

TRATAMIENTOS CANONICOS DE CAMPO MEDIO A TEMPERATURA FINITA.

R. Rossignoli*

Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Física,
Universidad Nacional de La Plata, C.C. 67, 1900 La Plata.

Se propone un método para realizar tratamientos canónicos de campo medio y de orden superior a temperatura finita. Se obtienen definidas mejoras sobre el tratamiento usual (gran canónico) de Hartree - Fock térmico.

INTRODUCCION

Los diversos tratamientos térmicos de cuasipartícula independiente [1-2] (Hartree-Fock térmico (HFT), HF-Bogoliubov térmico (HFBT)) están basados en el conjunto gran canónico, conservando por lo tanto el número de partículas sólo en promedio. La validez del teorema de Wick y de la expresión de Fermi-Dirac para el número de ocupación, hacen que este conjunto sea el más apropiado para una formulación sencilla de estas aproximaciones. No obstante, ellas exhiben ciertas desventajas, siendo la más notoria en sistemas finitos la anulación del parámetro de orden (gap o momento cuadrupolar) para $T > T_c$, en contraste con cálculos exactos y evidencias experimentales [3-5].

El propósito de este trabajo es el de desarrollar tratamientos canónicos de campo medio y de orden superior, basados estos últimos en la inclusión de ciertos términos de la interacción residual en el operador estadístico.

FORMALISMO

Aproximaciones autoconsistentes de campo medio y de orden superior pueden ser construidas en base a una expansión aproximada del operador estadístico, de la forma [6-7]

$$\hat{\rho}_{ap} = \exp \left\{ -\lambda_0 - \sum_{i=1}^m \lambda_i \hat{P}_i \right\} \quad (1)$$

donde $\{P_j, j=1, \dots, m\}$ es en principio un conjunto

arbitrario de operadores y λ_0 la constante de normalización. Los parámetros λ_i se determinan a partir de la minimización del gran potencial correspondiente. Si $\hat{H}' = \hat{H} - \sum_i \mu_i \hat{O}_i$, con \hat{H} el hamiltoniano y $\{\hat{O}_j, j=1, \dots, n, n \leq m\}$ un conjunto de observables cuyos valores medios son conocidos, el operador aproximado óptimo puede escribirse como [6-7]

$$\hat{\rho}_{ap} = \exp \{ -\lambda_0 - \beta \hat{h}' \} \quad (2)$$

donde

$$\hat{h}' = \sum_{j=1}^m \{ \partial \langle \hat{H}' \rangle / \partial \langle \hat{P}_j \rangle \} \hat{P}_j \quad (3a)$$

$$= \sum_{j=1}^m \langle \hat{P}_i^* \hat{H}' \rangle (A^{-1})_{ij} \hat{P}_j \quad (3b)$$

con $A_{ij} = \langle \hat{P}_i^* \hat{P}_j \rangle$ y $P_i^* = \int_0^1 \hat{\rho}_{ap}^{-x} \hat{P}_i \hat{\rho}_{ap}^x dx - \langle \hat{P}_i \rangle$.

Las expresiones anteriores son completamente generales, siendo válidas para todo tipo de operadores P_j y en cualquier conjunto estadístico, proporcionando un conjunto de ecuaciones autoconsistentes en los parámetros λ_i .

Los tratamientos usuales de campo medio se obtienen en este esquema eligiendo los operadores \hat{P}_j como operadores generales de un cuerpo $c_k^+ c_i$ y tomando trazas en un conjunto gran canónico. Tomando trazas en un conjunto canónico, las ecuaciones (3) nos proveen un método para realizar cálculos canónicos de campo medio.

Una forma particularmente simple de realizar un tratamiento de orden superior a HFT dentro del esquema anterior consiste en añadir al conjunto $c_k^+ c_i$ un subconjunto particular de operadores de dos cuer-

* Investigador CIC

pos, de forma que $\hat{\rho}_{ap}$ siga siendo diagonal en una base de partícula independiente:

$$\hat{\rho}_{ap} = \exp \left\{ -\lambda_0 - \sum_k \lambda_k c'_k + c'_k - \sum_{kl} \alpha_{kl} c'_k + c'_l + c'_k \right\} \quad (4)$$

donde los operadores c'_k se relacionan con los operadores no perturbados c_k por medio de una transformación de HF. Si $\alpha_{kl} = 0$, (4) conduce a la aproximación de HFT. Al incluir estos términos, (3a) implica que si \hat{H}' contiene a lo sumo operadores de dos cuerpos, \hat{h}' coincide directamente con la parte diagonal de \hat{H}' en la base primada de partícula independiente. La base óptima se determina a partir de

$$\langle [c'_k + c'_l, \hat{H}'] \rangle = 0, \quad (5)$$

condición que asegura la estabilidad respecto a la transformación de HF. Las ecuaciones de HFT también conducen a (5), pero en este caso los parámetros λ_k deben ser determinados en el tratamiento canónico utilizando las relaciones (3).

