí, i en particular ens referim a la funció resposta. Allí avançàvem que això era perfectament possible, i en aquesta secció ho considerem explícitament.

Recordem que definíem la funció resposta com a la variació en primer ordre de la mitjana de q(t) quan afegíem al drift f(q,t) un camp extern g(t) acoblat a les macrovariables del sistema a través d'una funció $\beta(q,t)$.

Recordem també que havíem aconseguit formular aquella definició introduint un propagador $R(t_1', t_1)$ donat per

$$\bar{R}^{\nu}_{\delta}(t_1', t_1) = -i \left\langle q^{\nu}(t_1')\, \beta^{\mu}_{\delta}(q(t_1), t_1)\, p_{\mu}(t_1) \right\rangle \tag{1}$$

i en el cas particular

$$\beta^{\mu}_{\delta}(q(t), t) = \delta^{\mu}_{\delta} \tag{2}$$

$$R^{\nu}_{\delta}(t_1', t_1) = -i \left\langle q^{\nu}(t_1')\, p_{\delta}(t_1) \right\rangle \tag{3}$$

És ben evident que aquesta expressió per a la funció resposta no es mantindrà un cop s'hagi introduït la representació Lagrangiana, car en aquesta darrera les variables p no intervenen en la descripció, però, sens dubte podrem trobar una forma alternativa d'escriure (3). Per a comprovar-ho partim de la representació Hamiltoniana, i escrivim la mitjana en (3) en termes de la integral funcional

$$\left\langle q^{\mu}(t'')\, p_{\nu}(t') \right\rangle = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \mathcal{D}p(\tau)\, q^{\mu}(t'')\, p_{\nu}(t') \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau \left[p_{\mu}(\tau)\, \dot{q}^{\mu}(\tau) - H(p(\tau), q(\tau), \tau) \right] \right\} \tag{4}$$

Suposem que ens restringim, per comoditat, a sistemes unidimensionals, amb el benentès que tot el que segueix es generalitzarà sens dificultat en el cas de tractar sistemes a m dimensions. Amb aquest supòsit

$$\left\langle q(t'')\, p(t') \right\rangle = \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \mathcal{D}p(\tau)\, q(t'')\, p(t') \exp\left\{ i \int_{t_0}^{t} d\tau \left[p(\tau)\, \dot{q}(\tau) - H(p(\tau), q(\tau), \tau) \right] \right\} \tag{5}$$

En la seva versió discretitzada, corresponent a la prescripció de discretització prepuntual adoptada en tot aquest treball, escrivim les integrals funcionals anteriors de la forma

$$\left\langle q(t'')\, p(t') \right\rangle = \lim_{\substack{n\to\infty \\ (\epsilon\to 0)}} \int_{\Gamma} \left(\prod_{j=1}^{n+1} dq_j \right) \left(\prod_{j=1}^{n+1} \frac{dp_j}{2\pi} \right) q_l\, p_k \exp\left\{ i\epsilon \sum_{j=1}^{n+1} \left[p_j \frac{q_j - q_{j-1}}{\epsilon} - H(p_j, q_{j-1}, t_{j-1}) \right] \right\} \tag{6}$$

amb l. k índexs continguts en la partició (1,..,n+1),

$$\left\langle q(t'')\, p(t') \right\rangle = \lim_{\substack{n\to\infty \\ (\epsilon\to 0)}} \int_{\Gamma} \left(\prod_{j=1}^{n+1} dq_j \right) \left(\prod_{\substack{j=1 \\ (j\neq k)}}^{n+1} \frac{dp_j}{2\pi} \right) \exp\left\{ i\epsilon \sum_{\substack{j=1 \\ (j\neq k)}}^{n+1} \left[p_j \frac{q_j - q_{j-1}}{\epsilon} - H(p_j, q_{j-1}, t_{j-1}) \right] \right\} \int \frac{dp_k}{2\pi}\, p_k \exp\left\{ i\epsilon \left[p_k \frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} - H(p_k, q_{k-1}, t_{k-1}) \right] \right\} \tag{7}$$

Resolguem d'antuvi l'última de les integrals que figuren en (7). Suposarem a més a més que no existeix dependència temporal explícita en la funció Hamiltoniana, i conseqüentment si substituïm

$$H(p_k, q_{k-1}) = p_k f(q_{k-1}) - i/_2\, p_k^2\, D(q_{k-1}) \tag{8}$$

en (7) procedim a resoldre la integral en p_k.

$$\int \frac{dp_k}{2\pi}\, p_k \exp\left\{ i\epsilon \left[p_k \frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} - H(p_k, q_{k-1}) \right] \right\} =$$

$$= \int \frac{dp_k}{2\pi}\, p_k \exp\left\{ i\epsilon \left[p_k \frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} - p_k f(q_{k-1}) + i/_2\, p_k^2\, D(q_{k-1}) \right] \right\} \tag{9}$$

que també podem escriure com

$$= \int \frac{dp_k}{2\pi}\, p_k \exp\left\{ -1/_2\, \epsilon\, p_k^2\, D(q_{k-1}) + i\epsilon\, p_k \left[\frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} - f(q_{k-1}) \right] \right\} \tag{10}$$

o bé

$$= \int \frac{dp_k}{2\pi}\, p_k \exp\left\{ -1/_2\, \epsilon\, D(q_{k-1}) \left[p_k - \frac{i}{D(q_{k-1})} \left(\frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} - f(q_{k-1}) \right) \right]^2 - 1/_2 \frac{\epsilon}{D(q_{k-1})} \left(\frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} - f(q_{k-1}) \right)^2 \right\} \tag{11}$$

$$= \exp\left\{ -1/_2 \frac{\epsilon}{D(q_{k-1})} \left[\frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} - f(q_{k-1}) \right]^2 \right\} \int \frac{dp_k}{2\pi}\, p_k \exp\left\{ -1/_2\, \epsilon\, D(q_{k-1}) \left[p_k - \frac{i}{D(q_{k-1})} \left(\frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} - f(q_{k-1}) \right) \right]^2 \right\} \tag{12}$$

Introduint el canvi de variables usual

$$p_k' = p_k - \frac{i}{D(q_{k-1})} \left(\frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} - f(q_{k-1}) \right) \tag{13}$$

resolem la integral que figura en (12) com

$$\frac{i}{D(q_{k-1})} \left[\frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} - f(q_{k-1}) \right] \int \frac{dp_k'}{2\pi} \exp\left\{ -1/_2\, \epsilon\, D(q_{k-1})\, p_k'^2 \right\} =$$

$$= \frac{i}{D(q_{k-1})} \left[\frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} - f(q_{k-1}) \right] \frac{1}{\left[2\pi\epsilon\, D(q_{k-1}) \right]^{1/2}} \tag{14}$$

i per tant portant aquest resultat a (12), escrivim finalment la integral en (10) de la forma

$$\frac{i}{D(q_{k-1})}\left[\frac{q_k-q_{k-1}}{\epsilon}-f(q_{k-1})\right]\frac{1}{[2\pi\epsilon D(q_{k-1})]^{1/2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\epsilon\frac{1}{D(q_{k-1})}\left[\frac{q_k-q_{k-1}}{\epsilon}-f(q_{k-1})\right]^2\right\} \tag{15}$$

i substituint en (7)

$$\langle q(t'')\,p(t')\rangle=\lim_{\substack{n\to\infty\\(\epsilon\to 0)}}\int_{\mathbb{R}}\left(\prod_{j=1}^{n+1}dq_j\right)q_\ell\int\left(\prod_{\substack{j=1\\(j\neq k)}}^{n+1}\frac{dp_j}{2\pi}\right)\exp\left\{i\epsilon\sum_{\substack{j=1\\(j\neq k)}}^{n+1}\left[p_j\frac{q_j-q_{j-1}}{\epsilon}-H(p_j,q_{j-1})\right]\right\}$$

$$\cdot\frac{i}{D(q_{k-1})}\left[\frac{q_k-q_{k-1}}{\epsilon}-f(q_{k-1})\right]\frac{1}{[2\pi\epsilon D(q_{k-1})]^{1/2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\epsilon\frac{1}{D(q_{k-1})}\left[\frac{q_k-q_{k-1}}{\epsilon}-f(q_{k-1})\right]^2\right\} \tag{16}$$

Si realitzéssim les integrals restants sobre les variables p, en la forma que ja s'ha vist quan hem introduït la representació Lagrangiana, arribaríem a

$$\langle q(t'')\,p(t')\rangle=\lim_{\substack{n\to\infty\\(\epsilon\to 0)}}\int_{\mathbb{R}}\left(\prod_{j=1}^{n+1}d^{n}q_j\right)q_\ell\frac{i}{D(q_{k-1})}\left[\frac{q_k-q_{k-1}}{\epsilon}-f(q_{k-1})\right]\prod_{j=1}^{n+1}\frac{1}{[2\pi\epsilon D(q_{j-1})]^{1/2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{\epsilon}{D(q_{j-1})}\left[\frac{q_j-q_{j-1}}{\epsilon}-f(q_{j-1})\right]^2\right\} \tag{17}$$

i escrivint tot això en termes d'una integral funcional

$$\langle q(t'')\,p(t')\rangle=\int_{q(t_0)=q_0}\mathcal{D}q(\tau)\,q(t'')\frac{i}{D(q(t'))}\left[\dot q(t')-f(q(t'))\right]\exp\left\{-\int_{t_0}^{t}d\tau\,\mathcal{L}(q(\tau),\dot q(\tau))\right\} \tag{18}$$

que pot generalitzar-se per al cas m- dimensional en la forma

$$\langle q^{\mu}(t'')\,p_{\omega}(t')\rangle=\int_{q(t_0)=q_0}\mathcal{D}q(\tau)\,q^{\mu}(t'')\,i\,D_{\omega\sigma}(q(t'))\left[\dot q^{\sigma}(t')-f^{\sigma}(q(t'))\right]\exp\left\{-\int_{t_0}^{t}d\tau\,\mathcal{L}(q(\tau),\dot q(\tau))\right\} \tag{19}$$

on hem prescindit per comoditat del subíndex en la Lagrangiana, segons el que s'ha dit a propòsit de (I.2.27). Substituint en (3) haurem aconseguit l'expressió per a la funció resposta que estàvem cercant

$$R^{\mu}_{\omega}(t'',t')=\int_{q(t_0)=q_0}\mathcal{D}q(\tau)\,q^{\mu}(t'')\,D_{\omega\sigma}(q(t'))\left[\dot q^{\sigma}(t')-f^{\sigma}(q(t'))\right]\exp\left\{-\int_{t_0}^{t}d\tau\,\mathcal{L}(q(\tau),\dot q(\tau))\right\} \tag{20}$$

Podem considerar una particularització especialment interessant, que consisteix en suposar la matriu de difusió constant. En aquest cas

$$R^{\mu}_{\nu}(t'',t') = D_{\nu\sigma} \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\; q^{\mu}(t'') \left[\dot{q}^{\sigma}(t') - f^{\sigma}(q(t'))\right] \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\, \mathcal{L}(q(\tau),\dot{q}(\tau))\right\} \tag{21}$$

o en termes de mitjanes

$$R^{\mu}_{\nu}(t'',t') = D_{\nu\sigma} \left[\langle q^{\mu}(t'')\,\dot{q}^{\sigma}(t')\rangle - \langle q^{\mu}(t'')\, f^{\sigma}(q(t'))\rangle \right] \tag{22}$$

que també podem escriure com

$$R^{\mu}_{\nu}(t'',t') = D_{\nu\sigma} \left[\frac{\partial}{\partial t'} \mathcal{G}^{\mu\sigma}(t'',t') - \langle q^{\mu}(t'')\, f^{\sigma}(q(t'))\rangle \right] \tag{23}$$

Concluïm que la funció resposta admet en representació Lagrangiana una expressió tal com (23), en termes tan sols de propagadors definits en aquella representació. Afegim que adoptant una expressió concreta per al drift, depenent del problema a considerar, i escrivint els propagadors que figuren en (23) en funció de les seves parts connectades, arribaríem, cas de caldre, a poder escriure la funció resposta en termes de propagadors connectats, amb els quals hem estat treballant en la segona part d'aquest treball.

3.2 FORMULACIÓ MATRICIAL DE L'EQUACIÓ DE DYSON EN ESQUEMES TIPUS MSR.

En aquesta secció ens interessa comparar, encara que sigui breument, el formalisme desenvolupat en la segona part d'aquest treball amb esquemes anàlegs als que existeixen en la literatura, i especialment ens centrarem en el de Martin Siggia i Rose (1973), per ser un punt de referència gairebé obligat per a bona part de treballs posteriors sobre aquestes mateixes qüestions.

Analitzant aquell article s'observa que com a etapa intermèdia del formalisme MSR, s'estableix també una equació de Dyson com la que hem formulat en 3.4, encara que aquells autors la presenten en forma matricial. Així defineixen una matriu 2x2, que notarem $\underset{\sim}{G}_{(2)}$, els components de la qual estan relacionats amb la funció de correlació, o més exactament amb el propagador connectat de dos punts, i amb la funció resposta del sistema. Més pròpiament

$$\underset{\sim}{G}(\mu,t'';\nu,t') \equiv \begin{pmatrix} G(\mu,t'',\nu,t') & R^{\mu}_{\nu}(t'',t') \\ R^{\nu}_{\mu}(t',t'') & 0 \end{pmatrix} \tag{24}$$

o abreujadament

$$\underset{\sim}{G}_{(2)} \equiv \begin{pmatrix} G_{(2)} & R \\ R^{T} & 0 \end{pmatrix} \tag{25}$$

L'element nul de (24) apareix com a conseqüència que correspondria al propagador amb dos components de moment, i aquest, si recordem el que diguérem en I.1.4, arribem a la conclusió que suposa una contribució nul.la a $\underset{\sim}{G}_{(2)}$.

En la hipòtesi establerta en 2.6 correponent a prendre el propagador condensat idènticament nul, (2.94), la matriu $\underset{\sim}{G}_{(2)}$ definida així satisfà una equació de Dyson del tipus

$$\underset{\sim}{G}_{(2)} = \underset{\sim}{G}_{o}(2) + \underset{\sim}{G}_{o}(2)\underset{\sim}{\Sigma}G_{(2)} \tag{26}$$

o equivalentment

$$\underset{\sim}{\Sigma} = \underset{\sim}{G}_{o}^{-1}(2) - \underset{\sim}{G}^{-1}_{(2)} \tag{27}$$

amb $\underset{\sim}{G}_{o(2)}$ corresponent a la matriu dels propagadors lliures

$$\underset{\sim}{G}_{o}(2) \equiv \begin{pmatrix} G_{o}(2) & R_{o} \\ R_{o}^{T} & 0 \end{pmatrix} \tag{28}$$

A partir de (27) i escrivint l'operador autoenergia $\sum$ en forma matricial

$$\underset{\sim}{\Sigma} = \begin{pmatrix} 0 & \Pi \\ \Pi^{T} & \Sigma \end{pmatrix} \tag{29}$$

és immediat comprovar que les components no nul.les d'aquest operador vénen donades per

$$\Sigma = -R_0^{-1} G_{0(2)} (R_0^T)^{-1} + R^{-1} G_{(2)} (R^T)^{-1} \tag{30}$$

$$\Pi^T = R_0^{-1} - R^{-1} \tag{31}$$

$$\Pi = (R_0^T)^{-1} - (R^T)^{-1} \tag{32}$$

Indiquem que en establir una equació de Dyson en forma matricial tal i com es comenta ara, podria haver-se realitzat per un procediment totalment diferent, que consistiria en la ressumació de les contribucions corresponents a l'autoenergia pròpia, contribucions que apareixen en un desenvolupament pertorbatiu convencional dels que hem considerat en la primera part, quan es consideren per a la funció de correlació i de resposta. Això darrer fou considerat explícitament per M. San Miguel en la seva tesi doctoral. (Garrido i San MIguel (1978b)).

Per altra banda no voldríem insistir gaire més en les particularitats que suposa el plantejament matricial que hem indicat aquí, però referint-nos concretament a l'esquema MSR, sí que voldríem comentar-ne dos aspectes concrets. El primer fa referència a l'origen d'aquest caràcter matricial de les equacions, i en el segon s'hi indicaran algunes coincidències sota les quals és possible de trobar relacions útils entre les components matricials tant de $\underset{\sim}{G}_{(2)}$ com de $\underset{\sim}{\Sigma}$. Amb això se simplifica el tractament algebraic de les equacions en què intervenen, i per la mateixa raó aquestes darreres són de resolució si bé normalment aproximada, però més plausible.

Quant al primer punt, el contingut del qual és tractat de manera més explícita en el treball de Martin Siggia i Rose (1973), indicarem que el caràcter matricial de l'equació de Dyson, o equivalentment de $\underset{\sim}{G}_{(2)}$, va molt relacionat al fet de treballar simultàniament amb els dos tipus de propagadors, funcions de correlació i de resposta, o cosa que és equivalent, va molt lligada al fet de referir-nos simultàniament a variables macroscòpiques i a "variables" moment, amb la qual cosa la dinàmica estocàstica del sistema en qüestió, s'estableix en termes d'equacions d'evolució temporal per a operadors relacionats amb les coordenades macroscòpiques, i alhora s'estableixen equacions anàlogues per als operadors associats als "moments". Es oportú de recordar en aquest moment el que diguérem en I-1-2 a propòsit del plantejament operacional d'una dinàmica estocàstica com a alternativa a la utilització d'una descripció en termes d'integrals funcionals, i podem ben dir que aquest plantejament operacional és a la base del formalisme MSR.

Pel que fa al segon punt potser calgui precisar una mica més. A primer cop d'ull semblarà raonable pensar que resoldre l'equació de Dyson matricial (26) suposarà una complexitat més gran que no pas fer-ho per a una equació del mateix estil però lineal, qualificatiu en aquest cas sinònim de no matricial, com la que hem plantejat nosaltres. Recordem que tot i referir-nos a una equació de Dyson, és pròpiament una íntegro-diferencial del tipus de les de Baym-Kadanoff, aquella la resolució de la qual ens interessa, i com és de preveure, en la major part dels casos haurem de recórrer a aproximacions adequades per a les resolucions. A més a més l'operador autoenergia s'ha de construir iterativament, i això, evidentment, per a totes les seves components en el cas matricial. Finalment només afegir que en la construcció d'aquestes components, o en la pròpia resolució de (26), els propagadors $G_{(2)}$ i R, apareixeran barrejats, cosa que contribueix a què el problema esdevingui més enrevessat.

Amb tot el que hem dit podríem pensar que el problema pot ser de difícil tractament. No obstant això el formalisme MSR es considera fonamental en la Mecànica Estadística Moderna, i ha estat desenvolupat àmpliament, clarificat i aplicat posteriorment. (Phytian (1975,1976), Dekker i Haake (1975b), entre altres.). Aixo és degut, entenem, a què les complicacions apuntades anteriorment, queden notablement reduïdes en les aplicacions usuals on se suposa el sistema, en la major part dels casos operant en un règim estacionari ben definit. En aquestes condicions i sota hipòtesis força generals per al drift de la FPE, és possible de demostrar l'existència de relacions entre les funcions de correlació i de resposta, que són l'expressió del teorema de Fluctuació-Dissipació, ben conegut, abreujadament FDT, (Dekker i Haake (1975a), Garrido i San Miguel (1978b)). Com a conseqüència de l'esmentat teorema no és difícil d'establir identitats entre les components matricials de l'operador autoenergia, el resultat de tot el que hem dit anteriorment, essent una simplificació notable en el tractament d'una equació del tipus (26).

