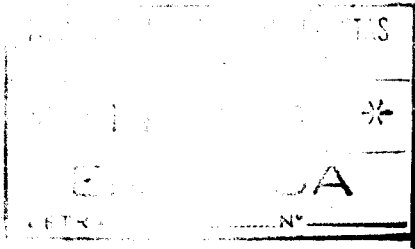


publicado

700-32932

N° 011



UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

ej 2
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

DEPARTAMENTO DE FISICA

CORRELACIONES CUANTICAS E INFERENCIA ESTADISTICA

TESIS DOCTORAL

NORMA B. CANOSA

1988

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

DEPARTAMENTO DE FISICA

CORRELACIONES CUANTICAS E INFERENCIA ESTADISTICA

TESIS DOCTORAL

NORMA B. CANOSA

DIRECTOR

ANGEL L. PLASTINO

LA PLATA

1988

Agradecimientos:

En primer lugar deseo agradecer al Dr. A. L. Plastino por el apoyo brindado. Su aporte en ideas, así como las valiosas discusiones con él mantenidas, permitieron en gran medida concretar esta tesis.

Durante estos años he contado con el permanente apoyo, estímulo y afecto de mis padres y hermano, así como de mi esposo a quien debo además, la gran colaboración prestada en la realización de esta tesis.

Deseo agradecer al Dr. R. Rodríguez por el importante aporte recibido en lo que concierne a los cálculos numéricos, así como también a todos y cada uno de los miembros del Grupo de Teoría Nuclear.

A lo largo de este tiempo, he contado para la realización de esta tesis, con el apoyo económico brindado por una beca de Iniciación y posteriormente de Perfeccionamiento del CONICET.

Debo agradecer por último a los integrantes de la cátedra de Física II QBF con quienes comparto las tareas docentes, por la colaboración prestada.

INDICE :

Introducción I

CAPITULO I. PRINCIPIO DE MAXIMA ENTROPIA EN DISTRIBUCIONES
CUANTICAS.

Introducción.....	2
I.1 Formalismo de máxima entropía.....	4
I.2 Esquema general.....	8
I.3 Caso diagonal.....	11
I.4 Conclusiones.....	14
Referencias.....	16

CAPITULO II. INFERENCIA ESTADISTICA DE MAGNITUDES FUNDAMENTALES.

Introducción.....	18
II.1 Inferencia estadística de la función de onda y del potencial asociado.....	20
II.2 Análisis de la estabilidad de los parámetros de Lagrange...	22
II.3 Aplicación del formalismo en un oscilador anarmónico cuártico.....	24
II.4 Potencial biestable y cúbico.....	27
II.5 Potencial de Morse.....	28
II.6 Conclusiones.....	29
Referencias.....	31
Tablas.....	32
Figuras.....	34

CAPITULO III. ANALISIS EN UN SISTEMA FERMIONICO.

Introducción.....	40
III.1 Formalismo general en el caso discreto.....	42
III.2 El modelo.....	46
III.3 Solución de Hartree- Fock.....	50
III.4 Aplicación del formalismo en un modelo de simetría $U(3)$...	53
III.5 Discusión sobre la estabilidad de las soluciones.....	60
III.6 Conclusiones.....	64
Referencias.....	66
Tablas.....	68

CAPITULO IV. INFERENCIA ESTADISTICA Y EVOLUCION TEMPORAL. CLAUSURA LINEAL.

Introducción.....	77
IV.1 Evolución dinámica exacta. Descripción estadística.....	79
IV.2 Descripción aproximada de la evolución dinámica. Clausura lineal.....	85
IV.3 El modelo.....	89
IV.4 Aplicación del formalismo.....	91
IV.5 Resultados.....	97
IV.6 Conclusiones.....	100
Referencias.....	102
Tablas.....	103
Figuras.....	104

CAPITULO V. CLAUSURA NO LINEAL.

Introducción.....	111
V.1 Descripción aproximada de la evolución dinámica. Tratamiento de campo medio.....	113
V.2 Descripción aproximada de la evolución dinámica. Clausura no lineal.....	116
V.3 Clausuras alternativas.....	120
V.4 Tratamiento de Hartree-Fock dependiente del tiempo en un modelo de simetría $U(3)$	123
V.5 Aplicación del presente formalismo en un modelo de simetría $U(3)$	127
V.6 Análisis de los resultados.....	130
V.7 Conclusiones.....	134
Referencias.....	137
Figuras.....	138
CAPITULO VI. CONCLUSIONES.....	146
Apéndice.....	148

INTRODUCCION.

La necesidad de lograr una mayor comprensión en el problema cuántico de muchos cuerpos ha motivado que en los últimos años una considerable cantidad de esfuerzo se haya centralizado en la búsqueda y análisis de aproximaciones de orden superior a las proporcionadas por las teorías usuales de campo medio.

En tal sentido, cabe destacar que la aplicación de métodos de inferencia estadística a problemas de carácter estrictamente cuántico, ha cobrado recientemente singular relevancia.

En el estudio de sistemas de una o muchas partículas, tanto dentro como fuera del equilibrio, la inferencia estadística de aquellos observables en base a los cuales es posible realizar una descripción adecuada del correspondiente problema, constituye un tema que despierta real interés.

Creemos que el enfoque de la Mecánica Estadística proporcionado por la Teoría de la Información, brinda el marco apropiado para atacar este tipo de problemas.

Por tal motivo, en esta tesis hemos investigado métodos de inferencia estadística basados en conceptos relacionados con la Teoría de la Información, tanto desde el punto de vista estático como dinámico.

En la primera parte, hemos desarrollado, en base a una generalización del principio de máxima entropía, un método que permite inferir la función de onda del estado fundamental de sistemas en equilibrio, cuando no se dispone de información completa. El esquema fue aplicado tanto en el caso continuo, en sistemas cuánticos de una partícula, como en su extensión al caso

discreto para tratar un sistema de N fermiones interactuantes.

La segunda parte de esta tesis esta dedicada al estudio de sistemas de mucho cuerpos fuera del equilibrio. Con esa finalidad, hemos desarrollado un formalismo general que permite inferir estadísticamente la evolución dinámica de observables en tales sistemas. La teoría proporciona un esquema adecuado para extraer la información concerniente con los observables de interés, y al mismo tiempo generar las ecuaciones de movimiento que describen en forma aproximada la evolución temporal. Con este formalismo es posible obtener una extensión a la aproximación de campo medio, y por consiguiente soluciones de orden superior a las proporcionadas por dicho esquema.

El propósito básico de esta tesis es desarrollar herramientas teóricas, basadas en la Teoría de la Información, que permitan aunque sea parcialmente, ir más allá de los esquemas tradicionales que provee el formalismo de Hartree-Fock (HF).

Como se verá en los capítulos siguientes, la inferencia estadística ofrece un promisorio panorama para la descripción de las correlaciones cuánticas que los métodos tipo HF no pueden abordar.

CAPITULO I.

PRINCIPIO DE MAXIMA ENTROPIA EN DISTRIBUCIONES CUANTICAS.

Introducción.

El conocimiento del operador estadístico, o en forma equivalente de los valores medios de un conjunto completo de observables linealmente independientes de un sistema, proporciona una descripción estadística completa, en el sentido de que es posible predecir el valor de expectación de cualquier operador de interés perteneciente al mismo.

Sin embargo, en general ni las observaciones ni los modelos teóricos son suficientes para determinar el operador estadístico $\hat{\rho}$. Debemos tener en cuenta que en la mayor parte de las situaciones sólo dispondremos de información sobre un conjunto reducido de variables. Otras veces, la misma complejidad del fenómeno analizado nos impone la necesidad de tener que concentrar la atención sobre un cierto conjunto de variables y al mismo tiempo dejar otras de lado. Por consiguiente, nos vemos forzados a recurrir a una descripción estadística incompleta caracterizada por el conjunto de variables consideradas relevantes para el problema en cuestión.

Usualmente la elección de este conjunto dependerá de la situación física tratada y en principio podríamos incluir en el todas las variables que puedan ser controladas u observadas, así como las constantes de movimiento involucradas.

Recordemos que en mecánica cuántica un observable juega el papel de una variable aleatoria, mientras que una variable dinámica aparece como el valor de expectación del observable correspondiente. Desde el punto de vista microscópico, entonces, podríamos indentificar el conjunto de variables relevantes (que de

acuerdo con el contexto de que se trate las designaremos como variables macroscópicas, colectivas, etc.) con los valores de expectación del conjunto de observables relevantes.

Las restantes variables que consideramos irrelevantes pueden ser evaluadas recurriendo al tratamiento estadístico. La certidumbre en la predicción de estos valores dependerá del grado de precisión con que se pueda aproximar el estado del sistema, por medio del operador estadístico que hemos construido en base a la información disponible.

En ese sentido, como veremos a continuación, el principio de máxima entropía, enmarcado en la Teoría de la Información¹⁻⁶, proporciona una prescripción definida para construir el operador estadístico que mejor describe el estado del sistema, de acuerdo con nuestro grado de conocimiento sobre el mismo.

Este formalismo resulta apto para ser empleado en una gran variedad de situaciones (que incluyen descripciones estadísticas fuera del equilibrio)⁶⁻¹¹. En este capítulo analizaremos una versión modificada del principio de máxima entropía en distribuciones probabilísticas asociadas con estados cuánticos puros.

Aplicando este esquema resulta posible inferir la función de onda del estado fundamental en base al conocimiento de los valores de expectación de un conjunto reducido de observables relevantes.

Veremos que el método es a la vez sistemático y autoconsistente, proporcionando un criterio óptimo para evaluar la función de onda que se torna exacto en el caso de disponer de información completa.

I.1 Formalismo de máxima entropía.

Supongamos que nuestra descripción incompleta se halla caracterizada por un conjunto reducido de valores medios de observables (variables aleatorias en sistemas clásicos u operadores en sistemas cuánticos),

$$\langle \hat{B}_i \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{B}_i) = B_i, \quad i = 1, \dots, M, \quad (\text{I.1.1})$$

en base a los cuales podremos reconstruir el operador estadístico que describe el estado del sistema.

Este operador estadístico juega el papel de una distribución cuántica de probabilidad. Las predicciones que podamos obtener a partir de él conllevan un cierto grado de incerteza como consecuencia de nuestra descripción incompleta. Existe alguna cantidad de información, representada por el conjunto de variables a las que consideramos irrelevantes, de la que no podemos disponer. Los valores de expectación de las variables de ese conjunto deben ser obtenidos recurriendo a la inferencia estadística.

La incertidumbre en esas cantidades surge del hecho de que los valores de expectación (I.1.1) no son suficientes para determinar $\hat{\rho}$ unívocamente. Existen una gran cantidad de operadores densidad $\hat{\rho}$ compatibles con las restricciones (I.1.1). Es decir, que son equivalentes en cuanto a la predicción que es posible obtener a partir de ellos de los valores de expectación de las variables relevantes. Sin embargo, proporcionan estimaciones diferentes de los valores medios del conjunto de variables irrelevantes.

Asociada con cada uno de estos operadores existirá una cantidad S , la entropía de von Neumann,

$$S(\hat{\rho}) = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}), \quad (\text{I.1.2})$$

(donde hemos considerado la constante de Boltzman $k_{\beta} = 1$). Esta $S(\hat{\rho})$ representa una medida de la falta de información relacionada con esta descripción estadística incompleta, que involucra todas las variables, tanto las relevantes como las irrelevantes.

De este modo, del conjunto de operadores estadísticos que es posible construir, aquél cuya entropía sea máxima, será el que contenga la mínima información posible sobre las variables irrelevantes (vale decir, aquel operador que maximice nuestra falta de información).

Las ideas mencionadas constituyen la esencia de la visión de la Mecánica Estadística dada por la Teoría de la Información de Jaynes¹. De acuerdo con este formalismo, si la información es dada "a priori", en términos de los valores de expectación del conjunto de operadores (I.1.1), el operador estadístico que proporciona la mejor descripción de nuestro sistema de acuerdo con la información disponible, será aquél que maximice (I.1.2) con las restricciones (I.1.1). Con cada restricción sobre los valores de expectación es posible asociar un parámetro de Lagrange λ_i .

En el contexto de este formalismo, el operador $\hat{\rho}$ de máxima entropía toma la forma de una densidad canónica generalizada,

$$\hat{\rho} = \exp\left\{-\lambda_0 - \sum_{i=1}^M \lambda_i \hat{B}_i\right\} \quad (\text{I.1.3})$$

donde los multiplicadores de Lagrange λ_i son ajustados de modo tal de forzar a $\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{B}_i)$ a cumplir con (I.1.1).

La condición de normalización

$$\text{Tr} \hat{\rho} = 1 \quad (\text{I.1.4})$$

está asociada con la asignación del valor uno al observable identidad $B_0 = \langle \hat{B}_0 \rangle = \langle I \rangle = 1$. Por lo tanto,

$$\lambda_0 = \ln \text{Tr} \left\{ \exp \left(- \sum_{i=1}^M \lambda_i \hat{B}_i \right) \right\} \quad (\text{I.1.5})$$

lo cual conduce a

$$\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_i} = - B_i \quad (\text{I.1.6})$$

que determina los multiplicadores a partir de los B_i .

El operador (I.1.3), que maximiza la entropía (I.1.2), con las restricciones (I.1.1) y (I.1.4), es el menos sesgado, o más caótico de acuerdo con la información disponible. Este operador contiene la mínima información posible, sus autovalores son los más uniformes y los que poseen una distribución más probable.

Puede, además, demostrarse que si (I.1.3) es convergente la solución existe y es única si los valores medios (I.1.1) son linealmente independientes y satisfacen las reglas de la mecánica cuántica (por ejemplo, deben satisfacer el principio de incerteza).

S mide también nuestra incertidumbre estadística relacionada con el problema en análisis. De esta manera si disponemos de

información completa relativa a un estado puro, $(\hat{\rho}^2 = \hat{\rho})$ S se anula.

El formalismo resulta lo suficientemente general como para ser aplicado a un amplio rango de situaciones que exceden el marco de la mecánica estadística tradicional. A continuación analizaremos en detalle una de tales posibles extensiones.

I.2 Esquema general.

Pasaremos ahora a tratar el punto central y original de la primera parte de la tesis.¹²

Consideremos un estado cuántico $|\psi\rangle$ representado en una base completa ortonormal $\{|\epsilon\rangle\}$ por la función de onda

$$\psi(\epsilon) = \langle \epsilon | \psi \rangle, \quad (I.2.1)$$

la cual suponemos definida positiva, es decir sin nodos. La densidad correspondiente o distribución de probabilidad $\rho(\epsilon)$ en el "espacio ϵ ", está directamente relacionada con (I.2.1) a través de $\psi(\epsilon) = [\rho(\epsilon)]^{1/2}$. Como ejemplos podemos citar la función de onda del estado fundamental de una partícula en la representación de coordenadas, en un potencial dado; la función de onda del estado fundamental en sistemas bosónicos de muchos cuerpos, así como el estado fundamental de hamiltonianos de ciertos modelos fermiónicos específicos^{13,14}.

Supongamos ahora que la información disponible relacionada con el sistema, asumiendo que este se encuentra en el estado fundamental, está constituida por los valores de expectación O_i de un conjunto de observables linealmente independientes $\{\hat{O}_i, i = 1, \dots, n\}$,

$$O_i = \langle \psi | \hat{O}_i | \psi \rangle = \int \int \psi(\epsilon) \langle \epsilon | \hat{O}_i | \epsilon' \rangle \psi(\epsilon') d\epsilon d\epsilon'. \quad (I.2.2)$$

Supongamos que el conjunto es incompleto, de modo tal que las restricciones (I.2.2), no son suficientes para determinar

unívocamente a $\psi(\epsilon)$. En general, existirán varias funciones de onda que verificarán las restricciones (I.2.2).

Asociada con la distribución $\rho(\epsilon)$, introducimos una entropía cuántica,

$$S = -\int \rho(\epsilon) \ln(\rho(\epsilon)) d\epsilon = -\int 2\psi^2(\epsilon) \ln(\psi(\epsilon)) d\epsilon. \quad (I.2.3)$$

S mide la falta de información relacionada con la distribución de probabilidad en la base $\{|\epsilon\rangle\}$. S resulta de este modo explícitamente dependiente de la base, contrariamente a lo que sucede con la entropía (I.1.2) de un operador estadístico (la cual se anula para estados puros). Esto se debe al hecho de que $\rho(\epsilon) = \langle \epsilon | \hat{\rho} | \epsilon \rangle$, de manera que en (I.2.3) sólo es tomada en cuenta la información diagonal en la base elegida. En el caso continuo, en (I.2.3) deberemos sumar además, una constante infinita irrelevante (independiente de $\rho(\epsilon)$) (ver texto de Katz).

Basándonos en el criterio de máxima entropía, elegiremos aquella función de onda que extremalice (I.2.3), sujeta a las restricciones (I.2.2). La solución puede ser obtenida introduciendo n multiplicadores de Lagrange λ_i y extremalizando la magnitud

$$S' = S - \sum_i \lambda_i O_i$$

$$= -\iint \psi(\epsilon) [2\ln(\psi(\epsilon)) \delta(\epsilon - \epsilon') + \sum_i \lambda_i \langle \epsilon | O_i | \epsilon' \rangle] \psi(\epsilon') d\epsilon d\epsilon'. \quad (I.2.4)$$

A partir de $\delta S' = 0$, resulta la siguiente ecuación para $\psi(\epsilon)$:

$$0 = 2\psi \ln \psi + \psi + \sum_i \lambda_i \int g_i(\epsilon, \epsilon') \psi(\epsilon') d\epsilon', \quad (I.2.5)$$

donde

$$g_i(\epsilon, \epsilon') = \frac{1}{2} [\langle \epsilon | \hat{O}_i | \epsilon' \rangle + \langle \epsilon' | \hat{O}_i | \epsilon \rangle] . \quad (I.2.6)$$

Si \hat{O}_i es un operador hermítico, (I.2.5) es una ecuación real. La segunda variación de (I.2.4), da como resultado

$$\begin{aligned} \delta^2 S' = & -2 \iint \delta\psi(\epsilon) [(2 \ln(\psi(\epsilon)) + 3) \delta(\epsilon - \epsilon') \\ & + \sum_i \lambda_i g_i(\epsilon, \epsilon')] \delta\psi(\epsilon') d\epsilon d\epsilon' , \end{aligned} \quad (I.2.7)$$

de modo que no se garantiza un máximo de S' en todos los casos. La normalización de $\rho(\epsilon)$, que puede ser representada por el operador \hat{O}_0 , es decir, $\langle \epsilon | \hat{O}_0 | \epsilon' \rangle = \delta(\epsilon - \epsilon')$, y el multiplicador correspondiente λ_0 , debe ser incluida como restricción adicional en (I.2.4). Cabe destacar que hasta este punto, las restricciones (I.2.2) revisten un carácter completamente general.

La expresión (I.2.5) representa una ecuación integrodiferencial para ψ , si por ejemplo, $\langle \epsilon | \hat{O}_i | \epsilon' \rangle \propto \delta^{(k)}(\epsilon - \epsilon')$ para algún i , (es decir, la k -ésima potencia del momento en el espacio ϵ) y no resulta fácil de resolver en el caso general.

La coordenada ϵ puede representar en este formalismo un conjunto de índices continuos o discretos, (en este último caso las integrales deben ser reemplazadas por sumas) o una combinación de ambos.

I.3 Caso diagonal.

De aquí en más nos restringiremos al análisis del caso en el cual los observables son diagonales en la base $\{|e\rangle\}$, es decir

$$\langle e|\hat{O}_i|e'\rangle = \delta(e-e')g_i(e) . \quad (I.3.1)$$

A partir de (I.2.5), resulta inmediato que la solución para $\psi(e)$, tiene la siguiente forma

$$\psi(e) = \exp\left\{-\frac{1}{2}[\lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i g_i(e)]\right\} , \quad (I.3.2)$$

donde $\lambda_0' = \lambda_0 + 1$. Los valores particulares de los multiplicadores de Lagrange deberán ser determinados a partir de las restricciones (I.2.2).

De esta forma, se obtiene una expresión para $\rho(e)$ similar a (I.1.3) y a la vez típica de la aproximación a la Mecánica Estadística proporcionada por la Teoría de la Información.

Los teoremas generales sobre distribuciones, usualmente empleados en este campo resultan de gran utilidad. En particular, puede ser probada la unicidad de la solución (I.3.2), si los valores medios O_i son linealmente independientes⁴.

Se puede ver fácilmente a partir de (I.2.7), que la solución (I.3.2) es siempre un máximo de S' , para valores fijos de los parámetros λ_i , y de S para valores fijos de los O_i .

La entropía máxima adquiere la expresión

$$S = \sum_{i=1}^n \lambda_i O_i + \lambda_0' . \quad (1.3.3)$$

Si el conjunto $\{g(\varepsilon), i = 1, \dots, n\}$ (con $g(\varepsilon) = 1$) forma una base completa de funciones en el "espacio ε ", $\psi(\varepsilon)$ puede ser determinada unívoca y exactamente sin recurrir al principio de máxima entropía. En este caso podemos expandir $\psi^2(\varepsilon)$ en esta base,

$$\psi^2(\varepsilon) = \sum_{j=0}^n C_j g_j(\varepsilon) , \quad (1.3.4)$$

de modo que,

$$O_i^* = \int \psi^2(\varepsilon) g_i^*(\varepsilon) d\varepsilon = \sum_{j=0}^n C_j D_{ij} \quad (1.3.5)$$

con

$$D_{ij} = \int g_i^*(\varepsilon) g_j(\varepsilon) d\varepsilon . \quad (1.3.6)$$

Si suponemos que todos los O_i son conocidos, podemos obtener en forma inmediata los C_j a partir de (1.3.5),

$$C_j = \sum_{i=1}^n O_i^* D_{ji}^{-1} \quad (1.3.7)$$

para un conjunto ortonormal ($D_{ij} = \delta_{ij}$), $C_i = O_i^*$.

La expresión (1.3.2), para $\psi(\varepsilon)$ representa en este caso la expansión de $\ln(\psi^2(\varepsilon))$,

$$\lambda_i = \sum_{j=0}^n D_{ij}^{-1} \int 2 \ln(\psi(\epsilon)) g_j^*(\epsilon) d\epsilon . \quad (I.3.8)$$

En este sentido el esquema puede ser considerado como un método de inversión para la expansión (I.2.3), cuando no todos los O_i son accesibles. El criterio de máxima entropía adjudica un valor nulo al multiplicador, si el correspondiente operador no es conocido.

La entropía (I.3.3) toma su menor valor cuando todos los O_i correspondientes a un conjunto completo son conocidos. Por otra parte, proporciona obviamente una cota superior para la entropía mínima "exacta".

Teniendo en cuenta que $\rho(\epsilon)$ no es un operador estadístico, sino más bien, una distribución de probabilidad en el "espacio ϵ ", para determinar $\rho(\epsilon)$ sin recurrir al criterio de máxima entropía se necesita un conjunto menor de observables que el requerido en el caso estadístico. El conjunto $\{O_i, i = 1, \dots, n\}$ no es completo en el espacio de los observables (éstos son diagonales), pero sus valores de expectación determinan $\psi(\epsilon)$ completamente, si el correspondiente conjunto de funciones $g_i(\epsilon)$ es completo. Además, es necesario tener en cuenta que un operador estadístico completo puede no ser normalizable, aún para un conjunto reducido de observables (por ejemplo, $\hat{\rho} = \exp(-\lambda \hat{x}^2)$ no tiene una traza finita si \hat{x} es el operador coordenada asociado con el momento \hat{p}).

I.4 Conclusiones.

Hemos desarrollado un método general de inferencia estadística, que está basado en conceptos relacionados con la Teoría de la Información. El esquema permite la reconstrucción de una función de onda cuántica libre de nodos, a partir del conocimiento de un conjunto incompleto de valores de expectación.

Hemos analizado especialmente el caso en el cual, estos valores de expectación están referidos a observables diagonales (con relación a la base seleccionada). En esas circunstancias, el formalismo resulta sumamente fácil de aplicar, como se desprende de lo expuesto en la sección (I.3).

El esquema propuesto brinda la distribución menos sesgada y más plana en la base elegida, consistente con la información disponible. El hecho de que esta función de onda sea apropiada o no, puede ser determinado en forma autoconsistente a partir de la estabilidad de los multiplicadores de Lagrange. Si al agregar nuevos datos los parámetros originales de los cuales disponemos, no cambian más allá de la precisión deseada, mientras que los nuevos parámetros permanecen comparativamente pequeños, no se obtiene nueva información relevante. La información está concentrada en los primeros valores de expectación, y de esta forma, es posible realizar predicciones con un cierto grado de precisión.

Se podría decir que el criterio (subjetivo) de máxima entropía está en acuerdo filosófico con la interpretación de Copenhague de la función de onda cuántica, en el sentido que $|\psi|^2$ describe el

conocimiento del observador sobre la posición de la partícula (o estado), aunque no es nuestra intención profundizar en temas filosóficos.

El método como veremos en el próximo capítulo, resulta particularmente apto para la reconstrucción de la función de onda efectiva del estado fundamental en sistemas de una partícula.

Analizaremos en detalle, desde el punto de vista teórico, e ilustraremos en distintos ejemplos, como dentro del marco de este formalismo es posible inferir, además de la función de onda, el correspondiente potencial efectivo.

Referencias:

1. C. Shannon, Bell Syst. Tech. J. 27, 379, 623 (1948).
2. L. Brillouin, 'Science and Information Theory' (Academic Press, N.Y., 1956).
3. E. Jaynes, Phys. Rev. 106, 620 (1957); 108, 171 (1957).
4. A. Katz, 'Principles of Statistical Mechanics' (Freeman, San Francisco, 1967).
5. A. Hobson, 'Concepts in Statistical Mechanics' (Gordon and Breach, London, 1971).
6. R. Balian, Y. Alhassid and H. Reinhardt, Phys. Rep. 131, 1 & 2 (1986); H. Reinhardt, R. Balian and Y. Alhassid, Nucl. Phys. A 413, 475 (1984).
7. R. Balian and M. Veneroni, Ann. of Phys. 164, 334 (1985).
8. R. Balian and M. Veneroni, Ann. of Phys. 174, 229 (1987).
9. Y. Alhassid and R. D. Levine, Phys. Rev. A18 89 (1978); Phys. Rev. C20, 1775 (1979).
10. N. Tishby and R. D. Levine, Phys. Rev. A30 1477 (1984).
11. D. Otero, A. Plastino, A. Proto and G. Zannoli, Phys. Rev. A26 1209 (1982); Z. Phys. A316, 323 (1984).
12. N. Canosa, A. Plastino and R. Rossignoli (enviado).
13. D. Agassi, H Lipkin and N. Meshkov, Nucl. Phys. A 86, 321 (1966).
14. N. Canosa, A. Plastino and R. Rossignoli, Nucl. Phys. A 453, 417 (1986).

CAPITULO II.

INFERENCIA ESTADISTICA DE MAGNITUDES FUNDAMENTALES.

Introducción.

En este capítulo analizaremos algunos aspectos del formalismo desarrollado previamente¹ que revisten especial interés.

Frecuentemente sucede que si bien se dispone de la información sobre de los valores de expectación respecto del estado fundamental, de observables simples, no se posee conocimiento sobre el hamiltoniano efectivo pertinente ni sobre la función de onda. En tales circunstancias, una práctica común es realizar una elección intuitiva de esas cantidades y luego verificar si las predicciones son consistente con la información disponible. Este tipo de procedimiento exige tener que recurrir a un ajuste minucioso de las constantes de acoplamiento involucradas, en una etapa final.

Nuestro esquema brinda en cambio, una forma funcional sumamente adecuada para la función de onda aproximada, y que de esta forma resulta fácil de tratar. Además, como veremos, no sólo es posible inferir estadísticamente la función de onda del estado fundamental, sino también otras magnitudes de interés, tales como la energía del estado fundamental.

Un aspecto del método que reviste especial importancia, es que permite reconstruir el potencial asociado a la correspondiente función de onda, a partir del conocimiento de unos pocos valores medios de observables relevantes.

De los correspondientes resultados, resulta posible apreciar como las cantidades inferidas convergen hacia las exactas a medida que se va incorporando nueva información.