RESULTADOS

Como ilustración, aplicaremos el formalismo anterior en el modelo de Lipkin [8], con $H = \epsilon J_2 + 1/2 V (J_+^2 + J_-^2)$, $J_{\pm} = \sum_{p,v} c_{pv}^{\pm} c_{p-v}$, $J_2 = 1/2 \sum_{p,v} v c_{pv}^+ c_{pv}^-$, $p = 1, \dots, 2\Omega$, $v = \pm 1$. Consideraremos trazas en el conjunto canónico completo [5,9], de dimensión $\left[\frac{4\Omega}{N} \right]$, sin restricciones adicionales ($\hat{H}' = \hat{H}$), y con $N = 2\Omega$. La transformación de HF puede ser escrita como

$$c'_{pv} = \cos(\vartheta/2) c_{pv} + v \sin(\vartheta/2) \exp(i\varphi) c_{p-v}^+ \quad (6)$$

La ecuación (9) se reduce a $\langle [J_{\pm}, \hat{H}] \rangle = 0$, la que determina ϑ y ϕ .

En las figuras 1-3 se comparan resultados para el caso $v = V/[\epsilon(N-1)] = 5$, $N = 20$. Los resultados de HFT canónico (HFTC) son similares a los de HFT gran canónico (HFTGC), aunque representan de todas maneras una mejora, especialmente en la fase deformada. La temperatura crítica correspondiente a la transición deformado-normal (independiente de N para v fijo en HFTGC) disminuye al aumentar N , siendo la transición del mismo tipo.

En el tratamiento de orden superior basado en (4), los resultados varían apreciablemente. Además de las soluciones deformada y normal, similares a las de HFT, existe una nueva solución, caracterizada por el valor fijo $\vartheta = \pi/2$. Esta solución, que existe para todo T , conserva la simetría rota en la solución deformada

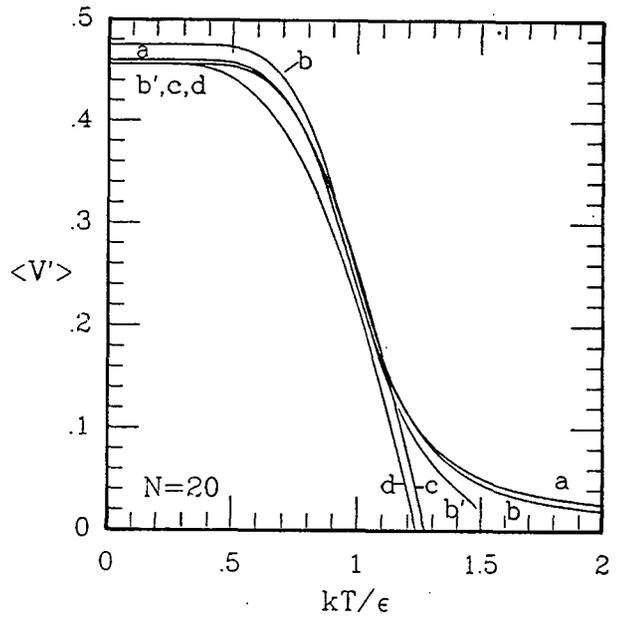


Figura 1: Valor medio de la interacción normalizada $V' = (J_+^2 + J_-^2) / (2N^2)$ en función de la temperatura, para $N = 20, v = 5$. a) corresponde al resultado exacto, b) a la solución $\vartheta = \pi/2$ del tratamiento canónico de orden superior, b') a la solución deformada de orden superior, c) al tratamiento canónico de HFT y d) al tratamiento convencional (gran canónico) de HFT.