Pel que fa al formalisme que hem presentat aquí, hem d'assenyalar que no ens cal recórrer a l'existència d'un FDT per a escriure l'equació de Dyson de forma que explícitament només hi aparegui un tipus de propagador, car és una conseqüència pròpia de l'ús d'una representació Lagrangiana, i en aquest sentit la seva utilització pot resultar avantatjosa.

3.3 PROPAGADORS ESTACIONARIS I TEOREMA DE FLUCTUACIÓ-DISSIPACIÓ.

Hem acabat la secció anterior fent referència al

FDT. Aquesta secció la dedicarem a un estudi ampli, tot i que no serem pas exhaustius, de les seves expressions particulars que siguin més interessants per a nosaltres, juntament amb les condicions de validesa corresponents. Com que per altra banda les relacions que estableix aquest teorema ho són entre propagadors estacionaris, és interessant que abans discutim breument aquesta circumstància. En I.1.14 dèiem que l'estat d'un sistema dinàmico-estocàstic el qualificaríem d'estacionari quan les seves propietats fossin invariants davant d'una traslació temporal; recordem que això es manifestava, per exemple, en què sota tals hipòtesis la funció de correlació depenia únicament de la diferència entre els seus arguments temporals, lògicament pel que fa a dependència temporal. També comentàrem que eren dues les condicions sota les quals s'havia de parlar d'estacionarietat:

i) que l'operador Hamiltonià no contingués explícitament cap dependència temporal, i

ii) que el càlcul de propagadors fos realitzat amb la solució estacionària de la FPE.

En aquestes circumstàncies és fàcil de veure allò que deiem de la invariància davant de traslacions temporals de les seves propietats. Així, per a una mitjana de quantitats preses a dos temps diferents serà

$$\left\langle f(q(t_2))\, g(q(t_1))\right\rangle = \int_{\Gamma} d^m q_1 d^m q_2\; f(q_2) g(q_1) P(q_2,t_2/q_1,t_1) P(q_1,t_1) \qquad (33)$$

i en les hipòtesis anteriors

$$P(q_1,t_1) \equiv P_{st}(q_1) \qquad (34)$$

$$P(q_2,t_2/q_1,t_1) \equiv P(q_2,t_2-t_1/q_1,0) \qquad (35)$$

amb la qual cosa aquella mitjana depèn amb el temps a través de $(t_2 - t_1)$.

Tractem ara el teorema de fluctuació - dissipació. L'existència de relacions entre les funcions de correlació i de resposta fou proposta per Kubo (1959) en el cas canònic, tant clàssic com quàntic, per a estats d'equilibri. En general per a sistemes descrits per una dinàmica de Fokker-Planck i en règims estacionaris foren establertes detalladament per Dekker i Haake (1975) i més tard de manera precisa foren descrites per Garrido i San Miguel (1978b). D'aquesta manera es tornaren a obtenir resultats de Kawasaki, Ma i Mazenko, Enz i Garrido i altres, les referències dels quals poden trobar-se en els articles esmentats. En l'apèndix B es dedueix com a exemple una d'aquestes relacions de fluctuació-dissipació, i si l'incloïm en aquest treball és únicament per a provar la capacitat de la representació funcional que hem emprat aquí, a l'hora d'obtenir alguns resultats formals de particular interès, com poden ser, en aquest cas, relacions pròpies del FDT. En aquesta secció hi presentem els resultats finals, així com també alguns comentaris.

Donat un sistema estocàstic descrit en el seu estat estacionari per una solució, $P_{st}(q)$, de la FPE corresponent, i expressable a través d'un potencial generalitzat $\mathcal{H}(q)$ mitjançant

$$P_{st}(q) \equiv \mathcal{N} \exp\{-\mathcal{H}(q)\} \tag{36}$$

i en el cas que el drift del sistema derivi d'aquest potencial a través de

$$f^{\mu}(q) = -\tfrac{1}{2}\, D^{\mu\nu} \frac{\partial \mathcal{H}(q)}{\partial q^{\nu}} \tag{37}$$

és possible de demostrar (Apendix B) que es verifica

$$\langle q^{\mu}(t_1') \, f^{\sigma}(q(t_1)) \rangle = -\tfrac{1}{2}\, D^{\sigma\delta} R^{\mu}_{\delta}(t_1' - t_1) \tag{38}$$

que juntament amb (23) permet d'establir una relació entre la funció de correlació i de resposta donada per

$$\frac{\partial}{\partial t_1} \Phi^{\alpha\mu}(t_1-t'_1) = \frac{1}{2} D^{\alpha\nu} R^{\mu}_{\nu}(t'_1-t_1) - \frac{1}{2} D^{\mu\nu} R^{\alpha}_{\nu}(t_1-t'_1) \tag{39}$$

que constitueix un cas particular de l'anomenat FDT de Ma i Mazenko, aplicable a sistemes on el drift és purament dissipatiu o irreversible i en situació de balanç detallat.

És obvi que podríem buscar solucions més generals que (37) amb $\mathcal{H}(q)$ donat per (36); amb això aconseguiríem altres formes més amplies de FDT. Així podem suposar el drift donat per

$$f^{\sigma}(q) = J^{\sigma}(q) - \frac{1}{2} D^{\sigma\delta} \frac{\partial \mathcal{H}(q)}{\partial q^{\delta}} \tag{40}$$

amb

$$J^{\sigma}(q) \equiv -\frac{1}{2} d^{\sigma\delta} \frac{\partial \mathcal{H}(q)}{\partial q^{\delta}} \tag{41}$$

i d una matriu antisimètrica

$$d^{\sigma\delta} = -d^{\delta\sigma} \tag{42}$$

amb la qual cosa si n'introduïm una altra d'elements

$$\mathcal{D}^{\sigma\delta} \equiv -(d^{\sigma\delta} + D^{\sigma\delta}) \tag{43}$$

escriurem (40) en la forma

$$f^{\sigma}(q) = \frac{1}{2} \mathcal{D}^{\sigma\delta} \frac{\partial \mathcal{H}(q)}{\partial q^{\delta}} \tag{44}$$

En aquestes condicions i procedint anàlogament al cas anterior escriuríem una relació semblant a (39) com

$$\langle q^{\mu}(t'_1) f^{\sigma}(q(t_1)) \rangle = \frac{1}{2} \mathcal{D}^{\sigma\delta} R^{\mu}_{\delta}(t'_1-t_1) \tag{45}$$

i substituint en (23)

$$R^{\mu}_{\nu}(t'_1-t_1) = D_{\nu\sigma} \frac{\partial}{\partial t_1} \Phi^{\mu\sigma}(t'_1-t_1) + \frac{1}{2} D_{\nu\sigma} d^{\sigma\delta} R^{\mu}_{\delta}(t'_1-t_1) + \frac{1}{2} D_{\nu\sigma} D^{\sigma\delta} R^{\mu}_{\delta}(t'_1-t_1) \tag{46}$$

d'on

$$\frac{1}{2} R^{\mu}_{\;\nu}(t_1'-t_1) = D_{\nu\sigma}\frac{\partial}{\partial t_1}\mathcal{G}^{\mu\sigma}(t_1'-t_1) + \frac{1}{2} D_{\nu\sigma}\, d^{\sigma\delta} R^{\mu}_{\;\delta}(t_1'-t_1) \tag{47}$$

Contraent amb $D^{\alpha\nu}$ en tots dos costats

$$\frac{1}{2} D^{\alpha\nu} R^{\mu}_{\;\nu}(t_1'-t_1) = \frac{\partial}{\partial t_1}\mathcal{G}^{\mu\alpha}(t_1'-t_1) + \frac{1}{2} d^{\alpha\delta} R^{\mu}_{\;\delta}(t_1'-t_1) \tag{48}$$

i tenint en compte l'antisimetria de $d^{\alpha\delta}$ juntament amb la definició de $\mathcal{D}^{\alpha\delta}$ (43)

$$\frac{\partial}{\partial t_1}\mathcal{G}^{\mu\alpha}(t_1'-t_1) = -\frac{1}{2}\mathcal{D}^{\nu\alpha} R^{\mu}_{\;\nu}(t_1'-t_1) \tag{49}$$

o més pròpiament

$$\theta(t_1'-t_1)\frac{\partial}{\partial t_1}\mathcal{G}^{\mu\alpha}(t_1'-t_1) = -\frac{1}{2}\mathcal{D}^{\nu\alpha} R^{\mu}_{\;\nu}(t_1'-t_1) \tag{50}$$

Si calculéssim l'altra contribució per a $t_1 > t_1'$, establiríem el FDT complet com

$$\frac{\partial}{\partial t_1}\mathcal{G}^{\alpha\mu}(t_1-t_1') = \frac{1}{2} R^{\alpha}_{\;\nu}(t_1-t_1')\mathcal{D}^{\nu\mu} - \frac{1}{2}\mathcal{D}^{\nu\alpha} R^{\mu}_{\;\nu}(t_1'-t_1) \tag{51}$$

que simbòlicament representem per

$$\dot{\mathcal{G}} = \frac{1}{2} R\mathcal{D} - \frac{1}{2}\mathcal{D}^{T} R^{T} \tag{52}$$

i que constitueix una altra de les formes particulars de FDT.

3.4 CONSTRUCCIÓ DE Σ SENSE CONTRIBUCIONS DE DERIVADES TEMPORALS DE LES FUNCIONS DE CORRELACIÓ.

Recordem el comentari que férem en la secció 2 d'aquest mateix capítol a propòsit de l'avantatge intrínsec d'una formulació Lagrangiana que consistia en l'absència almenys explícita, de qualsevol propagador relacionat amb la funció resposta.

De totes maneres caldria analitzar més detalladament l'expressió per a l'operador autoenergia, per a comprovar si en qualsevol cas aquell operador és expressat en termes d'una sola mena de línies, car podria ocórrer que, tot i havent estat capaços de plantejar una equació de Dyson no matricial i referida únicament a $G_{(2)}$, existís la possibilitat que a més a més de $G_{(2)}$ figuressin en Σ altres propagadors de manera implícita. Si això ocorrés aquests propagadors no podrien ser més que derivades temporals de $G_{(2)}$, ja que els potencials del problema, explícitament considerats en l'expressió per a Σ o implícitament a través de les funcions vèrtex, actuen multiplicant o com a molt derivant respecte a coordenades temporals. En el supòsit que haguéssim de considerar contribucions que involucressin derivades temporals de la funció de correlació, recordem que estem tractant amb $G_{(1)}=0$, i per tant $G_{(2)}$ coincideix amb la funció de correlació, hauríem de precissar alguns aspectes.

Primerament i si recordem que existeix una relació entre les derivades temporals de la funció de correlació i la funció resposta (23), sembla que aquesta darrera intervindria en l'expressió per a Σ , o cosa que és igual, sembla que hauríem d'arribar a la conclusió que l'operador autoenergia no admet una construcció on hi intervinguin únicament les línies corresponents a la funció de correlació. Tot això sembla més clar sota hipòtesis tals que justifiquèssin l'existència de relacions de fluctuació- dissipació; en tal cas existeix una proporcionalitat entre $G_{(2)}$ i R, (39),(52). Tot això sembla que ens meni a una formulació molt més semblant a la pròpia de l'esquema MSR tot i que es mantindria aquí la característica no matricial de l'equació de Dyson.

Altrament i encara havent prescindit de qualsevol comparació amb altres formalismes, tot ens fa témer que la presència d'aquestes derivades temporals repercutirà en una dificultat més gran per a la resolució de les equacions íntegro-diferencials a que ens veiem aconduïts en l'aplicació d'un esquema pertorbatiu com el que estem considerant aquí.

La conclusió de tot el que hem dit anteriorment seria doncs ben segur, la necessitat d'estudiar amb cert detall l'origen de les eventuals contribucions de derivades temporals de la funció de correlació pensant en la possible incorporació de condicions sota les quals aquelles contribucions fossin nul.les. Aquesta secció la dedicarem a aquest aspecte concret.

Per conveniència considerem el problema més general consistent en l'aparició de derivades temporals primeres qualssevol, a nivell de l'equació obtinguda aplicant el lema d'integració per parts a Z(J), (I.2.64), de la que partírem per a formular l'equació de Dyson. I diem més general, perquè incloïm les derivades temporals primeres associades a l'operador diferencial $\hat{\Lambda}$ allí introduït, amb el benentès que de la pròpia definició d'aquest operador (I.2.74), se'n treurà que les condicions d'anul.lació que aquí s'establiran, correspondrien pròpiament a les de no contribució de funcions resposta en $\sum$, en el supòsit que $\lambda_{\mu\nu} = \lambda_{\nu\mu}$ $\forall \mu, \nu$

Comencem doncs per considerar l'equació (I.2.76) on procedim a una lleugera reordenació dels termes que hi figuren per a separar-ne clarament aquells que involucrin una primera derivada temporal. Així, i suposant el drift sense dependència temporal explícita serà

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L} - J_\mu(\tau) q^\mu(\tau)\right]\right\} \left\{ D_{\mu\nu}\, \ddot{q}^\nu(t') + \left(D_{\nu\sigma} \frac{\partial f^\sigma(q(t'))}{\partial q^\mu(t')} - D_{\mu\sigma} \frac{\partial f^\sigma(q(t'))}{\partial q^\nu(t')} \right) \dot{q}^\nu(t') - D_{\sigma\nu} \frac{\partial f^\sigma(q(t'))}{\partial q^\mu(t')} f^\nu(q(t')) + J_\mu(t') \right\} = 0 \tag{53}$$

a partir de la qual definim el tensor covariant antisimètric T mitjançant

$$T_{\nu\mu}(q) \equiv D_{\nu\sigma} \frac{\partial f^\sigma(q)}{\partial q^\mu(t')} - D_{\mu\sigma} \frac{\partial f^\sigma(q)}{\partial q^\nu} \tag{54}$$

Si recordem els passos successius que ens menaren a l'equació integro-diferencial per a $G_{(2)}$ a partir d'una relació tal com (53), no ens serà difícil d'entendre que les contribucions no desitjades de derivades temporals primeres provenen del terme associat al tensor que acabem d'introduir.

Suposem que el drift del sistema considerat fos tal que derivés d'un potencial $\phi(q)$ a través de

$$f^\sigma(q) = -\tfrac{1}{2} D^{\sigma\delta} \frac{\partial \phi(q)}{\partial q^\delta} \tag{55}$$

En aquest cas substituint en (54) i tenint present la condició d'igualtat davant de derivades creuades, suposada implícitament per a la funció $\phi(q)$, podem arribar fàcilment a la conclusió

$$T_{\nu\mu}(q) = 0 \quad \forall \nu,\mu \tag{56}$$

És a dir, el tensor T definit en (55) és idènticament nul com a condició suficient, si suposem l'existència d'un potencial ϕ (q) tal que verifiqués (55). Ara bé si substituïm una forma tal per al drift en la FPE, no és difícil de caracteritzar una solució estacionària de la mateixa

$$P_{st}(q) = \mathcal{N} \exp\{-\phi(q)\} \tag{57}$$

Si ara recordem de la secció anterior(36) i (37), arribem a la conclusió que la condició suficient establerta per a l'anul.lació de T, correspon a la que empràvem allà per assegurar la validesa d'una manera particular de FDT; concretament l'expressada a través de (39).

Tot el que hem dit ens podria fer pensar que la mateixa condició que justifica la validesa d'aquella forma particular de FDT, amb tot el que implica quant a la possibilitat de reduir el tractament matricial d'un esquema tipus MSR, suposa per a nosaltres la possibilitat d'obviar qualsevol contribució en derivades temporals primeres a nivell d'equació de Dyson, o del seu equivalent de Baym-Kadanoff, i per tant en ambdós plantejaments suposa, tot i que de manera diferent, una simplificació de la manipulació associada a tals equacions.

Per altra banda, i tal i com comentàrem a propòsit de (39), la relació (55) amb el potencial $\phi(q)$ establert segons (57), no és més que la condició potencial de balanç detallat, quan aquesta es refereix a sistemes purament irreversibles o dissipatius. Cal que precisem breument a què es refereix aquesta situació.

La característica de balanç detallat és únicament l'especialització del principi de microreversibilitat (Van Kampen (1975)) a l'estat estacionari. (Graham i Haken (1971); Graham (1973)). Així a partir del conjunt de macrovariables $q(t) = \{q^{\mu}(t)\}$ podrem definir-ne un de nou, transformat per inversió temporal

$$\tilde{q}^{\mu} = \epsilon_{(\mu)}\, q^{\mu} \tag{58}$$

amb $\epsilon_{(\mu)} = \pm 1$ segons que q^{μ} canviï o no de signe quan s'inverteix el pas del temps. En aquestes condicions direm que el sistema es troba en situació de balanç detallat si

$$P_{st}(q_2, t_2-t_1 / \tilde{q}_1, 0)\, P_{st}(q_1) = P_{st}(\tilde{q}_1, t_2-t_1 / \tilde{q}_2, 0)\, P_{st}(q_2) \qquad (59)$$

Foren Graham i Haken (1971) els primers que establiren unes anomenades condicions potencials que venien a ésser la caracterització formal de la situació intrínsecament física de balaç detallat. D'aquesta manera demostraren que llur existència, en relació amb una transformació ben definida de les variables del sistema per inversió temporal, era equivalent a les condicions

$$D^{\mu\nu}(\tilde{q}) = \epsilon_{(\mu)}\epsilon_{(\nu)} D^{\mu\nu}(q) \qquad (60)$$

$$f_i^{\mu}(q) = \tfrac{1}{2}\frac{\partial D^{\mu\nu}(q)}{\partial q^{\nu}} - \tfrac{1}{2} D^{\mu\nu}(q)\frac{\partial \phi(q)}{\partial q^{\nu}} \qquad (61)$$

$$\frac{\partial}{\partial q^{\mu}}\left(f_r^{\mu}(q)\, P_{st}(q)\right) = 0 \qquad (62)$$

on f_r i f_i són les parts reversibles i irreversibles, respectivament, del drift del sistema,

$$f_r^{\mu}(q) = \tfrac{1}{2}\left(f^{\mu}(q) - \epsilon_{(\mu)} f^{\mu}(\tilde{q})\right) \qquad (63)$$

$$f_i^{\mu}(q) = \tfrac{1}{2}\left(f^{\mu}(q) + \epsilon_{(\mu)} f^{\mu}(\tilde{q})\right) \qquad (64)$$

i amb $\phi(q)$ en (61) relacionat amb $P_{st}(q)$ a través de (57). En el cas particular de sistemes amb difusió constant i purament irreversibles, (60) i (62) són irrellevants, mentre que (61) es converteix en (55). En el treball de San Miguel i Chaturvedi (1980) s'hi poden trobar altres caracteritzacions de la situació de balanç detallat, així com també s'hi poden trobar conseqüències de llur no existència.

En aquest moment voldríem avançar un argument que justifiqués en certa manera el resultat a què hem arribat, és a dir, de com la condició de balanç detallat suposa, per a la classe de sistemes irreversibles considerats, l'anul.lació del terme en derivades temporals primeres en (53). Per tal de veure-ho, suposem que totes les variables,del sistema fossin parells enfront a inversió temporal; en aquest cas la pròpia equació (53) serà invariant davant d'inversió temporal , o no ho serà, depenent del coeficient del terme en $\dot{q}(t)$. Si ara recordem el que afirmavem una mica més amunt en el sentit que la condició de balanç detallat està relacionada amb el principi de microreversibilitat temporal, no és estrany que aquest principi, cas d'existir, es manifestés en equacions dinàmiques del tipus de (53) amb la qual cosa finalment una condició tal com (56) resulti coherent. Per a una discussió més extensa d'aquesta qüestió es pot revisar Garrido, Lurié i San Miguel (1979).