Los ejemplos empleados como aplicación constituyen una prueba

exigente que permitirán apreciar los alcances y posibilidades de este nuevo formalismo.

II.1 Inferencia estadística de la función de onda del estado fundamental y del potencial asociado.

Aplicaremos el formalismo desarrollado en el capítulo anterior, al estudio de sistemas de una partícula sometidos a la acción de un potencial V . Supondremos que la información disponible está dada por los valores de expectación de n funciones linealmente independientes de las coordenadas $x = (x_1, x_2, x_3)$,

$$g_i = \langle g_i(x) \rangle = \int \psi^2(x) g_i(x) dx \quad . \quad (II.1.1)$$

y la función de onda inferida (I.3.2) está dada por

$$\psi(x) = \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i g_i(x)\right]\right\}, \quad (II.1.2)$$

donde la constante de normalización λ_0 se puede expresar como

$$\lambda_0 = -\ln\left\{\int \exp\left[\sum_{i=1}^n \lambda_i g_i(x)\right] dx\right\}, \quad (II.1.3)$$

$$\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_i} = -g_i \quad . \quad (II.1.4)$$

Con esta elección de ψ , resulta posible inferir estadísticamente cualquier cantidad de interés. Además de la predicción usual por medio de trazas, representada aquí por los valores medios inferidos de funciones conocidas de las coordenadas, otros tipos de inferencias resultan posibles dentro de este nuevo contexto.

De particular interés resultan las inferencias del valor medio del cuadrado del momento (en lo sucesivo asignaremos a \hbar el valor 1),

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}^2 \rangle &= - \int \psi \nabla^2 (\psi) dx \\ &= - \frac{1}{2} \int \psi^2 \nabla^2 (\ln(\psi)) dx, \end{aligned} \quad (II.1.5)$$

y de la energía del estado fundamental así como el correspondiente potencial asociado (suponemos una masa unitaria),

$$V(x) - E = \frac{\nabla^2 \psi}{2\psi} = \frac{1}{4} \left\{ -\sum_i \lambda_i \nabla^2 g_i(x) + \frac{1}{2} \sum_i \lambda_i \nabla g_i(x) \right\}^2, \quad (II.1.6)$$

como resulta de la ecuación de Schrödinger estacionaria (en la anterior expresión ∇^2 denota el operador Laplaciano, mientras que ∇ representa el vector gradiente). En otras palabras, potenciales de la forma (II.1.6) poseen como estado fundamental la función de onda (II.1.2).

De este modo resulta posible obtener una expresión aproximada de la energía del estado fundamental (medida desde el fondo del pozo de potencial) y de la función potencial, con sólo unos pocos valores medios relevantes.

II.2 Análisis de la estabilidad de los parámetros de Lagrange.

Las cantidades inferidas, esto es, la energía del estado fundamental y la función potencial, convergen hacia las exactas a medida que son incluidas nuevas restricciones del tipo (II.1.1), vale decir, cuando se incorpora una cantidad adicional de información. La convergencia es alcanzada cuando los parámetros de Lagrange se estabilizan (dentro de una determinada precisión).

A menudo, la única información disponible está representada por promedios de momentos $x_1^i x_2^j x_3^k$, es decir, promedios de momentos multipolares, o directamente de r^l , como en el caso de sistemas con simetría radial (r representa el radio medido desde el origen).

Por ejemplo, la función de onda del estado fundamental en el potencial Coulombiano es de la forma $\psi = \exp\{-\frac{1}{2}(\lambda_0 + \lambda r)\}$. Por lo tanto, puede ser exactamente reconstruida con la única información del valor medio del radio $\bar{r} = 3/\lambda$.

En el oscilador armónico unidimensional, la $\psi(x_1)$ puede ser exactamente obtenida únicamente con el valor medio de $\langle x_1^2 \rangle$ (en el caso del potencial desplazado se requieren $\langle x_1^2 \rangle$ y $\langle x_1 \rangle$). En estos casos la estabilidad de los parámetros de Lagrange queda garantizada con sólo un momento.

La entropía correspondiente para el caso del potencial Coulombiano, es

$$S = \lambda_0 + \lambda \bar{r} = C_0 + 3 \ln(\bar{r}) \quad (\text{II.2.1})$$

donde $C_c = \ln(8\pi/9)+3$

Para el oscilador armónico, la expresión correspondiente es:

$$S = C_h + \ln(\sigma) , \quad (II.2.2)$$

con $\sigma = (\langle x_1^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2)^2$, y $C_h = (\ln(2\pi)+1)/2$.

En (II.2.2), obviamente la entropía se incrementa con la dispersión.

Otro aspecto que vale la pena mencionar, está relacionado con el hecho de que si las funciones $g_i(x)$ son polinomios, la función de onda inferida (I.3.2) adquiere una forma funcional que resulta muy conveniente. Por consiguiente puede ser empleada como función de prueba para aproximar el estado fundamental exacto si el hamiltoniano \hat{H} del sistema es conocido² (como veremos en el capítulo siguiente). Además, en este caso es posible utilizar la información disponible conjuntamente con la minimización del hamiltoniano para determinar los parámetros λ_i óptimos.

II.3 Aplicación del formalismo en un oscilador anarmónico cuártico.

Como primer ejemplo vamos a considerar el caso de un oscilador anarmónico cuártico. El hamiltoniano correspondiente puede ser escrito de una forma general como

$$\hat{H} = (\hat{P}^2 + \gamma \hat{X}^2)/2 + \delta \hat{X}^3 + \lambda \hat{X}^4, \quad (\text{II.3.1})$$

con $[\hat{X}, \hat{P}] = \hbar$. Durante los últimos años se han realizado una gran cantidad de trabajos empleando este tipo de potencial³⁻⁹, debido a su relevancia en el estudio de las vibraciones moleculares, así como su importante papel en la teoría cuántica de campos no lineal.

Nuestro propósito es el de reconstruir la función de onda del estado fundamental de (II.3.1) a partir del conocimiento de sólo unos pocos valores de expectación $\{\langle x^l \rangle, l = 1, \dots, n\}$. La correspondiente función de onda aproximada es

$$\psi(x) = \exp\left\{-\frac{1}{2}(\lambda_0 + \sum_{l=1}^n \lambda_l x^l)\right\}, \quad (\text{II.3.2})$$

donde los parámetros λ_l pueden ser obtenidos utilizando, por ejemplo, el método de Newton-Raphson.

Si $n = 2$, (II.3.2) es una Gaussiana, y el potencial inferido (II.1.6) es el del oscilador armónico. En este caso, nuestra aproximación es equivalente a la aproximación de campo medio en la representación bosónica⁷⁻⁹. De esta forma, para $n > 2$ estamos en

posición de ir más allá del tratamiento de campo medio.

Primero analizaremos el caso $\delta = 0$, $\gamma > 0$, es decir, un potencial simétrico con un solo mínimo en el origen. En la tabla I se muestran resultados de algunas cantidades de interés, tales como entropía, valor medio del cuadrado del momento, etc. para $n = 2, 4$ y 8 , y $\gamma = 0.5$, con $\lambda = 1$ y 10 (sólo dos de las tres constantes de acoplamiento son realmente independientes). Obviamente la información se restringe a los momentos pares. La función de onda exacta y los momentos han sido calculados de acuerdo con los procedimientos delineados en las referencias 7-9. Vemos que un excelente acuerdo entre los valores inferidos y los exactos es alcanzado ya con $n = 4$, aunque aún con $n = 2$ es posible obtener una descripción suficientemente aceptable de los mismos. El overlap $\langle \psi_{ex} | \psi_{op} \rangle$ entre la función de onda exacta y la aproximada es superior a 0.999 en todos los casos. Además, la precisión de los resultados depende sólo ligeramente de los valores de λ .

En las tablas $\langle \hat{H} \rangle$ representa el valor medio de la energía (suponiendo que el hamiltoniano es conocido), mientras que E_{inf} representa la energía inferida del estado fundamental, obtenida a partir del término constante en el desarrollo de (II.1.6) (suponiendo que no disponemos de información ni sobre las constantes de acoplamiento ni aún sobre el potencial). Los potenciales inferidos se muestran en la figura 1, conjuntamente con el potencial exacto. Puede apreciarse que el ajuste es muy satisfactorio.

También se muestra la entropía (I.2.3) para la función de onda exacta y para las aproximadas. El "surprisal" $S' = S_{op} - S_{ex}$ mide

la información que deberíamos incorporar a la función de onda aproximada para obtener la solución exacta.

Se puede concluir en base a estos resultados que sólo una cantidad de información mínima está almacenada en los momentos de orden superior. Debemos notar, sin embargo, que aquellas cantidades que dependen de las derivadas de la función de onda son apreciablemente sensibles a los valores de los parámetros de Lagrange, y por lo tanto para ellas también influirán los momentos de orden superior.

II.4 Potencial biestable y cúbico.

Como segundo ejemplo, hemos elegido un potencial biestable, con $\gamma = -1.5\gamma_c$, y $\lambda = 1$ con referencia a (II.3.1). En este caso, $\gamma_c = (243/2)^{1/3}\lambda^{2/3}$ representa el valor crítico tal que para $|\gamma| > |\gamma_c|$, la aproximación de campo medio experimenta una rotura de simetría. Cuando esto sucede, la solución se vuelve degenerada^o (a temperatura cero), centrada en uno de los pozos. La aproximación Gaussiana no es capaz en este caso de proporcionar una descripción adecuada de la función de onda del estado fundamental.

Los resultados se muestran en la tabla I. En la figura 2 se puede apreciar que ya para $n = 4$, nuestra aproximación proporciona un potencial inferido biestable.

Una situación que reviste particular interés y que también fue analizada ocurre cuando los dos pozos de potencial poseen distinta profundidad. Los resultados correspondientes se exhiben en la tabla II, para el caso a), elegimos $\delta = -1$, con λ y γ asumiendo los mismos valores que en el ejemplo del potencial biestable. En este caso, obviamente debemos incorporar información sobre los momentos impares. Como se puede apreciar en la figura 3, la función de onda del estado fundamental inferida está centrada en el pozo más profundo, y predice un segundo pozo menos profundo para $n \geq 4$, aunque es necesario ir hasta $n = 8$ para obtener una descripción más precisa del potencial.

II.5 Potencial de Morse.

Como ejemplo final hemos considerado el potencial de Morse, el cual proporciona una descripción bastante realista de las vibraciones moleculares. Por ese motivo, ha sido utilizado como modelo en una considerable cantidad de trabajos relacionados con el tema^{10,11}.

El hamiltoniano correspondiente puede ser escrito en la forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{P}^2 + A[1 - \exp(-\hat{X})]^2. \quad (\text{II.5.1})$$

En este caso la función de onda del estado fundamental exacta posee la forma

$$\psi_{0,x}(x) \propto \exp\{-[C \exp(-x) + (C - \frac{1}{2})x]\}, \quad (\text{II.5.2})$$

donde $C = (2A)^{1/2}$. Los multiplicadores exactos $\lambda_l = (-)^l 2C/l!$ ($l > 1$) decrecen rápidamente con l .

En la tabla II se muestran algunas cantidades de interés, en los casos en que $A = 1$ (b) y $A = 10$ (c), (con referencia a (II.5.1)). Los resultados obtenidos para un número finito de momentos están en un excelente acuerdo con los exactos.

Vale la pena mencionar el grado de precisión que brinda este esquema en el caso del potencial inferido, (para $n > 2$) en la región próxima al fondo del pozo de potencial, como se pueden apreciar en la figura 4.

II.6 Conclusiones.

Hemos empleado el formalismo general desarrollado en el capítulo anterior con el propósito de reconstruir la función de onda del estado fundamental, así como el correspondiente potencial asociado, en base al conocimiento de un conjunto incompleto de valores de expectación.

El esquema se torna muy simple de implementar, como ya fue mencionado, cuando estos valores de expectación están referidos a observables diagonales (en la base elegida no sesgada), y resulta especialmente adecuado para la reconstrucción de la función de onda efectiva del estado fundamental de una partícula.

Los resultados numéricos que hemos presentado, muestran que sólo son necesarios unos pocos valores medios relevantes, para lograr un acuerdo excelente con la función de onda exacta. Muchas cantidades físicas importantes generalmente se vuelven estables con una cantidad de información reducida, por ejemplo S , $\langle \hat{H} \rangle$ y el overlap, como reflejan los resultados numéricos, sugiriendo que ellas dependen ligeramente de los valores detallados de los parámetros de Lagrange. Por el contrario, como ya mencionamos, aquellas cantidades que involucran derivadas de la función de onda inferida pueden depender bastante fuertemente de ellos. La inferencia de las mismas requiere correspondientemente una mayor cantidad de información.

En resumen hemos mostrado una versión modificada del principio de máxima entropía, involucrando sólo elementos diagonales del operador densidad. De esa manera la aproximación se torna

fácilmente manejable, y tal como se puede apreciar en los ejemplos analizados, permite una inferencia aproximada bastante precisa, en lo que respecta a las propiedades del estado fundamental, en potenciales de diversa forma.

En el próximo capítulo aplicaremos este formalismo en el caso discreto. Veremos que dentro de este contexto resulta también posible reconstruir la función de onda del estado fundamental de un sistema fermiónico.

Referencias:

1. N. Canosa, A. Plastino and R. Rossignoli (enviado).
2. N. Canosa, A. Plastino and R. Rossignoli, Nucl. Phys. A 453, 417 (1986).
3. F. Hioe and E. Montroll, J. Math. Phys 16, 1945 (1975).
4. K. Banerjee, S. P Bhatnagar, V. Choudry and S. Kanwal, Proc. Royal Soc. London A360, 575 (1979).
5. R. N. Chaudhury and B Mukherjee, J. Phys A17, 227 (1984); A16 3193 (1983).
6. J. Flessas, R. Whitehead and A. Rigas, J. Phys. A16, 85 (1983); M. Znojil and M. Tater, J. Phys, A19, 2317 (1986).
7. C. S. Hsue and J. L. Chern, Phys. Rev. D29, 643 (1984).
8. C. S. Hsue, Phys. Rev. A33, 1392 (1986).
9. J. Nuñez, A. Plastino and R. Rossignoli, Phys. Rev. D33, 1709 (1986); J. of Phys. A21 729 (1988).
10. F. Iachello and R. D. Levine, J. Chem. Phys. 77, 3046 (1982).
11. R. D. Levine, Chem Phys. Lett. 95, 87 (1983).

Tabla I

	$\langle \hat{P}^2 \rangle$	$\langle \hat{H} \rangle$	E_{inf}	S	Overlap	Caso
Exacta	0.985978	0.803771	-	0.738300	-	
m = 1	0.972196	0.813051	0.972196	0.739890	0.999570	a)
m = 2	0.986032	0.803798	0.816305	0.738304	0.999999	
m = 4	0.985978	0.803771	0.804183	0.738300	1.	
Exacta	1.963289	1.504972	-	0.396591	-	
m = 1	1.922751	1.553558	1.922751	0.398913	0.999367	b)
m = 2	1.963494	1.505075	1.540536	0.396597	0.999996	
m = 4	1.963289	1.504972	1.506419	0.396591	1	
Exacta	1.220330	-1.761382	-	1.254668	-	
m = 1	0.173477	0.963904	0.173477	1.601647	0.899541	c)
m = 2	1.310386	-1.716354	-0.869993	1.263924	0.997804	
m = 4	1.225705	-1.758694	-1.396386	1.254953	0.999932	

Valor medio del cuadrado del momento, energía, energía inferida, entropía y overlap con la función de onda exacta, para el hamiltoniano (II.3.1), con $\delta = 0$. El caso a) corresponde a $\gamma = 0.5$, $\lambda = 1$, b) to $\gamma = 0.5$, $\lambda = 10$, and c) to $\gamma = -1.5\gamma_c$, $\lambda = 1$ (caso biestable). El número de momentos empleados en la reconstrucción de la función de onda aproximada está dado por $m = n/2$.(para más detalles consultar el texto)

Tabla II

	$\langle \hat{P}^2 \rangle$	$\langle \hat{H} \rangle$	E_{inf}	S	Overlap	Caso
Exacta	2.038384	-5.222044	2.149228	0.380544	-	
m = 2	1.971266	-5.189709	1.971267	0.386453	0.998622	
m = 4	2.038781	-5.221846	2.139804	0.380555	0.999977	a)
m = 8	2.038384	-5.222044	2.149490	0.380544	1.	
Exacta	0.457107	0.582107	-	1.206731	-	
m = 2	0.346084	0.772470	0.217030	1.256329	0.987721	b)
m = 4	0.446454	0.584565	0.546476	1.207711	0.999788	
Exacta	1.986068	2.111068	-	0.403670	-	
m = 2	1.863853	2.190178	1.631636	0.414468	0.997321	c)
m = 4	1.985223	2.111170	2.109015	0.403681	0.999997	

Las mismas cantidades citadas en la tabla I, pero para los potenciales asimétricos. El caso a) corresponde al hamiltoniano (II.3.1) con $\gamma = -1.5\gamma_c$, $\delta = -1$, $\lambda = 1$, (la tercer columna representa la energía inferida del estado fundamental medida desde el fondo del pozo de potencial, mientras que los casos b) y c) se refieren al potencial de Morse, con $A = 1$ (b) y $A = 10$ (c). En estos casos, $m = n$.

FIGURAS

Figura 1: Potenciales exactos e inferidos para el caso a) de la Tabla I, es decir para el hamiltoniano (II.3.1), con $\delta = 0$, $\gamma = 0.5$, y $\lambda = 1$, (caso biestable). Se emplea la misma notación.

Figura 2: Potenciales exactos e inferidos para el caso c) de la Tabla I. Los detalles son similares a los de la figura 1, con la salvedad de que $\gamma = -1.5\gamma_c$, y $\lambda = 1$.

Figura 3: Potenciales exactos e inferidos para el caso a) de la Tabla II, que corresponde al hamiltoniano (II.3.1) (asimétrico) con $\gamma = -1.5\gamma_c$, $\delta = -1$, y $\lambda = 1$.

Figura 4: Potenciales exactos e inferidos para el caso del potencial de Morse, con $A = 10$.

