

Campos médios Gaussianos, correlações e decoerência em sistemas de muitos bosons e de muitos férmions

A. F. R. de Toledo Piza

Instituto de Física, Universidade de São Paulo
C.P. 66318, 05389-970 São Paulo, S.P., Brasil

Conteúdo:

Capítulo 1. Estados quânticos e operadores (matrizes) densidade. Operadores densidade gaussianos para bosons e férmions idênticos no espaço de Fock. A projeção gaussiana de um estado geral de muitos bosons ou férmions. Dinâmica: aproximação variacional gaussiana e campos médios de Hartree-Fock-Bogolyubov.

Capítulo 2. O uso de estados e projeções gaussianas: exemplos. Gas de Fermi não ideal e o campo médio de Hartree-Fock. Oscilador paramétrico. Oscilador anarmônico e teoria ϕ^4 em 1+1 dimensões. Modelo de Jaynes-Cummings.

Capítulo 3. Dinâmica efetiva da projeção gaussiana. Efeitos de correlação e integrais de colisão. Decoerência colisional da densidade de um corpo. Exemplos: gas de Fermi não ideal, oscilador anarmônico e modelo de Jaynes-Cummings.

Capítulo 1

Aproximação gaussiana para bosons e férmions

1.1 Introdução

1.1.1 Estados quânticos e operadores densidade

A caracterização do estado de um sistema (hamiltoniano, para fixar as idéias), clássico ou quântico, deve necessariamente permitir atribuir valores numéricos às variáveis dinâmicas do sistema. Classicamente, estados *puros* correspondem a *pontos* do espaço de fases. Estados mais gerais (*mistos*) são dados como *distribuições de probabilidades* no espaço de fases. A evolução dinâmica do estado é dada pelas equações de Hamilton, que descrevem o deslocamento temporal de pontos no espaço de fases. No caso mais geral de estados mistos, a evolução temporal da distribuição de probabilidade é descrita pela equação de Liouville.

Os espaços de fases quânticos são mais estruturados que os clássicos, no sentido de serem espaços vetoriais complexos. Um estado quântico puro corresponde a um vetor num tal espaço (ou, mais precisamente, a um *raio* desse espaço, isto é, a um vetor de norma um com uma fase global arbitrária). O objeto que corresponde naturalmente a essa definição é um *operador de projeção* sobre um subespaço unidimensional do espaço de fases quântico: ao vetor de estado normalizado $|\alpha\rangle$ corresponde o operador de projeção

$$F_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|, \quad F_\alpha^2 = F_\alpha^\dagger = F_\alpha.$$

Essa caracterização embute de uma forma natural a normalização do vetor de estado bem como a sua definição a menos de uma fase global arbitrária. O operador F_α é chamado o *operador densidade* associado ao estado quântico puro $|\alpha\rangle$. Muitas vezes ele é expresso em termos de alguma particular representação, isto é, de uma particular *base* $\{|\nu\rangle\}$ do espaço vetorial:

$$F_\alpha \rightarrow F_\alpha(\nu, \nu') = \langle \nu | F_\alpha | \nu' \rangle = \langle \nu | \alpha \rangle \langle \alpha | \nu' \rangle.$$

Essa matriz que representa F_α na base escolhida é chamada *matriz densidade* associada ao estado quântico puro $|\alpha\rangle$. O fato de que F_α é um operador de projeção corresponde à hermiticidade e idempotência da matriz densidade correspondente:

$$F_\alpha(\nu, \nu') = F_\alpha(\nu', \nu)^* = \sum_{\nu''} F_\alpha(\nu, \nu'') F_\alpha(\nu'', \nu').$$

Na mecânica quântica variáveis dinâmicas são associadas a operadores hermiteanos \hat{D} no espaço de vetores de estado. A forma pela qual um estado, caracterizado por um dado vetor $|\alpha\rangle$, permite a atribuição de valores numéricos a tais operadores, consiste na correspondência

$$\{\hat{D}, |\alpha\rangle\} \rightarrow \langle \alpha | \hat{D} | \alpha \rangle$$

isto é, a cada variável dinâmica \hat{D} corresponde, no estado $|\alpha\rangle$, o valor esperado de \hat{D} nesse estado. Note que está sendo suposto que o vetor de estado está devidamente normalizado, e que uma fase global do vetor de estado é irrelevante para essa atribuição. Quando o estado é descrito em termos de um operador densidade, essa mesma associação pode ser expressa em termos do *traço* do produto da variável dinâmica e do operador densidade:

$$\{\hat{D}, F_\alpha\} \rightarrow Tr(\hat{D}F_\alpha) = \sum_{\nu} \langle \nu | \hat{D} | \nu' \rangle \langle \nu' | F_\alpha | \nu \rangle = \langle \alpha | \hat{D} | \alpha \rangle. \quad (1.1)$$

A forma fatorada do operador ou da matriz densidade correspondente a um estado quântico puro sugere uma certa redundância da descrição do estado. Para evitar essa redundância é que usualmente se utiliza o próprio vetor de estado $|\alpha\rangle$ ou a *função de onda* $\langle \nu | \alpha \rangle$ para caracterizar estados quânticos puros. A descrição em termos de operadores (ou matrizes) densidade é no entanto essencial para descrever estados quânticos *mistos*, que analogamente ao caso clássico correspondem a uma distribuição de probabilidades sobre *vetores de estado*. Uma tal distribuição pode sempre ser caracterizada através de um operador densidade do tipo

$$F_{\{p_\alpha\}} = \sum_{\alpha} p_\alpha F_\alpha; \quad p_\alpha \geq 0; \quad \sum_{\alpha} p_\alpha = 1; \quad F_\alpha F_{\alpha'} = F_\alpha \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (1.2)$$