Indubtablement ens hauria complagut poder expressar les condicions d'anul.lació (56) de manera totalment equivalent, per exemple, a les condicions potencials de balanç detallat, plantejades en llur forma més general, (60),(61), (62), sense haver de recórrer a una subclasse de sistemes caracteritzats pel seu comportament purament irreversible. Això no obstant no creiem que sigui possible, i per a explicar-ho se'ns ocorre un argument que fa referència al contingut, segons el nostre entendre diferent, entre els dos tipus de condicions. Per una banda les que fan referència a la situació de balanç detallat posseeixen un significat físic cocret referit a sistemes en estats estacionaris, i permeten d'aplicar als que obeeixen aquestes condicions, idees i raonaments usuals en el tractament d'estats en equilibri tèrmic, i que poden ser d'utilitat per a caracteritzar fins i tot el seu comportament dinàmic. (Graham (1973)).

Per altra banda, les condicions d'anul.lació de T, posseeixen més aviat, a almenys ho entenem així, un significat formal i referit a la possibilitat d'expressar l'operador autoenergia sens presència, ni implícitament ni explícitament, de propagadors diferents d'aquells que estan associats amb la funció de correlació.

Si ens referim a les condicions per al drift del sistema sota les quals s'ha de parlar de relacions de fluctuació-dissipació, tampoc ens sembla possible de fer-les correspondre exactament a les condicions d'anul.lació d'aquell tensor. En aquest sentit no hem estat capaços de demostrar que formes més generals, com (44), que corresponen a sistemes amb drift amb components reversibles i irreversibles alhora, suposessin T idènticament nul.

De totes maneres, sí que val la pena assenyalar que l'aplicació del formalisme MSR en les condicions d'existència de relacions de fluctuació-dissipació, ha estat desenvolupada, bàsicament que nosaltres coneguem, per a una situació tal com (55), i en aquest sentit, el FDT concret és (39). (Dekker i Haake (1975b)). En aquest cas ja hem dit que la validesa del FDT és completament equivalent a l'anul.lació de T.

Ens cal encara insistir en un altre detall, que fa referència al caràcter no necessari, sinó més aviat suficient de (55), amb tot el que significa de la possibilitat de condicions més generals que aquella per a assegurar (56), i en quelcom més important, que podem concretar dient que en el cas eventual d'existència d'un FDT, aquest ens proporciona relacions molt útils però que corresponen únicament a propagadors estacionaris, i en aquest sentit no creiem que pugui suposar massa avantatge en el supòsit que pretenguéssim aplicar un esquema com el MSR a situacions no estacionàries. En el cas nostre podríem en canvi emprar una condició tal com (55), i no obstant això no tenim cap motiu per aplicar-la, en el context del desenvolupament pertorbatiu desenvolupat en aquesta segona part, a una dinàmica estrictament estacionària, sinó que podríem considerar estadis anteriors de l'evolució del sistema envers aquella dinàmica.

I ja per acabar aqesta discussió ens sembla interessant de comentar un treball molt recent de Graham (1981) on hi qüestiona el paper fonamental que semblava jugar la condició de balanç detallat, en la resolució d'una FPE per a la densitat de probabilitat condicional estacionària $P(q,t/q_0)$. Si portem aquest punt fins aquí és perquè l'autor proposa, tal i com veurem a continuació, que la qüestió a propòsit d'aquella resolució, no s'hauria de plantejar en termes de l'existència o no existència de balanç detallat, sinó més aviat en si el drift del sistema satisfà o no una relació potencial que ens recorda la nostra condició suficient (55). Així Graham insisteix en l'existència d'una gran llibertat a l'hora de fixar la transformació per inversió temporal de les variables i els paràmetres d'un sistema, llibertat que permet sempre de trobar una transformació tal respecte a la qual el sistema estarà sempre en condició de balanç detallat, tot i que en alguns casos, aquesta transformació és suficientment complicada com per a poder especificar-se només a posteriori, un cop s'hagi trobat la solució estacionària de la FPE. En aquest sentit l'autor proposa que l'antiga distinció entre sistemes amb balanç detallat, i sense, s'hauria de replantejar en termes de balanç detallat manifest, és a dir essent coneguda la transformació per inversió temporal a priori, i sistemes amb balanç detallat ocult en què aquella transformació no es coneix abans de la resolució de la FPE. A part d'aquestes consideracions, marginals fins a cert punt considerades com a qüestió de principi, Graham va una mica més enllà i intenta de generalitzar el que havia realitzat Risken (1972) quant a la resolució de la FPE quan existia balanç detallat explícit. Per això defineix un potencial ϕ (q) a partir de $P_{st}(q)$, en la forma usual (57), i un drift d(q) a partir de

$$d^{\mu}(q) = \tfrac{1}{2} \frac{\partial D^{\mu\nu}(q)}{\partial q^{\nu}} - \tfrac{1}{2} D^{\mu\nu} \frac{\partial \phi(q)}{\partial q^{\nu}} \qquad (65)$$

notant per r(q) la part del drift total f(q) no continguda en d(q); és a dir

$$r^{\mu}(q) = f^{\mu}(q) - d^{\mu}(q) \qquad (66)$$

En aquestes condicions demostra que si r(q) és nul, la FPE pot transformar-se sempre en una equació hermítica, mentre que en cas contrari això no és mai possible. En qualsevol cas la resolució de la corresponent FPE transformada passa pel tractament d'un problema de vectors i de valors propis, que serà hermític en el primer cas i en el segon no ho serà. Els avantatges de tractar amb classes de sistemes corresponents a r (q) nul semblen ser clares en aquest sentit. Insistim però, que tenint en compte (65) i (66), i per al cas de matriu de difusió constant, aquesta condició és completament equivalent a la que hem establert nosaltres (55). No volem analitzar amb més detall aquesta característica comuna, però sí que ens semblava oportú de plantejar-la.

PART III : APLICACIÓ AL LASER AMB UN ÚNIC MODE.

INTRODUCCIO.

Si volem que tota la formulació teòrica emprada fins aquest moment tingui una materialització concreta davant un problema específic, ens cal escollir un sistema amb característiques tals que una descripció de llur dinàmica estocàstica s'ajusti a la que aquí hem plantejat.

I diem això perquè la nostra intenció primera, cal dir-ho una vegada més, era l'estudi de reaccions químiques, sistemes en què, tal com ja vàrem veure en el pròleg d'aquest treball, una descripció amb continguts estocàstics podia tenir un innegable interès. Tanmateix, i com també ja vàrem esmentar allí, la descripció no determinista d'un problema no sol ser única, i pel que fa a processos reactius, podem afirmar, en la mesura dels nostres coneixements, que sol ésser més comuna una formulació en termes de les anomenades equacions mestres, " master equation " (Oppenheim et als. 1977)., i no pas mitjançant una equació de Fokker- Planck, la dinàmica associada a la qual hem adoptat d'entrada en aquest treball.

També ens calia resoldre una altra dubte en el moment de la nostra elecció, que consistia en decidir-nos o bé per un sistema tractat parcialment o bé escollir un sistema ben conegut, que fins i tot hagués estat objecte d'anàlisi en el context de teories pertorbatives semblants a les que aquí proposem. Davant de la disjuntiva, vàrem decidir-nos per aquesta darrera possibilitat, moguts, ben segur, per un intent de confrontar els resultats a què poguéssim arribar, i en un intent de familiaritzar-nos amb tota aquesta formulació, fent- la així més transparent per a nosaltres, pensant, no cal dir-ho, en posteriors objectius, potser més ambiciosos.

En la part III que segueix a continuació, ens referim a un sistema amb les característiques que esmentàvem darrerament, i que consisteix en un laser descrit per un únic mode pel que fa al camp elèctric associat a la radiació generada pels àtoms excitats.

Diguem de bon començament que no hem pretés en cap moment de fer un estudi rigorós d'aquella acció laser, ni tampoc somniàvem amb millorar les quasi perfectes determinacions que de la magnitud d'interés, anomenada factor de " linewith ", havien fet anteriorment altres autors, com Grossmann(1978), Dekker i Haake (1975,1979), etc..,. Aquell sistema representa més aviat per a nosaltres, una possibilitat d'aplicació del que hem anat desenvolupant fins ara. No obstant això, aclarim que els resultats a què hem arribat els considerem raonablement satisfactoris, especialment pel que fa al laser operant en un règim entorn de l'anomenat llindar, punt aquest darrer en que el laser canvia marcadament de comportament.

Diguem també que el procediment de resoluió comença tractant l'aproximació de vèrtexs nuls, també qualificada com a gaussiana, o de Hartree-Fock, la qual superem un xic més endavant, per mitjà de la incorporació d'una primera aproximació als vèrtexs $\Gamma_{(4)}$ i $\Gamma_{(6)}$.

1. APLICACIÓ AL LASER UNIMODAL.

1.1 AUTOORGANITZACIÓ EN UN LASER.

Un sistema que està en la frontera entre els que formen part de la natura i els que poden considerar-se de laboratori és el laser. Tractem aquí al laser com un muntatge experimental, tot i que l'acció del laser operant en la regió de les microones, ha estat observada també en l'espai interestelar. Usualment una il.luminació amb llum d'una certa longitut d'ona excita als àtoms de certs elements específics, i aquests àtoms actuen com si fossin antenes microscòpiques, emetent trens d'ones durant intervals molt petits, de l'ordre de 10^{-8}s., i amb una longitut d'uns metres. Quan comencem a aportar energia en dosis petites, el laser actua com una làmpara: cada àtom emeteix incoherentment dels altres. Però si augmenten el subministrament d'energia fins a un cert valor, que s'en diu llindar del laser, té lloc un fenomen totalment nou: els àtoms comencen a oscil.lar coherentment, i ara emeten trens d'ona, la longitut dels quals pot ser de centenars de kilòmetres, mentre que la intensitat de la llum emesa augmenta drasticament per increments molt petits de l'énergia aportada. L'extraordinaria coherencia de la llum laser reflexa el comportament organitzat dels dipols atòmics, i és un dels exemples més ben estudiats d'entre els que es qualifiquen de cooperatius. (Haken (1973,1974,1977)). El canvi sobtat de les propietats estadístiques de la llum del laser prop del llindar ja fou predit per Haken (1964), i analitzat amb detall des d'aleshores. No pretenem descriure rigurosament el comportament a nivell microscòpic del sistema, ni la formulació matemàtica corresponent, però sí indicar esquemàticament algunes de les seves característiques per a entendre millor el contingut físic del problema. Altres tractaments més detallats poden trobar-se en Haken (1970), i Graham (1973).

Tres són els components o modes que tenen un paper fonamental. D'una banda el mode corresponent al camp de llum generat pels atoms excitats, que vindrà representat per l'amplitud complex del camp elèctric corresponent. El considerar un sol mode pel camp elèctric és un cas particular de resolució del problema, que correspon al laser unimodal. D'altra banda cal considerar els modes corresponents a la materia, el moment dipolar atòmic, i una magnitud relacionada amb la població dels nivells energètics atòmics, ocupació dels quals vindrà fortament influenciada per la intensitat de la font externa actuant sobre el sistema. Tots aquests modes satisfan equacions de moviment en les que hi són acoblats, i on intervenen forces fluctuants d'origen divers. Tal com es va comentar en I.1.1, habitualment es pretè la reducció del nombre de graus de llibertat rellevants , de forma que ens quedem amb l'equació de moviment del més lent, anomenat paràmetre d'ordre, i per tant caldrà redefinir la força estocàstica que inicialment actuava damunt ell.

D'acord amb aquesta descripció, es suposa que el temps de relaxació del moment dipolar atomis és molt més petit que el corresponent al camp electric oscil.lant, i per tant té sentit una eliminació adiabàtica, per la que el mode de variació lenta, l'amplitud del camp electric, tendeix a esclavitzar als de variació rapida associats als atoms. Si en aquestes condicions, modifiquem adequadament la població dels nivells atòmics per mitjà d'una dosi més gran d'energia externa, amb el que es tendiria a invertir-ne l'ocupació, el mode rellevant pot oscil.lar de forma no esmorteïda, o dit d'altra manera, pot tornar-se inestable, i adquirir un temps de relaxació molt gran. Estem en aquest moment en el llindar del laser. Afegim finalment que d'acord amb l'analogia comentada en el pròleg d'aquest treball, entre sistemes que evolucionen en regims cooperatius, i aquells altres que experimenten transicions de fase de no equilibri, es possible interpretar l'acció laser, com si fos una transició de segon ordre. (Graham (1973)).

1.2 TRACTAMENT ESTOCÀSTIC DEL LASER UNIMODAL.

Seguint les idees apuntades en la secció anterior, Haken (1964) va establir que l'amplitud complex del camp electromagnètic oscil.lant en resonància amb els àtoms del material sò - lid del laser, que per conveniencia va suposar que només tenien dos nivells energètics, venia regida per una equació de moviment característica de l'equació de Van der Pol al que se li afegia aditivament un terme estocàstic o soroll, que considerà blanc, gaussia, amb mesura nul.la i matriu de correlació - constant. Així, si indiquem per b l'amplitud del mode seria

$$db/dt = \beta(a-b^*b)b + \xi(t) \tag{1}$$

on $\xi(t)$ és el soroll

$$\begin{gathered}\langle\xi(t)\rangle = 0 = \langle\xi^*(t)\rangle \\ \langle\xi(t)\xi(t')\rangle = \langle\xi^*(t)\xi^*(t')\rangle = 0 \\ \langle\xi(t)\xi^*(t')\rangle = 4\,\delta(t-t')\end{gathered} \tag{2}$$

i β i a són contants reals característiques del laser, que són explícitament calculades en aquell treball. Eventualment, i nosaltres així ho farem, es pot prendre $\beta=1$. a és el paràmetre que fixa el llindar del laser, i per tant per a valors de a negatius, respectivament positius, direm que el laser esta operant per sota, respectivament per sobre, del llindar . Indiquem ara, tal i com assenyalen Deker i Haake (1975b), que l'ús de la dinàmica bidimensional de l'oscil.lador de Van der Pol per a descriure el laser unimodal, és especialment útil per a estudiar-lo operant en condicions no molt lluny del llindar. De fet, aixo no impedeix que tant els autors esmentatas, com nosaltres mateixos, ens ocupem del problema en la forma més general possible, i en aquest sentit, intentarem aportar conclusions per a regims qualssevol, tot i que potser s'haurà d'anar amb certa precaució en les que facin referènrencia a situacions allunyades de la llinda, pel que s'ha apuntat abans. En qualsevol cas, aquesta consideració tampoc ha de ser excessivament preocupant, ja que la regió amb més interès i contingut físic és la centrada al voltant del llindar , que és on hi ha una marcada transició en el comportament del laser, segons es va comentar en la secció anterior.

Tornant a l'equació tipus Langevin (1), notem que un cop establerta es va procedir a convertir-la en una tipus Fokker-Planck. Així Risken (1965), fa quasi dues decades, va proposar una transformació de les variables del sistema a coordenades polars, i amb elles va formular una FPE de la que va obtenir una solució estacionària. Amb Vollmer (Risken i Vollmer(1967a)) va aconseguir transformar la FPE en una equació unidimensional del tipus Schrödinger, a partir de la qual, la solució de la FPE es desenvolupava llavors en termes de les funcions i valors propis de l'equació transformada. La determinació de les parelles d'autofuncions i autovalors va haver de fer-la mitjançant metodes pertorbatius aproximats, combinats amb metodes numèrics de resolució per integrals de l'equació de Schrödinger. En treballs posteriors (Risken i Vollmer(1967b)), aplicant part dels resultats anterorment obtinguts, s'interessaren més aviat per propietats estadístiques no estacionàries. Els resultats ampliament caracteritzats en la referència citada. No es va tancar amb aquests intents primers l'estudi del laser, sinó més aviat tot el contrari. L'existencia d'investigacions experimentals (Meltzer i Mandel(1970), Arechi i Degirgio (1971)), que permetien la confrontació amb els resultats teòrics obtinguts, feia que aquests avancessin i així per a valors de a no molt grans ($a \leq 8$) els resultats numèrics obtinguts en l'últim dels treballs citats s'acceptaven com a satisfactoris; es disposava també de resultats correctes per a valors de $a \geqslant 20$. Quedava per resoldre l'interval existent entre ambdues regions. Un altre cop Risken i Vollmer (1980) van proposar un metode per a omplir aquest buit, que pretenia resoldre la FPE directament mitjançant un desenvolupament convenientment tuncat en polinomis de Laguerre. A més dels intents aquí esmentats va haver-hi altres treballs de Haake (1978), Grossmann (1978), Ziegler i Horner (1980), i poden trobar-se referències de d'altres autors en el de Risken i Vollmer (1980). Hem reservat per al final les cites als treballs de Deker i Haake (1975b, 1979),perque són els que es refereixen a una formulació més en consonància amb el contingut del nostre treball. Deixarem per la secció 6 el comentari entre les analogies i les diferències d'ámbdues maneres de procedir, un cop hàgim exposat quina serà la nostra.

1.3 APROXIMACIÓ HARTREE-FOCK PER Σ. PRIMERS RESULTATS DE L'EQUACIÓ DE DYSON.

El que pretenem en aquesta secció és l'aplicació pràctica del formalisme desenvolupat en la part segona del treball. Aquesta aplicació passarà per un intent de resolució de l'equació de Dyson, tenint en compte l'expressió de Σ en termes de les funcions vèrtex i de lesequacions autoconsistents per a ells.

El primer que volem conèixer, un cop formulada l'equació de Langevin (1) per a les variables del sistema, i la corresponent FPE, és la solució estacionaria d'aquesta última. Suposarem qúe pel sistema en estat estacionari regeix la condició de balanç detallat (Graham (1973)), amb les seves corresponents condicions potencials, (II.3.60-II.3.62). Entendrem a més que el drift és purament irreversible, el que és immediat de (1) si suposem, per exemple, que tant $\underline{b}$ com $\underline{b}^*$ són parells per inversió temporal.
Com que la matriu de correlació del soroll es pren constant la condició potencial rellevant l'escrivim com

$$f^{\mu}(q) = \tfrac{1}{2} D^{\mu\nu}\partial \ln P_{st}(q)/\partial q^{\nu} \tag{3}$$

i obtenim $P_{st}(q)$ directament per quadratures prenent $f^{\mu}(q)$ directament de (1). Així arribem a establir-la com

$$P_{st}(b,b^*) = N \exp\{-\tfrac{1}{4}(bb^*-a)^2\} \tag{4}$$

Smith i Armstrong (1966) van comprovar explícitament aquesta solució. Cal aclarir, ja des d'ara, que suposarem el sistema operant sempre en el seu estat estacionari. A partir de (4) és inmediat comprovar que amb aquesta hipòtesi, els propagadors condensats referits a qualsevol de les dues variables del sistema, és a dir, els seus valors mitjans són nuls i en conseqüència, es pot treballar amb un $\sum$ donat per (II. 2.95), amb les equacions pels vèrtexs no nuls $\Gamma_{(4)}$ i $\Gamma_{(6)}$ donades en (II.2.97) i (II. 2.107).