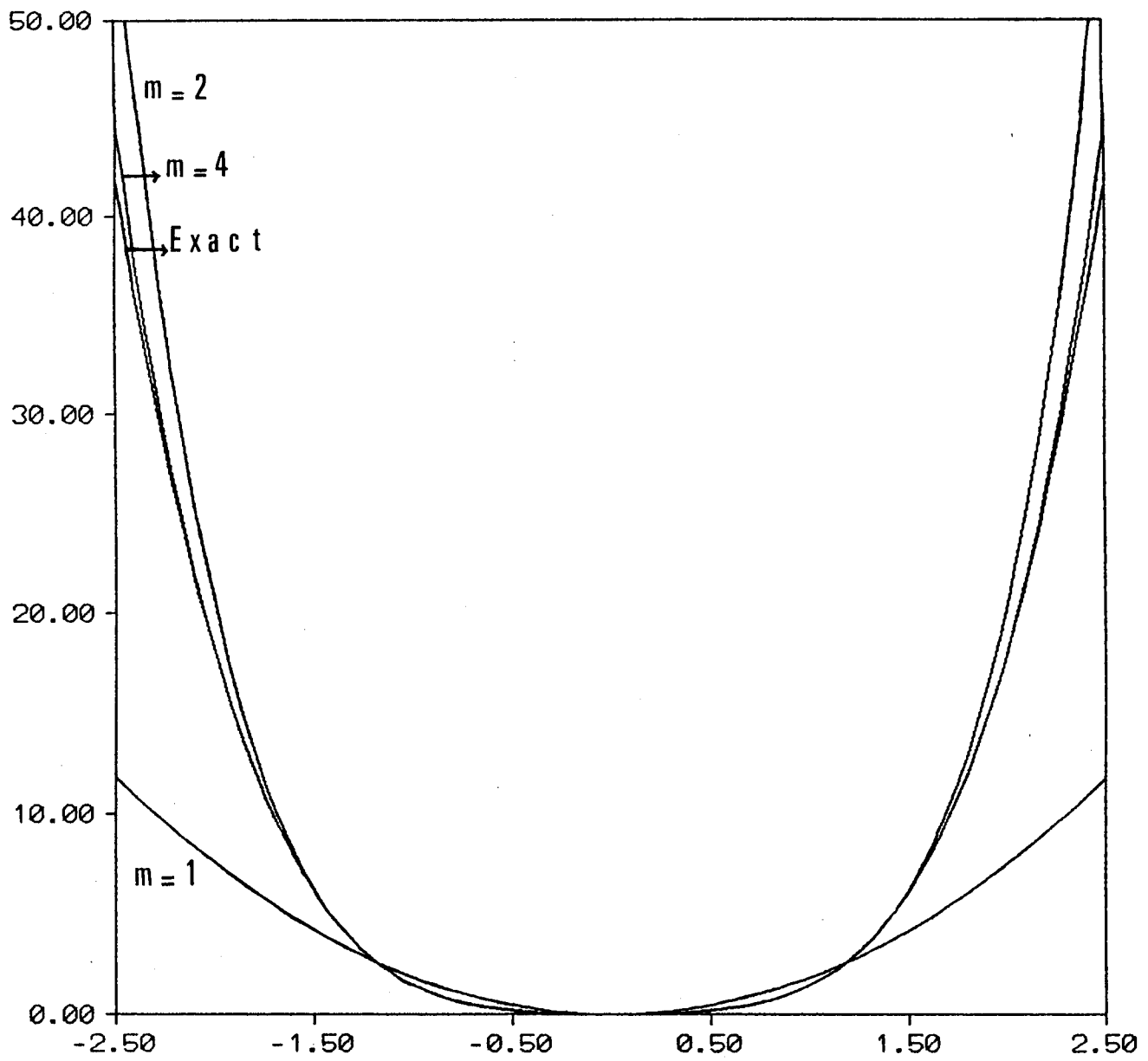


fig.1

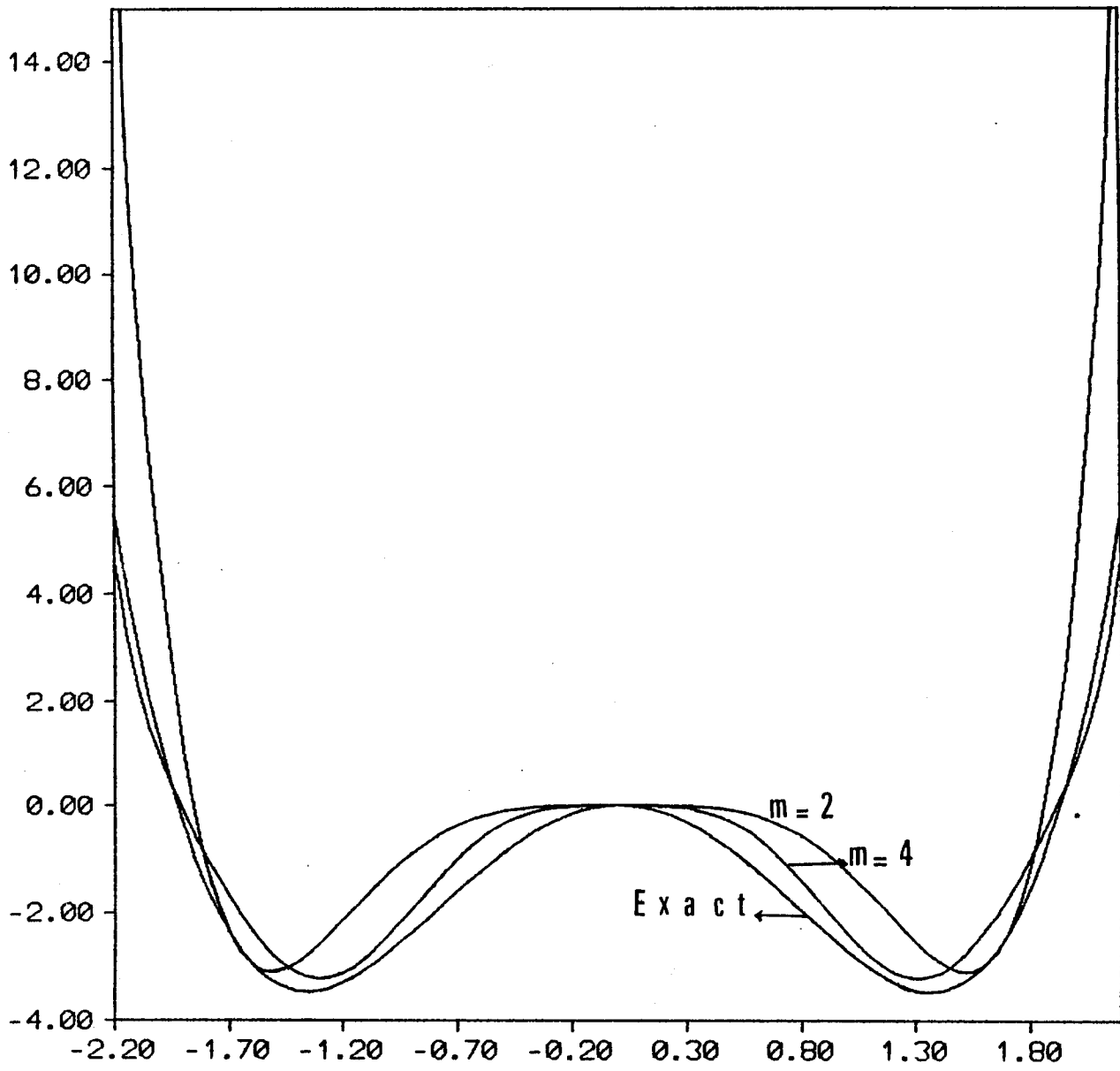


fig. 2

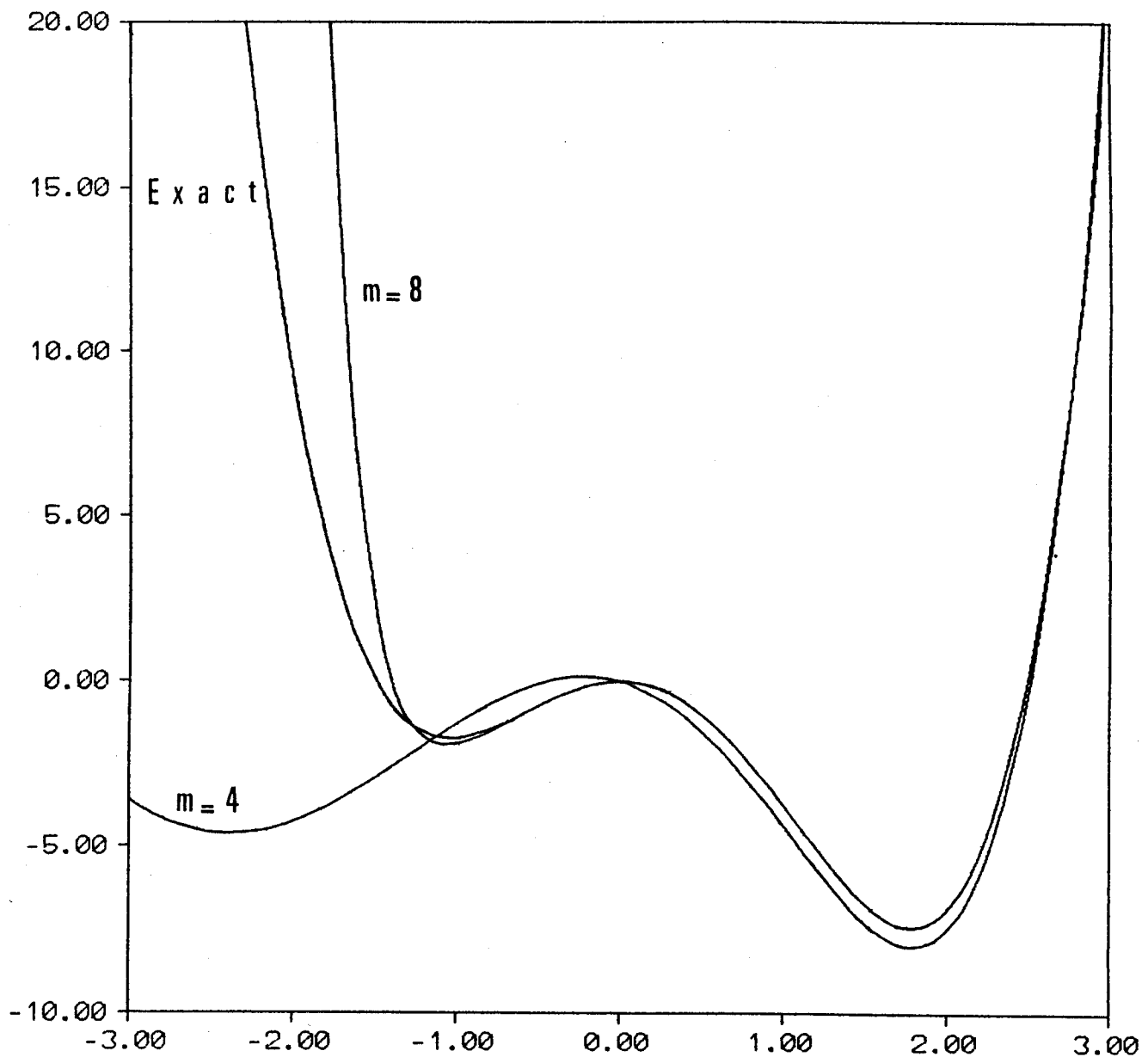


fig. 3

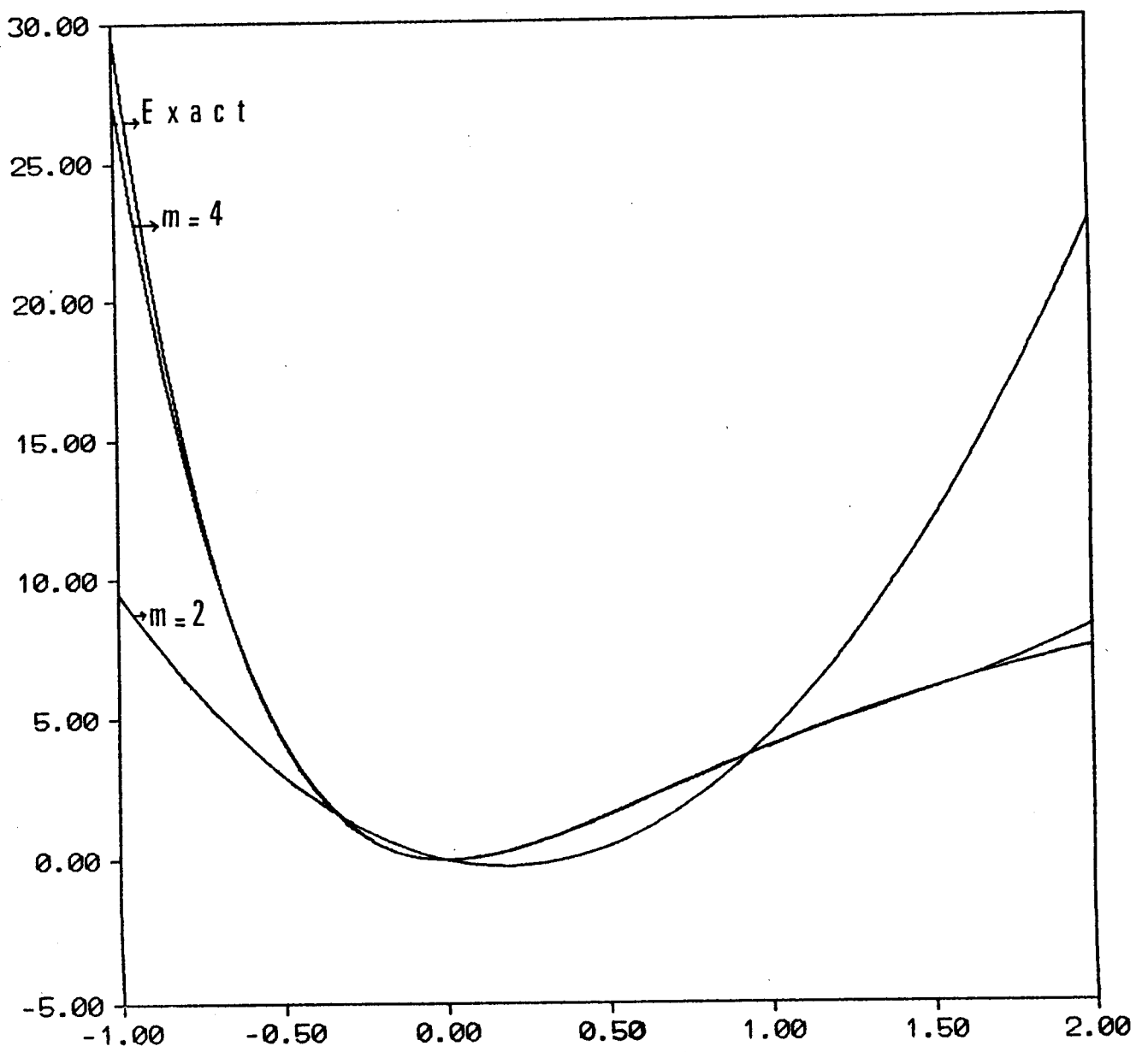


fig.4

CAPITULO III.

ANALISIS EN UN SISTEMA FERMIONICO.

Introducción.

En este capítulo emplearemos el formalismo desarrollado previamente, con el propósito de analizar algunos aspectos de interés en el problema cuántico de muchos cuerpos.

El método de Hartree-Fock¹⁻⁴ (HF) (o en general Hartree-Fock Bogoliubov (HFB)) constituye la aproximación básica cuando se encara el análisis de este tipo de problemas. En especial, cuando se emplean bases dinámicas⁵, porque este esquema produce la mejor función de onda de orden cero, a partir de la cual resulta posible desarrollar aproximaciones más complejas. En realidad, las descripciones teóricas de sistemas de muchos fermiones casi invariablemente parten de un determinante de Slater, el cual es variado o perturbado de alguna forma más o menos complicada. Sin embargo, existen situaciones donde la aproximación de campo medio no resulta la más adecuada para tratar con el correspondiente problema; por ejemplo, este esquema proporciona una descripción donde las correlaciones no son tenidas en cuenta. En esos casos se hace necesario recurrir a métodos alternativos para obtener una descripción adecuada del fenómeno analizado.

Por tal razón, emplearemos el método descrito anteriormente en el caso discreto, para aproximar la función de onda del estado fundamental de un sistema fermiónico de muchos cuerpos.

El formalismo que estamos tratando posee la ventaja de proporcionar una descripción aproximada que tiene en cuenta las correlaciones cuánticas. Estas se tornan especialmente importantes en el límite de constantes de acoplamiento muy fuertes. Precisamente en este límite asintótico resulta posible encontrar,

en algunos casos, una expresión simple para la función de onda aproximada.

Teniendo en cuenta que en el estudio de sistemas de muchos cuerpos los modelos exactamente solubles han probado ser de gran provecho, especialmente en el análisis de la validez y utilidad de diversas aproximaciones teóricas^{2,6-13}, hemos ilustrado las presentes ideas en un modelo exactamente soluble de simetría $U(3)$ ⁷. Los resultados obtenidos fueron comparados en todos los casos con los proporcionados por el método de HF, con el propósito de comprobar la bondad de la aproximación.

III.1 Formalismo general en el caso discreto.

Supongamos que \hat{H} es el hamiltoniano que describe a nuestro sistema de muchos cuerpos y que éste se encuentra en el estado fundamental no perturbado.

Enfocaremos nuestra atención en las simetrías subyacentes que el problema en cuestión pueda poseer. Explotando completa y convenientemente las mismas podremos escribir el hamiltoniano en la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (\text{III.1.1})$$

donde \hat{H}_0 representa la parte simétrica del hamiltoniano y \hat{H}_1 la perturbación.

Con \hat{H} expresado de la forma (III.1.1) resultará sencillo encontrar una base especial $|j\rangle$ (ortonormal completa) que diagonalize a \hat{H}_0 .

La función de onda que describe el estado fundamental, tendrá entonces la forma

$$|\psi\rangle = \sum_j C_j |j\rangle, \quad \text{con } C_j = \langle j|\psi\rangle. \quad (\text{III.1.2})$$

Nuestra idea es la de aproximar estos coeficientes en base a las consideraciones del capítulo I, es decir, reconstruyendo aproximadamente el operador densidad $\hat{\rho}$. Este operador proporciona una descripción del sistema que contiene un cierto número de parámetros ajustables (I.3.2), los cuales pueden ser fijados

recurriendo al procedimiento delineado en el punto (I.3), o como veremos, a través de una forma alternativa por medio de la minimización del hamiltoniano.¹⁴ Teniendo en vista las consideraciones anteriores, podemos escribir

$$|C_j|^2 = |\langle j|\psi\rangle|^2 = \langle j|\hat{\rho}|j\rangle. \quad (\text{III.1.3})$$

donde si suponemos además, que los C_j están definidos positivos, una vez determinado el operador estadístico, resulta inmediato recuperar $|\psi\rangle$ por medio de la expansión (III.1.2). Por ende, será preciso realizar una elección sumamente cuidadosa de los operadores relevantes empleados al construir $\hat{\rho}$.

En lo que sigue nos restringiremos al caso diagonal, vale decir, sólo emplearemos aquellos operadores de uno, dos y en general de n cuerpos que sean diagonales en la base elegida. Esta elección conduce a una expresión sencilla para $\hat{\rho}$ y que por consiguiente resulta fácil de tratar. De esta manera, nuestro ansatz para el operador densidad aproximado tendrá la forma :

$$\hat{\rho} = \exp\left\{ -\lambda_0 - \sum_i \lambda_i \hat{O}_i^{(1)} - \sum_{j,k} \lambda_{jk} \hat{O}_{jk}^{(2)} - \dots - \sum_{l,m,\dots,n} \lambda_{lm,\dots,t} \hat{O}_{lm,\dots,t}^{(n)} \right\} \quad (\text{III.1.4})$$

donde $\hat{O}^{(1)}$, $\hat{O}^{(2)}$, ..., $\hat{O}^{(n)}$ se refieren a los operadores de uno, dos, y en general de n cuerpos, que son diagonales en la base $|j\rangle$, mientras que λ_0 , como recordamos, es la constante de normalización

Una vez que los parámetros λ_i , λ_{jk} , etc., hayan sido determinados, el operador $\hat{\rho}$ reproducirá el estado fundamental

aproximado del sistema interactuante, por medio de (III.1.3).

Los parámetros λ , como ya anticipamos, pueden ser obtenidos recurriendo a la minimización del hamiltoniano. La expresión resultante tiene una forma particularmente simple, debido al hecho de haber elegido sólo operadores diagonales en la base dada,

$$\frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \lambda_j} = \sum_i \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle \hat{P}_i \rangle} \left\{ \frac{1}{2} [\langle \hat{O}_j \hat{P}_i + \hat{P}_i \hat{O}_j \rangle] - \langle \hat{P}_i \rangle \langle \hat{O}_j \rangle \right\} = 0, \quad (\text{III.1.5})$$

donde $\langle \hat{H} \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$ ha sido calculado como en (I.2.2). Tanto \hat{P}_i como \hat{O}_j representan operadores de un cuerpo, dos cuerpos, etc., y la sumatoria se extiende sobre todos los \hat{P}_i incluidos en la representación de \hat{H} .

Vale la pena mencionar que de haber empleado operadores no diagonales, aparece en la expresión resultante la transformada de Kubo de \hat{O}_j^{15} .

Si por el contrario, disponemos de información "a priori" sobre conjunto de valores medios de observables relevantes, los parámetros λ pueden ser determinados en la forma descrita en el capítulo I. Es decir, exigiendo que el operador densidad que hemos construido sea capaz de reproducir

$$\langle \hat{O}_j(l) \rangle = \langle \psi | \hat{O}_j(l) | \psi \rangle = \text{Tr } \hat{\rho} \hat{O}_j(l), \quad (\text{III.1.6})$$

con $l = 1, 2, \dots, n$.

En los puntos siguientes analizaremos los resultados correspondientes a las dos posibilidades mencionadas.

En el caso discreto (III.1.4), es pues, equivalente a un

operador estadístico construido en base al principio de máxima entropía, donde la única información disponible es la concerniente a operadores diagonales en la base elegida.

La entropía cuántica introducida en (I.2.3), en el caso discreto queda expresada directamente por

$$S = - \text{Tr } \hat{\rho} \ln \hat{\rho} = \sum_j |c_j|^2 \ln(|c_j|^2) \quad (\text{III.1.7})$$

Como recordamos esta S mide la agudeza de la distribución de probabilidad con respecto a la base elegida.

Vale la pena destacar que el operador estadístico exacto $|\psi\rangle\langle\psi|$, para el cual $S = 0$, contiene toda la información, tanto la relacionada con los operadores no diagonales como la relacionada con los diagonales. Nuestro propósito es precisamente inferir aproximadamente el estado puro del sistema a partir de la información diagonal.

Las ideas expuestas serán ilustradas utilizando un modelo no trivial exactamente soluble, a fin de clarificar los conceptos correspondientes.

III.2 El modelo.

Emplearemos como aplicación un modelo exactamente soluble de simetría $U(3)^2$, el cual consiste de N fermiones distribuidos en tres niveles de partícula independiente (p.i.), 2Ω veces degenerados. Por razones de simplicidad tomaremos $N=2\Omega$. El ket $|p,i\rangle$ representa los estados de una partícula, con $1 \leq p \leq 2\Omega$ y $1 \leq i \leq 3$.

Los generadores del grupo son definidos a continuación :

$$\hat{G}_{ij} = \sum_{p=1}^{2\Omega} c_{pi}^+ c_{pj} \quad , \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (III.2.1)$$

y obedecen las reglas de conmutación

$$[\hat{G}_{ij}, \hat{G}_{kl}] = \hat{G}_{il} \delta_{jk} - \hat{G}_{kj} \delta_{il} \quad , \quad (III.2.2)$$

donde c_{pi}^+ (c_{pi}) es el operador de creación (destrucción) de un fermión en el estado $|p,i\rangle$. El valor medio de estos operadores está restringido por el requerimiento de la conservación del número de partículas N , es decir

$$\langle \hat{N} \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^3 \hat{G}_{ii} \right\rangle = N \quad . \quad (III.2.3)$$

Con estos operadores podemos construir el hamiltoniano, con un término de interacción monopolar,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \epsilon_i \hat{G}_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i < j} V_{ij} (\hat{G}_{ij}^2 + \hat{G}_{ji}^2) \quad (\text{III.2.4a})$$

$$\hat{H} \equiv \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (\text{III.2.4b})$$

con $\epsilon_1 \leq \epsilon_2 \leq \epsilon_3$ y $V_{ij} = V_{ji}^*$. Este modelo representa un esquema muy simplificado de un núcleo con dos modos colectivos de excitación distintos, que interactúan uno con el otro y con el estado fundamental.

El autoestado más bajo del hamiltoniano no perturbado \hat{H}_0 , pertenece a la representación irreducible completamente simétrica del grupo $U(3)$, es decir, $(N, 0, 0)$. En vista de la estructura de la interacción en \hat{H} , una situación idéntica prevalecerá para el estado fundamental (e.f.) del hamiltoniano completo (III.2.4a).

Los estados base de esta representación son los siguientes :

$$|n_2, n_3\rangle = \left[\frac{n_1! / N! n_2! n_3!}{1} \right]^{1/2} \hat{G}_{21}^{n_2} \hat{G}_{31}^{n_3} |0, 0\rangle, \quad (\text{III.2.5a})$$

con

$$|0, 0\rangle = \prod_p c_{p_i}^+ |0\rangle \quad (\text{III.2.5b})$$

donde

$$0 \leq n_2 + n_3 \leq N, \quad (\text{III.2.6})$$

$$n_1 + n_2 + n_3 = N$$

son las condiciones que satisfacen los números de ocupación y $|0,0\rangle$ es el estado fundamental no perturbado, para el cual $n_1 = N$, y $n_2 = n_3 = 0$. En esta representación cualquier determinante de Slater puede ser construido a partir de los generadores \hat{G}_{ij} , y escrito de la forma²:

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= (x_1)^N \exp(h_1 \hat{G}_{21} + h_2 \hat{G}_{31}) |0,0\rangle \\
 &= \sum_{n_2, n_3} \left[\frac{N!}{n_1! n_2! n_3!} \right]^{1/2} x_1^{n_2} x_2^{n_2} x_3^{n_3} |n_2, n_3\rangle \quad (\text{III.2.7}) \\
 &= \sum_{n_2, n_3} C_{n_2 n_3}^{(0)} |n_2, n_3\rangle \equiv |\psi(0)\rangle
 \end{aligned}$$

con

$$h_1 = x_2/x_1, \quad h_2 = x_3/x_1 \quad (\text{III.2.8})$$

y

$$|x_1|^2 + |x_2|^2 + |x_3|^2 = 1$$

La dimensión de la matriz de energía a diagonalizar en la base $|n_2, n_3\rangle$ es de $(N+2)(N+1)/2$, la cual puede ser bloqueada en cuatro submatrices debido al carácter particular de la interacción en (III.2.4). Los elementos de matriz relevantes son :

$$\hat{G}_{ii} |n_i n_j n_k\rangle = n_i |n_i n_j n_k\rangle, \quad n_i + n_j + n_k = N \quad (\text{III.2.9a})$$

$$\hat{G}_{ij} |n_i, n_j, n_k\rangle = [n_j (n_i + 1)]^{1/2} |n_i + 1, n_j - 1, n_k\rangle \quad (\text{III.2.9b})$$

donde con el objeto de hacer más clara la notación los números cuánticos n_i han sido citados explícitamente.

III.3 Solución de Hartree-Fock.

En el caso del modelo que estamos tratando, el problema de Hartree-Fock puede ser encarado de un modo analítico elegante. El teorema de Wick (ver apéndice) permite expresar el valor esperado de \hat{H} , con respecto a un dado determinante de Slater $|D_S\rangle$, (III.2.7) en términos de la matriz densidad de un cuerpo:

$$\rho_{p_i q_j} = \langle c_{q_j}^+ c_{p_i} \rangle = \delta_{pq} N^{-1} \langle \hat{G}_{ij} \rangle \quad (\text{III.3.1})$$

que puede ser escrito siempre de una forma separable, es decir

$$\rho_{p_i q_j} = \delta_{qp} x_i x_j^* \quad (\text{III.3.2})$$

La expresión resultante es la siguiente :

$$\begin{aligned} E_{\text{HF}} &= \langle \hat{H} \rangle \\ &= N \left\{ \sum_{i=1}^s e_i |x_i|^2 + 1/2 \sum_{i < j} v_{ij} (x_i^2 x_j^{*2} + x_j^2 x_i^{*2}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{III.3.3})$$

$$\text{con } v_{ij} = (N-1)v_{ij} \quad (\text{III.3.4})$$

Esta energía será la energía de Hartree-Fock, si minimizamos (III.3.3) con respecto a los coeficientes x_i .

En el caso especial

$$V_{ij} = V = -v(N-1), \quad v > 0, \quad \forall i, j \quad (\text{III.3.5})$$

después de realizar los correspondientes cálculos,¹⁶ se obtiene para la solución de energía más baja,

$$|x_i|^2 = 1/3 \left[1 + 1/v \sum_{j=1}^g \epsilon_j - 3\epsilon_i/v \right] \quad (\text{III.3.6})$$

$$\frac{E_{HF}}{N} = -1/3 \left[\frac{\epsilon_g^2 - \epsilon_g + 1}{v} + v \right] - 1/3(1+\epsilon_g) \quad (\text{III.3.7})$$

donde hemos supuesto $\epsilon_1 = 0$ y $\epsilon_2 = 1$.

Estos resultados son válidos para $v > 2\epsilon_g - 1$. Los coeficientes x_i son reales para $v < 0$, mientras que su signo permanece indeterminado (es decir, que las soluciones son degeneradas).

Cuando $v = 2\epsilon_g - 1$, la solución de HF sufre una transición de fase caracterizada por el hecho de que x_g se anula y todo sucede como si el tercer nivel no existiese. Nuestro modelo se reduce entonces al modelo de Lipkin de dos niveles $U(2)$,⁶ con las conocidas soluciones de Hartree-Fock :

$$\begin{aligned} x_1^2 &= 1/2(1 + 1/v) \\ x_2^2 &= 1/2(1 - 1/v) \end{aligned} \quad (\text{III.3.8})$$

$$E_{HF}/N = -1/4(v + 1/v) + 1/2$$

que vale para $1 < v < 2\epsilon_g - 1$.

Existe aún otra transición de fase que toma lugar en $v = 1$, donde x_2 se anula. Para $v < 1$, el estado de HF coincide con el estado no perturbado $|0,0\rangle$.

La función de onda puede ser obtenida fácilmente en todos los casos recurriendo al celebrado teorema de Thouless² (III.2.7).

III.4 Aplicación del formalismo en un modelo de simetría U(3).

El leit-motiv del método presentado es el de contruir una $\hat{\rho}$ aproximada para la matriz densidad exacta del estado fundamental, cuyos elementos diagonales en la base $|p,q\rangle$ son :

$$(\hat{\rho}_{\text{exacta}})_{pq,pq} = |\langle \text{e.f.} | p,q \rangle|^2 = |C_{\text{ex}}(p,q)|^2 . \quad (\text{III.4.1})$$

De acuerdo con lo explicitado en el punto (III.1), y con este propósito, elegiremos adecuadamente los operadores empleados para construir $\hat{\rho}$ de tal forma que exploten las simetrías subyacentes, características del hamiltoniano que estamos utilizando. En particular, el operador estadístico deberá construirse en base a aquellos operadores de que pudieran ser accesibles al manejo experimental, o a un adecuado tratamiento teórico. Dentro del presente contexto emplearemos, por consiguiente, operadores de uno y dos cuerpos que sean diagonales en la base $|p,q\rangle$ y asociados a la simetría predominante en U(3), es decir, los generadores \hat{G}_{ij} . El operador más general de esta clase, de acuerdo con (III.1.4), (sólamente restringido a ser cuadrático en los generadores) es

$$\hat{\rho} = \exp\{-\lambda_0 - \sum_i \lambda_i \hat{G}_{ii} - \sum_{i,j} \lambda_{ij} \hat{G}_{ii} \hat{G}_{jj}\} , \quad (\text{III.4.2})$$

donde λ_0 es la constante de normalización y λ_i , λ_{ij} son los parámetros a ser ajustados de acuerdo con la información disponible. En otras palabras, la física del problema deberá reflejarse en los valores numéricos que estos parámetros alcanzan

realmente.

Sabemos que la aproximación de campo medio proporciona una descripción física razonable del problema de muchos cuerpos, al menos para sistemas que no están fuertemente acoplados. En esta sección veremos que la expresión (III.4.2) adquiere una forma muy simple cuando los valores de las constantes de acoplamiento se encuentran en los límites asintóticos. En especial, reviste gran interés el límite de constantes de acoplamiento fuertes, pues en esas circunstancias las correlaciones adquieren gran importancia.

El método aproximado resulta fácilmente manejable en ese límite, brindando al mismo tiempo una descripción muy precisa del estado fundamental del sistema de muchas partículas interactuantes. En primer lugar analizaremos este caso, es decir

$$\varepsilon_i \rightarrow 0 \quad (\text{o } V \rightarrow \infty), \quad \forall i \quad (\text{III.4.3})$$

En esta situación un razonamiento físico conduce a los siguientes valores de $\langle \hat{G}_{ii} \rangle$, $\langle \hat{G}_{ij}^2 \rangle$,

$$\langle \hat{G}_{ii} \rangle = \text{constante independiente de } i \quad (\text{III.4.4})$$

$$\langle \hat{G}_{ij}^2 \rangle = \text{constante independiente de } i, j$$

Estos resultados nos permiten afirmar que $\lambda_i = \lambda^{(1)}$ ($i = 1, 2, 3$) y $\lambda_{ij} = \lambda^{(2)}$ $\forall i, j$. Teniendo en cuenta, además, que la restricción (III.2.3) fija el valor de $\lambda^{(1)}$, el operador estadístico puede ser reescrito de una forma mucho más simple, es decir :

$$\hat{\rho} = \exp\{-\lambda_0 - \lambda \sum_{i < j} (\hat{G}_{ii} - \hat{G}_{jj})^2\} \quad (\text{III.4.5})$$

y esta expresión depende de un único parámetro, ya que la condición de normalización ($\text{Tr } \hat{\rho} = 1$) determina a λ_0 .

Dentro de este contexto los coeficientes aproximados $C(p,q)$ (ecuación (III.1.3)) vienen dados por

$$\begin{aligned} C(p,q) &= \{ \langle p,q | \hat{\rho} | p,q \rangle \}^{1/2} \\ &= \exp\{(-\lambda_0 - \lambda((p-q)^2 + (N-2p-q)^2 + (N-p-2q)^2))/2\} \quad (\text{III.4.6}) \end{aligned}$$

dado que los \hat{G}_{ii} son diagonales en la base $|p,q\rangle$.

Por otra parte como hemos elegido $v < 0$ no pueden surgir problemas de fase, ya que en este modelo la energía alcanza el menor valor posible cuando todos los $C(p,q)$ poseen el mismo signo.

Finalmente nos manejamos con un único parámetro ajustable, que debe ser empleado para minimizar la energía aproximada del estado fundamental.

La expresión (III.1.5) en este modelo adquiere la forma siguiente :

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \lambda_1} = \sum_i \epsilon_i \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle \hat{G}_{ii} \rangle} \{ 1/2 [\langle \hat{G}_{ii} \hat{G}_{ii} \rangle + \langle \hat{G}_{ii} \rangle \langle \hat{G}_{ii} \rangle] - \langle \hat{G}_{ii} \rangle \langle \hat{G}_{ii} \rangle \} \\ &\quad + \sum_{i < j} v_{ij} \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle \hat{G}_{ij}^2 \rangle} \{ 1/2 [\langle \hat{G}_{ii} \hat{G}_{ij}^2 \rangle + \langle \hat{G}_{ij}^2 \rangle \langle \hat{G}_{ii} \rangle] - \langle \hat{G}_{ij}^2 \rangle \langle \hat{G}_{ii} \rangle \} \\ 0 &= \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \lambda_{lm}} = \sum_i \epsilon_i \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle \hat{G}_{ii} \rangle} \{ 1/2 [\langle \hat{G}_{ii} \hat{G}_{mm} \hat{G}_{ii} \rangle + \langle \hat{G}_{ii} \hat{G}_{ii} \hat{G}_{mm} \rangle] - \langle \hat{G}_{ii} \rangle \langle \hat{G}_{ii} \hat{G}_{mm} \rangle \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i < j} V_{ij} \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle \hat{G}_{ij}^2 \rangle} \left\{ 1/2 \left[\langle \hat{G}_{ll} \hat{G}_{mm} \hat{G}_{ij}^2 \rangle + \langle \hat{G}_{ij}^2 \rangle \langle \hat{G}_{ll} \hat{G}_{mm} \rangle \right] \right. \\
& \left. - \langle \hat{G}_{ij}^2 \rangle \langle \hat{G}_{ll} \hat{G}_{mm} \rangle \right\} \quad (III.4.7)
\end{aligned}$$

Los resultados obtenidos se muestran en la tabla I, para $N = 8$ y distintos valores de la constante de acoplamiento V . Nuestras energías aproximadas fueron confrontadas con las proporcionadas por el método de HF y con las exactas, así como también, los resultados relacionados con los overlaps $\langle HF | \text{exac} \rangle$, y $\langle m.a. | \text{exac} \rangle$.

La "entropía cuántica" definida en (III.1.7), dentro de este contexto adquiere la expresión :

$$S = - \sum_{p,q} |C(p,q)|^2 \ln |C(p,q)|^2 \quad (III.4.8)$$

Esta entropía nos brinda una idea sobre la agudeza de la distribución de estados (para una función de onda dada) con referencia a la base $|p,q\rangle$. Como se espera esta S resulta mínima para la función de onda exacta. No obstante, si los parámetros de Lagrange se obtienen por minimización de $\langle \hat{H} \rangle$, en lugar de (III.1.6), la expresión (III.4.8) puede proporcionar un resultado para la entropía aproximada menor que el de la exacta.