É claro que essa definição mais geral de um estado quântico contém a definição de estados quânticos *puros* como um caso particular, em que apenas um dos $p_\alpha = 1$. Sempre que mais de um único estado comparecer com probabilidade não nula é claro também que a propriedade de idempotência se perde, isto é, *em geral* $F_{\{p_\alpha\}}$ não é um operador de projeção:

$$F_{\{p_\alpha\}}^2 = \sum_\alpha p_\alpha^2 F_\alpha \neq F_{\{p_\alpha\}}.$$

No entanto é imediato verificar que a propriedade de hermiticidade

$$F_{\{p_\alpha\}} = F_{\{p_\alpha\}}^\dagger$$

ou, em termos da matriz densidade,

$$F_{\{p_\alpha\}}(\nu, \nu') = F_{\{p_\alpha\}}(\nu', \nu)^*$$

permanece válida. No caso de um estado puro, a idempotência está ligada à normalização do vetor de estado correspondente. No caso geral de um estado misto representado como em (1.2), a normalização do estado quântico é dada pela normalização da distribuição de probabilidades $\{p_\alpha\}$. Tanto em um como no outro desses dois casos ela pode ser expressa em termos do *traço* do operador densidade:

$$\text{Tr} F_\alpha = \sum_\nu \langle \nu | \alpha \rangle \langle \alpha | \nu \rangle = \text{Tr} F_{\{p_\alpha\}} = \sum_\alpha p_\alpha \sum_\nu \langle \nu | \alpha \rangle \langle \alpha | \nu \rangle = 1. \quad (1.3)$$

A propriedade $F_\alpha F_{\alpha'} = F_\alpha \delta_{\alpha\alpha'}$ dos projetores utilizados na definição (1.2) corresponde à ortogonalidade dos subespaços (unidimensionais) correspondentes a eles. Ela corresponde à ortogonalidade dos vetores de estado, $\langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'}$. Disso resulta que esses vetores são na realidade autovetores do operador densidade $F_{\{p_\alpha\}}$ com autovalores p_α :

$$F_{\{p_\alpha\}} |\alpha\rangle = p_\alpha |\alpha\rangle.$$

Os estados $|\alpha\rangle$ são chamados *estados naturais* do operador densidade $F_{\{p_\alpha\}}$, e os autovalores p_α são as *probabilidades de ocupação* desses estados naturais.

É possível também construir um operador densidade correspondente a um estado quântico misto superpondo projetores correspondentes a estados puros *não ortogonais*, isto é, relaxando a condição $F_\alpha F_{\alpha'} = F_\alpha \delta_{\alpha\alpha'}$, mas mantendo a normalização do traço, Eq. (1.3). Nesse caso os vetores $|\alpha\rangle$ não serão autovetores do operador densidade. Este pode porém ser reduzido à forma (1.2) através da determinação de seus autovetores e autovalores correspondentes (isto é, reescrevendo-o em termos de seus estados naturais). De fato, resolvendo nesse caso o problema de autovalores

$$F_{\{p_\alpha\}} |\beta\rangle = p_\beta |\beta\rangle, \quad \langle \beta | \beta' \rangle = \delta_{\beta\beta'}$$

é imediato reescreve-lo como

$$F_{\{p_\alpha\}} = \sum_{\beta} |\beta\rangle p_\beta \langle\beta|$$

que, em virtude da ortogonalidade dos autovetores e da invariança do traço, preenche as condições (1.2). A associação de valores numéricos às variáveis dinâmicas é feita através da generalização óbvia da relação (1.1):

$$\{\hat{D}, F_{\{p_\alpha\}}\} \rightarrow Tr(\hat{D}F_{\{p_\alpha\}}) = \sum_{\nu} \langle\nu|\hat{D}|\nu'\rangle \langle\nu'|F_{\{p_\alpha\}}|\nu\rangle = \sum_{\alpha} p_\alpha \langle\alpha|\hat{D}|\alpha\rangle = \sum_{\beta} p_\beta \langle\beta|\hat{D}|\beta\rangle. \quad (1.4)$$

Exercícios:

1. Qualquer operador hermiteano não negativo de traço 1 pode ser posto sob a forma (1.2) e define portanto um estado quântico misto.
2. Uma partícula de spin 1/2 está polarizada na direção z positiva ou na direção x positiva com probabilidades iguais. Escreva o operador densidade que descreve esse estado de polarização e reduza-o à forma (1.2) determinando os estados naturais e as probabilidades de ocupação correspondentes. Verifique explicitamente a equivalência das duas últimas expressões que aparecem na Eq. (1.4) para o valor médio da projeção do spin numa direção arbitrária \vec{u} , $\vec{\sigma} \cdot \vec{u}$.

A evolução dinâmica de um estado quântico puro descrito por um vetor de estado é descrita (no contexto não relativístico) pela equação de movimento (representação de Schrödinger)

$$i\hbar \frac{d}{dt}|t\rangle = H|t\rangle.$$

A equação de movimento para o operador densidade correspondente $F(t) = |t\rangle\langle t|$ pode ser imediatamente obtida da equação para o vetor de estado (*também* na representação de Schrödinger, isto é, o representante do *estado*, $F(t)$, depende do tempo) como

$$i\hbar \frac{d}{dt}F(t) = [H, F(t)]. \quad (1.5)$$

Essa mesma equação (equação de Liouville-von Neumann) se estende na mesma forma a operadores densidade mistos, como pode ser verificado usando a representação (1.2) e a unitariedade da evolução temporal dos estados naturais.

Exercício:

3. Calcule a evolução temporal do operador densidade do exercício 2. sob a ação de um campo magnético externo, constante, na direção definida por ângulos esféricos (θ, φ) .

1.1.2 Operadores densidade reduzidos, decoerência

A caracterização de estados quânticos em termos de operadores (ou matrizes) densidade é crucial quando o sistema em consideração é parte (subsistema) de um sistema interagente maior. Formalmente, nessa situação o espaço de fases quântico é realizado como o *produto* de dois espaços vetoriais complexos, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, onde e.g. \mathcal{H}_2 corresponde à parte não observada do sistema maior. As variáveis dinâmicas do subsistema observado são da forma $\hat{D}_1 \otimes \mathcal{I}_2$, sendo o segundo fator o operador identidade de \mathcal{H}_2 . Supondo que o estado do sistema maior seja um estado puro descrito por um vetor de estado normalizado $|\alpha\rangle$ de \mathcal{H} ou, equivalentemente, pelo operador densidade $F_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|$, e introduzindo bases $\{|\mu\rangle\}$ e $\{|\nu\rangle\}$ respectivamente em \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 , o cálculo de valores médios das variáveis dinâmicas do subsistema observado fica

$$Tr \left[(\hat{D}_1 \otimes \mathcal{I}_2) F_\alpha \right] = \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \langle \mu | \hat{D}_1 | \mu' \rangle \delta_{\nu\nu'} \langle \mu' \nu' | F_\alpha | \mu \nu \rangle = \sum_{\mu\mu'} \langle \mu | \hat{D}_1 | \mu' \rangle \sum_{\nu} \langle \mu' \nu | F_\alpha | \mu \nu \rangle. \quad (1.6)$$