El primer que s'ha de fer per construir $\sum$ és determinar els potencials del problema $\gamma_{(4)}$ i $\gamma_{(6)}$. Per començar hem de remuntar-nos a l'avaluació de les seves components independents del temps (II.1.15, II.1.16). De l'equació de Langevin (1), escrivint les dues variables $\underline{b}$ i $\underline{b}^*$ com q^1 i q^2, queda clar que les components del drift vénen donades per

$$f^1 = aq^1-(q^1)^2q^2$$
$$f^2 = aq^2-(q^2)^2q^1 \tag{5}$$

i en conseqüència

$$\lambda_{(1)}=\lambda_{(2)}=a \tag{6}$$

mentre que

$$F^1=-(q^1)^2q^2$$
$$F^2=-(q^2)^2q^1 \tag{7}$$

on les components no nul.les de $\gamma^{\mu}_{\nu\sigma\lambda}$ són

$$\gamma^1_{112}=\gamma^1_{121}=\gamma^1_{211}= -1 = \gamma^2_{221}=\gamma^2_{212}=\gamma^2_{122} \tag{8}$$

D'altra banda de (2) escrivim la matriu de difussió com

$$D^{11}=D^{22}=0 \qquad D^{12}=D^{21}=4 \tag{9}$$

d'on

$$D_{11}=D_{22}=0 \qquad D_{12}=D_{21}=1/4 \tag{10}$$

A més, de la hipòtesi feta anteriorment sobre la validesa de la condició de balanç detallat, juntament amb el caracter purament irreversible del drift, es segueix inmediatament l'anul.lació del tensor T introduït en (II.3.4), el que ens indica, recordem-ho, la no aparició de contribucions que provinguin del terme que conté $\dot{q}(t)$ en (II.3.53). D'altra banda, essent $\lambda_{(1)}=\lambda_{(2)}$, l'anterior es tradueix en la idèntica anul.lació de totes les components de $\dagger_{\mu\nu\sigma\lambda}$, com pot també comprovar-se directament a partir de la seva definició (II. 1.17). Així doncs, el potencial $\gamma_{(4)}$ provindrà, prèvia introducció de les dependències temporals, i posterior simetrització, del potencial independent del temps $\gamma_{\mu\nu\sigma\lambda}$ del qual les úniques components no nul.les s'obtenen directament de la seva definició (II.1.16), essent totes elles idèntiques i corresponent a totes les possibles combinacions dels quatre índexs covariants referits dos d'ells a la variable b, i els altres dos a b^*,

$$\gamma_{1122} = \gamma_{1212} = \gamma_{1221} = a/3 = \gamma_{2112} = \gamma_{2121} = \gamma_{2112} \qquad (11)$$

D'altra banda el potencial $\gamma_{(6)}$ s'obtindria de la mateixa manera a partir de $\gamma_{\mu\sigma\lambda\alpha\beta\gamma}$, les components no nul.les del qual són també idèntiques, i corresponen a totes les possibles combinacions dels sis índexs covariants, referits en igual número a b , i a b^*.

$$\begin{aligned}
&\gamma_{112122} = \gamma_{112212} = \gamma_{112221} = \gamma_{122112} = \gamma_{212112} = \gamma_{221112} = -1/12 \\
&\gamma_{121122} = \gamma_{121212} = \gamma_{121221} = \gamma_{122121} = \gamma_{212121} = \gamma_{221121} = -1/12 \qquad (12) \\
&\gamma_{211122} = \gamma_{211212} = \gamma_{211221} = \gamma_{122211} = \gamma_{212211} = \gamma_{221211} = -1/12
\end{aligned}$$

Estem ara en condicions d'afrontar la construcció de Σ. Considerem només la part Hartree-Fock del mateix, és a dir, prenem en primera aproximació les funcions vèrtex idènticament nul.les. En aquest cas (II.2.95) es redueix a

$$\Sigma^{(0)}(12) = 3\,\gamma(1234)\,G(34) + 15\,\gamma(123456)\,G(34)\,G(56)$$

i tenint en compte les definicions de $\gamma_{(4)}$ i $\gamma_{(6)}$ (13)

$$\Sigma^{(0)}(12) = (\gamma_{1234} + \gamma_{1324} + \gamma_{1423})\,G(34) + 15/10\,(\gamma_{123456} + \dots + \gamma_{156234})\,G(34)\,G(56)$$

Separant els arguments en les seves parts discreta i contínua (14)

$$\begin{aligned}
\Sigma^{(0)}(\mu.t_1;\alpha.t_2) = &\int dt_3\,dt_4\,(\gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda} + \gamma_{\mu\sigma\alpha\lambda} + \gamma_{\mu\lambda\alpha\sigma})\,\delta(t_1-t_2)\,\delta(t_1-t_3)\,\delta(t_1-t_4)\,G(\sigma.t_3;\lambda.t_4) \\
&+ 3/2\int dt_3\,dt_4\,dt_5\,dt_6\,(\gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda\beta\gamma} + \dots + \gamma_{\mu\beta\gamma\alpha\sigma\lambda})\,\delta(t_1-t_2)\dots\delta(t_1-t_6)\,G(\sigma.t_3;\lambda.t_4)\,G(\beta.t_5;\gamma.t_6)
\end{aligned} \qquad (15)$$

on com sempre els índexs discrets repetits han de sumar-se. Fent les integrals indicades

$$\begin{aligned}
\Sigma^{(0)}(\mu.t_1;\alpha.t_2) = &(\gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda} + \gamma_{\mu\sigma\alpha\lambda} + \gamma_{\mu\lambda\alpha\sigma})\,\delta(t_1-t_2)\,G(\sigma.t_1;\lambda.t_1) + 3/2\,(\gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda\beta\gamma} + \dots \\
&+ \gamma_{\mu\beta\gamma\alpha\sigma\lambda})\,\delta(t_1-t_2)\,G(\sigma.t_1;\lambda.t_1)\,G(\beta.t_1;\gamma.t_1)
\end{aligned} \qquad (16)$$

En aquest moment hem de tenir en compte explícitament que els propagadors que intervenen a (15) són els corresponents estacionaris, i en aquest sentit, la dependència del seus arguments temporals es manifesta a través de la seva diferència, amb la qual cosa canviant la notació de forma senzilla tenim

$$\Sigma^{(0)}(\mu,\alpha;t_1-t_2)=(\gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda}+\cdots)\,\delta(t_1-t_2)\,G(\sigma,\lambda;0)+3/2\,(\gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda\beta\gamma}+\cdots)\,\delta(t_1-t_2)\,G(\sigma,\lambda;0)\,G(\beta,\gamma;0) \tag{17}$$

D'altra banda, del càlcul de propagadors a temps iguals $G(\sigma,\lambda;0)$ a realitzar mitjançant (4) es dedueix immediatament que

$$G(1,1;0)=G(2,2;0)=0 \tag{18}$$

mentre que el corresponent a la funció de correlació estàtica $G(1,2;0)$, o si és vol $G(\underline{b},\underline{b}^{*};0)$, figura en l'apèndix C, complint-se evidentment

$$G(1,2;0)=G(2,1;0) \tag{19}$$

En aquestes condicions, tenint en compte (17), juntament amb (11) i (12), és facil adonar-se de

$$\Sigma^{(0)}(b,b;t_1-t_2)=\Sigma^{(0)}(b^{*},b^{*};t_1-t_2)=0 \tag{20}$$

mentre que

$$\Sigma^{(0)}(b,b^{*};t_1-t_2)=2aG(b,b^{*};0)\,\delta(t_1-t_2)-9/2\,G^2(b,b^{*};0)\,\delta(t_1-t_2) \tag{21}$$

i d'altra banda

$$\Sigma^{(0)}(b^{*},b;t_1-t_2)=\Sigma^{(0)}(b,b^{*};t_2-t_1)=\Sigma^{(0)}(b,b^{*};t_1-t_2) \tag{22}$$

Explicitant l'equació de Dyson, i tenint en compte l'expressió per G_0^{-1} (12), arribem a plantejar la següent equació integro-diferencial

$$-1/4\left(\partial^2/\partial t_1^2-a^2\right)G(b,b^{*};t_1-t_r)=\delta(t_1-t_r)+\int dt_2\,\Sigma^{(0)}(b^{*},b;t_1-t_2)\,G(b,b^{*};t_2-t_r) \tag{23}$$

i tenint en compte (21) i (22)

$$-1/4\left(\partial^2/\partial t_1^2-a^2\right)G(b,b^{*};t_1-t_r)=\delta(t_1-t_r)+\left(2a\,G(b,b^{*};0)-9/2\,G^2(b,b^{*};0)\right)G(b,b^{*};t_1-t_r) \tag{24}$$

i per mitjà d'un canvi de variable escrivim (24) com

$$d^2/dt^2\,G(b,b^{*};t)=-4\delta(t)+\left(a^2-8a\,G(b,b^{*};0)+18\,G^2(b,b^{*};0)\right)G(b,b^{*};t) \tag{25}$$

D'altra banda, de la definició del sistema (1),(2) observem de seguida, que les variables $\underline{b}$, $\underline{b}^{*}$ juguen exactament el mateix paper, el que es traduirà en particular, en que el propagador connectat de dos punts, o funció de correlació $G(\underline{b},\underline{b}^{*};t)$, a part de la simetria per bescanvis conjunts d'índexs discrets i temporals, ho sera també respecte únicament a l'intercanvi dels seus índexs discrets, el que indica, el caracter parell de la funció de correlació respecte a la coordénada temporal

$$G(b,b^*;t)=G(b^*,b;t)=G(b,b^*;-t) \qquad (26)$$

Podria demostrar-se igualment a partir de (1), (2), que aquestes són les úniques components de correlació no nul.les existents en el sistema; és a dir que

$$G(b,b;t)=G(b^*,b^*;t)=0 \qquad (27)$$

Vol dir això que la correlació entre les variables del sistema està caracteritzada per una única funció G(t) simètrica per inversió temporal

$$G(b,b^*;t)=G(b^*,b;t)\equiv G(t) \qquad (28)$$

amb el que reescrivim (26) en la forma definitiva

$$d^2/dt^2\ G(t)= -4\delta(t)+ (a^2-8aG(0)+18G^2(0))G(t) \qquad (29)$$

que és l'equació diferencial de segon ordre que pretenem resoldre.

Assenyalem respecte a l'equació anterior, que aquesta mostra clarament la discontinuïtat característica de la derivada de la funció de correlació per t=0. En efecte integrant (29) entre $-\epsilon$ i $+\epsilon$ amb $\epsilon\to 0$, i admetent el caràcter continu en t=0 de G(t)

$$\dot{G}(0^+)-\dot{G}(0^-)=-4 \qquad (30)$$

D'altra banda, donat el caracter parell de G(t)

$$\dot{G}(0^+)= - \dot{G}(0^-) \qquad (31)$$

o equivalentment

$$\dot{G}(0^+)= -2 \qquad (32)$$

condició inicial que podria haver-se establert a partir de la relació de fluctuació-dissipació (II.3.39).

Per resoldre (29) procedim transformant-la per Fourier, i després realitzant l'antitransformada per integració en el camp complex. Introduïnt

$$k^2\equiv a^2-8aG(0)+ 18G^2(0) \qquad (33)$$

resulta inmediatament

$$G(t)= 2/k\ \exp(-k|t|) \qquad (34)$$

La magnitud que estem interessats en calcular és l'anomenada amplada de banda o " linewidth ", λ , definit a partir de G(t), mitjançant

$$\lambda\equiv G(0)/\int_0^\infty G(t)dt \qquad (35)$$

pel que substituïnt (34) en (35)

$$\lambda=(k^2/2)G(0) \qquad (36)$$

Per a comprovar amb els resultats d'altres autors i amb els experimentals existents en la literatura, ens és més útil calcular $\lambda G(0)$, a vegades també anomenat factor de linewidth (Grossmann (1978)), per després representar el seu valor en funció del parametre del laser a. A partir de (36)

$$\lambda G(0)= (k^2/2)G^2(0) \tag{37}$$

i fent servir (34) per a t=0, arribem finalment a

$$G(0)=2 \tag{38}$$

idènticament per a qualsevol valor de a, el que significa que la magnitud buscada val exactament el mateix,per sota, en, i per sobre del llindar.

Els valors existents en la literatura (Grossmann (1978)) etc.., juntament amb les determinacions experimentals (Gerhardt et als. (1972)) confirmen que el resultat obtingut aquí és el correcte per valors de a molt més petits que el llindar a=0, i els errors són menyspreables fins $a \lesssim -4$, tot i que no reprodueix com hauria de fer el decreixement monòton des del valor 2 per sota i proper al llindar fins al valor aproximadament 1 per valors positius i suficientment allunyats del llindar, decreixement que Grossmann atribueix a una reducció del número de graus de llibertat efectius pel laser operant per sobre del llindar. En qualsevol cas, el resultat coincideix amb el que obté aquell autor (Grossmann(1978)) al menysprear efectes de memòria, o amb el que dedueixen Dekker i Haake (1975b) en l'aproximació de vèrtexs nuls, aproximació en la que ens hem situat nosaltres aquí.

No és difícil justificar el fet que el resultat obtingut coincideixi amb el correcte per valors de a per sota del llindar, i en especial quan més negatiu sigui aquell paràmetre. En efecte, observant la forma que adopta la distribució de probabilitat estacionaria (4), ens adonem de seguida que és aproximadament gaussiana per sota i prou lluny del llindar, però definitament no gaussiana prop i encara menys per sobre del llindar. És d'esperar, en conseqüència, que el fet de no considerar a les funcions vèrtex en la construcció de Σ , situant-nos amb això en l'aproximació Gaussiana o de Hartree-Fock, no serà especialment rellevant en la regió en què això estigui més justificat, és a dir, aquesta aproximació serà tant més correcta quan més petit sigui a, i en especial per $a \to -\infty$.

Fixem-nos també que en el factor de linewidth hi intervé, en la seva propia definició, la funció de correlació estàtica G(O), tot i que per establir (38) no ens ha estat necessari avaluar-la. Recordem que G(O), i en general qualsevol propagador estàtic és calculable directament i exactament a partir del coneixement de P_{st}, que en el nostre cas figura en (4). Concretament en l'apèndix C hi ha calculats amb detall G(O), juntament amb altres propagadors d'ordre superior. El que poguem disposar d'un coneixement exacte de la estàtica del sistema, no ens ha de fer oblidar que per altres sistemes més complexos, pot molt ben passar que això no sigui absolutament tan trivial. Amb el procediment desenvolupat aquí, comprovarem que un cop superada l'aproximació Hartree-Fock, la determinació de G(O) com a pas previ a l'avaluació del factor de linewidth, és molt important. Cal afegir, naturalment, que obtindrem per G(O) valor aproximats als exactes, tot i que aquesta resolució aproximada pot tenir el seu propi interès en sistemes on l'estàtica no és exactament coneguda. En aquest sentit indiquem que no ens sembla prudent fer servir l'estàtica exactament coneguda si no és per comparar amb les nostres determinacions aproximades, i és en aquest fet que hi ha una de les diferències bàsiques amb esquemes anàlegs desenvolupats per Dekker i Haake (1975b) com ja veurem un xic més endavant.

Concretament en l'aproximació gaussiana comprovaríem a partir de (33') i (34) que G(O) vindria donada per la resolució d'un polinomi

$$(a^2-8aG(0)+18G^2(0))G^2(0)=4 \qquad (39)$$

Per $\underline{a}\to\pm\infty$, G(0) tendeix a $2/|a|$, obtenint per $\underline{a}\to-\infty$, com era previsible, el resultat exacte, però per valors de $\underline{a}$ més grans cada cop el resultat difereix més de l'exacte. Els valors corresponents a la solució de (39), juntament amb els exactes avaluats en l'apèndix C, estan resumits en la taula I

a	$G(0)_{HF}$	$G(0)_{ex.}$
$a\to-\infty$	$2/\vert a\vert$	$2/\vert a\vert$
-4	0.3648	0.4160
-2	0.4950	0.6390
0	0.6866	1.1284
2	0.9277	2.2253
4	1.1514	4.0104
$a\to\infty$	$2/a$	a

Taula I

1.4 PRIMERA APROXIMACIÓ AL VÈRTEX $\Gamma_{(4)}$.

A partir de l'expressió per Σ en 1 aproximació Hartree-Fock, podem avaluar una primera contribució de $\Gamma_{(4)}$, tenint en compte (II.2.97). Així

$$\Gamma^{(1)}(1234)=2\,\delta\Sigma^{(o)}(12)/\delta G(34) \qquad (40)$$

i a partir de l'expressió per $\Sigma^{(o)}(12)$ donada en (13)

$$\Gamma^{(1)}(1234)=6\,\gamma(1234)+60\,\gamma(123456)G(56) \qquad (41)$$

D'altra banda per a $\Gamma_{(6)}$ i a partir de (II.2.107) n'obtenim també una primera aproximació en la forma

$$\Gamma^{(1)}(123456)=120\,\gamma(123456) \qquad (42)$$

Aquestes dues determinacions de $\Gamma_{(4)}$ i $\Gamma_{(6)}$ les substituïm en l'expressió per $\Sigma(12)$, i n'obtenim una aproximació $\Sigma^{(1)}(12)$, per mitjà de la qual intentem resoldre la corresponent equació integro-diferencial de Dyson, per tal d'aconseguir una nova avaluació de la funció de correlació. Estalviant-nos les manipulacions corresponents a tot aquest procés, escrivim aquella equació en la forma

$$d^2/dt^2\ G(t) = -4\delta(t) + (a^2-8aG(0)+18G^2(0)+9(2a-9G(0))\int dt' G^4(t'))\ G(t) - 27\int dt'\ G^5(t-t')G(t') - 2(2a-9G(0))^2 \int dt'\ G^3(t-t')G(t') + 27(2a-9G(0))^2 \int dt'\ dt'' G^3(t-t')G^2(t-t'')\ G(t'-t'')G(t'') \tag{43}$$

La resolució d'aquesta equació integro-diferencial és certament complicada. Vàrem intentar fer-ho mitjançant aproximacions succesives, i també vam assajar alguns tractaments numèrics. Malgrat tot no tinguérem massa sort en aquestes pacients temptatives, la qual cosa ens va fer decidir a aplicar-hi una aproximació anomenada Markoviana. Teníem, certament, raons que ho aconsellaven, com per exemple, que aquest tipus d'aproximació ja havia estat utilitzada per Deker i Haake(1975b,1979) en relació amb el mateix problema en què nosaltres ens trobàvem, considerant a més aquells autors que el seu ús conduia a resultats més satisfactoris que alguns tractaments numèrics que havien intentat. L'esmentada aproximació consisteix en menysprear efectes de memòria en les parts integrals de (43), bo i entenent que la funció de correlació G(t) obeeix un comportament monòtonament decreixent a partir de llur valor màxim per a t=0, decreixement que podia ser considerat, en primera aproximació, com de tipus exponencial. En aquest sentit, si escrivim formalment (43) com

$$d^2/dt^2\ G(t) = -4\delta(t) + \alpha_1 G(t) + \alpha_2 \int dt'\ \sigma(t-t')G(t') \tag{44}$$

ens proposem trobar una solució de la corresponent equació aproximada

$$d^2/dt^2\ G(t) = -2\beta\delta(t) + (\alpha_1 + \alpha_2 \int dt'\ \sigma(t'))G(t) \tag{45}$$

on hem relaxat la condició inicial $\dot{G}(0^+)=-2$ per a la solució de (45), doncs es tracta insistim de buscar una solució aproximada a la corresponent a (43).

Si a partir d'ara notem el factor de linewidth, F, es verifica

$$\dot{G}(0^+) = -\beta = -F \qquad (46)$$

i per tant tenim dues incognites, F i G(0), i una relació entre ambdues, deduïble inmediatament de (45)

$$F^2 = G^2(0)\ (\alpha_1 + \alpha_2 \int dt'\, \sigma(t')\ ) \qquad (47)$$

Òbviament necessitem alguna altra relació que ens permeti avaluar les nostres incògnites.

