

# APROXIMACION GENERAL AUTOCONSISTENTE PARA OPERADORES ESTADISTICOS

R.Rossignoli\* y A. Plastino\*\*

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad de La Plata, CC67, 1900 La Plata

Se introduce una aproximación general autoconsistente para operadores estadísticos. El esquema se reduce a una descripción estadística generalizada de campo medio al ser aplicado a operadores de un cuerpo. No obstante, el presente contexto permite visualizar la aproximación desde un punto de vista distinto, y posibilita además la construcción directa de aproximaciones autoconsistentes de orden superior.

## INTRODUCCION

Las distintas aproximaciones estadísticas de campo medio (Hartree Fock térmico (HFT) y en general, Hartree Fock Bogoliubov térmico (HFBT)<sup>1,2</sup> constituyen una de las técnicas más importantes para tratar sistemas cuánticos de muchos cuerpos, ofreciendo un punto de partida adecuado para tratamientos más elaborados. El propósito de este trabajo es el de introducir una aproximación general autoconsistente<sup>3</sup> que abarque a las mencionadas anteriormente, dentro de un contexto estadístico completamente general brindado por la teoría de la información<sup>4,5</sup>.

## FORMALISMO

Consideremos un sistema cuántico caracterizado por los valores de expectación de  $m$  observables linealmente independientes  $\hat{O}_i$ . El correspondiente operador estadístico puede ser escrito en la forma<sup>4</sup>

$$\hat{\rho} = \exp\left\{\lambda_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i \hat{O}_i\right\} \quad (1)$$

El operador (1) es aquel que maximiza la entropía

$$S = -\text{Tr}[\hat{\rho} \ln(\hat{\rho})], \quad (2)$$

sujeto a las restricciones

$$\langle \hat{O}_i \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{O}_i] = 0_i, \quad i=1, \dots, m \quad (3)$$

$\lambda_0$  es la constante de normalización,

$$\lambda_0 = -\ln\left[\text{Tr}\left[\exp\left(\sum_{i=1}^m \lambda_i \hat{O}_i\right)\right]\right] \quad (4)$$

No obstante, el operador estadístico exacto (1) resulta en general difícil de tratar. La conexión entre los parámetros de Lagrange y los valores medios requiere usualmente la diagonalización del exponente, lo cual se encuentra fuera de las posibilidades reales en sistemas de muchos cuerpos. La propuesta central del presente trabajo consiste en basar la descripción del sistema en un operador estadístico aproximado de la forma

$$\hat{\rho}_{\text{ap}} = \exp\left\{\lambda_0 + \sum_{j=1}^k \lambda_j \hat{P}_j\right\}, \quad (5)$$

donde  $\{\hat{P}_j, j=1, \dots, k, k \geq m\}$ , es un conjunto de operadores elegido por el observador con el objeto de poseer una densidad tratable. Los parámetros intervinientes en (5) serán determinados maximizando la entropía asociada a (5), sujeto a las restricciones (3). Se obtiene el resultado<sup>3</sup>

$$\hat{\rho}_{\text{ap}} = \exp\left\{\lambda_0 + \sum_{j=1}^m \beta_j \hat{O}_j\right\}, \quad (6)$$

donde

$$\hat{O}_i = \sum_{j=1}^k \frac{\partial \lambda_i}{\partial \beta_j} \hat{P}_j. \quad (7)$$

siendo  $\beta_j$  los parámetros asociados con los observables  $\hat{O}_i$ . La expresión (6) es una solución formal, que conduce al sistema no lineal (autoconsistencia)

$$\text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{ap}} \hat{P}_j] = P_j, \quad j=1, \dots, k \quad (8)$$

En general, existirán varias soluciones para valores fijos de los parámetros  $\beta_j$ , y no todos corresponderán a máximos de  $S$ . Además, para valores fijos de los valores medios, los parámetros  $\beta$  deben ser