Nesta última expressão aparece o objeto

$$\sum_{\nu} \langle \mu' \nu | F_\alpha | \mu \nu \rangle = \langle \mu' | Tr_2 F_\alpha | \mu \rangle \equiv \langle \mu' | F_\alpha^{(1)} | \mu \rangle, \quad (1.7)$$

chamado *matriz densidade reduzida* (correspondente ao operador densidade reduzido $F_\alpha^{(1)} = Tr_2 F_\alpha$) que descreve o estado quântico do subsistema \mathcal{H}_1 . Em termos desse objeto o valor esperado (1.6) pode ser escrito como

$$Tr \left[(\hat{D}_1 \otimes \mathcal{I}_2) F_\alpha \right] = Tr \left[\hat{D}_1 F_\alpha^{(1)} \right]. \quad (1.8)$$

A operação Tr_2 , cujo sentido explícito aparece na Eq. (1.7), consiste num *traço parcial* tomado no âmbito do espaço \mathcal{H}_2 apenas.

O operador densidade reduzido $F_\alpha^{(1)}$ descreve completamente o estado quântico do *subsistema* correspondente a \mathcal{H}_1 . Mesmo no caso (considerado aqui) em que o estado do sistema maior é puro, o estado do subsistema será em geral misto, não podendo portanto ser representado por um vetor de estado no respectivo espaço de fases. Esse operador (hermiteano, não negativo e

de traço 1) pode sempre ser diagonalizado, representando-o em termos de seus estados naturais normalizados

$$F_\alpha^{(1)}|\xi_n\rangle = p_n|\xi_n\rangle, \quad \langle\xi_n|\xi_{n'}\rangle = \delta_{nn'} \quad (1.9)$$

como

$$F_\alpha^{(1)} = \sum_n |\xi_n\rangle p_n \langle\xi_n|$$

e o caráter misto de $F_\alpha^{(1)}$ se deve a que, em geral, mais de um dos autovalores (não negativos) p_n é diferente de zero mesmo se F_α corresponde a um estado puro. Essa perda de pureza do estado quântico pela restrição da observação a um subsistema do sistema maior do qual ele é parte, é conhecida como *decoerência*, e desempenha atualmente um papel importante na análise do processo de medida quântico [1].

Exercício:

4. Tomando, como acima, $F_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|$ e os estados naturais $|\xi_n\rangle$ da Eq. (1.9) com $p_n \neq 0$, defina os estados de \mathcal{H}_2

$$|\zeta_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_n}} \langle\xi_n|\alpha\rangle$$

onde o produto escalar com barra dupla significa integração sôbre as variáveis de \mathcal{H}_1 apenas. Mostre então que

$$\langle\zeta_n|\zeta_{n'}\rangle = \delta_{nn'},$$

isto é, os estados $|\zeta_n\rangle$ assim definidos são ortonormais. Mostre a seguir que, em vista desse resultado, o estado $|\alpha\rangle$ pode ser escrito como

$$|\alpha\rangle = \sum_n \sqrt{p_n} |\xi_n\rangle \otimes |\zeta_n\rangle$$

que é a chamada *decomposição de Schmidt* do estado $|\alpha\rangle$ [2, 3]. Use essa decomposição para mostrar que a densidade reduzida $F_\alpha^{(2)} = Tr_1 F_\alpha$ tem os mesmos autovalores que $F_\alpha^{(1)}$, e que seus estados naturais são os $|\zeta_n\rangle$.

1.2 Sistemas de muitas partículas idênticas

O espaço de fases quântico adequado para descever sistemas de muitas partículas idênticas é o espaço de Fock. Ele acomoda naturalmente tanto sistemas em que o número de constituintes é

conservado (e.g. núcleos atômicos como estados de muitos nucleons, ${}^4\text{He}$, etc.) como sistemas em que esse número não é conservado (e.g. fons). No primeiro caso, permite ainda introduzir de forma simples aproximações que se permitem violar a conservação do número de constituintes (e.g. aproximação de Hartree-Fock-Bogolyubov para bosons ou fermions, teoria BCS). De fato, introdução de aproximações que violam simetrias do sistema como recurso para simplificar o tratamento de determinados tipos de correlações de muitos corpos é um recurso geral muito útil e de uso comum para esta classe de sistemas.

O estado (em geral misto) de um sistema de muitas partículas idênticas será portanto caracterizado em geral por um operador densidade F (hermiteano, não negativo e de traço 1) no espaço de Fock apropriado (bosons ou férmions). Esse objeto é em geral extremamente complexo, já que deve conter a informação relativa a todas as correlações irreduzíveis de muitos corpos existentes no sistema. Na medida em que o interesse de trabalho recaia sobre um subconjunto mais restrito e específico de propriedades (e.g. propriedades de um corpo, funções de correlação de dois corpos), é conveniente extrair dele a informação relevante através da construção das densidades reduzidas apropriadas (e.g. de um ou dois corpos). Isso se faz construindo, a partir de F , médias de produtos apropriados de operadores de criação e aniquilação.

A) Bosons.