1.5 EQUACIÓ DINÀMICA COMPLEMENTÀRIA PER A $G_{(2)}$.

Una forma alternativa de deduir equacions de moviment per als propagadors, consistiria en pendre mitjanes directament en l'equació de Langevin (1). Així, si multipliquem aquella equació per $b^*(0)$ arribem a

$$\dot{b}(t)b^*(0) = a\ b(t)b^*(0) - b(t)b^*(t)b(t)b^*(0) + \xi(t)b^*(0) \qquad (48)$$

i prenent mitjanes

$$d/dt\langle b(t)b^*(0)\rangle = a\langle b(t)b^*(0)\rangle - \langle b(t)b^*(t)b(t)b^*(0)\rangle + \langle \xi(t)b^*(0)\rangle \qquad (49)$$

Prenent $t>0$, i pel requeriment de causalitat

$$\langle \xi(t)b^*(0)\rangle = 0 \qquad (50)$$

Si ara expressem (49) en termes de propagadors connectats, considerem el sistema en règim estacionari, i emprem la notació considerada en les seccions anteriors, escrivim (49) en la forma

$$\dot{G}(t) = (a - 2G(0))G(t) - \int d\bar{t}_1 d\bar{t}_2 d\bar{t}_3 d\bar{t}_4\, \Gamma(\bar{t}_1-\bar{t}_2, \bar{t}_1-\bar{t}_3, \bar{t}_1-\bar{t}_4)$$
$$G(t-\bar{t}_1)G(t-\bar{t}_2)G(t-\bar{t}_3)G(\bar{t}_4) \quad t>0 \qquad (51)$$

on la dependència temporal en el vèrtex $\Gamma_{(4)}$ ens recorda la característica d'estacionarietat. Aquesta equació és fins aquest moment exacte, car no hi hem fet cap mena d'aproximació, i caldrà completar-la amb la condició inicial $\dot{G}(0^+) = -2$, (32).

Succesives determinacions de $\Gamma_{(4)}$ considerades en (51) ens condueixen a aproximacions succesives per a la funció de correlació G(t). La més trivial de totes seria, naturalment, considerar l'aproximació gaussiana pel que fa a $\Gamma_{(4)}$, és a dir fer $\Gamma_{(4)}=0$, i en aquest cas

$$\dot{G}(t) = (a-2G(0))G(t) \tag{52}$$

que és una ecuació diferencial lineal de primer ordre de resolució immediata. Si considerem aplicable la condició inicial (32), serà trivialment

$$F=2=(2G(0)-a)G(0) \tag{53}$$

i, per tant, obtenim el mateix valor de F que en l'aproximació Gaussiana considerada a nivell de l'equació de Dyson. D'altra banda, una determinació aproximada de la funció de correlació estàtica, és igualment deduïble de (53), i els resultats corresponents a diferents valors del parametre a, figuren reunits en la primera columna de la Taula II, on també expressem, en la segona columna, els valors obtinguts anteriorment (Taula I), i els valors exactes en la darrera columna.

a	$G(0)_{HF}$	$G(0)_{HF}$	$G(0)_{ex.}$
$a \to -\infty$	$2/\|a\|$	$2/\|a\|$	$2/\|a\|$
-4	0.4142	0.3648	0.4160
-2	0.6180	0.4950	0.6390
0	1.0000	0.6866	1.1284
2	1.6180	0.9277	2.2253
4	2.4142	1.1514	4.0104
$a \to \infty$	$a/2$	$2/a$	a

Taula II

Resulta immediatament de la observació dels resultats obtinguts per a G(0), que , altra vegada, recuperem les determinacions exactes corresponents al límit $\underline{a} \to -\infty$, i fins i tot per valors de $\underline{a}$ negatius, les diferències amb els resultats exactes són més petites que un 10%. D'altra banda, i com ja podíem preveure, aquelles discrepàncies augmenten a mesura que $\underline{a}$ es va fent cada cop més gran. De totes maneres els resultats obtinguts ara, són més satisfactoris que els assolits en considerar l'aproximació Gaussiana en l'equació de Dyson, i aixo és cert per a tot valor de $\underline{a}$.

La primera aproximació no trivial en (51), consistiria en pendre $\Gamma_{(4)}$ no nul, però de caràcter instantani, característica, aquesta, evident a partir de (41)

$$\Gamma^{(1)}_{(4)}(t_1,t_2,t_3,t_4) = \Gamma^{(1)}_{(4)}\ \delta(t_1-t_2)\delta(t_1-t_3)\delta(t_1-t_4) \tag{54}$$

Amb aquesta elecció pel vèrtex $\Gamma_{(4)}$, i substituïnt-la en (51) serà

$$\dot{G}(t) = (a-2G(0))G(t) - \Gamma^{(1)}_{(4)}\int d\bar{t}\ G^3(t-\bar{t})G(\bar{t}) \qquad t>0 \tag{55}$$

Considerant-la en el límit $t\to 0^+$, i aplicant-hi una altra vegada la condició inicial (32) resulta

$$G^{(1)}_{(4)}(0,0,0)= \Gamma^{(1)}_{(4)}\int d\bar{t}\ G^4(\bar{t}) = (a-2G(0))G(0)+2 \tag{56}$$

identitat que permet escriure (55) en la forma

$$\dot{G}(t) = (a-2G(0))G(t) - G^{(1)}_{(4)}(0,0,0)\ \left(\int d\bar{t}\ G^3(t-\bar{t})G(\bar{t})\right)\Big/\int d\bar{t}\ G^4(\bar{t}) \tag{57}$$

i si li apliquem l'aproximació Markoviana, arribem a determinar- ne una solució exponencial decreixent per a la qual en resulta un factor F donat per

$$F= 2+1/3\ G^{(1)}_{(4)}(0,0,0)= 2+1/3((a-2G(0))G(0)+2) \tag{58}$$

on hem fet servir (56).

Si suposem que F donat per (58) coincideix amb F segons (47), ja podríem dir que hem aconseguit la relació que ens faltava d'acord amb el nombre d'incògnites que teníem. Tanmateix, sí bé no tenim massa problemes per a acceptar la identitat entre ambdues determinacions de F, no ens sembla massa oportú identificar la descripció de la correlació estàtica en (58), amb la corresponent a (47). Una de les raons per a justificar ambdues decisions ens la proporciona la mateixa aproximació Hartree-Fock, on ja vèiem que F podia coincidir en ambdues descripcions, però no passava el mateix per a G(0).

D'acord amb això, mantindrem una notació única per a F, pero n'introduïrem una altra per referir-nos a G(0) en (58)

$$F=2+1/3\ ((a-2\tilde{G}(0))\tilde{G}(0)+2) \qquad (59)$$

Tenim ara, doncs, dues equacions, (47) i (59), però tres incògnites: F, G(0) i $\tilde{G}(0)$. Per a completar la resolució del problema, ens resta afegir-hi una altra identitat que establirem a nivell de $G^{(1)}_{(4)}(0,0,0)$, identificant el seu valor a partir de (56) amb el que obtindríem prenent $\Gamma^{(1)}_{(4)}(t_1,t_2,t_3,t_4)$ de (41) i amb la corresponent solució per a G(t) que obtindríem de (45). Fixem-nos altra vegada, que en l'aproximació Hartree-Fock, aquesta darrera hipòtesi era trivialment certa, doncs en ambdós casos $G_{(4)}(0,0,0)$ era nul.la.

Els valors de F, i $\tilde{G}(0)$ obtinguts mitjançant aquest procediment figuren resumits en la Taula III per a alguns valors de <u>a</u>. Cal indicar, també, que de les dues estimacions per a la funció de correlació estàtica, escollim la darrerament notada $\tilde{G}(0)$, d'acord amb el precedent de l'aproximació Hartree-Fock, on resultava una millor descripció de la correlació estàtica a nivell de (53) que no pas de (37).

$\underline{a}$	$\underline{\tilde{G}(0)}$	$\underline{G(0)}_{ex.}$	$\underline{F}$
$a \to -\infty$	$2/\|a\|$	$2/\|a\|$	2.00
-4	0.4175	0.4160	1.99
-2	0.6380	0.6390	1.97
0	1.0724	1.1284	1.90
2	1.7100	2.2253	1.86
4	2.5273	4.0104	1.77
5	3.0086	5.0010	1.65
6	3.5488	6.0002	1.37

Taula III

Analitzant els resultats per a $\tilde{G}(0)$ i F, caldrà fer algunes observacions:

1) Tant per a $\tilde{G}(0)$ com per a F, i per l'interval de valors de a continguts en la taula anterior, obtenim determinacions més apropiades que les evaluades en les aproximacions anteriors.

2) Pel que fa a F, els resultats coincideixen amb els exactes,per valors de a negatius, incloent-hi el valor a=0, però per valors de a positius, i propers al llindar, sí bé el valor de F decreix amb a, la qual cosa és satisfactoria, ho fa molt més lentament del que seria de desitjar.

3) Finalment,per valors de a més allunyats de a=0, el factor F disminuiex molt ràpidament, i d'això en resulta que per valors de $a \geqslant 7$, no ens és possible obtenir resultats físicament raonables. Avançarem més endavant alguna possible explicació a aquest comportament anòmal.

4) De tota manera, l'interval de valors de a pel qual obtenim resultats significatius i satisfactoris, inclou la regió $a \to -\infty$, i de forma molt més interessant,el límit de valors negatius de a tendint cap al llindar, la qual cosa ens sembla esparançadora.

Tanmateix no quedem satisfets dels resultats obtinguts per valors de a positius, i proposem modificar lleugerament el procediment fins ara aplicat, per tal d'aconseguir millorar el tractament en aquesta regió.

Si repassem breument el que hem fet fins aquest moment, ens adonem que el vèrtex $\Gamma_{(4)}$ ha estat incorporat al tractament per mitjà d'una determinació en primer ordre donada per (41), i en aquesta determinació hi figura expressat en termes d'una avaluació també aproximada de G(0). Aquest fet no és reprodueix per a $\Gamma_{(6)}$, pel qual la determinació en primer ordre que figura en (42) ve expressada directament en termes de $\gamma_{(6)}$, i com a tal té un valor prescrit en (12). D'acord amb això, proposem tractar de forma més parella ambdós vèrtexs, escrivint $\Gamma^{(1)}_{(6)}$ en (42) en termes de $\gamma_{(6)}$, però aquest afectat d'un paràmetre γ que oportunament haurem de determinar. En haver introduït una nova incògnita, γ, ens caldrà incorporar una altra relació al sistema d'equacions de que disposàvem. En aquest sentit, tornem a l'equació de Langevin (1), i seguint un esquema totalment equivalent a aquell que ens ha permès obtenir una equació dinàmica per a G(t), ens proposem ara formular-ne una de semblant, encara que més complicada, per a G(t,t,t). No explicitem la deducció de l'esmentada equació amb detall, doncs no creiem que tingui massa dificultat, i en donem directament la forma resultant

$$
\begin{aligned}
d/dt\, G(t,t,t) = {} & -2G(0)\dot{G}(t) + 2(a-2G(0))G(0)G(t) - \\
& - 2G^3(t) + (a-2G(0))G(t,t,t) - 2G(0) \\
& G(0,0,t) - 4G(t)G(0,t,t) - G(t)G(t,0,t) \\
& - G(0,0,t,t,t)
\end{aligned}
\qquad t > 0 \qquad (60)
$$

on per simplificar la notació no hem indicat explícitament els índexs discrets per a $G_{(4)}$ i per a $G_{(6)}$, doncs, semblantment al que es comentava entorn de (28), comprovaríem que les úniques components no nules de $G_{(4)}$ i de $G_{(6)}$ són idèntiques i corresponen a agafar un nombre igual de variables $\underline{b}$ i $\underline{b}^*$ en ambdós propagadors. D'altra banda, pel que fa a la dependència en les variables temporals, recordem, una vegada més, la característica d'estacionarietat que suposem en el problema, i en aquest cas

$$G(t_1,t_2,t_3,t_4) \equiv G(t_1-t_2,t_1-t_3,t_1-t_4) \tag{61}$$

Si considerem (60) en $t=0^+$, en resulta

$$\dot{G}(t,t,t)_{t=0^+} = 4G(0) + 2(a-3G(0))G^2(0) + (a-9G(0))\, G(0,0,0) - G(0,0,0,0,0) \tag{62}$$

i tenint en compte les determinacions exactes de G(0,0,0) i de G(0,0,0,0,0) en l'apèndix C, esdevé

$$\dot{G}(t,t,t)_{t=0^+} = 0 \tag{63}$$

Si ara prenem les aproximacions en primer ordre per a $G_{(4)}$ i $G_{(6)}$ en termes de $\Gamma^{(1)}_{(4)}$ i $\Gamma^{(1)}_{(6)}$, i considerem aplicable (63), de forma semblant a com enteniem aplicable (32) en (55), arribem a

$$0 = -2G^3(0) + (a-7G(0))\Gamma^{(1)}_{(4)}\int d\bar{t}\; G^4(\bar{t}) - 9\,(\Gamma^{(1)}_{(4)})^2 \int d\bar{t}\; d\bar{\bar{t}}\; G^3(\bar{t})G(\bar{t}-\bar{\bar{t}})G^3(\bar{\bar{t}}) - \Gamma^{(1)}_{(6)}\int d\bar{t}\; G^6(\bar{t}) \tag{64}$$

identitat que podem considerar en relació amb les determinacions de $\Gamma^{(1)}_{(4)}$ i $\Gamma^{(1)}_{(6)}$ corresponents a (41) i (42), i amb G(0) avaluada a partir de (47).

Prenent aquesta com la relació buscada, tenim establert de bell nou, igual nombre d'equacions que d'incògnites, la qual cosa ens permet obtenir una determinació corregida de les magnituds d'interès, F i $\tilde{G}(0)$, sense moure'ns encara, serà bo recordar-ho, d'un primer ordre en $\Gamma_{(4)}$ i $\Gamma_{(6)}$. Els resultats, pel que fa a la determinació de la funció de correlació estàtica figuren en la taula IV, mentre els valors de F vénen representats en la Fig. I.

a	G(0)	$G(0)_{ex.}$
$a \to -\infty$	$2/\lvert a\rvert$	$2/\lvert a\rvert$
-4	0.4178	0.4160
-2	0.6380	0.6390
-1	0.3374	0.8327
0	1.1467.	1.1284
1	1.5159	1.5780
2	1.8928	2.2253
3	2.2854	3.0605
4	2.6985	4.0104
5	3.1388	5.0010
6	3.6024	6.0002
7	4.0893	a

Taula IV.

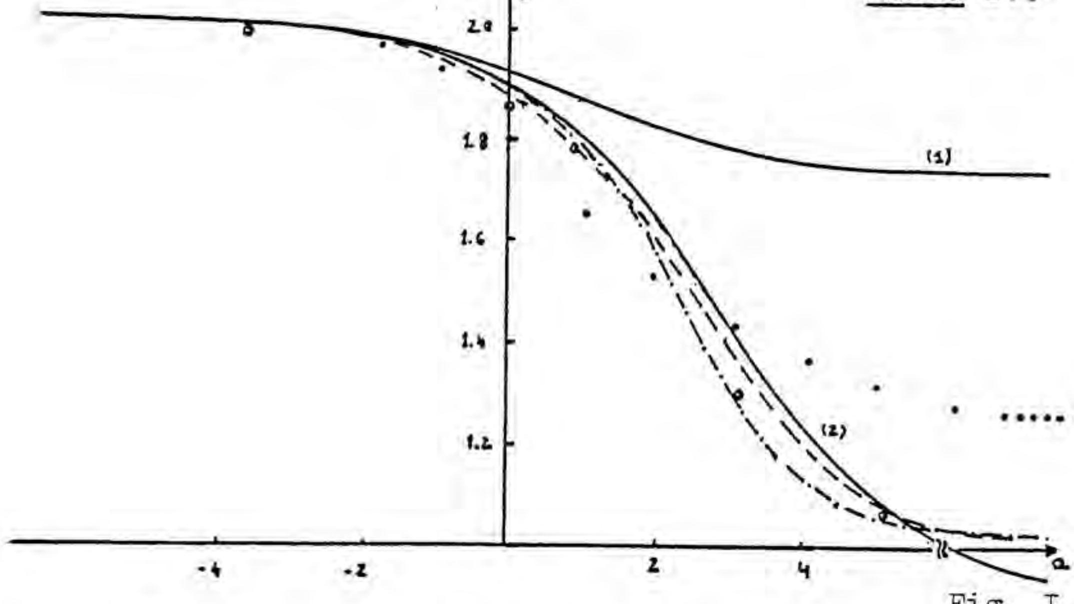


Fig. I

——— 1er. ordre en la teoria pertor. renor. de Deker et als.(1975

——— 4rt " " " " " " .(1979

—·—·- aproximació "mode-coupling" de Grossmann (1968)

- - - - resultats numèrics de Risken (1968)

o resultats experimentals de Gerhardt et als. (1972)

• 1er ordre en la teoria pertor. renor. plantejada en aquest treball.

De l'anàlisi del resultats obtinguts darrerament podríem concloure.

1) En la regió negativa de l'interval considerat, no observem diferències significatives respecte als resultats precedents, ni pel que fa a $\tilde{G}(0)$, ni pel que fa a F, llevat en tot cas de $\underline{a}=0$, on per F, el valor obtingut és lleugerament inferior al calculat anteriorment.

2) Per la regió positiva considerada, aconseguim millorar significativament els resultats obtinguts anteriorment.

3) Altra vegada, encara que per valors de $\underline{a}$ més grans, $\underline{a} \geq 10$, observem un progresiu deteriorament de les determinacions obtingudes per F.

Cal dir respecte a 3) que aquesta circumstancia no ens pot estranyar massa, si tenim en compte, per exemple, el que ja havíem dit en la introducció respecte a la descripció del laser unimodal per una equació de Langevin tal com (1), on advertíem de les precaucions amb que havíem de procedir en regions suficientment positives de $\underline{a}$. D'altra banda, la mateixa aproximació Markoviana esdevé progressivament menys satisfactòria a mesura que ens allunyem del llindar vers valors positius de $\underline{a}$. Aquesta circumstancia ja va estar reconeguda pels mateixos Deker i Haake, i de fet és fàcilment explicable sí ens adonem que per $\underline{a}$ creixent, el decreixement exponencial per a la funció de correlació és progresivament menys pronunciat.

Tanmateix, ens resta la possibilitat de fer servir el caràcter assimptòtic de la dinàmica, i fins i tot de l'estàtica del sistema, observada per a valors de $\underline{a}$ positius i a partir d'un límit que podem establir en $\underline{a}=4$ o $\underline{a}=5$ amb errors d'uns pocs per cent. En efecte, i en la mateixa aproximació Hartree-Fock, obtindríem de (53) un valor de $\tilde{G}(0)$ que per $\underline{a}=4$ difereix del valor assimptòtic a/2 en un 17%, i per $\underline{a}=5$ en un 12%, disminuïnt ràpidament aquestes diferències per valors de a lleugerament més grans. Pel que fa a l'estàtica i a la dinàmica exactament conegudes, aquest comportament assimptòtic és encara més pronunciat, i així per a=4, el valor de G(O) exactament calculat, G(O)=4.0104, difereix del valor assimptòtic, G(O)=a en un 0.25%. Pel que fa a magnituds dinàmiques, i prenent com a exemple el mateix factor de linewidth, els resultats experimentals de Gerhardt et als. (1972) estableixen per a=4 un valor 1.17, i per a=5, el resultat és 1.09, ambdós molt propers al límit igual a la unitat comunment acceptat per $a \rightarrow \infty$.