Deberemos destacar que la entropía "real" evaluada con los distintos operadores estadísticos ($S_{\text{real}} = - \text{Tr} \hat{\rho}_{\text{ex}} \ln \hat{\rho}_{\text{ex}}$) es nula en todas las circunstancias, ya que estamos tratando con estados puros.

La pseudoentropía (III.4.8), incorpora información considerando sólo la parte diagonal de los diferentes operadores estadísticos

(de este modo puede alcanzar un valor no nulo). Esta entropía mide nuestra falta de información relacionada con la distribución de las componentes de la función de onda con respecto a los estados de referencia $|p, q\rangle$.

En la tabla II mostramos un caso ligeramente más general, esto es, cuando $V_{12} = V_{29} = V$; $V = \alpha V$, con $\alpha = 1/2$. Cuando esto sucede los coeficientes de HF poseen los valores

$$|x_1|^2 = \frac{\epsilon_g (2/\alpha - 1) + 1 + v}{v(4 - \alpha)} \quad (\text{III.4.9a})$$

$$|x_2|^2 = \frac{-2 + \epsilon_g + v(2 - \alpha)}{v(4 - \alpha)} \quad (\text{III.4.9b})$$

$$|x_g|^2 = \frac{1 + v + 2\epsilon_g / \alpha}{v(4 - \alpha)} \quad (\text{III.4.9c})$$

si se cumple que $v > 2\epsilon_g / (\alpha - 1)$. Para $v < v_c$ el sistema se comporta como en el caso U(2).

En la situación analizada en el límite asintótico, se requieren dos multiplicadores de Lagrange en virtud de la desigual interacción entre los niveles. La nueva matriz densidad resulta

$$\hat{\rho} = \exp\{-\lambda_0 - \lambda_1 (\hat{G}_{11}^2 + \hat{G}_{99}^2) - \lambda_2 \hat{G}_{22}^2\} \quad (\text{III.4.10})$$

Si hacemos $\lambda_1 = \lambda_2$, (III.4.10) se reduce a (III.4.5), obteniéndose también resultados satisfactorios, como se puede apreciar en la tabla II.

Analizaremos ahora la reducción al caso U(2), con el propósito

de mostrar la forma extremadamente simple que en este contexto adquiere la expresión para $\hat{\rho}$ dada por (III.4.2).

Para ello si en (III.2.4) hacemos $V_{12} = V_{23} = 0$, nos encontramos con el celebrado modelo de Lipkin (ninguna partícula ocupa el tercer nivel de p.i.). La base se reduce por sí misma al conjunto $|p, 0\rangle$, con $0 \leq p \leq N$, es decir, al multiplete $|J, M\rangle$, con $J = N/2$. De esta forma \hat{H} se reduce al hamiltoniano de Lipkin,

$$\hat{H} = \hat{J}_z + v/2(\hat{J}_+^2 + \hat{J}_-^2) \quad (\text{III.4.11})$$

(expresado en términos de los operadores usuales de quasispin)

El operador estadístico (III.4.2) proporcionado por la aproximación tiene la forma general:

$$\hat{\rho} = \exp\{-\lambda_0 - \lambda_1 \hat{J}_z - \lambda_2 \hat{J}_z^2\} \quad (\text{III.4.12})$$

que en el límite asintótico que estamos analizando se reduce a la siguiente expresión

$$\hat{\rho} = \exp\{-\lambda_0 - \lambda \hat{J}_z^2\} \quad (\text{III.4.13})$$

de esta forma es posible obtener excelentes resultados simplemente determinando un único parámetro λ . Estos se muestran en la tabla IV (a partir de δV_0 , $\hat{\rho}$ fue aproximada por medio de (III.4.13).

En el límite opuesto, vale decir, para valores de $v \rightarrow 0$ la expresión resultante para el operador estadístico es la siguiente

$$\hat{\rho} = \exp\{-\lambda_0 - \sum_i \lambda_i \hat{G}_{ii}\} \quad (\text{III.4.14})$$

Como habíamos visto anteriormente la condición de normalización conjuntamente con (III.2.3) reduce el número de parámetros a determinar a dos. Los resultados figuran en la tabla III, para diferentes valores de la constante de acoplamiento.

En el caso U(2), la expresión para $\hat{\rho}$ en ese límite adquiere una forma extremadamente simple,

$$\hat{\rho} = \exp\{-\lambda_0 - \lambda \hat{J}_z\} . \quad (\text{III.4.15})$$

Como se puede apreciar en la tabla IV, los resultados proporcionados por la expresión (III.4.15) para valores de la constante de acoplamiento bajos (aunque en este caso empleamos esta aproximación hasta $4V_c$) reflejan una descripción muy precisa de la función de onda del estado fundamental, tornándose de esta manera muy competitivo con el método de HF también en ese límite.

Sin embargo, como se puede apreciar de estos resultados, cuando el rango de variación de V cubre valores intermedios respecto de los límites analizados, se hace necesario recobrar para $\hat{\rho}$ las expresiones generales (III.4.2) y (III.4.11) para los casos U(3) y U(2) respectivamente, si un grado mayor de precisión fuese requerido. Vale la pena mencionar, que aún en esta situación se obtienen excelentes resultados con sólo unos pocos parámetros.

Para finalizar este punto y por razones de completitud se muestran en las tablas V y VI (para los casos U(3) y U(2) respectivamente) los resultados obtenidos cuando los parámetros λ son fijados recurriendo al procedimiento delineado en el capítulo I. En este caso hemos considerado conveniente incluir también los resultados para la entropía (III.4.8). El acuerdo con los valores exactos es también excelente.

III.5 Discusión sobre la estabilidad de las soluciones.

El tratamiento aproximado nos proporciona, como se pudo apreciar, una descripción física precisa para todo el rango de valores de la constante de acoplamiento, y especialmente cuando estos son muy altos o muy bajos.

Además, y al menos con referencia al modelo de la sección anterior, nuestro método posee una propiedad muy interesante, esto es, resulta estable frente a transformaciones generales de un cuerpo, en otras palabras, si

$$\hat{F} = \sum_{i,j} f_{ij} c_i^+ c_j, \quad \text{con } f_{ij} = f_{ji}^*, \quad (\text{III.5.1})$$

tenemos

$$\frac{\delta}{\delta f} \langle \text{M.A.} | \exp(i\hat{F}) \hat{H} \exp(-i\hat{F}) | \text{M.A.} \rangle = 0 \quad (\text{III.5.2})$$

Consideremos primero el caso $U(2)$, donde el operador más general tiene la forma

$$\hat{F} = h\hat{J}_+ + h^*\hat{J}_- + r\hat{J}_z \quad (\text{III.5.3})$$

lo cual conduce a la siguiente expresión, donde $h = \alpha \exp(i\psi)$,

$$E'(h,r) = \langle \text{M.A.} | \exp(i\hat{F}) \hat{H} \exp(-i\hat{F}) | \text{M.A.} \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \hat{J}_z \rangle \cos 2\alpha + V \langle \hat{J}_+^2 \rangle [\cos^4 \alpha \cos 2r + \sin^4 \alpha \cos(4\psi + 2r)] \\
&\quad + 3/2 \cos 2(\psi + r) \sin^2(2\alpha) [\langle \hat{J}_z \rangle^2 - 1/3 J(J+1)]
\end{aligned}
\tag{III.5.4}$$

de forma tal que cuando $r = \psi = \alpha = 0$, tenemos

$$\frac{\partial E'}{\partial r} = \frac{\partial E'}{\partial \alpha} = \frac{\partial E'}{\partial \psi} = 0 \quad .
\tag{III.5.5}$$

Es conveniente destacar que existen soluciones adicionales. La parte diagonal de $\hat{F} (r \hat{J}_z)$ refleja la fase relativa entre las componentes de la función de onda. El mejor valor de r (que minimiza E') depende del signo de la constante de acoplamiento V y se anula para $V < 0$, como ya fue anticipado.

Otra solución para \hat{H} es la siguiente :

$$\psi = 0
\tag{III.5.6}$$

$$\alpha = 1/2 \arccos \left[-V \langle \hat{J}_+^2 \rangle - 3 \langle \hat{J}_z \rangle - 1/3 [J(J+1)] \right] / \langle \hat{J}_z \rangle^{-1}$$

Esta es una solución 'deformada' no trivial que corresponde a un mínimo local de E' , la cual yace siempre por encima de aquella que corresponde al caso $h = 0$

En el caso $U(3)$ el cálculo resulta más complicado. Por ello es más conveniente realizar una expansión en serie de \hat{F} en lugar de

seguir el camino utilizado anteriormente. Para el hamiltoniano (III.2.4) una expansión a segundo orden (utilizando por razones de simplicidad la condición (III.3.5)), da como resultado

$$\hat{F} = h_9 \hat{G}_{12} + h_1 \hat{G}_{29} + h_2 \hat{G}_{91} + \text{c.c.} \quad (\text{III.5.7})$$

$$E'(h,r) = \langle \text{M.A.} | \exp(i\hat{F}) \hat{H} \exp(-i\hat{F}) | \text{M.A.} \rangle$$

$$\begin{aligned} &\approx \langle \text{M.A.} | \hat{H} | \text{M.A.} \rangle - 1/2 \sum_{i < j} V \{ \langle \hat{G}_{ij}^2 + \hat{G}_{ji}^2 \rangle \\ &\quad \times (2|h_k|^2 + |h_i|^2 + |h_j|^2) + \langle \hat{G}_{kj}^2 \rangle h_j^2 + h_j^{*2} \langle \hat{G}_{jk}^2 \rangle \\ &\quad + \langle (\hat{G}_{ii} - \hat{G}_{jj})^2 - \hat{G}_{ji} \hat{G}_{ij} - \hat{G}_{ij} \hat{G}_{ji} \rangle (h_k^2 + h_k^{*2}) \\ &\quad + \langle \hat{G}_{ik}^2 \rangle h_i^2 + \langle \hat{G}_{ki}^2 \rangle h_i^{*2} \} \end{aligned} \quad (\text{III.5.8})$$

En la expresión anterior los términos diagonales en \hat{F} no necesitan ser considerados, puesto que nuestra función de onda es siempre coherente para $V < 0$.

Valiéndonos de las definiciones

$$a = \langle \hat{G}_{ij}^2 + \hat{G}_{ji}^2 \rangle$$

$$b = \langle \hat{G}_{ij} \hat{G}_{ji} + \hat{G}_{ji} \hat{G}_{ij} - (\hat{G}_{ii} - \hat{G}_{jj})^2 \rangle, \quad i \neq j \quad (\text{III.5.9})$$

se encuentra

$$E' - \langle M.A. | \hat{H} | M.A. \rangle = -V/2 \sum_{i=1}^n a(4|h_i|^2 + 2\text{Re}(h_i^2)) - 2b\text{Re}(h_i^2)$$

(III.5.10)

y la estabilidad se halla garantizada por

$$a[4h^2 - 2h^2] - 2|b|h^2 > 0 \quad (III.5.11)$$

(donde hemos hecho $h = |h_i|$).

De este modo (III.5.11) implica:

$$a > |b| \quad (III.5.12)$$

Resulta inmediato comprobar que esta condición es satisfecha por el resultado de la sección previa.

III.6 Conclusiones.

Hemos extendido el formalismo general presentado en el capítulo I al caso discreto, con el propósito de brindar un esquema que permita describir en forma aproximada el estado fundamental de un sistema de muchos fermiones interactuantes.

El método resulta fácilmente tratable cuando el conjunto de observables relevantes está conformado por los valores medios de aquellos operadores que son diagonales en la base elegida. Como ya expusimos en la sección III.1, un análisis detallado de las simetrías subyacentes del hamiltoniano que describe el sistema, permite una descomposición adecuada del mismo y en consecuencia resulta inmediato encontrar la base mencionada.

En este capítulo, teniendo en cuenta que el hamiltoniano del sistema era conocido, fue posible recurrir a la minimización del valor medio del mismo para determinar los parámetros de Lagrange óptimos. Otro camino alternativo que también fue empleado, por razones de completitud, es el procedimiento delineado en el capítulo I.

Como demostramos, la aproximación se torna particularmente simple y fácil de tratar, (es necesario determinar sólo unos pocos parámetros de Lagrange) cuando los valores de las constantes de acoplamiento son muy grandes o muy pequeños. Precisamente en este último caso sabemos que HF brinda resultados muy satisfactorios, aunque a menudo falla en el límite opuesto (vale decir, cuando los valores de constantes de acoplamiento son grandes).

Por el contrario, los resultados obtenidos al aplicar nuestro

esquema aproximado a un modelo no trivial de simetría $U(3)$ fueron excelentes, para todo el rango de valores de las constantes de acoplamiento. En base a los mismos es posible concluir, que al menos dentro del contexto del modelo empleado como ilustración, nuestro formalismo resulta altamente competitivo con la aproximación de campo medio. Además y tal como habitualmente sucede con este último esquema, podemos considerar la presente aproximación como un punto de partida alternativo hacia tratamientos que revisten un mayor grado de refinamiento o complejidad.

Referencias:

1. D.J. Thouless, 'The Quantum Mechanics of Many-Body Systems' (Academic Press, N.Y., 1961).
2. P. Ring and P. Shuck, 'The Nuclear Many-Body Problem'. (Springer, Berlin, 1980).
3. A. de Shalit, H. Feshbach, 'Theoretical Nuclear Physics' (Wiley, N.Y., 1974).
4. G. Ripka in 'Advances in Nuclear Physics', ed. M. Baranger and M. Vogt (Plenum, New Jersey, 1968).
5. G. Bozzolo, N. Canosa, J. Núñez, A. Plastino and J.P. Vary, Z. Phys. A321, 429 (1985).
6. H.J. Lipkin, N. Meshkov and A.J. Glick, Nucl. Phys. 62, 188 (1965). D. Agassi, H.J. Lipkin and N. Meshkov, Nucl. Phys. 86, 321 (1966).
7. N. Meshkov, Phys. Rev. C3, 2214 (1971).
8. A. Plastino and S.M. Moszkowski, Nuovo Cim. 47A, 470 (1978).
9. M.C. Cambiaggio and A. Plastino Z. Phys. A241, 277 (1979).
10. M.C. Cambiaggio and A. Plastino Z. Phys. A288, 153 (1978).
11. H.G. Kummel, Nucl. Phys. A317, 199 (1979).
12. R. Gilmore and D.H. Feng Nucl. Phys. A301, 184 (1978).
13. S.M. Peltier and A. Plastino Nucl. Phys. A430, 397 (1984).
14. N. Canosa, A. Plastino and R. Rossignoli, Nucl. Phys. A 453, 417 (1986).
15. R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 12, 570, (1957); Rep. Progr. Phys. 29, 255 (1966).

16. J. Nuñez, A. Plastino R. Rossignoli, and M.C. Cambiaggio
Nucl. Phys. A444, 35 (1985).

TABLAS

Tabla I.

Se comparan (para el caso U(3)) el overlap entre nuestra función de onda aproximada (MA) y la exacta (tercer columna), con el overlap para el caso de HF (segunda columna) para diferentes constantes de acoplamiento (primer columna). También se detallan las correspondientes energías del estado fundamental. El número de partículas es $N = 8$, y las tres constantes de acoplamiento (idénticas son expresadas en términos de $V_c = 3/(N-1)$, $\epsilon_8 = 2$.

Tabla II.

Los detalles son similares a los de la tabla I, salvo que en este caso hemos elegido $V_{12} = V_{23} = V$ y $V_{19} = 0.5V$, con $V_c = 7/(N-1)$, y $\epsilon_8 = 2$. En la primer columna n indica el número de parámetros de Lagrange utilizado.

Tabla III.

Los detalles son similares a los de la tabla I, con la excepción de que en este caso las tres constantes de acoplamiento (idénticas) son expresadas en términos de $V_c = 1/(N-1)$. Para evaluar estos resultados fueron empleados dos parámetros de Lagrange.

Tabla IV.

Los detalles son similares a los de la tabla I, con la salvedad de que los resultados corresponden al caso U(2).

Tabla V.

En este caso los resultados fueron obtenidos empleando el esquema desarrollado en el capítulo I. Se comparan (para $U(3)$) la entropía proporcionada por el método aproximado (MA), (cuarta columna) con la entropía exacta. También se muestra el overlap entre nuestra función de onda aproximada (MA) y la exacta (tercer columna) para diferentes constantes de acoplamiento (segunda columna). En la primer columna se indica con n el número de parámetros de Lagrange empleados en cada caso. También se detallan las correspondientes energías del estado fundamental. El número de partículas es $N = 8$, y las tres constantes de acoplamiento (idénticas son expresadas en términos de $V_0 = 1/(N-1)$).

Tabla VI.

Los detalles son similares al caso anterior salvo por el hecho de que empleamos el modelo de simetría $U(2)$.

Tabla I

V/V_c	$Dv(\text{ex.HF})$	$Dv(\text{ex.MA})$	$E(\text{HF})$	$E(\text{MA})$	$E(\text{ex.})$
2	0.477666	0.872446	-9.33333	-10.18218	-11.99248
3	0.461863	0.932368	-16.88889	-19.27327	-20.55264
4	0.457777	0.958985	-24.66667	-28.36433	-39.34959
6	0.455535	0.980618	-40.44444	-46.54650	-47.22157
8	0.454916	0.988814	-56.33333	-64.72865	-65.24502
10	0.454662	0.992730	-72.26667	-82.91080	-83.33210
20	0.454357	0.998079	-152.13333	-173.82150	-174.06199
40	0.454288	0.999440	-312.06667	-355.64314	-355.82128
80	0.454270	0.999781	-632.03333	-719.28623	-719.49099

Tabla II

n	V/V _c	Dv (ex. HF)	Dv (ex. MA)	E (HF)	E (MA)	E (ex.)
2	2	0.489042	0.906995	-25.14286	-28.11442	-30.09595
1			0.887089		-27.34754	
2	3	0.467224	0.944509	-40.76190	-46.17350	-48.09414
1			0.920237		-45.01697	
2	4	0.459761	0.960315	-56.57143	-64.23188	-66.27013
1			0.934294		-62.68664	
2	6	0.454507	0.972743	-88.38095	-100.34868	-102.82730
1			0.945380		-98.02673	
2	8	0.452686	0.977351	-120.28571	-136.46533	-139.49470
1			0.949498		-133.36734	
2	10	0.451847	0.979153	-152.22857	-172.58187	-176.20801
1			0.951450		-168.70820	
2	20	0.450731	0.982493	-312.11429	-353.16436	-359.98587
1			0.954099		-345.41376	
2	40	0.450453	0.983242	-632.05714	-714.32902	-727.75576
1			0.954769		-698.82617	
2	80	0.450384	0.983429	-1272.0286	-1436.6582	-1463.4034
1			0.954937		-1405.6517	

Tabla III

V/V_c	$Dv(\text{ex. HF})$	$Dv(\text{ex. MA})$	$E(\text{HF})$	$E(\text{MA})$	$E(\text{ex.})$
.1	0.999098	0.999999	-4.00000	-4.00430	-4.004307
.2	0.996357	0.999996	-4.00000	-4.01730	-4.017330
.3	0.991707	0.999995	-4.00000	-4.03920	-4.039247
.4	0.985069	0.999983	-4.00000	-4.07012	-4.070273
.5	0.976355	0.999970	-4.00000	-4.11037	-4.110658
.6	0.965480	0.999930	-4.00000	-4.15999	-4.160679
.7	0.952374	0.999853	-4.00000	-4.21923	-4.220623
.8	0.937001	0.999723	-4.00000	-4.28803	-4.290776
.9	0.919374	0.999452	-4.00000	-4.36633	-4.371395
1	0.899579	0.999089	-4.00000	-4.45397	-4.462687

TABLA IV

V/V_c	O_v (ex. HF)	O_v (ex. MA)	E (HF)	E (MA)	E (ex.)
.1	0.999284	0.999999	-4.00000	-4.00285	-4.002859
.2	0.997122	0.999999	-4.00000	-4.01146	-4.011468
.4	0.988247	0.999995	-4.00000	-4.04630	-4.046343
.6	0.972696	0.999961	-4.00000	-4.10565	-4.106006
.8	0.949538	0.999800	-4.00000	-4.19076	-4.192600
1	0.934838	0.999599	-4.00000	-4.24313	-4.246796
2	0.615067	0.978287	-5.00000	-5.17263	-5.366866
3	0.577308	0.948008	-6.66667	-6.38093	-6.991365
4	0.559065	0.942187	-8.50000	-8.23316	-8.839123
6	0.539876	0.974707	-12.33333	-12.35075	-12.754937
8	0.529997	0.985793	-16.25000	-16.46740	-16.777766
10	0.524014	0.990860	-20.20000	-20.58416	-20.837167
20	0.511994	0.997548	-40.10000	-41.16788	-41.322918
40	0.505988	0.999208	-82.05000	-82.33550	-82.470861
80	0.502993	0.999622	-160.02500	-164.67085	-164.854322

Tabla V

n	V/V _c	Dv(ex.MA)	S(MA)	S(ex)	E(MA)	E(ex.)
1	.2	0.999999	0.035549	0.035549	-4.011466	-4.011468
2		1	0.035549		-4.011468	
1	.4	0.999999	0.113032	0.113015	-4.046303	-4.046343
2		0.999999	0.113015		-4.046341	
1	.6	0.999961	0.219178	0.219041	-4.105653	-4.106006
2		0.999998	0.219048		-4.105982	
1	.8	0.999801	0.348174	0.347500	-4.190697	-4.192600
2		0.999991	0.347531		-4.192484	
1	1	0.999265	0.494149	0.491708	-4.301301	-4.308689
2		0.999973	0.491802		-4.308331	
1	2	0.978792	1.164075	1.092474	-5.116863	-5.366866
2		0.999814	1.093155		-5.363684	
1	4	0.931766	1.513813	1.277540	-7.644270	-8.839123
2		0.999836	1.278169		-8.834119	
1	8	0.912416	1.587541	1.285118	-13.949011	-16.775766
2		0.999797	1.285924		-16.762778	
1	10	0.909938	1.595583	1.284872	-17.238591	-20.837167
2		0.999785	1.285726		-20.819973	
1	20	0.906594	1.606027	1.284210	-33.952994	-41.322918
2		0.999767	1.285139		-41.285532	
1	40	0.905751	1.608588	1.283987	-67.645000	-82.470861
2		0.999762	1.284938		-82.394426	
1	80	0.905540	1.609225	1.283928	-135.15965	-164.85432
2		0.999760	1.284884		-164.70060	

Tabla VI

n	V/V _c	Dv(ex. MA)	S(MA)	S(ex)	E(MA)	E(ex.)
2	.2	0.999999	0.046921	0.046920	-0.017325	-0.017330
4		1	0.046920		-0.017330	
2	.4	0.999999	0.151226	0.151192	-0.070178	-0.070273
4		0.999999	0.151194		-0.070267	
2	.6	0.999937	0.294599	0.294377	-0.160046	-0.160679
4		0.999995	0.294390		-0.160629	
2	.8	0.999726	0.467152	0.466213	-0.287978	-0.290776
4		0.999984	0.466268		-0.290553	
2	1	0.999102	0.659009	0.656000	-0.453303	-0.462687
4		0.999973	0.656163		-0.461995	
2	2	0.981919	1.525264	1.464063	-1.719162	-1.936267
4		0.999269	1.466580		-1.921959	
2	4	0.952340	2.171197	2.003524	-5.751525	-6.594812
4		0.995020	2.020692		-6.464860	
2	8	0.948806	2.509462	2.326362	-15.856509	-17.662297
4		0.986951	2.373758		-17.150536	
2	10	0.949799	2.571778	2.391929	-21.225015	-23.467535
5		0.999795	2.392733		-23.451983	
2	20	0.952321	2.670164	2.499325	-48.800270	-53.218946
5		0.999868	2.499846		-53.200397	
2	40	0.953245	2.698296	2.530900	-104.74798	-113.54235
5		0.999888	2.531341		-113.51356	
2	80	0.953498	2.6705593	2.539153	-217.06554	-234.63165
5		0.999894	2.539574		-234.57855	

CAPITULO IV.

INFERENCIA ESTADISTICA Y EVOLUCION TEMPORAL. CLAUSURA LINEAL.

Introducción.

En la segunda parte de la Tesis abordaremos el estudio de la evolución dinámica de sistemas cuánticos de muchos cuerpos.

La complejidad que supone el análisis de tales sistemas, impone la necesidad de tener que recurrir a una descripción incompleta de los mismos, basada en el conocimiento de un conjunto reducido de valores medios de observables, que como ya fuera discutido en la primera parte de esta tesis, consideramos relevantes para el fenómeno analizado.

Desarrollaremos en base a un enfoque estadístico, un formalismo general, a través del cual podremos inferir la evolución temporal del conjunto de observables que caracteriza la dinámica del sistema.

El esquema que analizaremos surge de establecer una conexión entre la evolución temporal del conjunto de observables relevantes y la clausura de la semiálgebra particular bajo conmutación con el hamiltoniano correspondiente.

La teoría proporciona un esquema general, que permite a partir de clausuras alternativas, generar el conjunto de ecuaciones que aproximan la evolución dinámica del sistema en base a la información disponible. En este capítulo estudiaremos en detalle el caso en que dicha clausura es lineal.

Con el propósito de comprobar la bondad de nuestro formalismo, hemos comparado los resultados obtenidos con los proporcionados por el método de Hartree-Fock Dependiente del Tiempo (HFDT). Al hacerlo, hemos tenido en cuenta que aunque existen gran variedad de aproximaciones a las cuales es posible recurrir cuando se

estudian sistemas fuera del equilibrio, lo más frecuente en estos casos es realizar una descripción basada en el tratamiento de campo medio. Dentro de este contexto, HFDT ha sido vastamente utilizado, en especial, su aplicación al estudio de sistemas fermiónicos ha permitido obtener importantes progresos en la comprensión de la compleja dinámica nuclear. Este esquema proporciona la mejor descripción que es posible obtener en lo que respecta a la evolución dinámica de operadores de un cuerpo, sin embargo, brinda al mismo tiempo un cuadro no correlacionado de la evolución dinámica. Una desventaja inherente a su naturaleza de aproximación de partícula independiente. La teoría es no lineal y algunos interrogantes fundamentales concernientes con su interpretación física quedan aún sin respuesta^{1,2}.

Por consiguiente, creemos que reviste interés la búsqueda de descripciones alternativas de la evolución dinámica que permitan salvar alguna de las dificultades que el tratamiento anterior trae aparejado. En tal sentido, el esquema que proponemos proporciona a partir de la resolución de un sistema lineal de ecuaciones, una descripción del sistema donde las correlaciones son tenidas en cuenta.

IV.1 Evolución dinámica exacta. Descripción estadística.

Supongamos que las propiedades del sistema en el cual nos hallamos interesados están representadas por los valores de expectación de un conjunto de operadores \hat{O}_α , $\{\alpha = 1, \dots, q\}$. Entonces, hablar de evolución temporal es equivalente a poseer información sobre los valores de expectación $\langle \hat{O}_\alpha \rangle_t$ para todo tiempo $t > t_0$ (en lo sucesivo supondremos que los $\langle \hat{O}_\alpha \rangle$ no dependen explícitamente del tiempo).

Desde el punto de vista de la Mecánica Estadística Cuántica todo el conocimiento sobre el estado del sistema, ya sea éste puro o no, pasa a través del operador estadístico $\hat{\rho}$.

Luego, la evolución dinámica del conjunto $\langle \hat{O}_\alpha \rangle$ para todo tiempo t puede ser obtenida, en principio, recurriendo a la evaluación de

$$\langle \hat{O}_\alpha \rangle_t = \text{Tr}(\hat{\rho}(t)\hat{O}_\alpha) . \quad (\text{IV.1.1})$$

Este operador estadístico evoluciona en el tiempo (en la representación de Schrödinger) satisfaciendo la ecuación de Liouville-von Neumann :

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i[\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (\text{IV.1.2})$$

(donde \hat{H} es el hamiltoniano del sistema)

Recordemos a partir de los conceptos introducidos en el capítulo I la forma funcional que este operador estadístico posee,

$$\hat{\rho} = \exp\{-\lambda_0 - \sum_{\alpha=1}^q \lambda_{\alpha} \hat{O}_{\alpha}\}, \quad (\text{IV.1.3})$$

donde q es el número de operadores relevantes cuyos valores de expectación a $t=0$ vienen dados por (IV.1.1), es decir

$$\langle \hat{O}_{\alpha} \rangle_0 = \text{Tr}(\hat{\rho}(t=0) \hat{O}_{\alpha}) = o_{\alpha} \quad (\text{IV.1.4})$$

y los λ_{α} son los multiplicadores de Lagrange que quedan determinados a partir de las q condiciones iniciales para los $\langle \hat{O}_{\alpha} \rangle_0$.