Neste caso os operadores de criação e aniquilação a_ν^\dagger , a_ν referentes a uma base de estados de um corpo $\{|\nu\rangle\}$ satisfazem relações de comutação

$$[a_\nu, a_{\nu'}^\dagger] = \delta_{\nu\nu'}; \quad [a_\nu, a_{\nu'}] = [a_\nu^\dagger, a_{\nu'}^\dagger] = 0.$$

As densidades reduzidas mais simples que podem ser construídas nesse caso são

$$\begin{aligned} A_\nu &= Tr(a_\nu F) = [Tr(a_\nu^\dagger F)]^* \\ \rho_{\nu\nu'} &= Tr(a_{\nu'}^\dagger a_\nu F) = (\rho_{\nu'\nu})^* \\ \Pi_{\nu\nu'} &= Tr(a_{\nu'} a_\nu F) = [Tr(a_\nu^\dagger a_{\nu'}^\dagger F)]^*. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Esses objetos são em geral números complexos, sendo a matriz $\rho_{\nu\nu'}$ hermiteana e a matriz $\Pi_{\nu\nu'}$ simétrica. É imediato ainda que

$$Tr\rho = Tr\left(\sum_\nu a_\nu^\dagger a_\nu F\right) \equiv Tr(\hat{N}F) \equiv \langle N \rangle \quad (1.11)$$

que é o número médio de bosons em F , sendo \hat{N} o operador número de bosons. As quantidades A_ν e $\Pi_{\nu\nu'}$ são nulas quando a dispersão do número de bosons em F , $\Delta N^2 = Tr(\hat{N}^2 F) - [Tr(\hat{N}F)]^2$ é zero (isto é, F descreve um estado com número bem definido de bosons).

As matrizes $\rho_{\nu\nu'}$ e $\Pi_{\nu\nu'}$ são chamadas respectivamente matriz densidade de um corpo e matriz de emparelhamento. A matriz densidade de um corpo contém toda a informação necessária para o cálculo de valores médios de variáveis dinâmicas da forma (*operadores de um corpo*)

$$\hat{D}_1 = \sum_{\nu\nu'} D_{\nu'\nu}^{(1)} a_{\nu'}^\dagger a_\nu$$

onde $D_{\nu'\nu}^{(1)} = \langle \nu' | D^{(1)} | \nu \rangle$ são elementos de matriz do operador de um boson $D^{(1)}$ nos estados da base $\{|\nu\rangle\}$. De fato,

$$Tr(\hat{D}_1 F) = Tr(D^{(1)} \rho).$$

Ela desempenha portanto o papel de uma densidade reduzida para um “subsistema de um corpo” no sentido da seção 1.2 (cf. Eq. (1.8)), embora a condição de normalização usual de traço 1 seja modificada como na Eq. (1.11), que é mais conveniente no contexto de sistemas de muitas partículas idênticas.

B) Férmions.

Os operadores de criação e aniquilação c_ν^\dagger, c_ν satisfazem neste caso regras de anticomutação

$$\{c_\nu, c_{\nu'}^\dagger\} = \delta_{\nu\nu'}; \quad \{c_\nu, c_{\nu'}\} = \{c_\nu^\dagger, c_{\nu'}^\dagger\} = 0$$

e as densidades reduzidas mais simples a considerar são a matriz densidade de um corpo e a densidade de emparelhamento

$$\begin{aligned} \rho_{\nu\nu'} &= Tr(c_{\nu'}^\dagger c_\nu F) = (\rho_{\nu'\nu})^* \\ \Pi_{\nu\nu'} &= Tr(c_{\nu'} c_\nu F) = [Tr(c_\nu^\dagger c_{\nu'}^\dagger F)]^*. \end{aligned} \quad (1.12)$$

A não consideração de traços envolvendo um único operador c_ν se deve à suposição de que, embora a dispersão do número de férmions possa não ser nula, F não contém componentes com estatísticas diferentes, isto é, com números de férmions com paridade diferente. A matriz densidade de um corpo é hermiteana e tem seu traço normalizado também ao número médio de férmions em F , e a matriz de emparelhamento é antissimétrica devido à anticomutatividade dos operadores de aniquilação. Uma particular vantagem da normalização de $\rho_{\nu\nu'}$ é aqui particularmente evidente: no caso particular em que F corresponde a um estado determinantal puro com N férmions (isto é, na ausência de correlações entre os férmions, além das impostas pela condição de antissimetria) essa matriz é idempotente. Isso não é verdade quando o traço é normalizado a 1, o que pode ser entendido como uma consequência das correlações de Pauli associadas à antissimetria.

1.2.1 A projeção gaussiana de F

Uma classe de operadores densidade F para sistemas de muitos bosons ou férmions idênticos que é suficientemente simples para poder ser trabalhada explicitamente é a de operadores densidade gaussianos F_g , que tem a forma de uma exponencial de uma forma quadrática hermiteana nos operadores de criação e aniquilação. No caso de bosons

$$F_g = \frac{\exp \left[\sum_{\nu\nu'} \left(m_{\nu\nu'} a_\nu a_{\nu'} + m_{\nu\nu'}^* a_\nu^\dagger a_{\nu'}^\dagger + n_{\nu\nu'} a_\nu^\dagger a_{\nu'} \right) + \sum_\nu \left(q_\nu a_\nu + q_\nu^* a_\nu^\dagger \right) \right]}{\text{Tr} \left\{ \exp \left[\sum_{\nu\nu'} \left(m_{\nu\nu'} a_\nu a_{\nu'} + m_{\nu\nu'}^* a_\nu^\dagger a_{\nu'}^\dagger + n_{\nu\nu'} a_\nu^\dagger a_{\nu'} \right) + \sum_\nu \left(q_\nu a_\nu + q_\nu^* a_\nu^\dagger \right) \right] \right\}} \quad (1.13)$$

com $n_{\nu\nu'} = n_{\nu'\nu}^*$. Para o caso de férmions devem ser omitidos os termos lineares, além de ser feita a substituição dos operadores de criação e aniquilação bosônicos pelos fermiônicos.