Per tal d'utilitzar aquest comportament assimptòtic, i suposant que és també d'aplicació a determinacions aproximades com les que avaluem aquí, calculem les diferències entre les dues determinacions successives de $\tilde{G}(O)$ per a alguns valores de a referits a la regió en que és previsible comenci a apuntar-se aquell caràcter assimptòtic. Un cop això ha estat fet, proposem d'acord amb els resultats observats

$$\tilde{G}(O)-\tilde{G}(O)_{HF} = \delta_1 1/a + \delta_2 1/a^3 + \delta_3 1/a^5 + O(a^{-7}) \qquad (65)$$

i determinem els coeficients δ_1 , δ_2 , δ_3 de forma que aquesta elecció s'ajusti als valors calculats. Així i prenent com a referència els resultats per a=3.5,4, i 4.5, i admetent que (65) caracteritza el comportament assimptòtic per a valors de a positius i molt grans, aconseguim determinar resultats que són satisfactoris en aquest règim extrem de valors de a. Pel que fa a F la determinació així feta, figura suplementàriament en la Fig. I.

Abans d'acabar aquesta secció, precisem que el que hem fet aquí,corresponent a una determinació en primer ordre en les funcions vèrtex, podria continuar-se a ordres superiors seguint les mateixes idees, i cal esperar que els resultats obtinguts millorarien, especialment pel que fa a la regió més problemàtica corresponent a valors de a positius. No disposant encara en aquest moment de resultats suficientment el.laborats, ens limitem aquí a presentar els resultats en primer ordre.

1.6 RELACIÓ AMB ELS ESQUEMES PERTORBATIUS DE DEKER I HAAKE.

De tots els treballs teòrics de resolució del laser amb un únic mode que podem trobar en la literatura, ens interessa fonamentalment, comparar el que nosaltres hem fet aquí, amb el que desenvoluparen Deker i Haake, fonamentalment contingut en les referències ja donades de Phys. Rev. A (1975b), encara que en aquest treball s'émpren resultats anteriors pel que fa a les relacions de fluctuació-disipació enunciades en un article anterior (1975a), podent-se trobar més recentment encara una ampliació dels continguts del primer dels treballs citats en el darrer dels mateixos autors juntament amb King (1979).

No pretenem establir amb detall aquell formalisme, pero sí assenyalar allò que resulta comparable amb el que aquí s'ha plantejat.

El punt de partida el constitueix allà l'esquema operacional MSR, establint-se com a etapa intermitja un funcional generador de propagadors connectats que involucra alhora a la funció de correlació i de resposta. Tot això els condueix a una equació de Dyson de tipus matricial, la qual cosa no ens preocupa a nosaltres. De fet aquest és un punt que creiem ja ha quedat suficientment comentat i no hi insistim més. La utilització de les relacions de fluctuació-dissipació, identitats que pel que fa a les components de l'operador autoenergia s'encarreguen de demostrar la seva validesa a qualsevol ordre de teoria de perturbacions, és, com es pot compendre fàcilment, essencial. Un cop arribats a aquest punt, Deker i Haake, adverteixen de la conveniència d'una tria adient del paràmetre pertorbatiu, assignant aquest paper a un nou potencial γ^R, al que anomenen càrrega renormalitzada, i definit a partir de la transformada de Fourier del vèrtex de quatre punts. Cal dir ja des d'ara que una aventatge del seu esquema consisteix en què només han de treballar amb un vèrtex. Diguem també, que aquell paràmetre pertorbatiu d'aquella manera introduït, admet una expressió immediata en termes dels propagadors connectats estàtics de quatre i dos punts, la qual cosa facilita la seva avaluació.

En el nostre esquema,possiblement no queda tan marcada la presència d'un paràmetre pertorbatiu, doncs no meyspreem la consideració de successives determinacions a les funcions vèrtex en termes dels potencials del problema, la qual cosa aquells autors eviten, pero també és cert que en el nostres cas en fem una certa renormalització d'acord amb els continguts de la secció anterior.

Un cop introduïda la càrrega renormalitzada, l'esquema pertorbatiu que aquells autors segueixen fa un ús exhaustiu de l'estàtica exactament coneguda pel sistema, la qual cosa és possible en aquest problema, essent com és d'avaluació immediata. Aquí sí que la diferència és clara respecte a com nosaltres hem procedit, i insistim que de no ser coneguda exactament aquella estàtica,, les determinaciones successives que aquí ens resulten de forma natural, podria ser ben interessant.

Els resultats finals del seus càlculs figuren representats, juntament amb els d'altres autors,,i amb els nostres en la Fig. 1.

Assenyalem, per acabar, que sí bé els envejem de no poder disposar nosaltres de resultats analítics pel factor de linewidth tal com ells aconsegueixen, també és veritat que la no excessiva dificultat amb la que nosaltres hem obtingut determinacions raonablement satisfactòries de la dinàmica i l'estàtica del sitema, esdevé significativa davant el cost innegable que suposa el tirar endavant un esquema pertorbatiu tal com el que proposen, fins al menys ordre quatre, en que els seus resultats són clarament més adients que els nostres.

CONCLUSIONS.

Ens sembla molt interessant de resumir tot seguit els punt essencials del treball que presentem, dispensant una atenció especial a aquells que poden considerar-se de més novetat.

En el primer capítol de la part I, fem ús d'una representació funcional per tal de

1) escriure l'expressió per a la densitat de probabilitat condicional solució de la FPE, mitjançant una integral de camí avaluada en l'espai fàsic (I. 1.46), representació que serveix també per a descriure qualsevol mena de propagadors.

2) introduir un funcional generador d'aquests darrers, (I. 1.65)

3) formular una equació en derivades funcionals que, suplementada amb condicions de contorn específiques, ens permeti determinar el funcional generador corresponent a la dinàmica lliure del sistema (I.1.101)

4) expressar el generador complet a partir del lliure per tècniques simples de derivació funcional (I.1.110)

5) avaluar, finalment, qualsevol propagador, i especialment les funcions de correlació i resposta, per mitjà d'un desenvolupament perturbatiu (I.1.118) en què hi intervenen les components lliures de les dites funcions, i establint així un esquema alternatiu i creiem més transparent, a l'ús del teorema de Wick.

6) caracteritzar amb detall les funcions de correlació i resposta lliures, esdevenint expressable la primera d'ambdues, i de forma completament natural, com a suma de dues contribucions, cadascuna associada a una font de estocacitat diferenciada: per una banda la corresponent a la dinàmica estocàstica de Fokker-Planck, i per una altra una eventual distribució de condicions inicials.

En el segon capítol ens referim bàsicament a una descripció equivalent a la plantejada amb anterioritat, però ara formulada en termes d'una Lagrangina. En aquest context

7) retrobem prèvia integració de l'expressió funcional per a la densitat de probabilitat condicional, respecte a les variables "moment", la coneguda representació funcional en l'espai de configuracions (I. 2.17)

A partir d'aquest punt replantejem la descripció pertorbativa feta en el capítol primer, la qual cosa no coneixem que hagi estat tractada amb detall anteriorment; i així

8) escrivim un funcional generador associat a aquesta representació (I.2.42)

9) deduïm una equació en derivades funcionals per l'esmentat funcional (I.2.76), la qual completada amb condicions de contorn adients, resolem per la dinàmica lliure del sistema (I.2.106)

10) obtenim el generador complet a partir de la corresponent component lliure en forma anàloga a com ja vàrem indicar en el capítol 1 (I.2.107)

11) caracteritzem els desenvolupaments pertorbatius per la funció de correlació, estudiant amb detall, les contribucions diferenciades de dues components corresponents a la part pertorbativa de la funció Lagrangina (I.2.59), essent responsable la primera d'ambdues contribucions de l'aparició de la funció de correlació lliure, mentre que és a través de la segona que la funció resposta lliure intervé en l'esquema pertorbatiu plantejat

12) la constatació doncs, que ambdós propagadors lliures juguen un paper idèntic aquí al que els pertocava en representació Hamiltoniana, és immediata, essent una qüestió de paciència comprovar la identitat en la transcripció diagramàtica dels desenvolupaments pertorbatius en ambdues representacions I.2.13

En la part II tractem fonamentalment amb propagadors vestits.

En el primer capítol procedim a formular una equació del tipus Dyson, prenent com a punt de partida l'expressió pel funcional generador en la representació Lagrangiana introduïda prèviament. Això suposa un tractament alternatiu al de Martin, Siggia i Rose, i entenem que pot considerar-se un resultat essencial del treball realitzat. Per tal d'aconseguir-ho

13) concretem l'equació en derivades funcionals pel generador pel cas d'una pertorbació cúbica (II.1.19), i obtenim així la evolució dinàmica dels valors mitjans de les variables macroscòpiques del sistema, prèvia substitució de les mitjanes per les seves components totalment connectades (II.1.68)

14) per derivació funcional de l'esmentada equació corresponent al propagador connectat de dos punts (II.1.70), que expressada en forma d'equació tipus Dyson (II.1.78) permet una caracterització immediata de l'operador autoenergia (II.1.74)

Dediquem el segon capítol de forma expressa a les funcions vèrtex, i així en fem

15) la introducció mitjançant un funcional generador (II.2.3) deduint-ne també les connexions que estableixen entre els propagadors connectats de dos punts i aquells altres en nombre superior de components (II.2.48,II.2.49,II.2.54 i II.2.57)

16) la incorporació a l'expressió per l'operador autoenergia (II. 2.73)

17) la deducció de llurs equacions autoconsistents (II.2.76) (II.2.82)

Finalment el capítol tercer que tanca aquesta segona part és destinat bàsicament a les relacions de fluctuació-disipació, i alhora estableix una comparació amb esquemes del tipus MSR. Amb aquesta finalitat

18) Busquem l'expressió de la funció resposta en formalisme Lagrangià (II.3.23).

19) Establim alguns casos particulars, val a dir els més importants de relacions de fluctuació-dissipació (II.3.39, II.3.51), l'existència de les quals ja es conexia de bell antuvi, però que no havien estat demostrades en la forma en què ho fem nosaltres (apendix B).

20) Insistim en l'avantatge que a priori sembla tenir l'esquema que nosaltres presentem respecte al MSR, al menys pel que aquest té de servitud respecte a la validesa de les esmentades relacions de fluctuació-dissipació, que permeten en aquell context el desacoblament del caràcter matricial intrínsec del seu plantejament, II.3.2

21) Estudiem amb detall les condicions d'anul.lació de contribucions en derivades temporals primeres de la funció de correlació, la qual cosa estarà relacionada finalment amb la no presència de potencials derivatius en l'expressió de l'operador autoenergia, II. 3.4

En la part III, ja per finalitzar el treball, presentem una aplicació consistent en el tractament no exhaustiu del laser amb un únic mode. En aquest sentit

22) Caracteritzem la descripció estocàstica del sistema en termes d'una equació de Langevin (III.1.1)

23) En fem un càlcul immediat en l'aproximació gaussiana o Hartree-Fock (III.1.38), els resultats de la qual interpretem en el context de l'aproximació emprada.

24) Superem l'etapa anterior per mitjà de la incorporació de les contribucions en primer ordre de les funcions vèrtex de quatre i sis punts.

25) Fem servir alhora dues equacions dinàmiques respectivament associades als propagadors de dos i quatre punts, la utilització conjunta d'aquestes equacións juntament amb la de Dyson, permetent l'avaluació aproximada de la funció de correlació estàtica, i de la magnitud d'interès per a nosaltres, anomenada factor de " linewith" (Taula IV, Fig.1)

26) Essent els resultats obtinguts satisfactoris a l'en-

torn de l'anomenat llindar del laser, considerem la eventual possibilitat de fer un tractament assimptòtic pel sistema operant lluny del llindar.

Pel que fa als punts que ens semblen necessitats d'una investigació posterior n'assenyalarem principalment tres.

D'una banda el que fa referència a la tàctica de resolució simultània de l'equació de Dyson i de les equacions pels vèrtexs, principalment pel que fa a la conveniència de disposar d'un bon parametre pertorbatiu.

D'altra banda caldria incorporar al formalisme desenvolupat en la segona part, el tractament del problema de condicions inicials que de forma elegant fem en la primera part.

Insistim encara, que davant la consideració cada cop més usual de dinàmiques estocàstiques més complicades, per exemple el tractament de sorolls de color, o fins i tot sorolls blancs pero que intervenen multiplicativament en l'equació de Langevin, seria d'allò més convenient l'ampliació de l'esquema presentat per tal de poder abastar aquestes noves caracteritzacions de la dinàmica estocàstica d'un sistema.

Finalment i pel que fa a perspectives del treball presentat, no cal dir que considerem prioritari l'intent de clarificar i avançar en les questions anteriorment assenyalades, i no dubtem que en la mesura que fossim capaços de fer-ho, tindria un evident interès el considerar el procediment aquí presentat com una alternativa plenament raonable, i d'aplicació tal vegada superior, a la d'esquemes ja suficientment reconeguts com els de Martin, Siggia i Rose.

APÈNDIX A

L'obtenció de l'equació autoconsistent per a $\Gamma_{(4)}$, o més pròpiament per a $D_{(4)}$, que figura en (II.4.82), juntament amb la corresponent a $\Gamma_{(6)}$, les presentarem aquí seguint els mateixos arguments que empren De Dominicis i Martin (1964a), i si les incloïm en aquest treball és pel mer afany de clarificar la deducció que allí s'hi fa i que en principi i potser en algun punt concret ens resulta de difícil comprensió. La corresponent a $\Gamma_{(6)}$ no fou pas establerta pels autors abans esmentats, car aquest vèrtex no apareixia en l'expressió de l'operador autoenergia amb que treballaren.

Per començar, hem de remetre'ns fins a la introducció del funcional generador Z(J), que redefinirem convenientment, de tal manera que ara el farem dependre d'una font externa addicional, $J_{(2)}$ juntament a la independència ja introduïda en $J_{(1)}$. D'aquesta manera a partir d'aquest moment definirem un nou funcional $Z(J_{(1)},J_{(2)})$ com

$$Z(J_{(1)},J_{(2)}) \equiv \int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\, \exp\left\{ -\int_{t_0}^{t} d\tau \left[\mathcal{L}(q(\tau),\dot q(\tau),\tau) - J_\mu(\tau)\, q^\mu(\tau) - \int_{t_0}^{t} d\tau' \frac{1}{2} J_{\mu\nu}(\tau,\tau')\, q^\mu(\tau)\, q^\nu(\tau') \right] \right\} \tag{A.1}$$

A més, suposarem que $J_{(2)}$ ha estat simetritzat convenientment pel que fa a permutacions qualssevol dels seus arguments.

$$J_{\mu\nu}(\tau,\tau') = J_{\nu\mu}(\tau',\tau) \tag{A.2}$$

Evidentment, també en aquest cas podríem prendre mitjanes sobre condicions inicials, cas que estessin subjectes a una distribució de probabilitat donada, i així definiríem

$$Z^{P}(J_{(1)},J_{(2)}) \equiv \left\langle Z(J_{(1)},J_{(2)}) \right\rangle^{P} \tag{A.3}$$

A partir de la definició (A.1) és ben palès que la introducció de $J_{(2)}$ ens permetrà d'obtenir per derivades funcionals del nou funcional generador, respecte d'aquella font $J_{(2)}$, el propagador de dos punts exteriors, i precisament per aquest motiu l'hem introduïda. Així, podem definir una funció $\not{G}(\mu, t' ; \nu, t'')$ a partir de

$$\not{G}(\mu,t';\nu,t'') \equiv 2\,\frac{1}{Z(J_{(1)},J_{(2)})}\left(\frac{\delta Z(J_{(1)},J_{(2)})}{\delta J_{\mu\nu}(t',t'')}\right)_{J_{(1)}} \tag{A.4}$$

que, evidentment, estarà relacionada amb el propagador desconnectat real del sistema, un cop hagim anul.lat l'efecte de les fonts exteriors. Així

$$\not{G}(\mu,t';\nu,t'') = G(\mu,t';\nu,t'') + G(\mu,t')\,G(\nu,t'') \tag{A.5}$$

$$\not{G}(\mu,t';\nu,t'')\Big|_{J_{(1)}=J_{(2)}=0} \equiv \not{G}_f(\mu,t';\nu,t'') = \langle q^\mu(t')\,q^\nu(t'')\rangle = \langle q^\mu(t')\,q^\nu(t'')\rangle_c + \langle q^\mu(t')\rangle\langle q^\nu(t'')\rangle \tag{A.6}$$

Per altra banda, entenem que resultarà clar que les funcions $G_{(m)}$ vindran igualment definides per (II.1.31) però s'hauran d'efectuar les derivades funcionals corresponents amb $J_{(2)}$ fixa.