Este operador densidad elegido como función de los valores medios de esos operadores es aquél para el cual la entropía

$$S(\hat{\rho}) = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = -\langle \ln \hat{\rho} \rangle, \quad (\text{IV.1.5})$$

(de aquí en más adjudicaremos el valor 1 a la constante de Boltzmann k_{β}) es máxima^s para el conjunto dado de q valores medios, y toma la forma

$$S = \sum_{\alpha=0}^q \lambda_{\alpha} \langle \hat{O}_{\alpha} \rangle \quad (\text{IV.1.6})$$

La evolución temporal del operador estadístico está gobernada por la expresión (IV.1.2). De una forma similar, tendremos para $\ln \hat{\rho}(t)$

$$i \frac{d}{dt} \ln \hat{\rho} = \langle [\hat{H}, \ln \hat{\rho}] \rangle \quad (\text{IV.1.7})$$

donde, teniendo en cuenta (IV.1.3), $\ln \hat{\rho}$ puede ser expandido de la siguiente forma:

$$-\ln \hat{\rho}(t) = \sum_{\alpha=0}^q \lambda_{\alpha}(t) \hat{O}_{\alpha} . \quad (\text{IV.1.8})$$

Es necesario determinar dentro del presente contexto el conjunto de restricciones suficientes para que la expansión (IV.1.8) sea válida para todo tiempo t , es decir,

$$i \frac{d}{dt} \left(\sum_{\alpha=0}^q \lambda_{\alpha} \hat{O}_{\alpha} \right) = [\hat{H}, \sum_{\alpha=0}^q \lambda_{\alpha} \hat{O}_{\alpha}] \quad (\text{IV.1.9})$$

Si los \hat{O}_{α} cierran una semiálgebra de conmutación con el hamiltoniano del sistema, es posible escribir,

$$[\hat{H}, \hat{O}_{\alpha}] = i \sum_{\beta=0}^q \hat{O}_{\beta} g_{\beta\alpha} \quad (\text{IV.1.10})$$

donde \hat{O}_0 representa el operador identidad. Estos coeficientes $g_{\alpha\beta}$ son los elementos de una matriz G y pueden interpretarse como las constantes de estructura del álgebra parcial de Lie generada. Si \hat{H} depende explícitamente del tiempo, estos $g_{\alpha\beta}$ pueden también depender del tiempo.

Si los \hat{O}_{α} son linealmente independientes (y consecuentemente los λ_{α}) es posible comparar ambos miembros de la ecuación resultante

$$i \frac{d}{dt} \left(\sum_{\alpha=0}^q \lambda_{\alpha}(t) \hat{O}_{\alpha} \right) = i \sum_{\alpha=0}^q \lambda_{\alpha}(t) \sum_{\beta=0}^q \hat{O}_{\beta} g_{\beta\alpha} \quad (\text{IV.1.11})$$

$$i \left(\sum_{\alpha=0}^q \frac{d}{dt} \lambda_{\alpha}(t) \hat{O}_{\alpha} \right) = i \sum_{\beta=0}^q \sum_{\alpha=0}^q \lambda_{\beta}(t) g_{\alpha\beta} \hat{O}_{\alpha} \quad (\text{IV.1.12})$$

y de aquí obtenemos

$$\frac{d}{dt} \lambda_{\alpha}(t) = \sum_{\beta=0}^q \lambda_{\beta}(t) g_{\alpha\beta}, \quad \beta = 0, \dots, q. \quad (\text{IV.1.13})$$

Las condiciones de contorno necesarias que permiten resolver el sistema de ecuaciones planteado estarán dadas por el conjunto de valores $\lambda_{\beta}(t_0)$ con $0 \leq \beta \leq q$. El número de ecuaciones acopladas será igual al número de restricciones. El operador densidad al tiempo t posee, pues, la forma explícita de un operador densidad de máxima entropía,³ que conserva la forma funcional (IV.1.3) sujeto a las restricciones dadas por los $q+1$ valores medios $\langle \hat{O}_{\alpha} \rangle_t$.

Resulta conveniente destacar que si no disponemos de información sobre alguno de los valores medios iniciales de aquellos operadores \hat{O}_{α} incluidos en la semiálgebra, la prescripción de máxima entropía implica adjudicar el valor cero al multiplicador de Lagrange $\lambda_{\alpha}(t=0)$ correspondiente. Esto demuestra que el esquema resulta válido, aún para el caso de información inicial incompleta.

Existe, dentro del presente contexto, además del procedimiento que hemos delineado, un camino alternativo para obtener la evolución dinámica del conjunto de valores medios relevantes, y en él enfocaremos nuestra atención.

Para ello volvamos a la expresión dada por (IV.1.1). La forma en la cual los valores de expectación cambian en el tiempo está dada, en general, por

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{O}_{\alpha} \rangle_t = \frac{d}{dt} \text{Tr} \{ \hat{\rho}(t) \hat{O}_{\alpha} \}$$

$$= \text{Tr} \left\{ \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) \hat{O}_\alpha \right\} + \frac{\partial \langle \hat{O}_\alpha \rangle_t}{\partial t} \quad (\text{IV.1.14})$$

$$= i \text{Tr} \left\{ \hat{O}_\alpha [\hat{\rho}, \hat{H}] \right\} + \frac{\partial \langle \hat{O}_\alpha \rangle_t}{\partial t}$$

y teniendo en cuenta que la traza es invariante frente a permutaciones cíclicas, resulta

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{O}_\alpha \rangle_t &= i \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} [\hat{H}, \hat{O}_\alpha] \right\} + \frac{\partial \langle \hat{O}_\alpha \rangle_t}{\partial t} \\ &= i \langle [\hat{H}, \hat{O}_\alpha] \rangle + \frac{\partial \langle \hat{O}_\alpha \rangle_t}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{IV.1.15})$$

Analizaremos nuevamente el caso en el cual los \hat{O}_α no dependen explícitamente del tiempo.

La expresión (IV.1.15) representa la evolución temporal del valor medio de un operador, y es habitualmente conocida como teorema de Ehrenfest (aunque rigurosamente esta denominación se emplea cuando se describe la evolución temporal del valor medio del operador impulso o la coordenada del sistema).

El lado derecho de (IV.1.15) puede ser escrito en la forma (IV.1.10), de donde se obtiene

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{O}_\alpha \rangle_t = - \sum_{\beta=0}^q \langle \hat{O}_\beta \rangle_t g_{\beta\alpha} \quad (\text{IV.1.16})$$

Esta expresión proporciona un conjunto de ecuaciones diferenciales lineales acopladas que determinan completamente la evolución temporal del valor de expectación $\langle \hat{O}_\alpha \rangle_t$ si conocemos los correspondientes valores medios iniciales $\langle \hat{O}_\alpha \rangle_{t=0}$. La dinámica

completa del problema pasa a través de los valores de estos factores de estructura $g_{\beta\alpha}$, en tanto confinemos nuestra atención a la evolución temporal del conjunto $\{\hat{O}_\alpha\}$.

Este esquema tiene la ventaja de proporcionar en forma directa los valores medios del conjunto de observables relevantes sin necesidad de tener que recurrir a (IV.1.1) para evaluarlos. De este modo es posible evitar el engorroso proceso algebraico que este cálculo trae aparejado.

Cuando el conjunto de observables relevantes cierra una semiálgebra de conmutación con \hat{H} , este esquema es equivalente a resolver la ecuación de Liouville-von Neumann (IV.1.2) para el operador estadístico.

Resulta de interés, empleando los resultados obtenidos hasta este punto, analizar la evolución temporal de $S(\hat{\rho})$. Para ello si derivamos con respecto al tiempo la expresión (IV.1.6), obtenemos:

$$\frac{d}{dt} S(\hat{\rho}) = \sum_{\alpha=0}^q \left\{ \frac{d}{dt} \langle \lambda_\alpha \rangle \langle \hat{O}_\alpha \rangle + \lambda_\alpha \frac{d}{dt} \langle \hat{O}_\alpha \rangle \right\} \quad (\text{IV.1.17})$$

Y recurriendo a (IV.1.13) y (IV.1.16), encontramos

$$\frac{dS(\hat{\rho})}{dt} = \sum_{\alpha, \beta} \langle \hat{O}_\alpha \rangle_t \lambda_\beta g_{\alpha\beta} - \sum_{\alpha, \beta} \lambda_\alpha \langle \hat{O}_\beta \rangle_t g_{\beta\alpha} = 0, \quad (\text{IV.1.18})$$

es decir, la entropía es una constante de movimiento para el tratamiento exacto, si $\hat{\rho}$ satisface exactamente la ecuación de Liouville-von Neumann (IV.1.2).

IV.2 Descripción aproximada de la evolución dinámica.

Clausura lineal.

Supongamos que \hat{H} representa el hamiltoniano del sistema y $\{\langle \hat{O}_\alpha \rangle, \alpha = 1, \dots, R_0\}$, el conjunto de valores medios relevantes, que describen la evolución dinámica del sistema.

En la sección precedente vimos que la evolución temporal de este conjunto está gobernada por (IV.1.15). De esta última expresión y teniendo en cuenta consideraciones relacionadas con el álgebra de conmutadores, obtuvimos (IV.1.16), por comodidad la reescribiremos a continuación,

$$\frac{d\langle \hat{O}_\alpha \rangle_t}{dt} = - \sum_{\beta=0}^q g_{\beta\alpha} \langle \hat{O}_\beta \rangle_t. \quad (\text{IV.2.1})$$

Recordemos que usualmente, al conmutar un operador de m cuerpos con uno de n cuerpos obtendremos un operador de $m+n-1$ cuerpos, de tal modo que la clausura sólo será prácticamente posible, (en general) en aquellas circunstancias en cuales el hamiltoniano sea de partícula independiente. Vale decir, que en la mayoría de las situaciones de interés físico q será mayor que R_0 , y por lo común un número lo suficientemente grande (algunas veces infinito) como para que el esquema desarrollado anteriormente deje de ser práctico.

El planteo original que se propone⁴ es el de "forzar" al conjunto de operadores a satisfacer las condiciones de clausura del álgebra parcial de Lie. De esta forma se genera un conjunto de ecuaciones diferenciales, cuya solución proporciona una

descripción aproximada de la evolución temporal de los valores medios del conjunto de observables involucrado en la semiálgebra.

El formalismo general que desarrollaremos en este capítulo y en el siguiente posibilita la obtención de clausuras alternativas. En lo que sigue analizaremos el caso en que dicha clausura es lineal.

Para ello escribimos \hat{H} en la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \hat{H}_0 + \delta \hat{H}_1 \quad (\text{IV.2.2})$$

donde si δ resulta un número suficientemente pequeño comparado con la unidad (es decir, $\hat{V} \ll \hat{H}_0$) podremos aplicar un enfoque "perturbativo" en el sentido que detallaremos a continuación.

La idea consiste en cerrar la cadena de conmutadores, en alguna etapa del procedimiento, reemplazando el hamiltoniano completo por un hamiltoniano adecuado de p.i..

Más específicamente, después de conmutar con \hat{H} el conjunto de R_0 operadores originales aparecerán algunos operadores adicionales que incrementarán el conjunto inicial a R_1 , con $R_1 > R_0$. Repitiendo el proceso aparecerán nuevos operadores, de tal modo que el número total de ellos será ahora de R_2 , con $R_2 > R_1$. De esta manera se genera una secuencia de números crecientes R_0, R_1, R_2 , etc., que eventualmente finalizará en el número q (el cual, aunque bastante grande, siempre será finito si el número de partículas del sistema y la dimensión del espacio son finitos).

Nuestra propuesta, para tratar el problema en cuestión, consiste en que una vez alcanzada la n -ésima etapa (y obtenido de ese modo un número R_{n-1} de operadores, conmutar los $(R_n - R_{n-1})$ operadores adicionales (en ese paso) sóloamente con \hat{H}_0 , si esta operación cierra el álgebra de conmutadores.

Vale decir, despreciamos \hat{V} en ese paso, de manera que el esquema puede ser asimilado a un tratamiento perturbativo en el parámetro δ de (IV.2.2). Para ser un poco más explícitos la aproximación a orden cero implicaría considerar únicamente

$$[\hat{H}, \hat{O}_\alpha] = [\hat{H}_0, \hat{O}_\alpha] + \delta[\hat{H}_1, \hat{O}_\alpha] \quad (\text{IV.2.3})$$

donde $\alpha = 1, \dots, R_0$. Si el primer conmutador del lado derecho no produce nuevos operadores, despreciamos todos los "nuevos" que pueden aparecer de haber conmutado con \hat{H}_1 .

Para proseguir hasta primer orden es necesario tener que considerar:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, [\hat{H}, \hat{O}_\alpha]] &= [\hat{H}_0, [\hat{H}_0, \hat{O}_\alpha]] + \delta[\hat{H}_0, [\hat{H}_1, \hat{O}_\alpha]] \\ &\quad + \delta[\hat{H}_1, [\hat{H}_0, \hat{O}_\alpha]] + \delta^2[\hat{H}_1, [\hat{H}_1, \hat{O}_\alpha]] \end{aligned} \quad (\text{IV.2.4})$$

donde despreciaríamos la contribución δ^2 , para conseguir la clausura de la semiálgebra en esa etapa. Resulta obvio que el proceso puede ser desarrollado hasta cualquier orden deseado en δ .

De una forma más compacta podemos escribir,

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\alpha^{(j)} \rangle}{dt} = \langle [\hat{H}, \hat{O}_\alpha^{(j)}] \rangle, \quad (\text{IV.2.5a})$$

con $j = 1, \dots, M-1$, donde con el supraíndice j representamos el orden de la aproximación estamos considerando.

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\beta^{(M)} \rangle}{dt} = \langle [\hat{H}_0, \hat{O}_\beta^{(M)}] \rangle, \quad (\text{IV.2.5b})$$

Este procedimiento resulta equivalente a una expansión en serie de \hat{V} , (IV.2.2) es decir, despreciamos al evaluar la evolución temporal de $\langle \hat{O}_\alpha^{(1)} \rangle$ la M-ésima potencia del operador \hat{V} . De esta forma queda determinado un sistema de ecuaciones lineales acopladas que aproximará (hasta un orden m deseado, con $m = M-1$) la evolución temporal de los observables $\langle \hat{O}_\alpha^{(1)} \rangle$.

Es importante destacar que no necesariamente el conjunto inicial $\langle \hat{O}_\alpha \rangle$ debe involucrar exclusivamente operadores de un cuerpo, el esquema es general y por lo tanto permite que operadores de uno, dos, tres cuerpos, etc. estén incluidos en el conjunto de partida R_0 .

IV.3 El modelo.

El método desarrollado en este capítulo será ilustrado con referencia al modelo exactamente soluble de simetría $U(3)^5$, descrito en el punto (III.3), donde fue analizada en detalle la parte estática.

En esta sección, por lo tanto, nos ocuparemos de la evolución temporal exacta. Esta se obtiene diagonalizando \hat{H} en la base $|n_2, n_3\rangle$, donde la dimensión de la matriz es, como recordamos, de $(N+2)(N+1)/2$.

De este modo la función de onda (III.3.7) al tiempo t tiene la siguiente expresión :

$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle &= \exp(-i \hat{H}t) |\psi(0)\rangle \\
 &= \sum_{n_2, n_3} C_{n_2, n_3}(t) |n_2, n_3\rangle
 \end{aligned}
 \tag{IV.3.1}$$

con

$$C_{n_2, n_3}(t) = \sum_L \sum_{m_2, m_3} A_{n_2, n_3}^L A_{m_2, m_3}^{L*} \exp[(-i) E_L t] C_{m_2, m_3}(0) . \tag{IV.3.2}$$

La matriz A_{n_2, n_3}^L en (IV.3.2) conecta los autoestados $|L\rangle$ de \hat{H} ($1 \leq L \leq \binom{N+2}{2}$), con los estados base $|n_2, n_3\rangle$ de la representación $(N, 0, 0)$,

$$A_{n_2 n_3}^L = \langle n_2 n_3 | L \rangle , \quad (\text{IV.3.3})$$

donde E_L representa los autovalores correspondientes.

$$\hat{H}|L\rangle = E_L |L\rangle . \quad (\text{IV.3.4})$$

Los respectivos coeficientes $C_{n_2 n_3}(0)$ fueron definidos previamente en (III.3.7).

A partir de (III.3.10) podemos evaluar, mediante un sencillo cálculo los valores medios exactos al tiempo t de los generadores \hat{G}_{ij} obtendremos por ejemplo, las siguientes expresiones :

$$\langle \hat{G}_{ij} \rangle_t = \sum_{n_i, n_j} [n_j (n_i + 1)]^{1/2} C_{n_i+1, n_j-1, n_k}^*(t) C_{n_i n_j n_k}(t) , \quad i \neq j$$

$$\langle \hat{G}_{ii} \rangle_t = \sum_{n_2, n_3} n_i |C_{n_2 n_3}(t)|^2 , \quad (\text{IV.3.5})$$

IV.4 Aplicación del formalismo.

Para facilitar el empleo de las ecuaciones (IV.2.5a) y (IV.2.5b) dentro del presente contexto y a los efectos de simplificar la notación, definimos (sólo para los operadores de dos cuerpos en los cuales nos hallamos interesados) :

$$\hat{O}_{kij}^{(2)} = [\hat{G}_{ki}, \hat{G}_{kj}]_+ = \hat{O}_{kij}^{(2)}, \quad (\text{IV.4.1})$$

De esta manera, a partir de (IV.4.1) resulta posible escribir de una forma compacta la siguiente expresión :

$$\begin{aligned} -i \frac{d\langle \hat{G}_{ij} \rangle}{dt} &= (\varepsilon_i - \varepsilon_j) \langle \hat{G}_{ij} \rangle \\ &+ 1/2 \sum_k (V_{ki} \langle \hat{O}_{kij}^{(2)} \rangle - V_{jk} \langle \hat{O}_{kij}^{(2)} \rangle), \end{aligned} \quad (\text{IV.4.2})$$

y

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_{kij}^{(2)} \rangle}{dt} = (2\varepsilon_k - \varepsilon_i - \varepsilon_j) \langle \hat{O}_{kij}^{(2)} \rangle. \quad (\text{IV.4.3})$$

Dentro de este esquema perturbativo el conjunto de ecuaciones anterior representa la aproximación a primer orden ($M = 2$). En el capítulo siguiente analizaremos la expresión resultante a segundo orden. El sistema de ecuaciones representado por (IV.4.2) y por (IV.4.3) es lineal y puede ser resuelto trivialmente. De estas expresiones se desprende, que cuando t crece, el hecho de haber incorporado los observables resultantes en el paso $M=2$ contribuye

a mejorar la calidad de los resultados a pesar de que las correspondientes frecuencias sean independientes de la constante de acoplamiento.

En este capítulo, y a los efectos de clarificar el procedimiento, analizaremos los resultados para el caso en el que $V_{12} = V_{29} = 0$ y $V_{19} = V$, con lo cual nos reducimos al modelo de dos niveles que fuera empleado en el capítulo III, el caso general será considerado en el capítulo siguiente.

Dentro de ese contexto el hamiltoniano \hat{H} adquiere la forma :

$$\hat{H} = \varepsilon/2 \sum_{p,\sigma} \sigma c_{p\sigma}^+ c_{q\sigma} - v/2 \sum_{p,q,\sigma} c_{p\sigma}^+ c_{q\sigma}^+ c_{q-\sigma} c_{p-\sigma} \quad (\text{IV.4.4})$$

con $p,q = 1, \dots, 2\Omega$ y $\sigma = \pm 1$

Es posible identificar :

$$\begin{aligned} \hat{G}_{21} &= \hat{J}_+ = \hat{J}_-^+ \\ \hat{G}_{22} - \hat{G}_{11} &= 2\hat{J}_z \\ \hat{G}_{22} + \hat{G}_{11} &= \hat{N} \end{aligned} \quad (\text{IV.4.5})$$

donde

$$\hat{J}_z = 1/2 \sum_{p,\sigma} \sigma c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} \quad \text{y} \quad \hat{J}_+ = \hat{J}_-^+ = \sum_p c_{p0}^+ c_{p-0} \quad (\text{IV.4.6})$$

De este modo \hat{H} se puede escribir como en (III.4.11), o de una forma equivalente⁶:

$$\hat{H} = \epsilon \hat{J}_z - v/2 (\hat{J}_+^2 + \hat{J}_-^2) = \epsilon \hat{J}_z - v (\hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2) . \quad (\text{IV.4.7})$$

Para aplicar el formalismo de la sección anterior elegiremos \hat{H}_0 , nuestro hamiltoniano de p.i, como \hat{J}_z , y $\hat{V} = v (\hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2)$.

Como estamos interesados en comparar la presente aproximación con la de HFDT^{7,8}, asumiremos que el estado inicial del sistema sea un determinante de Slater,

$$|\psi(t=0)\rangle = \prod_{p=1}^N a_{p-}^+ |0\rangle \quad (\text{IV.4.8})$$

donde $|0\rangle$ representa el vacío y

$$a_{p+}^+ = \cos\alpha c_{p+}^+ + \exp(i\psi) \text{sen}\alpha c_{p-}^+ \quad (\text{IV.4.9})$$

$$a_{p-}^+ = -\exp(-i\psi) \text{sen}\alpha c_{p+}^+ + \cos\alpha c_{p-}^+$$

De este modo sólo dos parámetros α y ψ son suficientes para determinar el estado del sistema a $t = 0$. La forma en la cual estos parámetros se vinculan con los x_i descriptos previamente, (III.3.1) viene dada por :

$$x_1 = \cos\alpha \quad \text{y} \quad x_2 = \text{sen}\alpha \exp(-i\psi) \quad (\text{IV.4.10})$$

Por medio del teorema de Wick (ver apéndice) podemos reconstruir el valor de expectación de cualquier operador de n cuerpos que aparezca en el conjunto de condiciones iniciales, a partir del conocimiento de los valores medios de los operadores de un cuerpo, dados por (IV.3.5).

Al aplicar el esquema descrito a primer orden en \hat{V} , para obtener la evolución temporal de $\langle \hat{J}_x \rangle$, $\langle \hat{J}_y \rangle$ y $\langle \hat{J}_z \rangle$, a partir de (IV.4.2) y (IV.4.3) quedará determinado un sistema de siete ecuaciones diferenciales lineales acopladas, las cuales escribimos a continuación:

$$\frac{d\langle \hat{J}_x \rangle}{dt} = -\epsilon \langle \hat{J}_y \rangle + V \langle \hat{J}_y \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_y \rangle$$

$$\frac{d\langle \hat{J}_y \rangle}{dt} = \epsilon \langle \hat{J}_x \rangle + V \langle \hat{J}_x \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_x \rangle$$

$$\frac{d\langle \hat{J}_z \rangle}{dt} = -2V \langle \hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x \rangle$$

$$\frac{d\langle \hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2 \rangle}{dt} = -2\epsilon \langle \hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x \rangle \quad (\text{IV.4.11})$$

$$\frac{d\langle \hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x \rangle}{dt} = 2\epsilon \langle \hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2 \rangle$$

$$\frac{d\langle \hat{J}_x \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_x \rangle}{dt} = \epsilon \langle \hat{J}_y \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_y \rangle$$

$$\frac{d\langle \hat{J}_x \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_x \rangle}{dt} = -\epsilon \langle \hat{J}_y \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_y \rangle$$

$$\frac{d\langle \hat{J}_y \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_y \rangle}{dt} = \epsilon \langle \hat{J}_x \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_x \rangle$$

Este sistema puede ser resuelto fácilmente obteniéndose, por ejemplo, para $\langle \hat{J}_z \rangle$ una solución del tipo:

$$\langle \hat{J}_z \rangle_t = \langle \hat{J}_z \rangle_0 + v/\epsilon \{ \langle \hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2 \rangle_0 (\cos 2\epsilon t - 1) - \langle \hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x \rangle_0 \sin 2\epsilon t \} , \quad (\text{IV.4.12})$$

que conecta los valores medios a $t = 0$, con aquellos al tiempo t . Expresiones similares se obtienen para los restantes valores de expectación de los operadores involucrados en el álgebra. .

Cuando la expansión se desarrolla a un orden más, vale decir a segundo orden en \hat{V} , el conjunto de ecuaciones lineales acopladas a resolver se extiende a diecisiete, y la expresión para la evolución temporal de $\langle \hat{J}_z \rangle$, obtenida a partir de la solución del mismo es de la forma :

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}_z \rangle = & \langle \hat{J}_z \rangle_0 + v/\epsilon \{ [\langle \hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2 \rangle_0 + v/2\epsilon (\langle \hat{J}_x^2 \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_x^2 \rangle_0 \\ & + 2 \langle \hat{J}_x \hat{J}_z \hat{J}_x + \hat{J}_y \hat{J}_z \hat{J}_y \rangle)] \cos(2\epsilon t - 1) - \langle \hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x \rangle_0 \sin 2\epsilon t \} \end{aligned} \quad (\text{IV.4.13})$$

Resulta de gran interés comparar (IV.3.11) con el sistema correspondiente proporcionado por el método de HFDT. La evolución temporal de $\langle \hat{J}_x \rangle$, $\langle \hat{J}_y \rangle$ y $\langle \hat{J}_z \rangle$ tiene la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{J}_x \rangle}{dt} &= -\epsilon \langle \hat{J}_y \rangle + \frac{2V(N-1)}{N} \langle \hat{J}_y \rangle \langle \hat{J}_z \rangle \\ \frac{d\langle \hat{J}_y \rangle}{dt} &= \epsilon \langle \hat{J}_x \rangle + \frac{V(N-1)}{N} \langle \hat{J}_x \rangle \langle \hat{J}_z \rangle \end{aligned} \quad (\text{IV.4.14})$$

$$\frac{d\langle \hat{J}_z \rangle}{dt} = -4V \frac{(N-1)}{N} \langle \hat{J}_x \rangle \langle \hat{J}_y \rangle$$

Vemos que (IV.4.14) constituye un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales y que por ende, debe ser resuelto recurriendo a algún método numérico.

Un aspecto de gran interés es que la calidad de las soluciones proporcionadas por este sistema depende fuertemente de las condiciones iniciales. En relación con ese hecho, una situación especial ocurre cuando el determinante de Slater inicial coincide con el estado estático de Hartree-Fock. Esto sucede cuando los parámetros iniciales α y ψ son elegidos de tal modo que verifican las siguientes condiciones:

$$\cos\alpha = 1 ; \quad \text{sen}\psi = 0 ; \quad V < \frac{\epsilon}{(N-1)} \equiv V_c \quad (\text{IV.4.15})$$

y para

$$\cos\alpha = \frac{\epsilon}{(N-1)} , \quad \text{sen}\psi = 0 ; \quad V > V_c \quad (\text{IV.4.16})$$

En este caso particular las soluciones de Hartree-Fock exhiben un carácter estacionario que la solución exacta no posee. En consecuencia, para este conjunto especial de condiciones iniciales, el método de HFDT no suministra ninguna información sobre la evolución temporal del sistema. El formalismo analizado en este capítulo, por el contrario, no está sujeto a esta limitación, (aunque es necesario desarrollar la aproximación hasta segundo orden en V) siendo al menos en ese sentido, claramente superior al método de HFDT.

IV.5 Resultados.

En este punto presentaremos algunos resultados típicos, relacionados con la reducción al caso $U(2)$ del modelo descripto, que servirán para ilustrar las posibilidades y alcances del formalismo que hemos presentado. En el próximo capítulo se analizarán y compararán los resultados obtenidos con los proporcionados por otras aproximaciones dentro del contexto del modelo de simetría $U(3)$.