A simplicidade do tratamento de tais densidades se deve a que é sempre possível diagonalizar a forma quadrática por meio de transformações canônicas tipo Bogolyubov dos operadores de criação e aniquilação. Para o caso bosônico, elas podem ser implementadas em geral pondo

$$a_\nu = A_\nu + \sum_\mu \left(U_{\nu\mu} b_\mu - V_{\nu\mu} b_\mu^\dagger \right) \quad (1.14)$$

onde as quantidades A , U e V são números-c. A canonicidade da transformação (isto é, a condição de que os novos operadores b_μ , b_μ^\dagger satisfaçam também regras de comutação bosônicas) exige que as matrizes U e V satisfaçam às condições

$$\begin{aligned} UU^\dagger - VV^\dagger &= 1 \\ VU^T - UV^T &= 0 \end{aligned} \quad (1.15)$$

onde U^T , V^T indicam as transpostas das matrizes U e V . Reescrevendo a forma quadrática da Eq. (1.13) em termos dos novos bosons, é possível escolher os parâmetros da transformação de modo que F_g assuma a forma simples

$$F_g = \frac{\exp \sum_\mu N_\mu b_\mu^\dagger b_\mu}{\text{Tr} \left\{ \exp \sum_\mu N_\mu b_\mu^\dagger b_\mu \right\}} = \prod_\mu \frac{\exp \left[N_\mu b_\mu^\dagger b_\mu \right]}{\text{Tr} \left\{ \exp \left[N_\mu b_\mu^\dagger b_\mu \right] \right\}}. \quad (1.16)$$

Os traços nesta última expressão podem ser facilmente calculados. Introduzindo finalmente a definição

$$n_\mu = \frac{e^{N_\mu}}{1 - e^{N_\mu}}$$

a forma geral simplificada da densidade gaussiana fica

$$F_g = \prod_{\mu} \frac{1}{1 + n_{\mu}} \left(\frac{n_{\mu}}{1 + n_{\mu}} \right)^{b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu}}. \quad (1.17)$$

Uma propriedade importante das densidades gaussianas (1.13) é a de que elas são densidades no espaço de Fock completo que são inteiramente determinadas (no caso bosônico) pelos observáveis (1.10). Em outras palavras, dada uma densidade qualquer F , é possível determinar os coeficientes da forma quadrática que entra em (1.13) (ou, equivalentemente e de forma mais pática, os parâmetros n_{μ} e a transformação (1.14) a partir das condições

$$\begin{aligned} Tr(a_{\nu} F_g) &= Tr(a_{\nu} F) \\ Tr(a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} F_g) &= Tr(a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} F) \\ Tr(a_{\nu'} a_{\nu} F_g) &= Tr(a_{\nu'} a_{\nu} F). \end{aligned} \quad (1.18)$$

Para levar a cabo uma tal determinação [4], um primeiro passo é identificar os A_{ν} da Eq. (1.14) com os valores médios ef F dos operadores a_{ν} como na primeira das Eqs. (1.10). Feita essa identificação, as contribuições dos A_{ν} para a matriz densidade de um corpo e para a matriz de emparelhamento são separadas definindo

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{\nu\nu'} &= \rho_{\nu\nu'} - A_{\nu} A_{\nu'}^* \\ \tilde{\Pi}_{\nu\nu'} &= \Pi_{\nu\nu'} - A_{\nu} A_{\nu'}. \end{aligned}$$

Como pode ser notado facilmente, as matrizes $\tilde{\rho}$ e $\tilde{\Pi}$ são definidas da mesma forma que nas Eqs. (1.10) substituindo os operadores a_{ν} e a_{ν}^{\dagger} pelos operadores transladados de média nula $a_{\nu} - A_{\nu}$ e $a_{\nu}^{\dagger} - A_{\nu}^*$ respectivamente. Essas novas matrizes podem ser combinadas para definir uma matriz hermiteana de dimensão dupla chamada *densidade de um corpo estendida* que é escrita sob a forma

$$R = \begin{pmatrix} \tilde{\rho} & \tilde{\Pi} \\ \tilde{\Pi}^* & 1 + \tilde{\rho}^* \end{pmatrix} = R^{\dagger}.$$

Essa matriz permite a determinação da transformação de Bogolyubov (1.14, 1.15) através da solução do problema secular

$$GRX = XGN \quad (1.19)$$

onde as matrizes G , X e N têm a forma

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} U & V \\ V^* & U^* \end{pmatrix}, \quad N = \begin{pmatrix} n & 0 \\ 0 & 1+n \end{pmatrix}.$$

A matriz G desempenha o papel de uma métrica indefinida exigida pela estatística bosônica, e a matriz N é diagonal e real. A submatriz n contém como elementos diagonais os n_μ que aparecem na Eq. (1.17), e a transformação para os novos operadores bosônicos b_μ, b_μ^\dagger é escrita em notação matricial como

$$\begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} = X^\dagger \begin{pmatrix} a - A \\ a^\dagger - A^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^T \\ V^\dagger & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a - A \\ a^\dagger - A^* \end{pmatrix}.$$

Para verificar que essa transformação satisfaz, em particular, as condições de canonicidade (1.15) basta notar que (1.19) é um problema de autovalores não hermiteano. Considerando então o problema adjunto

$$RG\tilde{X} = \tilde{X}GN,$$

usando $G = G^\dagger$, $G^2 = 1$ e $GN = NG$ (pois essas matrizes são simultaneamente diagonais), uma comparação dessa equação com a (1.19) mostra que X e \tilde{X} são relacionadas por

$$\tilde{X} = GX, \quad X = G\tilde{X}.$$

A biortogonalidade das soluções X e \tilde{X} permite então escrever a condição de normalização

$$\tilde{X}^\dagger X = X^\dagger GX = G$$

e a relação de completeza

$$XG\tilde{X}^\dagger = G.$$

Escrevendo essas relações em termos das matrizes U e V resulta

$$\begin{aligned} U^\dagger U - V^T V^* &= 1 \\ V^\dagger U - U^T V^* &= 0 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} UU^\dagger - VV^\dagger &= 1 \\ V^*U^\dagger - U^*V^\dagger &= 0. \end{aligned}$$

O resultado final desse processo é portanto a determinação de uma particular densidade gaussiana F_g que é equivalente à densidade de partida F (em geral não gaussiana) no que se refere ao cálculo das variáveis dinâmicas (1.14). Essa particular densidade gaussiana será chamada *projeção gaussiana* F_0 de F . Essa denominação se deve ao fato de que é possível construir explicitamente [4] um *operador de projeção* \mathcal{P} tal que a projeção gaussiana F_0 de F é dada por

$$F_0 = \mathcal{P}F. \quad (1.20)$$

Mais sobre esse operador de projeção será dito no Capítulo 3. É importante lembrar que F_0 é um operador densidade definido no espaço de Fock *completo*. Isso significa que ele atribui um valor definido a qualquer variável dinâmica do sistema de muitos bosons. No entanto, esse valor coincide com o atribuído por F apenas para as variáveis (1.10), que podem por isso ser chamadas *variáveis gaussianas*. Pela própria construção de F_0 se pode ver que os valores atribuídos a outras variáveis por F_0 será sempre expresso em termos de parâmetros definidos a partir dos valores dos observáveis gaussianos em F apenas.