A partir d'ara repetirem esquemàticament el formalisme desenvolupat anteriorment quan teníem només $J_{(1)}$ però l'aplicarem al cas actual. Si apliquem el lema d'integració per parts arribem a

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\,\frac{\delta}{\delta q^\mu(t')}\exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\left[\mathcal{L} - J_\mu(\tau)\,q^\mu(\tau) - \int_{t_0}^{t} d\tau'\,\frac{1}{2}\,J_{\mu\nu}(\tau,\tau')\,q^\mu(\tau)\,q^\nu(\tau')\right]\right\} = 0$$

que ens mena a (A.7)

$$\int_{q(t_0)=q_0} \mathcal{D}q(\tau)\,\exp\left\{-\int_{t_0}^{t} d\tau\left[\mathcal{L} - J_\mu(\tau)\,q^\mu(\tau) - \int_{t_0}^{t} d\tau'\,\tfrac{1}{2}\,J_{\mu\nu}(\tau,\tau')\,q^\mu(\tau)\,q^\nu(\tau')\right]\right\}$$
$$\left\{\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\,q^\nu(t') - \mathcal{L}_{,\mu}(q(t'),\dot{q}(t'),t') + J_\mu(t') + \int_{t_0}^{t} d\tau\,J_{\mu\nu}(t',\tau)\,q^\nu(\tau)\right\} \tag{A.8}$$

que podem convertir en una equació en derivades funcionals per al funcional generador en la forma

$$\left[\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t') \frac{\delta}{\delta J_\nu(t')} - \mathcal{L}_{1\mu}\left(\frac{\delta}{\delta J(t')}, \frac{d}{dt'} \frac{\delta}{\delta J(t')}, t' \right) + J_\mu(t') + \int_{t_0}^{t} d\tau \; J_{\mu\nu}(t',\tau) \frac{\delta}{\delta J_\nu(\tau)} \right] Z(J_{(1)}, J_{(2)}) = 0 \qquad \text{(A.9)}$$

Prenent la Lagrangiana corresponent al sistema amb drift no lineal del tipus considerat en la 2ª part, allò anterior s'escriu com

$$\left[\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t') \frac{\delta}{\delta J_\nu(t')} + \gamma_{\mu\rho\tau\alpha\sigma\lambda} \frac{\delta^5}{\delta J_\rho(t') \ldots \delta J_\lambda(t')} + \gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda} \frac{\delta^3}{\delta J_\alpha(t') \ldots \delta J_\lambda(t')} + \tilde{\gamma}_{\mu\alpha\sigma\lambda} \frac{\delta^2}{\delta J_\sigma(t') \delta J_\lambda(t')} \frac{d}{dt'} \frac{\delta}{\delta J_\alpha(t')} + J_\mu(t') + \int_{t_0}^{t} d\tau \; J_{\mu\nu}(t',\tau) \frac{\delta}{\delta J_\nu(\tau)} \right] Z(J_{(1)}, J_{(2)}) = 0 \qquad \text{(A.10)}$$

Dividint per $Z(J_{(1)},J_{(2)})$ i introduint propagadors connectats arribaríem a

$$\hat{\Lambda}_{\mu\nu}(t')\, G(\nu,t') + \gamma_{\mu\rho\tau\alpha\sigma\lambda} \left[G(\rho,t';\tau,t';\ldots;\lambda,t') + \ldots + G(\rho,t') \ldots G(\lambda,t') \right] + \gamma_{\mu\alpha\sigma\lambda} \left[G(\alpha,t';\sigma,t';\lambda,t') + \ldots + G(\alpha,t')G(\sigma,t')G(\lambda,t') \right] + \tilde{\gamma}_{\mu\alpha\sigma\lambda} \frac{\partial}{\partial t} \left[G(\sigma,t';\lambda,t';\alpha,t) + \ldots + G(\sigma,t') G(\lambda,t')\, G(\alpha,t) \right] + J_\mu(t') + \int_{t_0}^{t} d\tau \; J_{\mu\nu}(t',\tau)\, G(\nu,\tau) = 0 \qquad \text{(A.11)}$$

Procediríem ara a la definició dels potencials dependents del temps γ_{1234}, etc., juntament amb la notació abreujada estesa a números amb el conveni ja conegut, amb la qual cosa (A.11) es converteix en

$$\left[\hat{\Lambda}(12)+J(12)\right]G(2)+\gamma_{123456}\left[G(23456)+\ldots+G(2)G(3)\ldots G(6)\right]+ \gamma_{1234}\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right]+\tilde{\gamma}_{1234}\,\partial/\partial t_2\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right] + J(1) = 0 \qquad \text{(A.12)}$$

Simetritzant convenientment els potencials γ_{1234} i γ_{123456} arribaríem a una equació totalment anàloga a (II.1.68) de la forma

$$\left[\hat{\Lambda}(12)+J(12)\right] G(2) + \gamma(123456)\left[G(23456)+\ldots+G(2)\ldots G(6)\right] +$$

$$+\gamma(1234)\left[G(234)+\ldots+G(2)G(3)G(4)\right]+ J(1) =0 \qquad (A.13)$$

Derivant funcionalment respecte a J(7)

$$\left[\hat{\Lambda}(12)+J(12)\right]G(27)+\gamma(123456)\left[G(234567)+\ldots+5G(27)G(3)G(4)\right.$$

$$\left.G(5)G(6)\right] +\gamma(1234)\left[G(2347)+\ldots+3G(27)G(3)G(4)\right]+\delta(17)=0$$

$$(A.14)$$

i redefinint

$$G_o^{-1}(12) \equiv -\left[\hat{\Lambda}(12)+J(12)\right] \qquad (A.15)$$

escriuríem (A.14) com a una equació de Baym-Kadanoff per a $G_{(2)}$

$$G_o^{-1}(12)G(27) =\delta(17)+\Sigma(12)G(27) \qquad (A.16)$$

on $\Sigma(12)$ ve donat idènticament per (II.1.74).

Ens podem adonar doncs que la introducció de la font addicional $J_{(2)}$ ha tingut la seva primera conseqüència explícita en la redefinició de l'operador G_o^{-1} (12); a més n'hi ha una altra d'implícita en el fet que tant les funcions $G_{(m)}$ com el propi $\Sigma(12)$ ara dependran addicionalment de $J_{(2)}$.

El que hem dit anteriorment ens fa pensar que amb la introducció d'una font addicional en el formalisme, no hàgim conviat massa les coses, tenint en compte a més a més que pel que fa a manipulació matematica, eventualment podríem considerar nul.la aquesta dependencia addicional. No obstant aixo, en l'estudi següent ens adonarem de la utilitat de la seva introducció.

Per a poder-ho demostrar escrivim les següents identitats entre derivades parcials

$$(\delta G(12)/\delta J(34))_{G_{(1)}} = (\delta G(12)/\delta J(34))_{J_{(1)}} -$$

$$-(\delta G(12)/\delta G(5))_{J_{(2)}} \; (\delta G(5)/ J(34))_{J_{(1)}} \qquad (A.17)$$

Centrem-nos amb (A.17). Veurem com a partir d'ella podem generar l'equació autoconsistent buscada per a $\Gamma_{(4)}$.

Calculem el terme que figura en primer lloc en la banda dreta de la identitat (A.17)

$$(\delta G(12)/\delta J(34))_{J_{(1)}} = (\delta/\delta J(34)(\delta/\delta J(1)\,\delta/\delta J(2)\ \ln Z)_{J_{(2)}})_J$$
$$=(\delta^2/\delta J(1)\delta J(2)\ \delta \ln Z/\delta J(34)) = (\delta^2/\delta J(1)\delta J(2)$$
$$\tfrac{1}{2}\mathcal{G}(34))_{J_{(2)}} = \tfrac{1}{2}(\delta^2/\delta J(1)\delta J(2)\left[G(34)+G(3)G(4)\right])_{J_{(2)}}$$

(A.18)

i realitzem les derivades funcionals indicades

$$=\tfrac{1}{2}\left[G(1234)+G(123)G(4)+G(23)G(14)+G(13)G(24)+G(3)G(124)\right]$$

(A.19)

Centrem-nos ara amb els altres termes que figuren a la dreta de (A.17). Així

$$(\delta G(12)/\delta G(5))_{J_{(2)}} = G(1\bar{1})G(2\bar{2})\Gamma(\bar{1}\bar{2}5) \qquad \text{(A.20)}$$

que no és altra cosa que (II.2.80) però cal que precisem a més que la derivada funcional s'haurà de realitzar prenent $J_{(2)}$ constant, prescripció necessària car ara $G_{(2)}$ també en depèn.

Per altra banda, seguint la mateixa línia que ens ha permès d'arribar a (A.19), establim sens cap dificultat

$$(\delta G(5)/\delta J(34))_{J_{(1)}} = \tfrac{1}{2}\left[G(345)+G(35)G(4)+G(3)G(45)\right]$$

(A.21)

d'on el producte de derivades funcionals en (A.17) s'expressa com

$$\tfrac{1}{2}\Gamma(\bar{1}\bar{2}5)G(1\bar{1})G(2\bar{2})\left[G(345)+G(34)G(5)+G(3)G(45)\right]$$

(A.22)

i si substituïm en (A.17)

$$(\delta G(12)/\delta J(34))_{G_{(1)}} = \tfrac{1}{2}\left[G(1234)+G(123)G(4)+G(23)G(14)+G(13)G(24)\right.$$
$$\left.+G(3)G(124)\right]-\Gamma(\bar{1}\bar{2}5)G(1\bar{1})G(2\bar{2})\left[G(345)+\right.$$
$$\left.+G(35)G(4)+G(3)G(45)\right] \qquad \text{(A.23)}$$

Si ara tenim en compte la definició de D(1234) donada en (II.2.83), a l'ensems que les relacions entre les funcions vèrtex $\Gamma_{(3)}$ i $\Gamma_{(4)}$, i $G_{(3)}$, $G_{(4)}$, escrites en (II.2.39) i (II.2.43), és molt fàcil arribar a escriure (A.23) en la forma

$$(\delta G(12)/\delta J(34))_{G_{(1)}} = \tfrac{1}{2}\Big[G(13)G(24)+G(23)G(14)+D(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4})\, G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})\Big] \qquad (A.24)$$

Altrament tenint en compte l'expressió per a la derivada de la funció inversa

$$\delta G(12)/\delta J(34) = -G(15)(\delta G^{-1}(56)/\delta J(34))G(26) \qquad (A.25)$$

així com també l'equació (A.16) escrita en la forma

$$G^{-1}(56) = G_o^{-1}(56) - \Sigma(56) \qquad (A.26)$$

reescrivim (A.25) com

$$(\delta G(12)/\delta J(34))_{G_{(1)}} = -G(15)\Big[\delta/\delta J(34)(G_o^{-1}(56) - (56))\Big]_{G_{(1)}} G(26) \qquad (A.27)$$

Calculem primer $\delta/\delta J(34)\ G_o^{-1}(56)$. Per això recordem la definició de G_o^{-1} donada en (A.15).

$$\delta G_o^{-1}(56)/\delta J(34) = -\delta J(56)/\delta J(34) \qquad (A.28)$$

pel fet que $\hat{\Lambda}$ és independent de $J_{(2)}$. Si avaluem (A.28) trobem que val

$$\tfrac{1}{2}\Big[\delta(53)\delta(64)+\delta(54)\delta(63)\Big] \qquad (A.29)$$

on s'ha tingut en compte el caràcter simètric de $J_{(2)}$ davant de permutacions del seus arguments. D'aquesta manera substituint en (A.27)

$$(\delta G(12)/\delta J(34))_{G_{(1)}} = -G(15)\Big[-\tfrac{1}{2}\delta(53)\delta(64)-\tfrac{1}{2}\delta(54)\delta(63)- -(\delta\Gamma(56)/\delta J(34))_{G_{(1)}}\Big]G(26) \tag{A.30}$$

$$=\tfrac{1}{2}G(13)G(24)+\tfrac{1}{2}G(14)G(23)+G(15) (\delta\Gamma(56)/\delta J(34))_{G_{(1)}}G(26) \tag{A.31}$$

que encara podem escriure en la forma

$$(\delta G(12)/\delta J(34))_{G_{(1)}} =\tfrac{1}{2}G(13)G(24)+\tfrac{1}{2}G(14)G(23)+G(15)G(26) (\delta\Gamma(56)/\delta G(78))_{G_{(1)}}(\delta G(78)/\delta J(34))_{G_{(1)}} \tag{A.32}$$

i comparant (A.24) i (A.32)

$$D(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4})G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})=2G(15)G(26)(\delta\Gamma(56)/\delta G(78))_{G_{(1)}} (\delta G(73)/\delta J(34))_{G_{(1)}} \tag{A.33}$$

Ara substituiríem la derivada funcional de $G_{(2)}$ que figura a la dreta de (A.33) per la corresponent expressió donada per (A.24) aillant finalment $D_{(4)}$, per a obtenir inmediatament (II.2.32) tal i com preteníem.

Anem ara de cara a $\Gamma_{(6)}$. Calcularem $(\delta G_{(4)}/\delta J_{(2)})$ de dues maneres diferentes, i després igualarem ambdós resultats. Així, per una banda, i de forma semblant a com feiem per a obtenir (A.18)

$$(\delta G(1234)/\delta J(56))_{J_{(1)}}=(\delta/\delta J(56)(\delta/\delta J(1)\ldots\delta/\delta J(4) \ln Z)_{J_{(2)}})_{J_{(1)}}$$

$$=(\delta/\delta J(1)\ldots\ldots\delta/\delta J(4)\ \ln Z/\delta J(56)$$

$$=\tfrac{1}{2}(\delta/\delta J(1)\ldots\ldots\delta/\delta J(4)\ (G(56)+g(5)G(6)))_{J_{(2)}}$$

(A.34)

i realitzant aquelles derivades funcionals successivament

$$(\delta G(1234)/\delta J(56))_{J_{(1)}} = \tfrac{1}{2}\Big[G(123456)+G(12345)G(6)+$$
$$+G(12346)G(5)+G(2345)G(16)+G(1345)G(26)+G(1245)G(36)+$$
$$+G(1235)G(46)+G(2346)G(15)+G(1346)G(25)+G(1246)G(35)+$$
$$+G(1236)G(45)+G(125)G(346)+G(135)G(246)+G(145)G(236)+$$
$$+G(126)G(345)+G(136)G(245)+G(146)G(235)\Big]$$

(A.35)

Altrament expressem $G_{(4)}$ en termes de les funcions vèrtex $\Gamma_{(4)}$ i $\Gamma_{(3)}$ segons (II.1.43)

$$(\delta G(1234)/\delta J(56))_{J_{(1)}} = \delta/\delta J(56)\Big\{\ G(1\bar{1})G(2\bar{2})G(3\bar{3})G(4\bar{4})$$
$$\Big[\Gamma(\bar{1}\bar{4}5)G(55)\Gamma(\bar{2}\bar{3}5)+\Gamma(\bar{2}\bar{4}5)G(55)\Gamma(\bar{1}\bar{3}5)+\Gamma(\bar{3}\bar{4}5)G(55)$$
$$\Gamma(\bar{1}\bar{2}5)\ +\Gamma(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4})\Big]\Big\}_{J_{(1)}}$$

(A.36)

i ara ens disposaríem a realitzar les derivades funcionals indicades, tenint en compte (A.19) pel que fa referència a ($\delta\ G_{(2)}/\ \delta J_{(2)}$), i pel que afecta a ($\delta\Gamma_{(3)}/\delta J_{(2)})_{J(1)}$ i a ($\delta\Gamma_{(4)}/\ J_{(2)}\ )_{J_{(1)}}$ consideraríem les seves dependències explícites pel que fa a $G_{(1)}$ i $G_{(2)}$. Així

$$(\delta\Gamma(123)/\delta J(45))_{J_{(1)}} = (\delta\Gamma(123)/\delta G(6))_{G_{(2)}}\ (\delta G(6)/\delta J(45))_{J_{(1)}}$$
$$+\ (\delta\Gamma(123)/\delta G(67))_{G_{(1)}}(\delta G(67)/\delta J(45))_{J_{(1)}}$$

(A.37)

i una identitat anàloga per a $\Gamma_{(4)}$. En aquesta identitat ara hi substituïríem $(\delta G_{(1)}/\delta J_{(2)})_{J_{(1)}}$ i $(\delta G_{(2)}/\delta J_{(2)})_{J_{(1)}}$ respectivament per (A.21) i (A.19). Finalment introduint les funcions vèrtex corresponents en (A.35) i en la resultant de (A.36) després de realitzar les derivades funcionals que s'hi indiquen, tal i com s'ha comentat, i si comparem ambdues relacions, arribarem finalment a una equació per a $\Gamma_{(6)}$ en termes de vèrtexs d'ordre inferior i de les derivades funcionals d'aquests darrers . Per una qüestió de brevetat i, perquè en la secció (II.1.6) ja se'n fa una particular anàlisis detallat, no incloem aquí la equació esmentada.

Si resumim el contingut d'aquest apèndix direm que hem aconseguit de formular equacions autoconsistents per a $\Gamma_{(4)}$, a l'ensems amb una identitat on hi apareix $\Gamma_{(6)}$, havent-nos servit per això del recurs purament formal que suposa la inclosió d'una nova font externa en la definició del funcional generador de partida. Per tal que el que aquí s'ha realitzat sigui exactament trasplantable a II.1.5 i a les seccions subsegüents haurem d'entendre que tot el formalisme que s'havia desenvolupat fins a la formulació de l'equació íntegro-diferencial (II.1.77) s'ha redefinit convenientment d'acord amb el que s'ha establert aquí, i conseqüentment aquella equació ara passa a ser (A.16) amb G_0^{-1} donat per (A.15) i amb Σ escrit segons (II.1.44), però amb dependència addicional implícita en $J_{(2)}$. Aquesta modificació no ens ha d'inquietar en absolut car pel fet que estem interessats en resoldre (A.16) amb les fonts totes idènticament nul.les, G_0^{-1} coincideix en (A.15) amb G_0^{-1} en (II.1.75) i l'eventual dependència addicional de les funcions $G_{(m)}$ o dels vèrtexs $\Gamma_{(m)}$ respecte a $J_{(2)}$, sota aquestes circumstàncies queda automàticament sens cap efecte.

APÈNDIX B

Recordem que en II.3.1 havíem arribat a establir la funció resposta en la forma

$$R^{\mu}_{\nu}(t_1', t_1) = D_{\nu\sigma}\left[\frac{\partial}{\partial t_1} \Phi^{\mu\sigma}(t_1', t_1) - \langle q^{\mu}(t_1') f^{\sigma}(q(t_1))\rangle\right] \tag{B.1}$$

Ara calcularem el segon terme a la dreta de la identitat anterior,

$$\langle q^{\mu}(t_1') f^{\sigma}(q(t_1))\rangle = \int_{\Gamma} d^n q_1' \, q_1'^{\mu} \int_{\Gamma} d^n q_1 \, P(q_1', t_1' - t_1 | q_1, 0) \, f^{\sigma}(q_1) \, P_{st}(q_1) \tag{B.2}$$

on hem pres $t_1' > t_1$. Suposarem a més a més, que existeix un potencial $\mathcal{H}(q)$ definit a través de la solució estacionària de la FPE mitjançant

$$P_{st}(q) = N \exp\{-\mathcal{H}(q)\} \tag{B.3}$$

Estudiem les relacions entre $f^{\sigma}(q)$ i $\mathcal{H}(q)$. Escrivim abans la FPE per a la densitat de probabilitat $P(q,t)$

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial q^{\mu}}\left\{\left(-f^{\mu}(q) + \tfrac{1}{2} D^{\mu\nu}\frac{\partial}{\partial q^{\nu}}\right) P(q,t)\right\} \tag{B.4}$$

on ja hem suposat constant la matriu de difusió, i juntament amb el drift, els hem suposat independents del temps per tal d'assegurar la primera de les condicions d'estacionarietat.

Qualifiquem una funció $P_{st}(q)$ de solució estacionària de la FPE si satisfà

$$\frac{\partial}{\partial q^{\mu}}\left\{\left(-f^{\mu}(q) + \tfrac{1}{2} D^{\mu\nu}\frac{\partial}{\partial q^{\nu}}\right) P_{st}(q)\right\} = 0 \tag{B.5}$$

i substituint $P_{st}(q)$ segons (B.3)

$$\frac{\partial}{\partial q^\mu}\left\{\left(-f^\mu(q)-\tfrac{1}{2}D^{\mu\nu}\frac{\partial\mathcal{H}(q)}{\partial q^\nu}\right)e^{-\mathcal{H}(q)}\right\}=0 \tag{B.6}$$

que admet una solució trivial en la forma

$$f^\mu(q)=-\tfrac{1}{2}D^{\mu\nu}\frac{\partial\mathcal{H}(q)}{\partial q^\nu} \tag{B.7}$$

En aquestes condicions substituint (B.7) en (B.2)

$$\langle q^\mu(t_1')f^\sigma(q(t_1))\rangle=-\int_\Gamma d^m q_1'\, q_1'^\mu\int_\Gamma d^m q_1\, P(q_1',t_1'-t_1/q_1,0)\,\frac{1}{2}D^{\sigma\delta}\frac{\partial\mathcal{H}(q_1)}{\partial q_1^\delta}e^{-\mathcal{H}(q)}$$

Estudiem detalladament la integral sobre q_1 (B.8)

$$-\tfrac{1}{2}\int_\Gamma d^m q_1\, P(q_1',t_1'-t_1/q_1,0)\,D^{\sigma\delta}\frac{\partial\mathcal{H}(q_1)}{\partial q_1^\delta}e^{-\mathcal{H}(q_1)}=$$

$$=-\tfrac{1}{2}D^{\sigma\delta}\int d^m q_1\, e^{-\mathcal{H}(q_1)}\frac{\partial}{\partial q_1^\delta}P(q_1',t_1'-t_1/q_1,0) \tag{B.9}$$

on hem fet ús d'una integració per parts, i hem suposat en la forma usual les condicions apropiades d'anul.lació per a $P_{st}(q)$ en la frontera de l'espai de configuració propi del sistema.