\* Investigador de la CIC

\*\* Investigador del CONICET

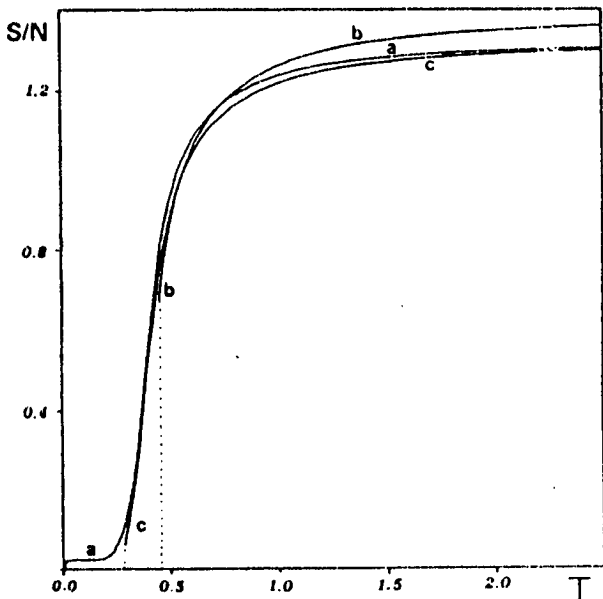


Figura 1a: Entropías intensivas en el sistema monopolar + apareamiento de cuasispín, para  $N=30$ , en función de la temperatura (en unidades de la diferencia de energías  $e$  entre los dos niveles de p.i. no perturbados). (a) corresponde a resultados exactos, (b) a la descripción detallada de campo medio (HFG estadístico) y (c) a la aproximación autoconsistente de orden superior (12). Las líneas punteadas denotan las temperaturas umbrales.

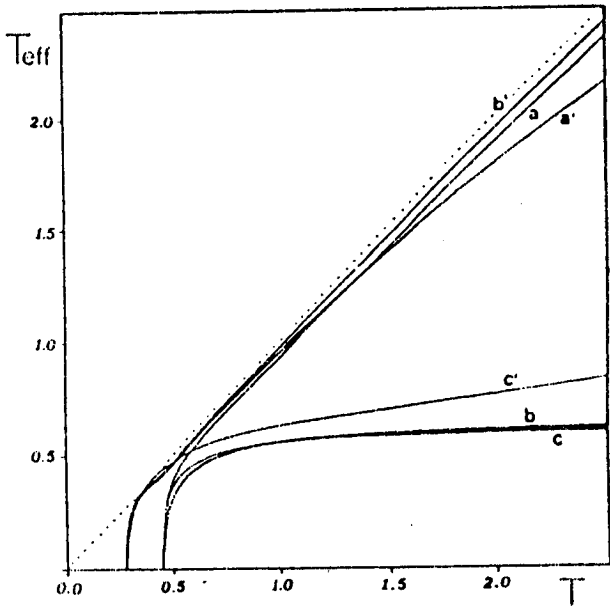


Figura 1b: (a), (b), y (c) denotan las temperaturas efectivas asociadas a los operadores  $J_z$ ,  $Q_+$ ,  $Q_-$  y  $(J_+^2 + J_-^2)/2$  respectivamente en el tratamiento de HFG estadístico, mientras que (a'), (b') y (c') denotan las mismas cantidades en la aproximación de orden superior.

determinados numéricamente, y no coincidirán con los parámetros exactos que aparecen en (1). Pueden ser considerados en este caso como multiplicadores efectivos, para los cuales la aproximación autoconsistente posee los mismos valores medios que la solución exacta. Resulta obvio que no existirá en este caso una solución general, ya que el rango de valores medios barrido por (1) es en general mayor que el correspondiente a (6). El operador (6) provee obviamente una cuota inferior a  $S$  para valores medios fijos y una cuota inferior a  $S' = S - \sum_i \beta_i 0$  para parámetros fijos.

En el caso particular en el cual los observables  $\hat{P}$  sean operadores generales de un cuerpo ( $c^+ c$ ,  $c^+ c^+$ ) y las trazas se realicen en un conjunto gran canónico, resulta obvio que (7) representa la densidad correspondiente a un tratamiento de HFB estadístico. El tratamiento usual estático corresponde al caso en el cual los observables conmutan con el Hamiltoniano del sistema y entre sí. En particular, las ecuaciones de HFBT, representadas en este contexto por (8), son obtenidas si se reduce el conjunto de operadores relevantes a  $H$  y  $N$ .