Exercício:

5. O espaço de fases de um oscilador harmônico unidimensional pode ser visto como o espaço de Fock para bosons em zero dimensões espaciais. Nesse caso existe um único operador de criação a^\dagger e as somas da Eq. (1.13) têm também um único termo. Obtenha as projeções gaussianas para as seguintes densidades:

$$\begin{aligned} i) \quad & F = |n\rangle\langle n|, \quad a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle \\ ii) \quad & F = \sum_n |n\rangle \frac{e^{-\beta n}}{1 - e^{-\beta}} \langle n| \\ iii) \quad & F = |v\rangle\langle v|, \quad a |v\rangle = v |v\rangle \\ iv) \quad & F = (a^\dagger - v^*) |v\rangle\langle v| (a - v) \\ v) \quad & F = |\alpha\rangle\langle \alpha|, \quad |\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |2\rangle). \end{aligned}$$

Desses casos apenas *ii)* e *iii)* são puramente gaussianos, i.e. $F = F_0$; e apenas *iii)* é uma densidade gaussiana pura, i.e. $F_0^2 = F_0$. Note que este é um caso limite da Eq. (1.17) com $n \rightarrow 0$.

O caso de sistemas de muitos férmions pode ser tratado de forma inteiramente análoga [5, 6, 7]. A forma quadrática geral que aparece na densidade gaussiana fermiônica pode também ser diagonalizada por uma transformação de Bogolyubov

$$c_\nu = \sum_\mu (U_{\nu\mu}d_\mu + V_{\nu\mu}d_\mu^\dagger). \quad (1.21)$$

A ausência do termo correspondente ao primeiro termo da Eq. (1.14) se deve à ausência de termos lineares na forma quadrática neste caso. As relações de anticomutação fermiônicas impõe como condições de canonicidade

$$\begin{aligned} UU^\dagger + VV^\dagger &= 1 \\ UV^T + VU^T &= 0. \end{aligned}$$

A equivalência entre a densidade gaussiana e uma densidade geral F ao nível das variáveis gaussianas pode ser estabelecida através da consideração de uma densidade estendida de um corpo que se constroi neste caso como [6, 7]

$$R = \begin{pmatrix} \rho & -\Pi \\ \Pi^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} = R^\dagger \quad (1.22)$$

que é também uma matriz hermiteana, em vista da antissimetria de Π e da hermiticidade de ρ . Os coeficientes da transformação de Bogolyubov apropriada se obtém agora do problema de autovalores hermiteano

$$\begin{pmatrix} \rho & -\Pi \\ \Pi^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U & V \\ V^* & U^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V \\ V^* & U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n & 0 \\ 0 & 1 - n \end{pmatrix}$$

onde a submatriz n é diagonal. As relações de ortonormalidade e completeza dos autovetores são novamente consistentes com as condições de canonicidade e os operadores fermiônicos transformados podem ser escritos em forma matricial como

$$\begin{pmatrix} d \\ d^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^T \\ V^\dagger & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix}.$$

A forma final diagonalizada da densidade gaussiana fermiônica se simplifica consideravelmente em vista da propriedade idempotente do operador número $d_\mu^\dagger d_\mu = (d_\mu^\dagger d_\mu)^2$. De fato ela pode ser escrita [8]

$$F_0 = \frac{\exp \sum_\mu N_\mu d_\mu^\dagger d_\mu}{Tr \left\{ \exp \sum_\mu N_\mu d_\mu^\dagger d_\mu \right\}} = \prod_\mu \frac{\exp [N_\mu d_\mu^\dagger d_\mu]}{Tr \left\{ \exp [N_\mu d_\mu^\dagger d_\mu] \right\}} = \prod_\mu [n_\mu d_\mu^\dagger d_\mu + (1 - n_\mu) d_\mu d_\mu^\dagger] \quad (1.23)$$

onde foi usada a definição

$$n_\mu = \frac{e^{N_\mu}}{1 + e^{N_\mu}}.$$

Da mesma forma que no caso bosônico, a determinação da transformação de Bogolyubov através da densidade de um corpo estendida (1.21) torna a densidade gaussiana F_0 , Eq. (1.23), equivalente à densidade completa F no que se refere a valores de variáveis dinâmicas gaussianas; e a existência de um operador de projeção que implementa no caso fermiônico a Eq. (1.20) permite que F_0 possa ser considerada de fato com a projeção gaussiana da densidade completa F que lhe deu origem.

1.2.2 Aproximação variacional gaussiana

As densidades gaussianas (1.17) e (1.23) podem ser usadas no contexto dos métodos variacionais estudados por Balian e Vénéroni [9] como ilustração do seu uso na aproximação de propriedades dinâmicas de um sistema de muitas partículas idênticas. Numa descrição grand-canônica, o estado de um sistema cuja dinâmica é dada por uma Hamiltoniana H é descrito pelo operador densidade

$$F = \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}}$$

onde $\mathcal{H} = H - \mu\hat{N}$, \hat{N} é o operador número de partículas, μ é um multiplicador de Lagrange a que cabe manter sob controle o número médio de partículas no sistema e que desempenha o papel do potencial químico e Z é a grand-função de partição

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}.$$

O método variacional de Balian e Vénéroni para aproximar Z consiste em buscar extremos do funcional

$$f(M) = \text{Tr} e^{-M}$$

sujeito à condição de vínculo $M - \beta\mathcal{H} = 0$, que é levada em conta através da introdução de uma matriz B de multiplicadores de Lagrange. Isso leva ao problema variacional

$$\delta\Phi(M, B) = \delta\text{Tr} \left[e^{-M} + B(M - \beta\mathcal{H}) \right] = 0. \quad (1.24)$$

A variação de M dá $B = e^{-M}$, e a eliminação de B da Eq. (1.24) conduz ao objeto, dependente apenas de M ,

$$\Phi(M, B) \rightarrow \Psi(M) = \text{Tr} \left[e^{-M} (1 + M - \beta \mathcal{H}) \right]. \quad (1.25)$$