En los gráficos que presentamos en esta sección serán comparadas tres tipos de curvas, es decir, las correspondientes a la solución exacta, las proporcionadas por el método de HFDT y las obtenidas mediante el formalismo desarrollado en la sección 2. Por razones de claridad nos hemos limitado al caso en el que $\varepsilon = 1$ y el número de partículas $N = 8$ (por lo tanto $V_c = 0.1429$). Las condiciones iniciales, es decir los valores de α y ψ , son arbitrarias, salvo para el caso particular en el cual α y ψ adoptan los valores especiales dados por (IV.4.15) o (IV.4.16).

En la figura 1 hemos graficado la evolución temporal de $\langle \hat{J}_z \rangle$ y de $\langle \hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x \rangle$. En este caso fueron elegidos valores pequeños de la constante de acoplamiento ($V = 0.28V_c$), y tal como cabría esperar del enfoque perturbativo de nuestra aproximación, los resultados están en un acuerdo excelente con los exactos.

Resulta conveniente destacar que dentro del presente contexto los operadores de uno y dos cuerpos y en general los de n cuerpos son tratados dentro del mismo rango de la aproximación. Contrariamente el método de HFDT no proporciona directamente la

evolución temporal de los valores medios de operadores de dos, tres cuerpos etc., sino que es necesario recurrir al teorema de Wick para evaluarlos.

En la figura 2, para los mismos valores de V y N que en el caso anterior, hemos elegido aquellas condiciones iniciales $\alpha = 0$ y $\psi = 0$, que conducen a soluciones estacionarias del método de HFDT.

Como se puede apreciar nuestros resultados no son demasiado sensibles al tipo de condiciones iniciales empleado, de esta forma es posible obtener, también en esta circunstancia, un buen acuerdo con la evolución exacta.

En la figura 3 hemos elegido un valor más grande para la constante de acoplamiento, en este caso era de esperar que el esquema propuesto comenzara a fallar. Sin embargo, se obtuvo un acuerdo aceptable con los resultados exactos, para un intervalo de tiempo razonablemente largo, aún cuando $V > V_c$. Debe destacarse que la evolución exacta exhibe un comportamiento complejo o cuasi-periódico circunstancia que ocasiona que la evolución predicha por nuestro esquema vuelva a aproximar la evolución exacta en algunos intervalos de tiempo, aún con $t \gg 0$.

La figura 4 exhibe la evolución temporal de la cantidad $\Delta = \rho^2 - \rho$, donde ρ representa la matriz densidad de un cuerpo. Este es otro resultado de gran interés, teniendo en cuenta que esta diferencia debe anularse cuando un único determinante de Slater sea apto para representar el estado de nuestro sistema. De este modo, la cantidad Δ siempre es igual a cero para el caso de HFDT reflejando este hecho el carácter idempotente de la matriz densidad, obtenida a partir de esta aproximación. Por el contrario, la evolución temporal de esta cantidad proporcionada

por nuestro método, posee un buen acuerdo con la exacta, al menos para las primeras oscilaciones, reflejando este hecho que las correlaciones son tomadas en cuenta.

En esta sección hemos incluido una tabla que tiene como propósito ilustrar sobre los resultados que se obtienen al desarrollar nuestra aproximación a primer o a segundo orden.

Luego, para un dado operador \hat{O} , definimos la cantidad

$$D(\hat{O}) = \left| \frac{\langle \hat{O} \rangle_t (\text{exac.}) - \langle \hat{O} \rangle_t (\text{aprox.})}{\langle \hat{O} \rangle_t (\text{exac.})} \right| \times 10^4. \quad (\text{IV.5.1})$$

Obviamente como se puede apreciar en la tabla, los resultados a segundo orden son superiores a los obtenidos considerando únicamente el primer orden de la aproximación. Esto permite abrigar la esperanza de un mejor acuerdo con la evolución exacta a medida que se prosiga a órdenes más altos.

En este punto es conveniente hacer una breve aclaración en relación con la escala temporal de las figuras. Si consideramos que $\epsilon = 0.5$ Mev, en (IV.4.7), nuestra 'unidad de tiempo característica' resulta ser del orden de 10^{-21} segundos. Teniendo en cuenta que las dimensiones nucleares son del orden de unos pocos Fermis y la velocidad nuclear en la superficie de Fermi es del orden de 30% de la velocidad de la luz, esta cantidad es diez veces la escala temporal primaria de la física nuclear (el tiempo que tarda un nucleón en atravesar el núcleo). Consecuentemente, podemos decir que nuestra aproximación resulta adecuada en los intervalos temporales relevantes para la descripción de procesos nucleares.

IV.6 Conclusiones.

En esta sección analizaremos algunos aspectos del formalismo que hemos desarrollado y que creemos merecen especial atención.

Como se desprende de una cuidadosa lectura del punto IV.2, este método proporciona un esquema general para extraer el sistema de ecuaciones que describe la evolución temporal aproximada del conjunto de observables relevantes.

Hemos visto que la calidad de los resultados obtenidos no es particularmente sensible a las condiciones iniciales, contrariamente a lo que sucede con el método de HFDT, el cual como ya fue analizado, en circunstancias especiales no aporta evolución alguna.

Un aspecto de real interés lo constituye el hecho de que la descripción que este formalismo proporciona no está restringida a un único determinante de Slater, y en ese sentido es claramente superior a la aproximación de campo medio.

Como recordamos este último esquema conduce a un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales. El formalismo desarrollado ofrece en cambio, la posibilidad de obtener a partir de un enfoque perturbativo, un sistema de ecuaciones diferenciales lineales que simplifican notablemente el problema en cuestión.

Es necesario tener en cuenta, además, que (a pesar de que involucraría un trabajo analítico sumamente tedioso) este esquema ofrece (en principio) la oportunidad de mejorar indefinidamente los resultados obtenidos desarrollando la aproximación a órdenes más altos.

Sin embargo, no esperamos que esta aproximación sea demasiado buena en el caso en que se consideren grandes constantes de acoplamiento, aunque una elección cuidadosa en la descomposición de $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ puede mejorar la situación.

Resumiendo, creemos que a pesar de las limitaciones descritas, este formalismo ofrece una alternativa seria a los tratamientos tipo HFDT, ampliamente utilizados en el marco de la física nuclear.

Referencias:

1. P. Ring and P. Shuck, 'The Nuclear Many-Body Problem'.
(Springer, Berlin, 1980).
2. A. de Shalit, H. Feshbach, 'Theoretical Nuclear Physics'
(Wiley, N.Y., 1974).
3. Y. Alhassid and R. D. Levine, Phys. Rev. A18, 1, 89 (1978).
4. N. Canosa, A. López, D. Otero, A. Plastino, and A.N. Proto, Z.
Phys. A326, 195 (1987).
5. N. Meshkov, Phys. Rev. C3, 2214, (1971).
6. H.J. Lipkin, N. Meshkov, and A.J. Glick, Nucl. Phys. 62, 188
(1965); D. Agassi, H.J. Lipkin, and N. Meshkov, Nucl. Phys.
86, 321 (1966).
7. S.J. Krieger, Nucl. Phys. A276, 12 (1977).
8. K.K. Kan, P.C. Lichtner, M. Dworzecka, and J.J. Griffin, Phys.
Rev. C21, 1098 (1980).

Tabla I

t	$D(\hat{O}) = \left \frac{\langle \hat{O} \rangle_t (\text{exac.}) - \langle \hat{O} \rangle_t (\text{aprox.})}{\langle \hat{O} \rangle_t (\text{exac.})} \right \times 10^4.$					
	\hat{J}_x			\hat{J}_y		
	HFDT	MA ₁	MA ₂	HFDT	MA ₁	MA ₂
0.5	21	35	2	47.9	73.9	0.5
1.0	84	136	9	145.1	233.5	3.4
1.5	209	355	7	195.5	328.4	6.5
2.0	531	906	24	154.5	266.8	5.7
2.5	4,745	7,408	398	72.1	110.4	0.3
3.0	969	1,263	82	27.5	1.5	7.7
3.5	389	353	37	57.8	29.8	9.1
4.0	109	90	29	131.0	185.1	0.3
4.5	174	558	19	171.9	322.7	6.1
5.0	650	1,349	23	140.5	308.9	16.0
6.0	3,695	5,223	415	43.9	14.3	9.8
8.0	584	1,494	42	125.8	339.2	24.9
10.0	988	759	286	151.8	71.4	23.0
12.0	7,794	12,885	831	24.0	95.5	6.5

Método aproximado a primer orden (MA₁), y a segundo orden (MA₂), confrontado con los resultados dados por TDHF (segunda y quinta columna) para distintos valores de t (primer columna).

FIGURAS

Figura 1a: Evolución temporal de $\langle \hat{O}_y \rangle = \langle \hat{J}_z \rangle$ para $N = 8$, y las condiciones iniciales $\alpha = 1841$ y $\psi = 0.8365$. La constante de acoplamiento es $V = -0.28 V_c$. Resultados exactos : ——— ; resultados de HFDT : ; resultados del método perturbativo a segundo orden : ----- . La escala temporal de todas las figuras está dada en unidades de \hbar/ε (para más detalles consultar el texto).

Figura 1b: Evolución temporal del operador de dos cuerpos $\langle \hat{O}_s \rangle = \langle \hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x \rangle$. Los detalles son similares a los de la figura 1a.

Figura 2: Evolución temporal de $\langle \hat{O}_y \rangle = \langle \hat{J}_z \rangle$. Los detalles son similares a los de la figura 1a, excepto por el hecho de que la condiciones iniciales $\alpha = 0$ y $\psi = 0$ son las que conducen a condiciones estacionarias para HFDT (en este caso dicho esquema no predice ninguna evolución temporal).

Figura 3a: Evolución temporal de $\langle \hat{O}_y \rangle = \langle \hat{J}_z \rangle$. Los detalles son similares a los de la figura 1a, excepto por el hecho de la constante de acoplamiento es $V = -0.7 V_c$ y $N = 8$.

Figura 3b: Evolución temporal de $\langle \hat{O}_y \rangle = \langle \hat{J}_z \rangle$, para $N = 8$, y las condiciones iniciales $\alpha = 0.1549$ y $\psi = 0$ para las cuales HFDT posee soluciones estacionarias. La constante de acoplamiento es $V = -1.05 V_c$.

Figura 4: Evolución temporal de la cantidad $\Delta = \rho^2 - \rho$ (el elemento diagonal). Los detalles son similares a los de la figura 1a.

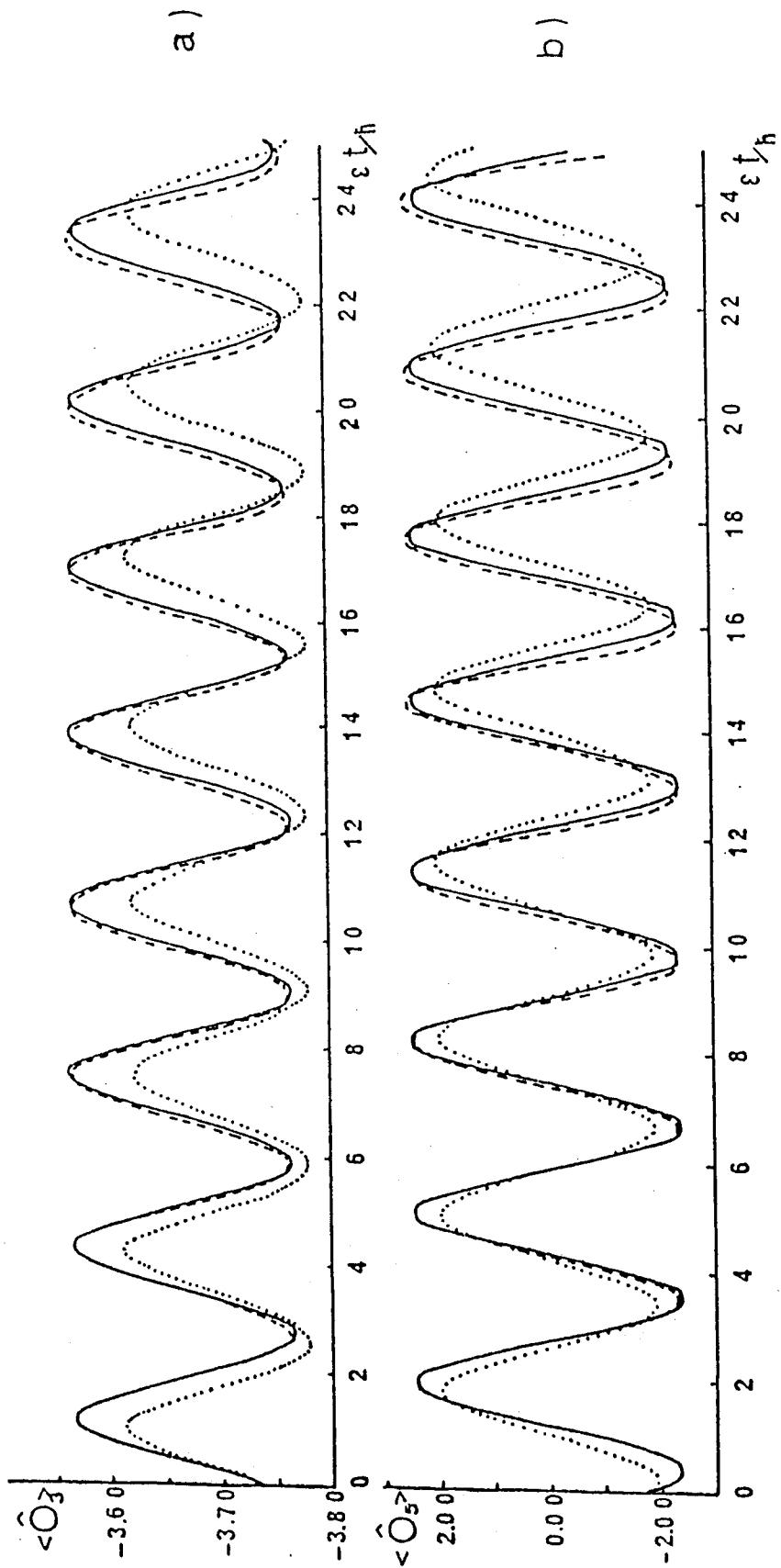


Fig.1

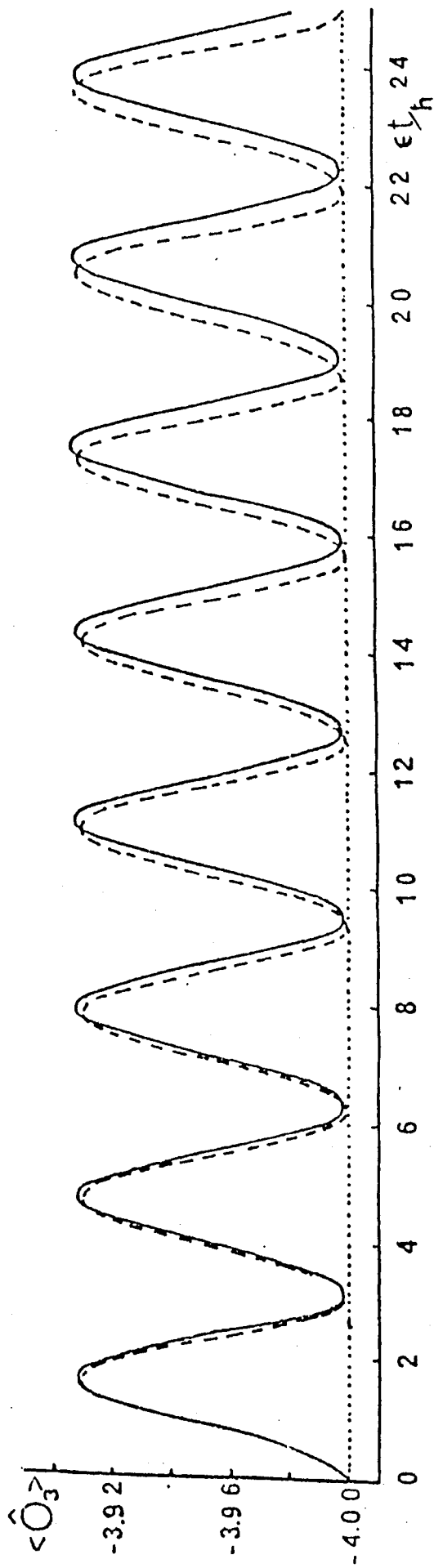


Fig. 2

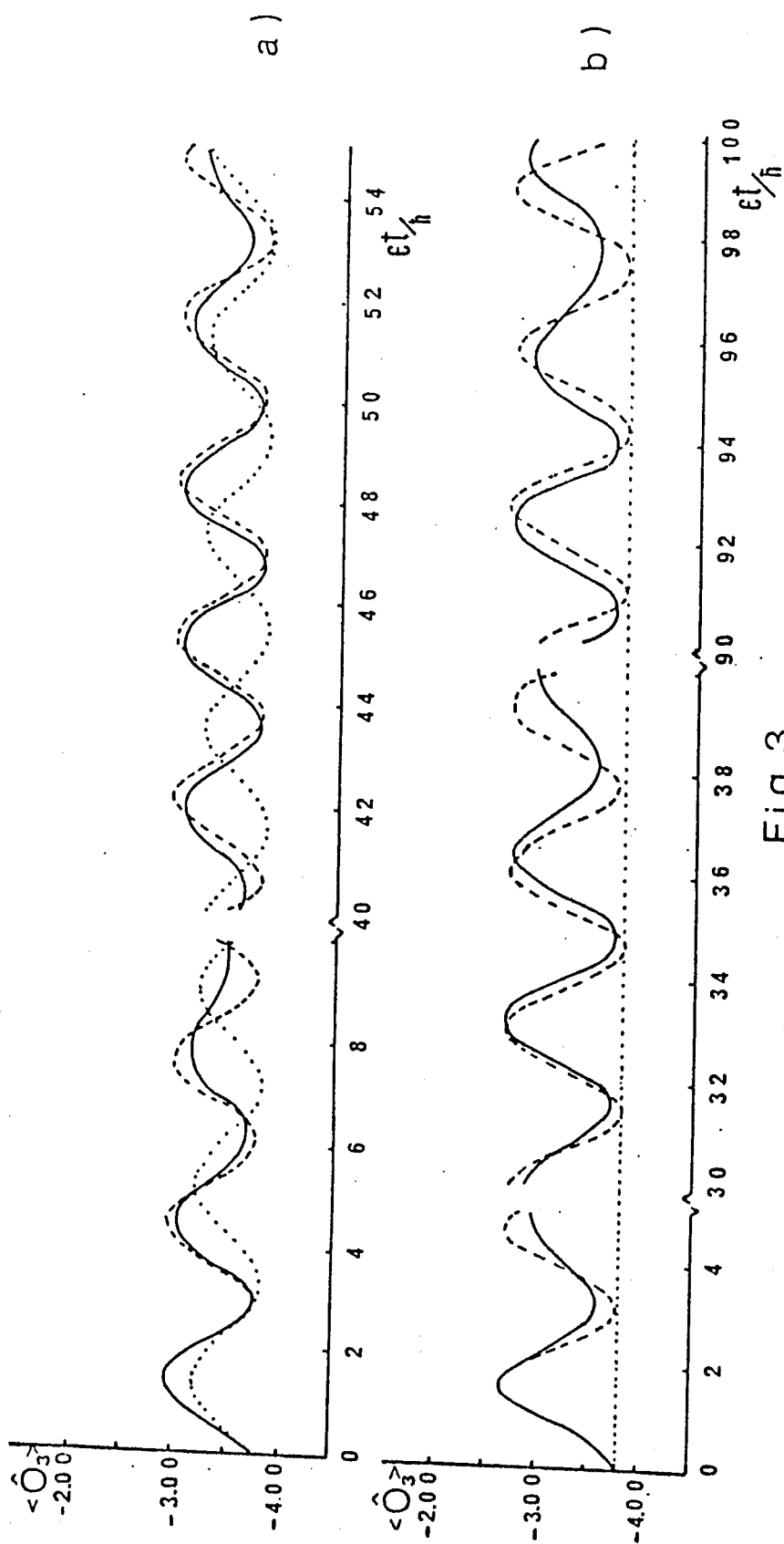


Fig.3

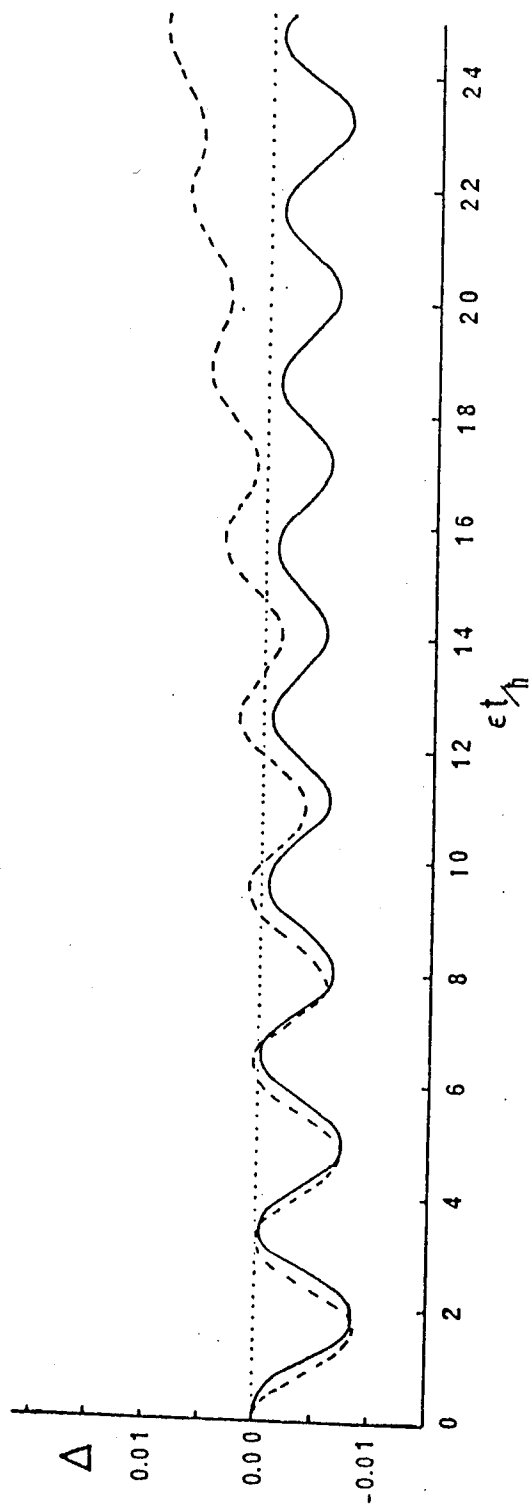


Fig.4

CAPITULO V.

CLAUSURA NO LINEAL.

Introducción.

El formalismo general introducido en el capítulo anterior brinda la posibilidad de obtener, a través de clausuras alternativas del álgebra parcial de Lie bajo conmutación con el hamiltoniano del sistema, distintas aproximaciones que permiten inferir estadísticamente la evolución dinámica del sistema.

En el capítulo previo, fueron analizadas en detalle las soluciones obtenidas para el caso de una clausura lineal. En este capítulo aplicaremos el presente formalismo dentro del marco de la teoría de campo medio para obtener una extensión del método de Hartree-Fock dependiente del tiempo. De la implementación del esquema y como consecuencia de una clausura no lineal, surge una aproximación de orden superior a la discutida anteriormente.

Sabemos que el método de HFDT ofrece una descripción adecuada de la dinámica nuclear a bajas energías¹⁻³. Sin embargo, no es capaz de reproducir eficazmente dentro de ese rango los datos experimentales relacionados, por ejemplo, con la dispersión de los operadores de un cuerpo, que es sensible a las correlaciones de dos cuerpos. Analizaremos éste y otros aspectos críticos que la descripción proporcionada por este método presenta⁴⁻⁶, con el objetivo de extender de una forma simple y tratable su rango de aplicabilidad.

Veremos como dentro del contexto original que estamos analizando, el tratamiento de campo medio puede ser considerado como una aproximación de primer orden.

En especial, estudiaremos en profundidad las aproximaciones de mayor orden generadas por la clausura no lineal, y que en el marco de este formalismo surgen de una manera natural. El procedimiento brinda una forma sistemática de introducir correcciones de orden arbitrario con respecto al esquema de partícula independiente, resultando en consecuencia claramente superior a HFDT.

V.1 Descripción aproximada de la evolución dinámica.

Tratamiento de campo medio.

La idea básica, del formalismo general introducido en el capítulo previo, consiste en 'forzar' al conjunto de operadores involucrados a satisfacer las condiciones de clausura de la semiálgebra bajo conmutación con el hamiltoniano (ver (IV.2.5a) y (IV.2.5b)).

Como ya mencionamos, cuando se estudian sistemas de muchos cuerpos, en la mayoría de las circunstancias, la clausura del álgebra parcial de Lie, no se puede concretar (en principio, esta clausura es prácticamente posible, en general, sólo en aquellas situaciones en las cuales el hamiltoniano es de p.i.).

Sin embargo, siempre es posible obtener una descripción aproximada autoconsistente de la evolución temporal, si restringimos el estado del sistema a ser de una forma prescripta dada en todo instante de tiempo. En ese caso la clausura de la semiálgebra será no lineal y producirá en consecuencia un sistema de ecuaciones acopladas no lineales.

El método de HFDT puede ser enfocado siguiendo esta línea de razonamiento y nos ocuparemos de él a lo largo de este capítulo.

Sabemos que en el contexto de este esquema, que es exacto en el límite clásico y extremaliza la acción cuántica⁷, el estado del sistema está restringido en todo instante de tiempo a un determinante de Slater (caso puro), o a un operador estadístico de p.i.. Los valores de expectación de aquellos operadores que no pertenecen a la semiálgebra, son evaluados recurriendo al teorema de Wick (ver apéndice). La evolución temporal de los operadores de

p.i. $\hat{O}_\alpha^{(1)}$ esta dada por:

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\alpha^{(1)} \rangle}{dt} = \langle [\hat{H}, \hat{O}_\alpha^{(1)}] \rangle_{HF} = \langle [\hat{h}, \hat{O}_\alpha^{(1)}] \rangle, \quad (V.1.1)$$

donde el subíndice HF indica que estamos evaluando los valores de expectación en forma autoconsistente, por medio del teorema de Wick, respecto de un estado representado por un operador estadístico de p.i..

En (V.1.1), \hat{h} representa el hamiltoniano de campo medio,

$$\hat{h} = \sum_{\alpha} (\partial \langle \hat{H} \rangle_{HF} / \partial \langle \hat{O}_\alpha^{(1)} \rangle) \hat{O}_\alpha^{(1)} \quad (V.1.2)$$

Dentro del presente contexto la aproximación de HFDT puede ser caracterizada en dos pasos. Para ello, escribimos \hat{H} en la forma (IV.2.2), es decir:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (V.1.3)$$

donde, como ya habíamos visto, la manera más adecuada de hacer esta elección es aquella donde \hat{H}_0 es la parte de p.i. y \hat{V} es (en la mayor parte de los casos) la interacción de dos cuerpos.

Teniendo en cuenta el formalismo explicitado en el capítulo anterior y (V.1.1), el procedimiento implica:

i) Cerrar una semiálgebra con \hat{H}_0 , y ii) incluir en ella además todos los operadores de un cuerpo que aparezcan en la evaluación del valor medio $\langle [\hat{V}, \hat{O}_\alpha^{(1)}] \rangle_{HF}$, recurriendo al teorema de Wick.

El tratamiento de campo medio produce al tiempo $t = 0$ (inicial), la derivada temporal correcta de primer orden de los

$$\langle \hat{O}_\alpha^{(1)} \rangle.$$

Sin embargo, dentro de esta aproximación, el teorema de Ehrenfest no vale en general para los operadores de dos cuerpos $\langle \hat{O}_\alpha^{(2)} \rangle$ (y para los operadores de n cuerpos $\langle \hat{O}_\alpha^{(n)} \rangle$), es decir

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\alpha^{(n)} \rangle_{\text{HF}}}{dt} \neq \langle [\hat{H}, \hat{O}_\alpha^{(n)}] \rangle_{\text{HF}} \quad (\text{V.1.4})$$

y en consecuencia la derivada temporal de primer orden de los $\hat{O}_\alpha^{(n)}$ a $t = 0$, no es correcta.