No obstante, el presente contexto es absolutamente general, siendo los operadores  $O_i$  y  $P_i$  com-

pletamente arbitrarios. En particular, los operadores (1) y (6) no son necesariamente estacionarios.

## APLICACION

Como ilustración de las posibilidades del esquema general autoconsistente en sistemas de muchos cuerpos, se ha escogido un modelo nuclear simplificado  $SU(2) \times SU(2)^{6,8}$  capaz de simular interacciones de corto y largo alcance. El modelo consta de estados de partícula independiente  $|p, v\rangle$ ,  $p = \dots, 2\Omega$ ,  $v = \pm 1$ . Se definen los operadores colectivos

$$\hat{J}_+ = \sum_p c_{p^+}^+ c_{p^-} = \hat{J}_-, \hat{J}_z = \frac{1}{2} \sum_{p,v} v c_{pv} c_{pv}^+ \quad (9)$$

$$\hat{Q}_+ = \sum_p c_{p^+}^+ c_{p^-} = \hat{Q}_-, \hat{Q}_z = \frac{1}{2} \sum_{p,v} c_{pv}^+ c_{pv} - \Omega = \frac{1}{2} \hat{N} - \Omega, \quad (10)$$

los cuales satisfacen un algebra de  $SU(2) \times SU(2)$ .

En este trabajo examinaremos el caso en que la información disponible está restringida al conjunto

$$\left\{ \langle \hat{Q}_z \rangle, \langle \hat{Q}_+ \hat{Q}_- \rangle, \langle \hat{J}_z \rangle, \frac{1}{2} \langle \hat{J}_+^2 + \hat{J}_-^2 \rangle \right\} \quad (11)$$

Resultados numéricos para la entropía y los correspondientes multiplicadores efectivos son mostrados en las figuras 1a-1b, de acuerdo a resultados canónicos exactos (obtenidos de un hamiltoniano monopolar + apareamiento de cuasispín a temperatura finita<sup>6,8</sup>, con  $v/\epsilon = g/\epsilon = -2.5$ ) y de HFB estadístico generalizado. No obstante, este último no proporciona una cota superior a la entropía, debido a que actúa en el conjunto gran canónico. Se ha desarrollado también una aproximación autoconsistente canónica, basada en el operador

$$\hat{\rho}_{ap} = \exp \left\{ \lambda_0 + \lambda \hat{J}_z + \alpha \hat{J}_z^2 + \xi \hat{J}^2 + \chi \hat{Q}^2 \right\} \quad (12)$$

donde la base primada se relaciona con la original por medio de una transformación de Bogoliubov a optimizar. Obviamente, el presente esquema se reduce a HFB estadístico (canónico) si  $\sigma = \xi = \chi = 0$  de modo que (12) brinda resultados de orden superior, proporcionando al mismo tiempo una cota inferior a la entropía.

Los resultados numéricos indican que la cota proporcionada por (12) es muy precisa, siendo además la temperatura umbral (temperatura a partir de la cual la solución autoconsistente existe) menor que en el caso de campo medio. Es de observar que el comportamiento de las temperaturas efectivas (inversas de parámetros de Lagrange) depende en la aproximación autoconsistente fuertemente de la

naturaleza del operador asociado.

En resumen, se ha presentado una aproximación muy general para operadores estadísticos. El esquema permite una formulación de las teorías estadísticas de campo medio dentro de un contexto más amplio, el mismo tiempo que posibilita el desarrollo de aproximaciones autoconsistentes de orden superior en conjuntos canónicos, evitando de este modo fluctuaciones en el número de partículas.

## REFERENCIAS

1. A. L. Goodman, N. Phys A 352, 30 (1981); A 352, 45 (1981).
2. M. Brack and P. Quentin, N. Phys. A. 352, 45 (1981).
3. R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. C (en prensa).
4. A. Katz, "Principles of Statistical Mechanics" (Freeman, San Francisco, 1976).
5. R. Balian, Y. Alhassid and H. Reinhardt, Phys. Rep. 131, 1 & 2 (1986).
6. M. Cambiaggio and A. Plastino, Z. Phys. A 288, 153 (1978).
7. R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. C 32, 1040 (1985).
8. R. Rossignoli, A. Platino and J. Vary, Phys. Rev. C37, 314 (1988).