Balian e Vénéroni mostram [9] que $Z \geq \Psi(M)$ para *qualquer* M . Definindo $z = \text{Tr} e^{-M}$ é possível escrever

$$e^{-M} = z \mathcal{F}$$

onde agora $\text{Tr} \mathcal{F} = 1$. O papel de uma tal parametrização de M é separar explicitamente a normalização do traço e a “estrutura intínseca” dessa matriz. Substituindo-a na Eq. (1.25) e variando z resulta uma equação que permite eliminar essa variável levando à expressão variacional para o grand-potencial Ω

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z \leq \text{Tr} [(\mathcal{H} + KT \ln \mathcal{F}) \mathcal{F}] \quad (1.26)$$

onde \mathcal{F} é um operador densidade arbitrário de traço 1, e onde foi usada a notação $1/\beta = KT$. Na Eq. (1.26) é possível em particular identificar um fator que representa a entropia como $S_0 = -K \text{Tr} [\mathcal{F} \ln \mathcal{F}]$. Uma aproximação gaussiana para Ω consiste simplesmente em tomar para \mathcal{F} uma densidade gaussiana F_0 e tratar os parâmetros que a definem (i.e., os parâmetros da transformação de Bogolyubov além dos n_μ e, para o caso de bosons, os A_ν). Os traços envolvidos na Eq. (1.26) podem ser calculados explicitamente e o processo de variar os parâmetros que definem a densidade gaussiana pode ser simplificado consideravelmente no caso de sistemas dotados de simetrias que permitam restringir a forma da transformação de Bogolyubov [5].

Exercício:

6. Aplique esse método variacional gaussiano para temperatura finita ao problema de um gás de bose ideal [10] cuja Hamiltoniana (na representação de momentos com condições periódicas de contorno num volume V) é

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}.$$

Por simplicidade tome o estado do sistema como sendo uniforme e isotrópico. Essa hipótese permite restringir a transformação canônica geral (1.14) dos $a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}}^\dagger$ (cujos parâmetros podem ser tomados como reais no caso de problemas estáticos) escrevendo-a como

$$a_{\vec{k}} = A_0 \delta_{\vec{k}0} + \cosh \sigma_k b_{\vec{k}} + \sinh \sigma_k b_{-\vec{k}}^\dagger,$$

isto é, o único operador de aniquilação que pode adquirir um valor médio não nulo é o de momento zero, e a transformação de Bogolyubov preserva o momento e é independente dos ângulos de \vec{k} . Use então esses elementos para obter uma expressão para Ω em termos de A_0 , dos σ_k e n_k (estes também independentes de ângulos) usando

e Eq. (1.26). A variação desses parâmetros leva aos resultados usuais, em particular para a condensação de Bose do gás ideal [11].

1.2.3 Aproximação gaussiana cinética

Uma aproximação gaussiana para a evolução temporal do estado do sistema de muitos corpos pode ser facilmente obtida a partir do resultado segundo o qual a densidade gaussiana F_0 equivalente a uma densidade dada F pode ser implementada como uma projeção dessa densidade. De fato, esse resultado permite escrever uma densidade arbitrária como

$$F(t) = \mathcal{P}(t)F(t) + (1 - \mathcal{P}(t))F(t) \equiv F_0(t) + F'(t) \quad (1.27)$$

e conseqüentemente a equação de Liouville-von Neumann (1.5) como

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{P}(t)F(t) = \mathcal{P}[H, F_0] + \mathcal{P}[H, F'].$$

Uma propriedade importante do projetor \mathcal{P} é a de que ele pode sempre ser escolhido de forma que (na representação de Schrödinger) $\dot{\mathcal{P}}F = 0$, de modo que a equação acima de fato se reduz a

$$i\hbar \dot{F}_0 = \mathcal{P}[H, F_0] + \mathcal{P}[H, F']. \quad (1.28)$$

Essa projeção da equação (1.5) mostra que a dependência temporal da projeção gaussiana F_0 provém tanto de uma contribuição puramente gaussiana (primeiro termo do lado direito de (1.28)) como de uma contribuição resultante da projeção gaussiana da derivada temporal de $F'(t)$. A aproximação gaussiana cinética consiste em *truncar* a Eq. (1.28) eliminando o seu último termo. Como essa equação representa um problema de condições iniciais, por consistência deve-se supor que a condição inicial $F(t=0)$ seja também uma densidade gaussiana, isto é $\mathcal{P}(0)F(0) = F(0)$ e portanto $F'(0) = 0$. Como será discutido no capítulo seguinte, essa restrição da equação de Liouville-von Neumann ao conjunto das densidades gaussianas corresponde à aproximação de Hartree-Fock-Bogolyubov *dependente do tempo*. Como uma densidade gaussiana é completamente determinada pelos valores médios das variáveis gaussianas, ela pode ser expressa sob a forma de equações de movimento (em geral acopladas) para essas quantidades.

Capítulo 2

Dinâmica na aproximação gaussiana: exemplos

Neste capítulo vão, apresentados breve e simplesmente, alguns exemplos da utilização dos estados gaussianos, tanto num contexto estacionário quanto num dependente do tempo. Alguns detalhes adicionais podem ser encontrados nas referências citadas em cada caso.

2.1 Aproximação de Hartree-Fock para gás de Fermi não ideal

O objetivo desta seção é mostrar de forma simples e direta que a restrição do estado de um sistema de muitos férmions à forma gaussiana (1.23) corresponde, no caso particular em que a transformação de Bogolyubov (1.21) é trivializada pondo $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$ e $V = 0$, à aproximação de Hartree-Fock dependente do tempo, proposta por Dirac em 1930 [12]. Quando essa restrição não é feita, a aproximação resultante é a de Hartree-Fock-Bogolyubov dependente do tempo. As soluções estacionárias das equações respectivas dão evidentemente aproximações de campo médio com e sem efeitos de emparelhamento para o estado fundamental do sistema. Essa aproximação é o ponto de partida para um dos cálculos cinéticos com a inclusão de efeitos colisionais descritos na ref. [13].