En el capítulo siguiente mostraremos, que dentro del marco del presente formalismo, es posible obtener las derivadas temporales correctas a $t = 0$ para los operadores de n cuerpos.

V.2 Descripción aproximada de la evolución dinámica.

Clausura no lineal.

Introduciremos a continuación la idea central y original en que se basa este capítulo⁸, y que tiene como objetivo lograr una aproximación de orden superior a la obtenida mediante el esquema perturbativo desarrollado anteriormente.

Con ese propósito, enfocaremos nuestra atención en la aproximación de campo medio desde la óptica particular del formalismo presentado en la sección (IV.2), e intentaremos extender su rango de aplicabilidad forzando a los valores de expectación $\langle \hat{O}_\alpha^{(n)} \rangle$ con $1 \leq n \leq M$, a satisfacer el teorema de Ehrenfest. Para ello deberemos tener en cuenta i) y ii) con $n = M$. De esta forma estaremos realizando una clausura no lineal de la semiálgebra, en la cual los operadores relevantes de n cuerpos que surgen de la correspondiente conmutación con \hat{V} estarán incluidos.

En forma compacta estas ideas pueden ser expresadas como sigue

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\alpha^{(j)} \rangle}{dt} = \langle [\hat{H}, \hat{O}_\alpha^{(j)}] \rangle, \quad j=1, \dots, M-1 \quad (\text{V.2.1a})$$

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\beta^{(M)} \rangle}{dt} = \langle [\hat{H}_0, \hat{O}_\beta^{(M)}] \rangle + \langle [\hat{V}, \hat{O}_\beta^{(M)}] \rangle_{\text{HF}}. \quad (\text{V.2.1b})$$

Tomando como punto de partida los observables de interés, la semiálgebra con \hat{H} se cierra exactamente hasta los operadores de $M-1$ cuerpos, y en ese paso nos valemos de las prescripciones i) y ii) para obtener una clausura aproximada. De esta manera, estamos teniendo en cuenta las correlaciones de orden $M-1$ inclusive.

Es importante destacar, además, que con este formalismo también se obtiene la derivada temporal correcta de orden $M-n+1$ a $t = 0$, para los operadores de n cuerpos. Es decir, que para $\langle \hat{O}_\alpha^{(1)} \rangle$ obtenemos la derivada temporal correcta de orden M a $t = 0$.

Dentro de este esquema, si consideramos la aproximación a primer orden ($M = 1$), recuperamos las ecuaciones de HFDT.

De particular interés es el caso $M = 2$, al cual nos referiremos en especial. Las ecuaciones resultantes son :

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\alpha^{(1)} \rangle}{dt} = \langle [\hat{H}, \hat{O}_\alpha^{(1)}] \rangle, \quad (V.2.2a)$$

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\beta^{(2)} \rangle}{dt} = \langle [\hat{H}_0, \hat{O}_\beta^{(2)}] \rangle + \langle [\hat{V}, \hat{O}_\beta^{(2)}] \rangle_{HF}, \quad (V.2.2b)$$

donde los $\langle \hat{O}_\beta^{(2)} \rangle$ pertenecen al conjunto $\{ [\hat{V}, \hat{O}_\alpha^{(1)}] \}$. Notemos que el teorema de Wick es empleado únicamente en el segundo término del lado derecho de (V.2.2b). En consecuencia, la evolución temporal no perturbada de los operadores de dos cuerpos no es afectada. Más explícitamente, si

$$\hat{H}_0 = \sum_i \epsilon_i c_i^+ c_i \quad (V.2.3)$$

y

$$\hat{O}_\beta^{(2)} = \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4} \sum_{j_1 j_2 j_3 j_4} c_{i_1}^+ c_{i_2}^+ c_{j_1} c_{j_2} c_{i_3} c_{i_4}, \quad (V.2.4)$$

se obtiene

$$[\hat{H}_0, \hat{O}_\beta^{(2)}] = w_\beta \hat{O}_\beta^{(2)} \quad (\text{V.2.5})$$

y

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{O}_\beta^{(2)} \rangle = \langle [\hat{V}, \hat{O}_\beta^{(2)}] \rangle_{\text{HF}}, \quad (\text{V.2.6})$$

donde

$$w_\beta = \epsilon_{i_1} + \epsilon_{i_2} + (\epsilon_{i_3} + \epsilon_{i_4})$$

y (V.2.7)

$$\hat{O}_\beta^{(2)} = \exp[(-i)w_\beta t] \hat{O}_\beta^{(2)}.$$

De este modo el teorema de Wick es aplicado sólo en la evaluación de la evolución temporal perturbada. El carácter no lineal de la clausura es una consecuencia del término $\langle [\hat{V}, \hat{O}_\beta^{(2)}] \rangle_{\text{HF}}$.

El hamiltoniano de p.i. no perturbado más adecuado (a ser empleado en (V.1.3)) es el hamiltoniano de campo medio estático obtenido a través de (V.1.2), utilizando los valores medios estacionarios $\langle \hat{O}_\alpha^{(1)} \rangle$. De esta forma \hat{V} resulta ser la interacción residual estática sin contribuciones de un cuerpo.

La evolución de HFDT lleva a nuestro sistema a lo largo de trayectorias que yacen sobre superficies de energía constante de Hartree-Fock, $(\langle \hat{H} \rangle_{\text{HF}})$ y de números de ocupación constantes. La aproximación que desarrollamos aquí, por el contrario, produce trayectorias de p.i. que como en el caso exacto, no poseen esta limitación.

Resulta claro además, que nuestro esquema no está restringido por la necesidad de ser un determinante de Slater, o sea un estado puro a $t = 0$. En consecuencia puede ser empleada sin modificaciones en el caso en cual el sistema se encuentra descrito inicialmente por un estado mezcla de p.i..

V.3 Clausuras alternativas.

La aproximación que estamos tratando en este capítulo, surge como consecuencia de una clausura no lineal, que como vimos, es realizada en una forma muy particular.

Otra posibilidad, que ya fue analizada en detalle en el capítulo anterior, consiste en reemplazar el hamiltoniano completo por un hamiltoniano adecuado de p.i. en algún paso dado de la aproximación^o, y esto es equivalente a trabajar con una expansión en serie de \hat{V} .

Por comodidad, escribiremos las ecuaciones (IV.2.5a) y (IV.2.5b) nuevamente,

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\alpha^{(j)} \rangle}{dt} = \langle [\hat{H}, \hat{O}_\alpha^{(j)}] \rangle, \quad j=1, \dots, M-1 \quad (\text{V.3.1a})$$

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\beta^{(M)} \rangle}{dt} = \langle [\hat{H}_0, \hat{O}_\beta^{(M)}] \rangle. \quad (\text{V.3.1b})$$

Existe aún otra forma alternativa de realizar la clausura, consistente en reemplazar el hamiltoniano \hat{H}_0 por el hamiltoniano dinámico de campo medio \hat{h} , en el lado derecho de (V.3.1b). Este procedimiento es equivalente a realizar una expansión en serie de la interacción residual $\hat{V}_{res} = \hat{H} - \hat{h}$, resultando nuevamente un problema no lineal.

Analizando la aproximación para $M = 2$, es posible demostrar que en este caso, si no hay correlaciones presentes en el estado inicial, la situación es aún equivalente a la aproximación de

HFDT. Esta propiedad, que en última instancia está vinculada al carácter estacionario de las trayectorias en ese método, puede obtenerse escribiendo los valores de expectación de los operadores de dos cuerpos en la forma

$$\langle \hat{O}_\beta^{(2)} \rangle = \langle \hat{O}_\beta^{(2)} \rangle_{\text{HF}} + \langle \hat{O}_\beta^{(2)} \rangle_c, \quad (\text{V.3.2})$$

donde el subíndice c denota la correlación. La evolución temporal del primer término del lado derecho, puede expresarse como

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\beta^{(2)} \rangle_{\text{HF}}}{dt} = \langle [\hat{h}, \hat{O}_\beta^{(2)}] \rangle_{\text{HF}} + \Delta_\beta, \quad (\text{V.3.3})$$

donde

$$\Delta_\beta = \sum_\alpha \langle [\hat{H}, \hat{O}_\alpha^{(1)}] \rangle_c \frac{\partial \langle \hat{O}_\beta^{(2)} \rangle_{\text{HF}}}{\partial \langle \hat{O}_\alpha^{(1)} \rangle}, \quad (\text{V.3.4})$$

Si en (V.3.1b) reemplazamos \hat{H}_0 por \hat{h} , resulta

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_\beta^{(2)} \rangle_c}{dt} = \langle [\hat{h}, \hat{O}_\beta^{(2)}] \rangle_c - \Delta_\beta, \quad (\text{V.3.5})$$

de modo que si no hay correlaciones presentes en $t = 0$, éstas se anulan para todo tiempo t .

La idea de reemplazar \hat{H}_0 por \hat{h} , puede ser de utilidad en aquellas situaciones en las cuales las correlaciones están presentes a $t = 0$, y por lo tanto, en esos casos no es posible recurrir al método de HFDT.

Para concluir esta sección, podemos mencionar que si en (V.2.2b) reemplazamos \hat{H}_0 por \hat{h} , se obtiene la siguiente relación

$$\begin{aligned}
-i \frac{d}{dt} \langle \hat{O}_\beta^{(2)} \rangle_c &= \langle [\hat{h}, \hat{O}_\beta^{(2)}] \rangle_c - \Delta_\beta \\
&+ \langle [\hat{V}_{res}, \hat{O}_\beta^{(2)}] \rangle_{HF}, \tag{V.3.6}
\end{aligned}$$

la cual puede compararse con la expresión obtenida empleando el tratamiento de la sección anterior, es decir,

$$\begin{aligned}
-i \frac{d}{dt} \langle \hat{O}_\beta^{(2)} \rangle_c &= \langle [\hat{H}_0, \hat{O}_\beta^{(2)}] \rangle_c - \Delta_\beta \\
&+ \langle [\hat{H}_0 - \hat{h}, \hat{O}_\beta^{(2)}] \rangle_{HF} \\
&+ \langle [\hat{V}, \hat{O}_\beta^{(2)}] \rangle_{HF} \tag{V.3.7}
\end{aligned}$$

En ambos casos es posible apreciar claramente que las correlaciones poseen una derivada inicial no nula, aún si estas no están presentes a $t = 0$.

V.4 Tratamiento de Hartree-Fock Dependiente del Tiempo en un modelo de simetría U(3).

Emplearemos a modo de aplicación el modelo de simetría U(3)¹⁰, descrito en el capítulo anterior.

Dentro de este contexto recurriendo al teorema de Wick, y utilizando las siguientes definiciones :

$$g_{kl} = \langle \hat{G}_{kl} \rangle / N, \quad v_{kl} = V_{kl} (N - 1) \quad (V.4.1)$$

se encuentra fácilmente (a partir de (III.2.4) :

$$\langle \hat{H} \rangle = N \left[\sum_i \epsilon_i g_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} v_{ik} g_{ik}^2 \right] \quad (V.4.2)$$

y

$$\langle \hat{h} \rangle = \sum_i \epsilon_i \hat{G}_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} v_{ik} g_{ik} \hat{G}_{ik} \quad (V.4.3)$$

Para obtener las ecuaciones de HFDT, dentro del marco del formalismo descrito, emplearemos (V.2.1b). Tomando el valor medio de Hartree-Fock en el segundo miembro, y valiéndonos de los resultados anteriores, el segundo término puede escribirse como

$$\langle [\hat{H}, \hat{G}_{kl}] \rangle_{HF} = (\epsilon_k - \epsilon_l) N g_{kl} + N v_{lk} g_{lk} (g_{ll} - g_{kk})$$

$$+ \sum_{\substack{i \neq k \\ i \neq l}} N v_{ik} g_{ik} g_{il} - N v_{il} g_{li} g_{ki} ,$$

de donde resulta

$$-i \frac{d}{dt} g_{kl} = (\epsilon_k - \epsilon_l) g_{kl} + v_{kl} g_{kl} (g_{kk} - g_{ll})$$

$$+ \sum_{\substack{i \neq k \\ i \neq l}} v_{ik} g_{ik} g_{il} - v_{li} g_{li} g_{ki} ,$$

(V.4.4)

que dentro del contexto del modelo empleado conduce a un sistema de nueve ecuaciones (reales) acopladas. Obviamente, en el caso puro que discutimos aquí, podrían haber sido escritas en términos de dos cantidades complejas x_2 y x_3 , (la fase de x_1 es irrelevante). Notemos, además que cuando (V.4.4) se escribe en términos de los v_{ij} el número de partículas N , no aparece.

Las ecuaciones de HFDT no son integrables para $n > 2$, contrariamente a lo que sucede en el caso de $U(2)$, en el cual, la conservación de $\langle \hat{H} \rangle$ y $\langle \hat{J}^2 \rangle$ conducen a un sistema unidimensional¹¹.

La evolución temporal, correspondientemente, exhibe un carácter más complejo, de modo que este modelo constituye una forma más exigente de comprobar la aproximación desarrollada que el analizado en el capítulo previo.

Volviendo al sistema (V.4.4), este puede ser resuelto con la ayuda de las condiciones iniciales proporcionadas por (III.3.1). Se puede ver fácilmente que las ecuaciones de HFDT conservan los valores de expectación de los tres operadores de Casimir del

grupo, es decir

$$C_1 = \sum_i g_{ii} \quad , \quad (V.4.5)$$

$$C_2 = \sum_{i,j} g_{ij} g_{ji} \quad , \quad (V.4.6)$$

$$C_3 = \sum_{i,j,k} g_{ij} g_{jk} g_{ki} \quad , \quad (V.4.7)$$

las cuales valen 1 para el caso puro considerado.

Puede demostrarse que las soluciones del sistema (V.4.4), esto es, los $g_{ij}(t)$ coinciden con los valores de expectación exactos (intensivos) $\langle G_{ij} \rangle / N$ en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$).

Para N finito, por el contrario, no obtendremos resultados muy precisos, siendo éstos además, fuertemente dependientes de las condiciones iniciales.

Revisten especial interés las soluciones estacionarias del sistema (V.4.4), esto es, las soluciones estáticas de Hartree-Fock. Por simplicidad consideraremos el caso

$$v_{ij} \equiv v(1 - \delta_{ij}) \quad \forall i,j \quad . \quad (V.4.8)$$

Estas pueden ser clasificadas en distintas clases, de acuerdo al número de niveles de p.i. que jueguen un papel activo en la situación resultante. En esta oportunidad nos restringiremos a soluciones del tipo

$$x_i = 1, \quad x_j = 0, \quad i \neq j, \quad (V.4.9)$$

donde sóloamente uno de los niveles de p.i. está ocupado. En esta

situación existe un único hamiltoniano estático autoconsistente \hat{h} , el cual coincide con \hat{H}_0 . Estas soluciones son las únicas para

$$|v| < \text{Min}(\epsilon_i - \epsilon_j) \equiv 1, \quad i \neq j \quad (\text{V.4.10})$$

(en todos los casos consideraremos $\epsilon_1 = 0$, $\epsilon_2 = 1$ y $\epsilon_3 = 2$).

V.5 Aplicación del presente formalismo en un modelo de simetría U(3).

Resulta de gran interés escribir las ecuaciones (V.2.1a) y (V.2.1b) dentro del contexto del modelo utilizado. Para ello emplearemos las definiciones (IV.4.1), (sólo para los operadores de dos cuerpos) y con el propósito de expresar de una forma compacta la evolución temporal, definimos :

$$\begin{aligned} \hat{F}_{lkij} = & V_{lk} \{ [\hat{O}_{lik}^{(2)}, \hat{G}_{ki}]_+ + [\hat{O}_{ljk}^{(2)}, \hat{G}_{kl}]_+ \} + \\ & - V_{il} \{ [\hat{O}_{lik}^{(2)+}, \hat{G}_{kj}]_+ - V_{jl} [\hat{O}_{ijk}^{(2)+}, \hat{G}_{ki}]_+ \} . \end{aligned} \quad (V.5.1)$$

De este modo el sistema de ecuaciones resultante tiene el siguiente aspecto:

$$-i \frac{d\langle \hat{G}_{ij} \rangle}{dt} = (\epsilon_i - \epsilon_j) \langle \hat{G}_{ij} \rangle + 1/2 \sum_k (V_{ki} \langle \hat{O}_{kij}^{(2)} \rangle - V_{jk} \langle \hat{O}_{kij}^{(2)+} \rangle) \quad (V.5.2)$$

y

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_{kij}^{(2)} \rangle}{dt} = (2\epsilon_k - \epsilon_i - \epsilon_j) \langle \hat{O}_{kij}^{(2)} \rangle + 1/2 \sum_l \langle \hat{F}_{lkij} \rangle_{HF} , \quad (V.5.3)$$

donde las sumas sobre k, l están restringidas por la condición $V_{ii} = 0, \forall i$.

Esta expresión para la evolución de los operadores de dos cuerpos, puede ser comparada con la obtenida por medio de la aproximación perturbativa, para ello debemos reemplazar (V.5.3) por :

$$-i \frac{d\langle \hat{O}_{kij}^{(2)} \rangle}{dt} = (2\varepsilon_k - \varepsilon_i - \varepsilon_j) \langle \hat{O}_{kij}^{(2)} \rangle + \hat{F}_{lkij} \quad (V.5.4)$$

Como analizamos previamente, dentro del esquema perturbativo, la aproximación a primer orden ($M = 2$) conduce a un conjunto de ecuaciones como las anteriores pero donde $\hat{F}_{lkij} = 0$. A segundo orden ($M = 3$), debemos incorporar a (V.5.2) y (V.5.4) las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} -i \frac{d\langle [\hat{O}_{lik}^{(2)}, \hat{G}_{kj}]_+ \rangle}{dt} &= \langle [\hat{H}_0, [\hat{O}_{lik}^{(2)}, \hat{G}_{kj}]_+] \rangle \\ &= (2\varepsilon_l - \varepsilon_j - \varepsilon_i) \langle [\hat{O}_{lik}^{(2)}, \hat{G}_{kj}]_+ \rangle \end{aligned} \quad (V.5.5)$$

y

$$-i \frac{d\langle [\hat{O}_{ljk}^{(2)}, \hat{G}_{ki}]_+ \rangle}{dt} = [2(\varepsilon_k - \varepsilon_l) + \varepsilon_j - \varepsilon_i] \langle [\hat{O}_{ljk}^{(2)+}, \hat{G}_{ki}]_+ \rangle \quad (V.5.6)$$

El sistema de ecuaciones resultante, como sabemos es lineal y por consiguiente trivial de resolver. De la expresión (V.5.6) se desprende que, cuando t crece, en este caso son los valores de expectación de los operadores de tres cuerpos los que oscilan con la frecuencia no perturbada. Sin embargo, como veremos, el hecho de haber incorporado a la evolución temporal los observables

resultantes en el paso $M = 3$, tiene su efecto aunque las correspondientes frecuencias sean independientes de la constante de acoplamiento.

Finalmente, si reemplazamos \hat{H}_0 por \hat{h} en el sistema de ecuaciones recién discutido, encontramos un sistema que involucra un número mayor de ecuaciones que el discutido previamente. Además, es no lineal, ya que la clausura de la semiálgebra con \hat{h} dada por (V.4.3) involucra la adición de nuevos operadores en el último paso.

V.6 Análisis de los resultados.

Una situación típica que sirve para ilustrar los distintos métodos discutidos en este capítulo, es mostrada en la figura 1. En este caso la constante de acoplamiento es $v = 0.5$, y para las condiciones iniciales hemos elegido valores reales, esto es $x_1^2 = 0.4$, y $x_2^2 = x_3^2 = 0.3$. Para el caso de operadores no diagonales los resultados proporcionados por HFDT quedan rápidamente fuera de fase cuando se los compara con los exactos y su comportamiento es de carácter sinusoidal. En el caso de $\langle \hat{G}_{11} \rangle$, el cual posee un comportamiento altamente no lineal la aproximación de HFDT no proporciona las amplitudes correctas, aún durante el transcurso de la primera oscilación temporal. Por el contrario, los resultados obtenidos con el método introducido en este capítulo son bastante precisos aún para el caso $M = 2$ (primer orden). Por otra parte ninguno de los dos métodos perturbativos descritos en la sección previa, puede aventajar estos resultados (inclusive teniendo en cuenta un orden más, es decir segundo orden) sin embargo, brindan una descripción más precisa que la proporcionada por HFDT. Notemos, empero, que para tiempos suficientemente largos, todas las aproximaciones se desvían de la evolución exacta, aunque es necesario tener presente el comentario relativo a las unidades que se hizo en el capítulo IV.

El hamiltoniano estático de campo medio, ha sido utilizado en todos los casos como hamiltoniano no perturbado \hat{H}_0 (V.1.3). El uso del hamiltoniano dinámico de p.i. (V.4.3) en lugar de \hat{H}_0 , no mejora apreciablemente la precisión de los resultados en ninguno de los tratamientos. Cabe mencionar que inclusive en algunas

circunstancias estos empeoran a pesar de que la correspondiente aproximación se torna más compleja de tratar.

Merece especial atención la situación en la cual las condiciones iniciales corresponden a la solución estática de Hartree-Fock. En este caso, este método no predice evolución temporal alguna, por el contrario, la aproximación descrita en este capítulo proporciona una evolución temporal no estacionaria (aún para $M = 2$), similarmente a lo que sucede con la solución exacta. Destaquemos que el tratamiento perturbativo debe ser evaluado a segundo orden para obtener una solución no estacionaria. En la figura 2 se exhibe este caso.

En la figura 3 se muestra una situación distinta, en la cual se hace referencia a la tendencia de la derivada inicial. En el caso del método de HFDT, éste proporciona la tendencia inicial correcta cuando el número de partículas es grande, pero si N es pequeño, no ocurre lo mismo. En este ejemplo, los valores iniciales de $\langle \hat{G}_{ij} \rangle$ son todos reales y consecuentemente todas las derivadas primeras temporales de la parte real de $\langle \hat{G}_{ij} \rangle$, se anulan inicialmente para el hamiltoniano considerado. Puesto que la derivada temporal segunda no está garantizada por la aproximación de HFDT, no podemos asegurar en este caso el comportamiento inicial correcto.

Por ejemplo, la derivada temporal segunda de $\langle \hat{G}_{ii} \rangle$, en el tratamiento de campo medio está dada en este caso por

$$\frac{d^2 \langle \hat{G}_{ii} \rangle_{\text{HF}}}{dt^2} \Big|_{t=0} = -4v/N^2 \sum_{i \neq k} (\langle \hat{G}_{ki} \rangle_0 \langle [\hat{h}, \hat{G}_{ki}] \rangle_0)$$

$$\frac{d^2 \langle \hat{G}_{ii} \rangle_{HF}}{d t^2} \Big|_{t=0} = -4v/N^2 \sum_{i \neq k} (\langle \hat{G}_{ki}^2 \rangle_0 \{(\epsilon_k - \epsilon_i) + v/N(\hat{G}_{ii} - \hat{G}_{kk})\}_0) \quad (V.6.1)$$

donde \circ denota los valores iniciales. Los valores exactos están dados por

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \langle \hat{G}_{ii} \rangle_{ex}}{d t^2} \Big|_{t=0} &= -2v \sum_{i \neq k} (\langle [\hat{H}, \hat{G}_{ki}^2] \rangle_0) \\ &= -2v \sum_{i \neq k} \{2(\epsilon_k - \epsilon_i) \langle \hat{G}_{ki}^2 \rangle_0 \\ &\quad + \sum_{l \neq m} v/2 \langle [\hat{G}_{lm}^2, \hat{G}_{ki}^2] \rangle_0\} \quad (V.6.2) \end{aligned}$$

Así para $N = 10$, $x_1^2 = 0.9$, $x_2^2 = 0.1$, $\langle \hat{G}_{11} \rangle$ crece inicialmente si $0 > v > -1.250$ de acuerdo con (V.6.1), y $0 > v > -0.568$, de acuerdo con (V.6.2) consecuentemente existe un rango de valores de v para el cual la aproximación de HFDT no puede dar la tendencia inicial correcta.

El método descrito en este capítulo, por el contrario proporciona la derivada inicial correcta hasta el orden M . El tratamiento perturbativo también proporciona la tendencia inicial correcta, pero es necesario desarrollar la aproximación hasta el orden siguiente (por ej., para conseguir la derivada primera inicial correcta es necesario proseguir hasta el orden dos).

El hecho de que la aproximación sea capaz de detectar efectos

que aparecen a tiempos largos indica que esta técnica no es el resultado de una simple estimación parabólica de la evolución temporal, donde sólo las dos derivadas iniciales son consideradas.

La figura 4 refleja el comportamiento del autovalor más grande de la matriz densidad de un cuerpo (el número de ocupación mayor), el cual es constante en el tratamiento de campo medio. La matriz densidad de un cuerpo de la aproximación descrita deja de ser idempotente para $t > 0$. Esto queda reflejado por el hecho de que los autovalores no permanecen constantes a medida que t crece, midiendo de esta manera la influencia de las correlaciones que este tratamiento incorpora.

En muchas situaciones de interés físico, la evaluación de la fluctuación estadística de un observable tiene particular importancia. Por ejemplo, en reacciones con iones pesados sería deseable poder predecir la dispersión en la masa de los fragmentos. Sabemos, además, que HFDT no proporciona una correcta descripción de estas cantidades. Por tal razón, hemos mostrado en la figura 5 la evolución temporal de la cantidad σ_x^2 , donde hemos comparado los resultados obtenidos en base a las diferentes aproximaciones, para $N = 8$ y $v = 0.3v_c$, con $x_1^2 = 0.034$ y $x_2^2 = 0.966$, con la evolución exacta. Se observa un excelente acuerdo entre ésta y la predicción proporcionada por nuestro formalismo, evidenciando una vez más, la descripción correlacionada que dicho esquema es capaz de brindar.

V.7 Conclusiones.

Hemos extendido el formalismo general introducido en el capítulo anterior con el propósito de conseguir aproximaciones de orden superior. De este modo, ha sido posible obtener una forma sistemática de mejorar los resultados proporcionados por la aproximación de HFDT.

El esquema propuesto no resulta mucho más dificultoso de manejar que el de HFDT, y puede ser aplicado a un amplio rango de problemas físicos. Los resultados obtenidos proporcionan una descripción muy precisa de la evolución temporal, en aquellas circunstancias donde la aproximación de campo medio resulta también apropiada, pero, además, tiene la ventaja de brindar un esquema adecuado de la evolución dinámica inicial en aquellos casos que no pueden ser tratados por HFDT.

Existen numerosas y atractivas formulaciones teóricas relacionadas con extensiones de HFDT, algunas basadas en diversas técnicas de proyección^{12,13}, otras que tratan con la inclusión de términos colisionales en las ecuaciones de movimiento, o con aproximaciones en el tiempo de relajación^{14,15}. La idea central que gobierna nuestro tratamiento extendido es la de "forzar" al conjunto de operadores involucrados a satisfacer el teorema de Ehrenfest. Un adecuado truncamiento del álgebra parcial de Lie bajo conmutación con el hamiltoniano del sistema, conduce en consecuencia a una clausura aproximada no lineal.

Un aspecto que merece destacarse del formalismo que hemos

desarrollado, y que reviste gran interés, es que en todas las aproximaciones obtenidas por medio de las diferentes clausuras alternativas, es posible lograr el orden de precisión deseado sólo en aquellos operadores en los cuales estamos interesados.

Además, tienen la ventaja de basarse directa y explícitamente en los valores de expectación de los operadores involucrados. Tengamos en cuenta que los métodos ordinarios, por el contrario, tratan con la función de onda, o con la matriz densidad. En esas condiciones, extraer por ejemplo, la información concerniente con los valores de expectación deseados, implica un cálculo algebraico sumamente engorroso, resultando de esta forma mucho más dificultosos de implementar.

En este capítulo hemos centrado la atención especialmente en el caso de clausuras no lineales, dentro del marco de la teoría de campo medio, aunque las distintas aproximaciones generadas por las clausuras alternativas fueron ilustradas y comparadas por razones de completitud. En relación con esto podemos agregar, que el tratamiento discutido en este capítulo involucra una evaluación autoconsistente de aquellos términos despreciados en el esquema perturbativo. De este modo proporciona un grado de precisión similar o superior al obtenido con el método perturbativo a un orden más en la expansión, además, con este esquema, se obtiene la derivada inicial temporal correcta, de orden M , de los operadores de un cuerpo.