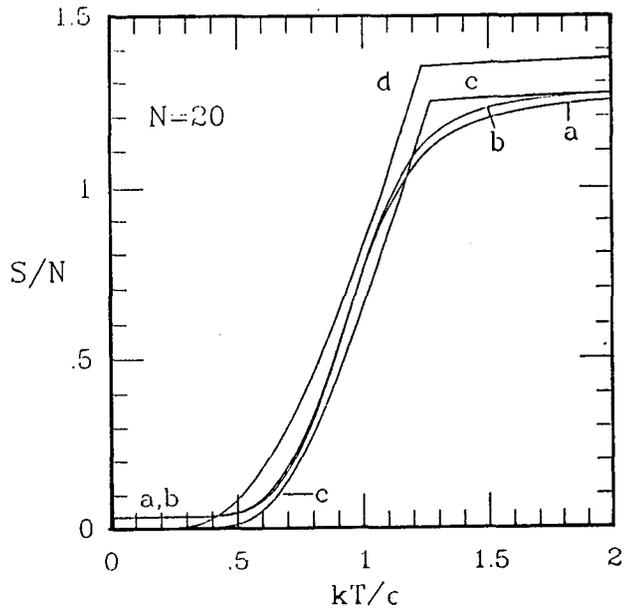


Figura 2: Entropía intensiva (en unidades de la constante de Boltzmann k). Detalles similares a los de la fig. 1.

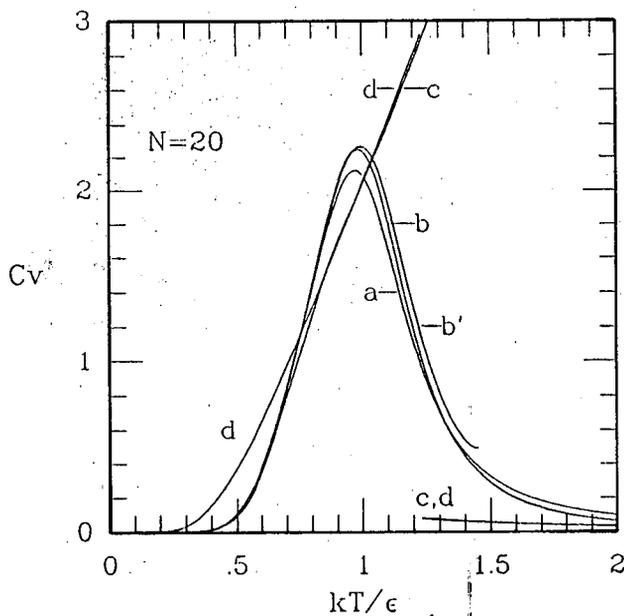


Figura 3: Calor específico $C_v = d\langle \hat{H} \rangle / d(kT)$. Detalles similares a los de la fig.1.

(para $\vartheta = \pi/2$, $\hat{h} \propto \hat{J}_z^2$ en el tratamiento basado en (4), de modo que $\langle \hat{J}_v \rangle = 0$), brindando no obstante un valor no nulo de $\langle \hat{J}_v^2 \rangle$, y por lo tanto una descripción aproximada simétrica de la interacción. Como puede apreciarse en las figuras, esta solución proporciona una excelente estimación del valor medio de la interacción para $T > T_c$ (el cual es nulo en HFTC y HFTGC), y de la entropía y el calor específico, en estos casos aún para $T < T_c$.

CONCLUSIONES

Se ha presentado un método para realizar cálculos

canónicos de campo medio y de orden superior. Si bien HFTC representa una mejora sobre HFTGC, especialmente en la fase deformada, los resultados indican que la inclusión de términos diagonales de dos cuerpos en el exponente del operador estadístico brinda una mejor descripción de la física pertinente en sistemas finitos. En el ejemplo analizado, mientras ciertas soluciones del tratamiento de orden superior son análogas a las de HFT, es factible una nueva solución no trivial, la cual brinda la descripción apropiada del valor medio de la interacción para $T > T_c$ conservando asimismo la simetría rota en la solución deformada.

REFERENCIAS

1. A. Goodman, Nucl. Phys. A352 (1981) 30,45.
2. M. Brack, P. Quentin, Nucl. Phys. A361 (1981) 35.
3. J. Egido, P. Ring, H.J. Mang, Nucl. Phys. A451 (1986) 35. J. Egido, P. Ring, S. Iwasaki, H.J. Mang, Phys. Lett. 154B (1985).
4. H.G. Miller, R.M. Quick, B.J. Cole, Phys. Rev. C39 (1989) 1599.
5. R. Rossignoli, A. Plastino, Phys. Rev. C32 (1985) 1040.
6. R. Rossignoli, A. Plastino, Phys. Rev. C40 (1989) 1798.
7. R. Rossignoli, A. Plastino, Phys. Rev. A42, (1990) 2065.
8. H.G. Lipkin, N. Meshkov, A.J. Glick, Nucl. Phys. 62 (1965) 188.
9. R. Rossignoli, A. Plastino, J. Vary, Phys. Rev. C37 (1988) 314.