Calculem la derivada que figura en (B.9), escrivint abans la versió discretitzada corresponent a la representació per integrals de camí de la densitat de probabilitat condicional $P(q_1,t_1'-t_1/q_1,0)$. Cal que afegim que per comoditat emprarem la representació Hamiltoniana desenvolupada en I.1

$$P(q_1',t_1'-t_1/q_1,0)=\lim_{\substack{n\to\infty\\(\epsilon\to 0)}}\int_\Gamma\left(\prod_{j=1}^{n}d^m q_{1j}\right)\int\left(\prod_{j=2}^{n+1}\frac{d^m p_j}{(2\pi)^m}\right)\exp\left\{i\epsilon\sum_{j=2}^{n+1}\left[p_{j\mu}\frac{q_{1j}^\mu-q_{1j-1}^\mu}{\epsilon}-\mathcal{H}(p_j,q_{1,j-1})\right]\right\}$$

$$q_{10}=q_1 \qquad q_{1,n+1}=q_1' \qquad \int\frac{dp_1}{(2\pi)^m}\exp\left\{i\epsilon\left[p_{1\mu}\frac{q_{11}^\mu-q_{10}^\mu}{\epsilon}-p_{1\mu}f^\mu(q_1)+\tfrac{i}{2}D^{\mu\nu}p_{1\mu}p_{1\nu}\right]\right\}$$

(B.10)

A partir de (B.10)

$$\frac{\partial}{\partial q_1^{\delta}} P(q'_1, t'_1 - t_1 | q_1, 0) = \lim_{\substack{n \to \infty \\ (\epsilon \to 0)}} \int_{\Pi} \left(\prod_{j=1}^{n} d^m q_{1j} \right) \int \left(\prod_{j=2}^{n+1} \frac{d^m p_j}{(2\pi)^m} \right) \exp\{ \} \int \frac{d^m p_1}{(2\pi)^m} \exp\{ i\epsilon \left(-\frac{p_{1\delta}}{\epsilon} - p_{1\mu} \frac{\partial f^{\mu}(q_1)}{\partial q_1^{\sigma}} \right.$$

$$= \lim_{\substack{n \to \infty \\ (\epsilon \to 0)}} \int_{\Pi} \left(\prod_{j=1}^{n} d^m q_{1j} \right) \int \left(\prod_{j=1}^{n+1} \frac{d^m p_j}{(2\pi)^m} \right) \left(-i p_{1\delta} \right) \exp\left\{ i\epsilon \sum_{j=1}^{n+1} \left[p_{j\mu} \frac{q_{1j}^{\mu} - q_{1j-1}^{\mu}}{\epsilon} - H(p_j, q_{1j-1}) \right] \right\}$$

(B.11)

on hem tingut en compte que en prendre el límit $\epsilon \to 0$, el terme que conté la derivada del drift donaria contribució nul.la. Si substituíssim aquest resultat en (B.9), i posteriorment en (B.8) arribaríem finalment a

$$\left\langle q^{\mu}(t'_1) f^{\sigma}(q(t_1)) \right\rangle = \tfrac{1}{2} D^{\sigma\delta} \left\langle q^{\mu}(t'_1) \, p_{\delta}(t_1) \right\rangle \tag{B.12}$$

i tenint en compte (II.5.3)

$$\left\langle q^{\mu}(t'_1) f^{\sigma}(q(t_1)) \right\rangle = -\tfrac{1}{2} D^{\sigma\delta} R^{\mu}_{\delta}(t'_1 - t_1) \tag{B.13}$$

on ja s´ha tingut en compte en escriure la dependència temporal de la funció resposta, el règim estacionari que suposem que ha assolit el sistema. Si substituïm ara la identitat anterior en (B.1)

$$\begin{aligned} R^{\mu}_{\nu}(t'_1 - t_1) &= D_{\nu\sigma} \left[\frac{\partial}{\partial t_1} \phi^{\mu\sigma}(t'_1 - t_1) + \tfrac{1}{2} D^{\sigma\delta} R^{\mu}_{\delta}(t'_1 - t_1) \right] \\ &= D_{\nu\sigma} \frac{\partial}{\partial t_1} \phi^{\mu\sigma}(t'_1 - t_1) + \tfrac{1}{2} R^{\mu}_{\nu}(t'_1 - t_1) \end{aligned} \tag{B.14}$$

o de manera equivalent

$$\tfrac{1}{2} R^{\mu}_{\nu}(t'_1 - t_1) = D_{\nu\sigma} \frac{\partial}{\partial t_1} \phi^{\mu\sigma}(t'_1 - t_1) \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t_1} \phi^{\mu\sigma}(t'_1 - t_1) = \tfrac{1}{2} D^{\sigma\nu} R^{\mu}_{\nu}(t'_1 - t_1)$$

(B.15)

que només correspon a una branca del FDT, car hem de recordar que la identitat anterior ha estat deduïda suposant $t_1' > t_1$. Precisem aquest detall establint (B.15) en la forma

$$\theta(t_1'-t_1)\frac{\partial}{\partial t_1}\phi^{\mu\alpha}(t_1'-t_1) = \tfrac{1}{2} D^{\alpha\nu} R^{\mu}_{\nu}(t_1'-t_1) \tag{B.16}$$

que també podem escriure, emprant la simetria de $\phi_{(2)}$ davant d'intercanvis conjunts dels seus índexs discrets i temporals, com

$$\theta(t_1'-t_1)\frac{\partial}{\partial t_1}\phi^{\alpha\mu}(t_1-t_1') = \tfrac{1}{2} D^{\alpha\nu} R^{\mu}_{\nu}(t_1'-t_1) \tag{B.17}$$

Per a calcular el FDT complet emprarem novament aquella simetria juntament amb la dependència en t_1-t_1', en la forma

$$\frac{\partial}{\partial t_1}\phi^{\alpha\mu}(t_1-t_1') = -\frac{\partial}{\partial t_1'}\phi^{\mu\alpha}(t_1'-t_1) \tag{B.18}$$

Si procedim a un intercanvi de t_1 per t_1' i de α per μ en (B.17), escrivim aquesta darrera com

$$\theta(t_1-t_1')\frac{\partial}{\partial t_1'}\phi^{\mu\alpha}(t_1'-t_1) = \tfrac{1}{2} D^{\mu\nu} R^{\alpha}_{\nu}(t_1-t_1') \tag{B.19}$$

i tenint en compte (B.18) en (B.19)

$$-\theta(t_1-t_1')\frac{\partial}{\partial t_1}\phi^{\alpha\mu}(t_1-t_1') = \tfrac{1}{2} D^{\mu\nu} R^{\alpha}_{\nu}(t_1-t_1') \tag{B.20}$$

Sumant finalment (B.17) i (B.20) establim

$$\frac{\partial}{\partial t_1}\phi^{\alpha\mu}(t_1-t_1') = \tfrac{1}{2} D^{\alpha\nu} R^{\mu}_{\nu}(t_1'-t_1) - \tfrac{1}{2} D^{\mu\nu} R^{\alpha}_{\nu}(t_1-t_1') \tag{B.21}$$

que constitueix el FDT complet que preteníem obtenir.
A vegades aquesta mateixa relació s'escriu simbòlicament en la forma

$$\dot{\phi} = -\tfrac{1}{2} R D + \tfrac{1}{2} D R^{T} \tag{B.22}$$

APÈNDIX C

En aquest apèndix calculem els propagadors connectats estàtics de dos, quatre i sis punts. Comencem pel primer i ens referirem succesivament als dos restants.

Les úniques components no nul.les per $G_{(2)}$ corresponen a la correlació entre una variable $\underline{b}$ i una $\underline{b}^*$. D'acord amb la notació emprada

$$G(1,2;0) \equiv G(b,b^*;0) \equiv G(0) = \langle bb^* \rangle_{P_{st.}} \qquad (C.1)$$

D 'acord amb la forma de $P_{st}(b,b^*)$ (III.1.4) proposem un canvi a coordenadas polars ,segons

$$\begin{aligned} b &= r(\cos\theta + i\sin\theta) \\ b^* &= r(\cos\theta - i\sin\theta) \end{aligned} \qquad (C.2)$$

i per tant

$$G(0) = a + \exp\{-\tfrac{1}{4}a^2\}\left[\int_{-\frac{1}{2}a}^{\infty} du \exp\{-u^2\}\right]^{-1} \qquad (C.3)$$

o en termes de la funció complementaria d'error fcer(x)

$$\mathrm{fcer}(x) = 1 - \mathrm{fer}(x) = 2/\pi^{1/2} \int_x^{\infty} du \exp\{-u^2\} \qquad (C.4)$$

sera

$$G(0) = a + 2/\pi^{\frac{1}{2}} \left[1 + \mathrm{fer}(\tfrac{1}{2}a)\right]^{-1} \exp\{-\tfrac{1}{4}a^2\} \qquad (C.5)$$

A partir de (C.5) i del comportament de la funció error per $x \to \pm\infty$, es demostra fàcilment

$$G(0) \xrightarrow[a\to-\infty]{} 2/|a| \qquad\qquad G(0) \xrightarrow[a\to\infty]{} a \qquad (C.6)$$

Pel de quatre punts sera

$$\not{G}(1,1,2,2;0,0,0) \equiv \langle bbb^*b^* \rangle_{P_{st}} \qquad (C.7)$$

i resulta ser

$$\not{G}(1,1,2,2;0,0,0) = 2 + a^2 + a \exp\{-\tfrac{1}{4}a^2\}\left[\int_{-\frac{1}{2}a}^{\infty} du \exp\{-u^2\}\right]^{-1} \qquad (C.8)$$

amb la qual cosa escriurem el connectat com

$$G(1,1,2,2;0,0,0) = \not{G}(1,1,2,2;0,0,0) - 2G^2(0) \qquad (C.9)$$

i finalment

$$G(1,1,2,2;0,0,0) = (a - 2G(0))G(0) + 2 \qquad (C.10)$$

Ja només ens resta el de sis punts. En aquest cas tindrem

$$G(1,2,1,2,1,2;0,0,0,0,0) = 2a+(a^2-14-9aG(0)+12G^2(0))G(0) \qquad (C.11)$$

expressió final que obtindriem un cop realitzada la corresponent integral i reordenada convenientment en termes de G(0).

REFERENCIES.

G. S. Agarwal, E. Wolf; Phys. Rev. D2,(1970), 2161
D. J. Amit; Field Theory: the Renormalization Group and Critical Phenomena
F. T. Arecchi, V. Degiorgio; Phys. Rev A3,(1971), 1108
L. Arnold; Stochastic Differential Equations: Theory and Applications(New York, Wiley 1974)
R. Bausch, H. K. Janssen, H. Wagner; Z.Phys. B24 (1976), 113
G. Baym, L. P. Kadanoff; Quantum Statistical Mechanics (New York,W.A. Benjamin 1962)
J. P. Boon; J. Phys. Chem. Liquids 3, (1972), 157
H. Busse; J. Phys. Chem. 73, (1969), 750
N. N. Bogolyubov, D. V. Shirkov; Introduction to the Theory of Quantized Fields (New York, Interscience,1959)
L. Cohen; J. Math. Phys. 11, (1970), 3296
P. Dekepper, W. Horsthenke, in Synergetics÷ far from equilibrium. Ed. A. Pacault (N.Y. Springer-Verlag 1979)
U. Dekker, F. Haake (1975a); Phys. Rev. A11, (1975), 2043
" " (1975b); Phys. Rev. A12, (1975), 1629
H. Dekker (1976a); Physica 85A, (1976), 363
" (1976b); Physica 85A, (1976), 598
" (1978a); Physica 92A, (1978), 438
" (1978b); Phys. Lett. 69A, (1978), 241
F. J. Dyson; Phys. Rev. 82, (1951), 428
C. De Dominicis, P. C. Martin (1964a); J. of. Math. Phys. 5, (1964), 14
" " (1964b); J. of. Math. Phys. 5, (1964), 31
J. S. Dowker; J. Math. Phys. 17, (1976), 1873
C. P. Enz, L. Garrido; Phys. Rev. A14, (1976), 1258
C. P. Enz; Physica 89A, (1977), 1
L. D. Faddeev in Methods in Field Theory. Les Houches 1975 Ed. R. Balian, J. Zinn-Justin (Amsterdam, North-Holland, 1976)
A. L. Fetter, J. D. Walecka; Quantum Theory of Many Particle Systems (N. Y. McGraw-Hill, 1971)

R. P. Feynman; Rev. Mod. Phys. 20, (1948), 367
R. P. Feynman, A. R. Hibbs; Quantum Mechanics and Path Integrals (N.Y., McGraw-Hill, 1965)
R. J. Field, R. M. Noyes; J. Chem. Phys. 60, (1974), 1877
H. M. Fried; Functional Methods and Models in Field Theory (MIT Press, Cambridge, Mass. 1972)
L. Garrido, M. San Miguel (1978a); Prog. Theor. Phys. 59, (1978 40
" " (1978b); Prog. Theor. Phys. 59, (1978 52
L. Garrido, D. Lurié, M. San Miguel; Phys. Lett. 67A, (1978), 243
" " " ; Jour. Stat. Phys. 21, (1979), 313
L. Garrido; Physica 100A, (1980), 140
H. Gerhardt, H. Welling, A. Güttner; Z. Phys. 253, (1972), 113
V. de Giorgio, M. O. Scully; Phys. Rev. A2, (1970), 1170
P. Glansdorff, I. Prigogine; Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations (N.Y. Wiley 1971)
R. Graham, H. Haken; Z. Phys. 237, (1970), 31
R. Graham, H. Haken; Z. Phys. 243, (1971), 289
R. Graham; Springer Tracts in Modern Physics. Vol.66 (Springer-Verlag 1973)
R. Graham (1977a); Z. Phys. B26, (1977), 281
" (1977b); Z. Phys. B26, (1977), 397
" (1977c); Short Time Propagators in Riemann geometries. (Statphys 13, Haifa, September 1977)
M. S. Green ; J. Chem. Phys. 20, (1952), 1281
M. S. Green; J. Chem. Phys. 22, (1954), 398
S. Grossmann, P. H. Titcher; Z. Phys. 242, (1971), 458
S. Grossmann; Phys. Rev. A17, (1978), 1123
F. Haake; Phys. Rev. Lett. 41, (1978), 1685
H. Haken ; Z, Phys. 181, (1964), 96
" in Encyclopedia of Physics, Vol.XXV, 12c, Laser Theory (Berlin, Heidelberg, N. Y. Spinger 1970)

H. Haken ; Synergetics (Stuttgart, Teubner, 1973)
" ; Cooperative Effects: Progress in Synergetics (Noth-Holland Publ. Co. 1974)
" ; Rev Mod. Physics, 47, (1975), 67
" ; Z. Phys. B24, (1976), 321
" ; Synergetics: a workshop (Berlin, Springer 1977)
M. Herschowitz; C. R. Acad. Sci. Paris 270, 1970, 1049
W. Horsthemke, A. Back; Z. Phys. B22, (1975), 189
K. Itô ; Mem. Am.Math. Soc. 4, (1951), 1
H. K. Janssen ; Z. Phys. B23, (1976), 377
L. P. Kadanoff; Rev. Mod. Phys. 39, (1967), 395
H. King, U. Dekker, F. Haake; Z. Phys. B36, (1979), 205
R. Kubo; Lect. in Theore. Physics Vol.1 (Boulder Interscience Publ. 1959)
F. Langouche, D. Roekaerts, E. Tirapegui; Prep. KUL-TF 77/023 (1977)
" " " (1978a); Prep. KUL-TF 78/007 (1978)
" " " (1978b); Prep. KUL-TF 78/015 (1978)
" " " (1978c); Prep. KUL-TF 78/031 (1978)
" " " Physica 95A, (1979), 252
H. Leschke, M. Schmutz; Z. Phys. B27, (1977), 85
K. Linderberg, K. E. Shuler, et als. in Probabilistic Analysis and Related Topics.Vol.3 Ed. At. Bharucha-Reid (N.Y. Academic Press, 1981)
P. C. Martin, E. D. Siggia, H. A. Rose; Phys. Rev. A8, (1973) 243
J. Matheson, D. F. Walls, C. W. Gardiner; J. Stat. Physics 12, (1975), 21
K. J. McNeil, D. F. Walls; J. Stat. Phys. 10, (1974), 439
D. A. McQuarrie; Stochastic Approach to Chemical Kinetics. Suppl.Rev. Ser. in Appl.Prob.Vol.8(London, Methusen 1967)
E. Meeron; J. Chem. Phys. 27, (1957), 1238
D. Meltzer, L. Mandel; Phys. Rev. Lett. 25, (1970), 1151
R. E. Mortensen; J. Stat. Phys. 1, (1969), 271

G. Nicolis, I. Prigogine; Self Organization in Nonequilibrium Systems. (N.Y. Wiley, 1977)
A. Nitzan, et als.; J. Chem Phys. 61, (1974), 1056
L. Onsager, S. Machlup; Phys. Rev. 91, (1953), 1505
I. Oppenheim, H. E. Shuler, G. H. Weiss; Stochastic Processes in Chemical Physics. (MIT Press 1977)
R. Phytian; J. Phys. A8, (1975), 1423
" ; J. Phys. A9, (1976), 269
" ; J. Phys. A10, (1977), 777
I. Prigogine, R. Lefever; J. Chem. Phys. 48, (1968), 1695
L. E. Reichl; A Modern Course in Stat. Phys. (Univ. of. Texas, Austin, 1980)
H. Risken; Z. Physik 186, 85 (1965)
H. Risken, H. D. Wollmer (1967a); Z. Phys. 201, (1967), 323
" " (1967b); Z. Phys. 204, (1967), 240
H. Risken ; Fortschr. Phys. 16, (1968), 261
" ; Z. Phys. 251, (1972), 231
" ; Z. Phys. B39, (1980), 89
P. Roman ; Introduction to Quantum Field Theory (N.Y. Wiley 1968)
G. Rosen; Formulations of Classical an Quantum Dynamical Theory. (N.Y. Acad. Press. 1969)
J, M. Sancho, M. San Miguel; Prog. Theor. Phys. 63, 1980, 62
M. San Miguel, S. Chaturvedi; Z. Phys. B40, (1980), 167
M. San Miguel, J. M. Sancho in Stochastic Non Linear Systems in Physics, Chemistry, and Biology. Ed. L. Arnold i R. Lefever. Springer Series in Synergetics. Vol.8 (Springer-Verlag,1981)
A. Schenzle, H. Brand; Phys. Rev. A20, (1979), 1628
F. Schlögl; Z. Phys. 253, (1972), 147
" ; Phys. Rep. 62, (1980), 267
J. Schwinger; Proc. Natl. Acad. Sci. 37, (1951), 452
A. W. Smith, J. A. Armstrong; Phys. Rev. Lett. 16, (1966),1169
R. L. Stratonovich; Topics in the Theory of Random Noise Vol.1 (N.Y. Gordon and Breach 1963)
" ; Sel. Trasl. Math. Stat. Prob. 10, (1971) 273

K. Symanzik in Lectures in Theor. Phys. Vol.3. Ed. W. E. Brittin (N.Y. Intersc. 1961)

N. G. Van Kampen; Physica 23, 707 (1975)

G. C. Wick; Phys. Rev. 80, (1950), 268

E. Wong, M. Zakai; Ann. Math. Stat. 36, (1965), 1560

A. Zhabotinsky; Biofizika 9, (1964), 306

K. Ziegler, H. Horner; Z. Phys. B37, (1980), 339

R. Zwanzig; Phys. Rev. 124, (1961), 983