Para concluir, este tratamiento ofrece la posibilidad de complementar al método de HFDT, especialmente en aquellas circunstancias en que dadas las características del fenómeno

analizado se requiere un mayor grado de precisión, o una descripción de p.i. no es la adecuada para tratar con el correspondiente problema.

Referencias:

1. P. Ring and P. Shuck, 'The Nuclear Many-Body Problem'.
(Springer, Berlin, 1980).
2. A. de Shalit, H. Feshbach, 'Theoretical Nuclear Physics'
(Wiley, N.Y., 1974).
3. S.E. Konin and H. Kerman, Ann. Phys. (N.Y.) 100, 332 (1976).
4. P. Bonche, J. Phys. C 5, 37 (1976).
- 5 C.H. Dasso, T. Dossing, and H.C. Pauli, Z. Phys. A 289, 395
(1979).
6. K.K. Kan, P.C. Lichtner, M. Dworzecka and J.J. Griffin Phys.
Rev. C21, 1098 (1980).
7. H. Gilmore, 'Catastrophe Theory for Scientist and Engineers'
(Wiley, New York, 1981).
8. N.Canosa, A. López, A. Plastino and R. Rossignoli Phys. Rev
C37, 320 (1988).
9. N.Canosa, A. López, D. Otero, A. Plastino and A.N. Proto, Z.
Phys. A326, 195 (1987).
10. N. Meshkov, Phys. Rev. C3, 2214 (1971).
11. J. Krieger, Nucl. Phys. A276, 12 (1977).
12. R. Balian, Y. Alhassid, and H. Reinhardt, Phys. Rep. 131, 1
(1986); 131, 2 (1986).
13. H. Reinhardt, R. Balian, and Y. Alhassid, Nucl. Phys. A422, 349
(1984).
14. S. Ayik and M. Dworzecka, Nucl. Phys. A440, 424 (1985);
S.Ayik, ibid. A422, 327 (1985).
15. A.H. Blin, B. Hiller, J.J. Griffin, and M. Dworsecka, Nucl.
Phys. A444, 62 (1985); P. Grange, R. Weidenmüller and G.
Wolschin, Ann. Phys. (N.Y.) 136, 190 (1981).

FIGURAS.

Figura 1: Evolución temporal de $\text{Re}\langle\hat{G}_{31}\rangle$ (1a) y $\langle\hat{G}_{11}\rangle$ (1b) para $N = 10$. Los valores iniciales son $x_1^2 = 0.4$, $x_2^2 = 0.3$, (todos los x_i son reales). La constante de acoplamiento es $v = -0.5$. Resultados exactos : ——— ; resultados de HFDT : ; resultados del MA : -.-.-.- ; del método perturbativo a primer orden con $\hat{h} = \hat{H}_0$: ----- ; y del método perturbativo a segundo orden : -.-.-.-.- . La escala temporal de todas las figuras está dada en unidades de $h/(\epsilon_2 - \epsilon_1)$ (para más detalles consultar el texto).

Figura 2: Evolución temporal de $\langle\hat{G}_{11}\rangle$ para $N = 10$. Los valores iniciales $x_1^2 = 1$ y $x_2^2 = x_3^2 = 0$ son los que corresponden al caso estacionario. La constante de acoplamiento es $v = -0.5$. Resultados exactos : ——— ; resultados del MA : -.-.-.- ; y del método perturbativo a segundo orden : -.-.-.-.- . Ambas aproximaciones, tanto HFDT, como el método perturbativo a primer orden predicen una evolución constante : Los operadores no diagonales se anulan en todos los tratamientos.

Figura 3: Evolución temporal de $\langle\hat{G}_{11}\rangle$ para $N = 10$. Los valores iniciales $x_1^2 = .9$ y $x_2^2 = 0.1$, la constante de acoplamiento está dada por $v = -0.95$. Resultados exactos : ——— ; resultados de HFDT : ; resultados del MA : -.-.-.- ; del método perturbativo a

primer orden : -.-.-.- , y del método perturbativo a segundo orden : -...-...-...- . La tendencia inicial de HFDT difiere en este caso de la correspondiente al comportamiento exacto.

Figura 4: Evolución temporal del autovalor más bajo de la matriz densidad de un cuerpo (f_1) para las mismas condiciones de la fig. 1. Resultados exactos : ——— ; f_1 permanece igual a 1 en HFDT : ; reflejando el carácter idempotente de dicha aproximación.

Figura 5: Evolución temporal de la cantidad σ_x^2 . En este caso hemos empleado la reducción al modelo de simetría U(2). Las condiciones iniciales corresponden a $x_1^2 = 0.034$ y $x_2^2 = 0.966$, la constante de acoplamiento es $v = -0.30$, y $N = 8$. Resultados exactos : ——— ; resultados de HFDT : ; resultados del MA : -.-.-.- ; y del método perturbativo a segundo orden : -+--+--+ .

* En todos los casos M. A. indica la aproximación desarrollada en este capítulo.

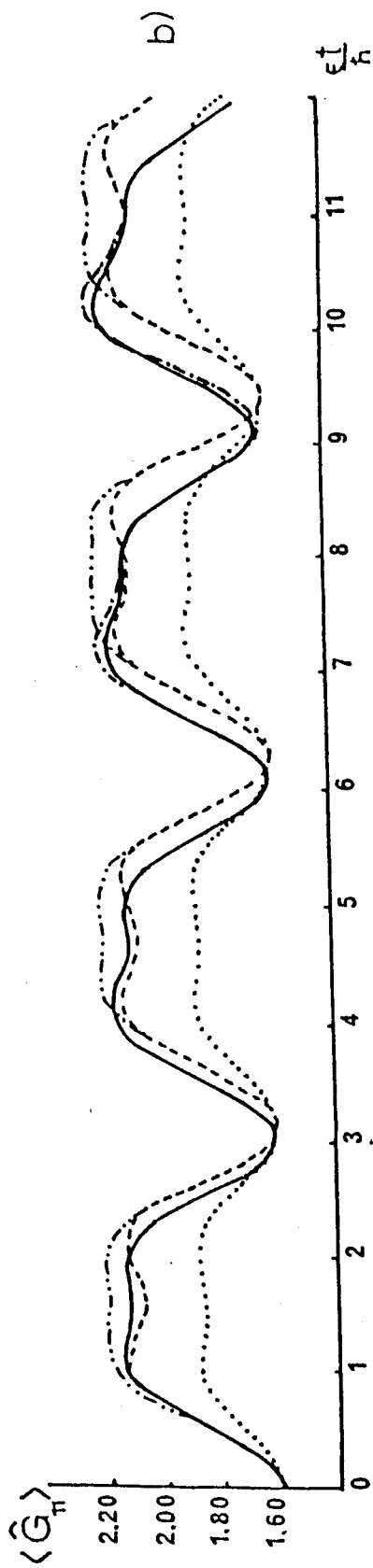
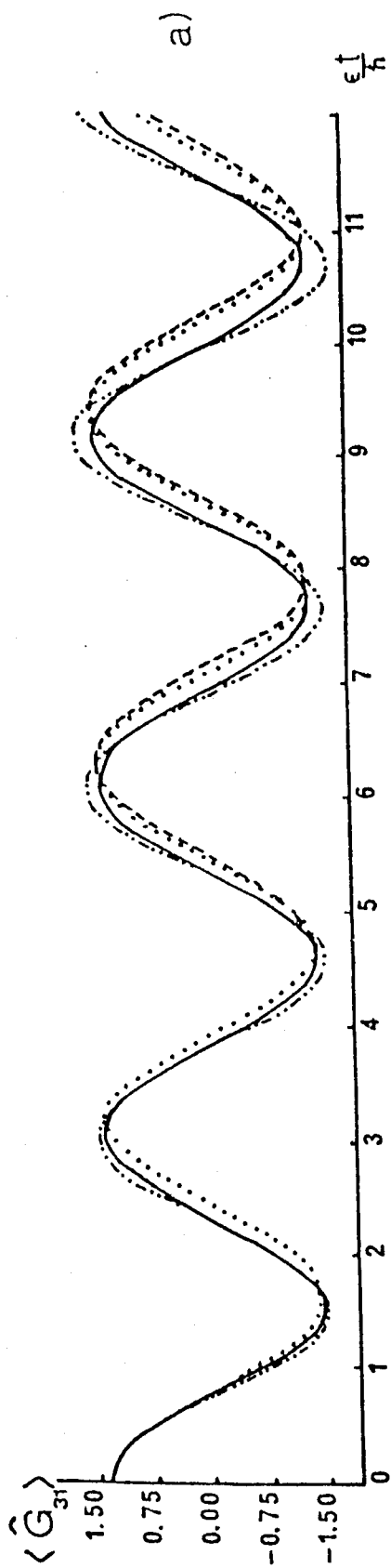


Fig.1

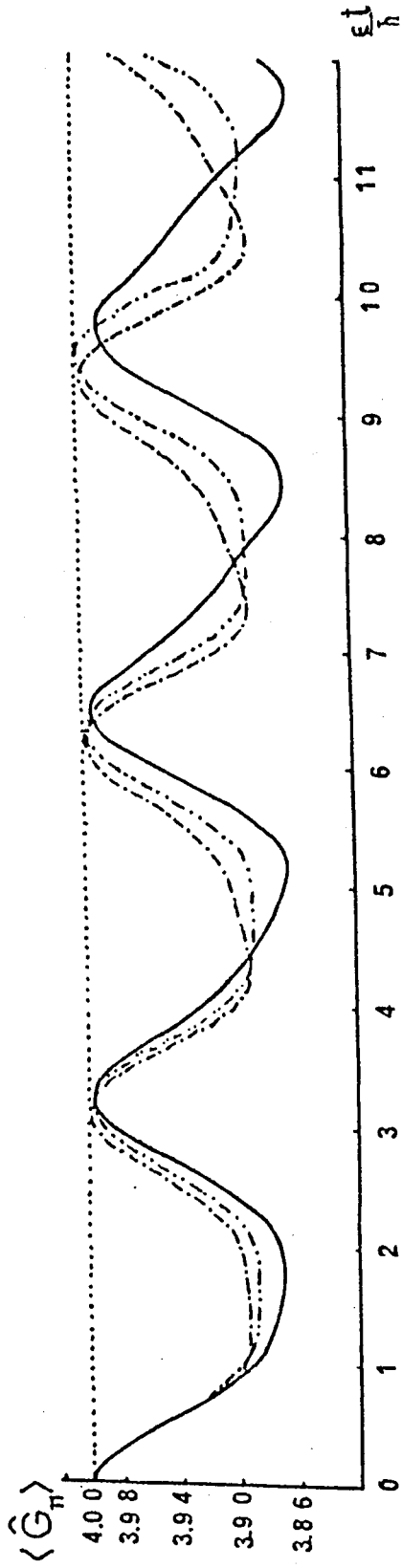


Fig.2

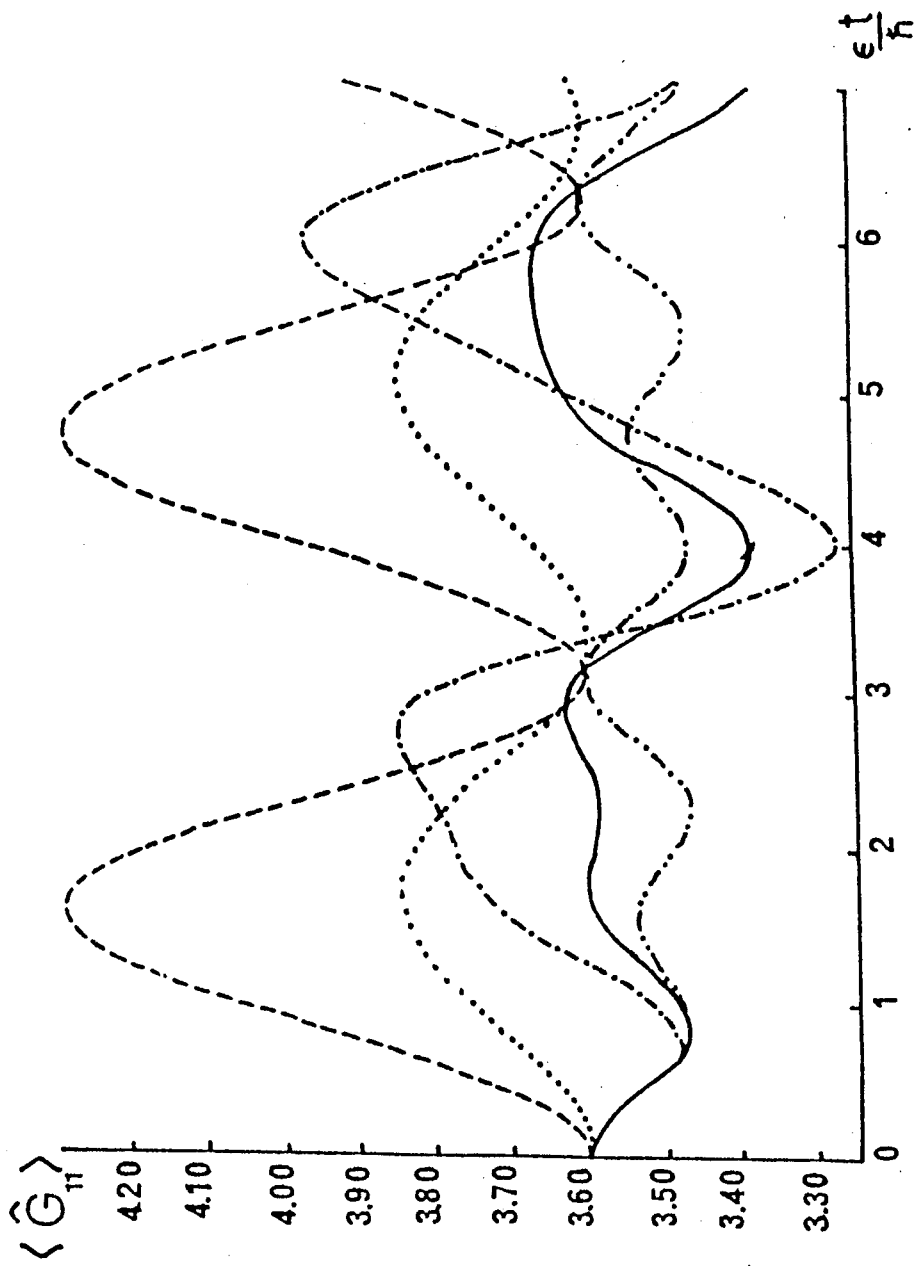


Fig. 3

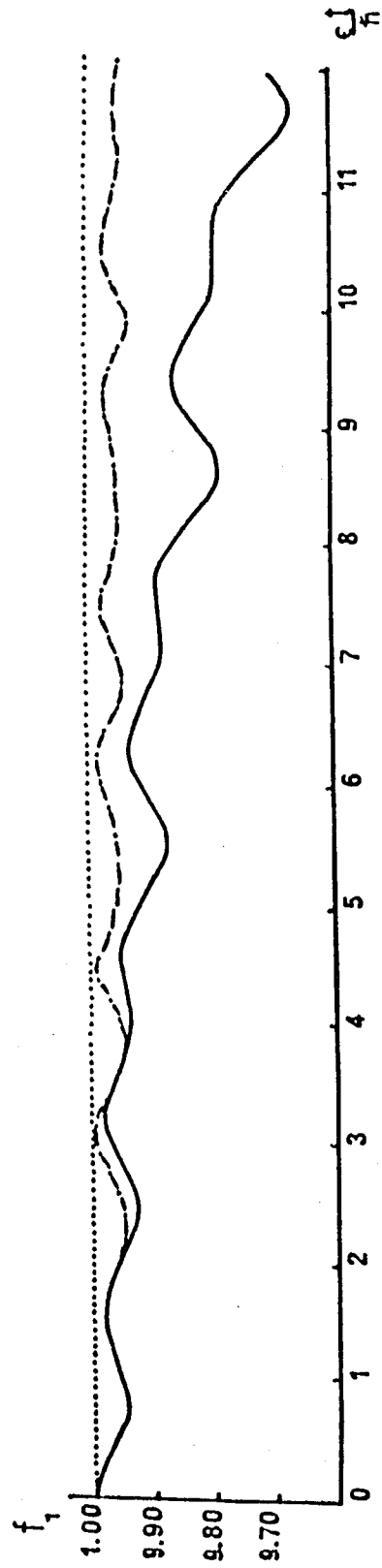


Fig. 4

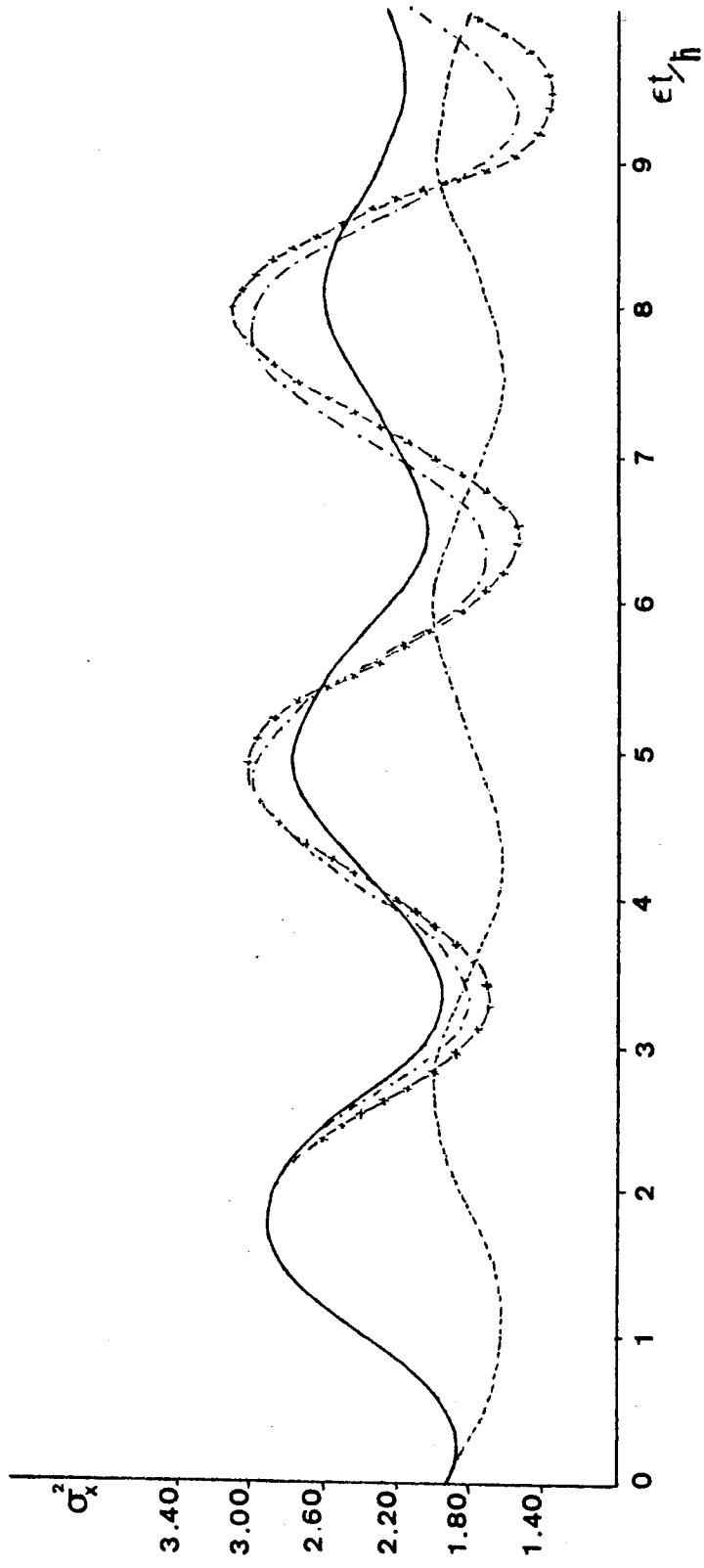


Fig. 5

CAPITULO VI.

CONCLUSIONES.

Conclusiones.

En esta tesis hemos analizado y desarrollado, basándonos en consideraciones de carácter estadístico, y más precisamente dentro del marco de la Teoría de la Información, diferentes aproximaciones originales que permiten describir adecuadamente sistemas cuánticos, tanto dentro como fuera del equilibrio.

En la primera parte hemos investigado un método general de inferencia estadística, extraído a partir de una generalización del principio de máxima entropía. El esquema ofrece una excelente descripción del estado fundamental de los sistemas de un cuerpo y muchos cuerpos, caracterizados por una función de onda cuántica libre de nodos. En circunstancias diferentes a ésta, el hecho de que los resultados dependan de la base elegida permite que una elección cuidadosa de la misma pueda mejorar la descripción.

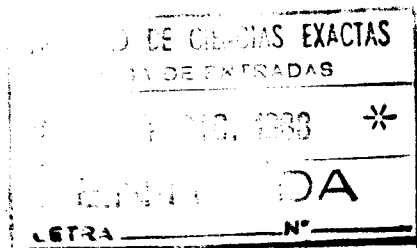
En la segunda parte de la tesis, desarrollamos un formalismo general que proporciona un esquema unificado para generar diferentes aproximaciones. De esta forma es posible obtener una descripción aproximada de la evolución dinámica de observables de interés en sistemas cuánticos de muchos cuerpos. Dentro del contexto del formalismo, la predicción de los valores a asumir por estos observables, así como una forma sistemática de mejorar esta predicción, surge de una manera natural, sin necesidad de recurrir a cálculos adicionales. La implementación del esquema permite predecir magnitudes de particular interés, tales como correlaciones cuánticas, o la fluctuación en los valores medios de los observables, para las cuales la aproximación de campo medio no

proporciona una descripción adecuada.

A lo largo de esta tesis hemos mostrado los alcances y posibilidades de este nuevo enfoque, por medio de variados ejemplos. A pesar de que en algunos aspectos se ofrece una solución parcial del correspondiente problema, creemos que un primer paso está dado, en el sentido de que estos métodos amplían y a la vez complementan el panorama que ofrecen los tratamientos habituales. En especial, brindan desde una perspectiva distinta, esto es, a través de un enfoque estadístico sumamente general, la posibilidad de encarar problemas tradicionalmente reservados a las teorías usuales de campo medio.

Resulta de interés enfatizar el hecho de haber recurrido a la inferencia estadística con el objeto de efectuar predicciones tanto de carácter estático como, y muy especialmente, de carácter dinámico en el problema cuántico de muchos cuerpos.

Digamos por último que dado el amplísimo espectro de posibilidades que la inferencia estadística ha abierto en otras disciplinas, resulta justificado abrigar fundadas esperanzas en cuanto al futuro de tales métodos dentro de nuestro contexto.



[Handwritten signature]

Apéndice:

Teorema de Wick

El teorema de Wick¹ permite el reordenamiento de un conjunto de N operadores a_ν, a_ν^+ , los cuáles tienen la propiedad de que el conmutador (anticommutador) en el caso de bosones (fermiones), de dos operadores de este conjunto elegidos en forma arbitraria es un número.

Este teorema (en su formulación usual^{2,3}) se define a partir del producto normal ordenado, según el cual todos los operadores de campo son ordenados de tal forma que los operadores de creación se sitúan a la izquierda de los operadores de destrucción.

En este apéndice trataremos la extensión estadística de este teorema⁴, es decir cuando este producto normal no está definido con respecto al vacío (caso puro), como ocurre en la teoría de campos tradicional, sino con respecto a un operador estadístico de p.i..

Consideremos, pues, un operador estadístico ρ cuya forma funcional es la del exponente de un operador de un cuerpo, y supongamos que ρ está adecuadamente normalizado, es decir $\text{Tr} \rho = 1$.

Definimos entonces una contracción entre dos operadores de campo U, V (que representan tanto operadores de creación, a_ν^+ como de aniquilación a_ν) como su valor medio en el estado ρ

$$\overline{UV} = \text{Tr} UV\rho = \langle UV \rangle \quad (\text{A.1})$$

Si $\ln \rho$ conmuta con el operador número de partícula, (es decir,

no contiene pares a^+a^+ , aa) las únicas contracciones posibles no nulas son de la forma $\overline{a^+a}$, $\overline{aa^+}$, que están relacionadas a través de:

$$\overline{a_{\mu}^+ a_{\nu}} \pm \overline{a_{\mu} a_{\nu}^+} = \delta_{\mu\nu} \quad (\text{A.2})$$

donde el signo + (-) corresponde a fermiones (bosones).

Para dos operadores el producto normal ordenado se define como

$$: UV : = UV - \overline{UV} . \quad (\text{A.3})$$

Para el caso de N operadores de campo, el producto normal ordenado se define en forma recursiva de tal modo que el teorema de Wick sea satisfecho. Este establece que el producto de operadores de campo es igual a su producto normal ordenado, más el producto normal ordenado con una contracción en todas las formas posibles, más el producto normal ordenado con dos contracciones y así sucesivamente,

$$\begin{aligned} UVW\dots XYZ &= : UVW\dots XYZ : + : \overline{UV}W\dots XYZ : + : UV\overline{W}\dots XYZ : \\ &+ \dots + : \overline{UVW}\dots XYZ : \\ &+ \dots + : \overline{UVW}\overline{XYZ} : + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Al remover una contracción de un producto normal ordenado hay que tener en cuenta que debido a las relaciones de anticonmutación de los operadores fermiónicos una permutación impar de éstos producirá un signo menos adicional. Por ejemplo, para el caso del producto normal ordenado de cuatro operadores de campo se obtiene:

$$\begin{aligned}
:a_{\mu}^+ a_{\nu}^+ a_{\gamma} a_{\delta}: &= a_{\mu}^+ a_{\nu}^+ a_{\gamma} a_{\delta} - (:a_{\mu}^+ a_{\delta}: a_{\nu}^+ a_{\gamma} + :a_{\nu}^+ a_{\gamma}: a_{\mu}^+ a_{\delta} \\
&+ :a_{\mu}^+ a_{\gamma}: a_{\nu}^+ a_{\delta} + :a_{\nu}^+ a_{\delta}: a_{\mu}^+ a_{\gamma} \\
&+ :a_{\mu}^+ a_{\delta}: a_{\nu}^+ a_{\gamma} + :a_{\mu}^+ a_{\gamma}: a_{\nu}^+ a_{\delta}) \quad (A.5)
\end{aligned}$$

donde el signo - (+) corresponde a fermiones (bosones).

En la expresión anterior hemos supuesto que $\ln\rho$ conserva el número de partícula, de esta manera las contracciones del tipo $\overline{a^+ a^+}$, $\overline{a a}$ se anulan.

Es posible demostrar⁵ que el valor medio respecto de un estado ρ de un producto de operadores de campo es igual a la suma de todas las posibles contracciones:

$$\text{Tr}(UVW\dots XYZ\rho) = \overline{UV} \overline{W\dots X} \overline{YZ} + \overline{UVW\dots XYZ} + \dots \quad (A.6)$$

Teniendo en cuenta esta última expresión conjuntamente con (A.5), se deduce que el valor medio de un producto normal se anula

$$\text{Tr}(:UVW\dots XYZ:\rho) = 0 \quad (A.7)$$

De (A.7) puede demostrarse además, que el promedio de un producto de productos normales resulta igual a la suma de todos los términos completamente contraídos, pero que no poseen ninguna contracción de operadores pertenecientes al mismo producto normal ordenado, vale decir:

$$\text{Tr}[(:UVW:) (:XYZ:) \rho] = -\overline{UX} \overline{VY} \overline{WZ} + \overline{UY} \overline{VX} \overline{WZ} - \overline{UZ} \overline{VY} \overline{WX} + \dots \quad (A.8)$$

Referencias:

1. G. C. Wick, Phys. Rev. 80, 268 (1960).
2. P. Ring and P. Schuck, 'The Nuclear Many Body Problem' (Springer Verlag, N.Y., 1980).
3. D.J. Thouless, 'The Quantum Mechanics of Many-Body Systems' Academic, N.Y., 1961).
4. H. Reinhard, R. Balian and Y Alhassid, Nucl. Phys. A422, 349 (1984).
5. M. Goudin, Nucl.Phys. 15, 89 (1960).