A Hamiltoniana a ser considerada tem a forma geral

$$H = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | \tilde{v} | \gamma\delta \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma$$

onde os estados de um férmion $\{|\alpha\rangle\}$ são uma base de trabalho ortonormal conveniente e os elementos de matriz da interação de dois corpos $v(1, 2)$ é antissimetrizado:

$$\langle \alpha\beta | \tilde{v} | \gamma\delta \rangle = \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta - \delta\gamma \rangle.$$

A equação de movimento aproximada é dada pela forma truncada da Eq. (1.28)

$$i\hbar\dot{F}_0 = \mathcal{P}[H, F_0] \quad (2.1)$$

e o estado gaussiano fermiônico obtido com $V = 0$ se escreve como

$$F_0 = \prod_{\mu} \left[n_{\mu} d_{\mu}^{\dagger} d_{\mu} + (1 - n_{\mu}) d_{\mu} d_{\mu}^{\dagger} \right]$$

onde os operadores de criação e aniquilação se referem á base de um férmion transformada

$$|\mu\rangle = \sum_{\alpha} U_{\alpha\mu} |\alpha\rangle \quad (2.2)$$

escolhida de forma a diagonalizar a matriz densidade de um corpo $\rho_{\alpha\beta}$, isto é, a nova base corresponde à base (dependente do tempo) dos estados naturais da matriz densidade de um corpo:

$$\rho_{\mu\mu'} = n_{\mu} \delta_{\mu\mu'} = \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha\mu}^* U_{\beta\mu'} \rho_{\alpha\beta}.$$

Neste caso a densidade F_0 é completamente determinada apenas por $\rho_{\alpha\beta}$ (ou, equivalentemente, pelos autovalores n_{μ} e por U), de forma que é possível evitar a explicitação do projetor \mathcal{P} tomando em vez disso o traço da Eq. (2.1) com $c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha}$. O que se obtém então é a equação

$$i\hbar\dot{\rho}_{\alpha\beta} = i\hbar \text{Tr} \left(c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} \dot{F}_0 \right) = \text{Tr} \left(c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} [H, F_0] \right) = \text{Tr} \left([c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha}, H] F_0 \right), \quad (2.3)$$

onde a última expressão foi obtida usando a propriedade cíclica do traço. A explicitação completa dessa equação, por outro lado, envolve a questão técnica de calcular o traço do último termo no espaço de Fock. O cálculo de traços desse tipo é bem conhecido [14] e é feito somando todos os elementos de matriz diagonais numa base conveniente do espaço de Fock. A base conveniente neste caso é a dos autovetores simultâneos dos operadores de número $d_{\mu}^{\dagger} d_{\mu}$. Os operadores c, c^{\dagger} que aparecem em (2.3) são reescritos em termos dos d, d^{\dagger} através da transformação U como na Eq. (2.2). Após um cálculo relativamente longo é possível reescrever (2.3) sob a forma

$$i\hbar\dot{\rho}_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma} (h_{\alpha\gamma} \rho_{\gamma\beta} - \rho_{\alpha\gamma} h_{\gamma\beta}) \quad (2.4)$$

onde foi usada a definição da Hamiltoniana efetiva de campo médio

$$h_{\alpha\beta} \equiv t_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma\delta} \langle \alpha\gamma | \tilde{v} | \beta\delta \rangle \rho_{\delta\gamma}.$$

Devido à hermiticidade dessa Hamiltoniana a evolução temporal de campo médio da matriz densidade de um corpo é unitária, e portanto os autovalores n_μ dessa matriz são independentes do tempo. Esse fato pode também ser mostrado diretamente calculando a derivada temporal de um autovalor de $\rho_{\alpha\beta}$:

$$i\hbar \dot{n}_\mu = \text{Tr} \left([d_\mu^\dagger d_\mu, H] F_0 \right) = \text{Tr} \left([F_0, d_\mu^\dagger d_\mu] H \right)$$

onde, dada a forma de F_0 , é claro que o comutador na última expressão se anula. Na realidade é uma propriedade geral das aproximações cinéticas de campo médio a de que, ao suprimirem correlações, elas suprimem mecanismos de decoerência que seriam os responsáveis pela evolução temporal *não unitária* dos autovalores da matriz densidade de um corpo.

O caso específico tratado na ref. [13] corresponde à solução estacionária da Eq. (2.3) para um gás de Fermi uniforme. Nesse caso as bases $\{|\alpha\rangle\}$ e $\{|\mu\rangle\}$ coincidem e consistem de autoestados do momento com condições de contorno periódicas num volume de quantização \mathcal{V} . A hamiltoniana de campo médio é diagonal e dada por

$$h_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sum_{\vec{k}'} \langle \vec{k}\vec{k}' | \tilde{v} | \vec{k}\vec{k}' \rangle n_{\vec{k}'}$$

com as ocupações normais de um gas de Fermi degenerado

$$n_{\vec{k}} = \Theta(k_F - k)$$

onde k_F é o momento de Fermi e $\Theta(x)$ é a função degrau.

2.2 Oscilador paramétrico

O problema tratado aqui é o problema de condições iniciais para um único oscilador harmônico forçado e com parâmetros dependentes do tempo [15]. A Hamiltoniana a ser tratada é escrita como

$$H = f_1(t)a^\dagger a + f_2(t)a^\dagger a^\dagger + f_2^*(t)aa + f_3(t)a^\dagger + f_3^*(t)a$$

onde $f_1(t)$ é real e positiva. A relevância das projeções gaussianas para este problema consiste em que, se $F(t)$ é a solução da equação de Liouvilli-von Neumann correspondente à condição

inicial $F(0)$, então a sua projeção gaussiana $F_0(t)$ satisfaz à equação (1.28) *sem o último termo*, que se anula identicamente devido à particular forma quadrática de H *sem termo de autointeração entre os bosons*:

$$i\hbar\dot{F}_0(t) = \mathcal{P}[H, F_0(t)]. \quad (2.5)$$

Isso significa que a dinâmica das variáveis gaussianas (1.18) é fechada, independentemente da presença de correlações (no sentido $F'(t) \neq 0$, cf. Eq. (1.27)) no estado do sistema. Essa dinâmica pode ser expressa sob a forma de equações diferenciais para os valores médios das variáveis gaussianas simplesmente tomando os traços apropriados da Eq. (2.5).

2.3 Oscilador paramétrico e teoria ϕ^4 em 1+1 dimensões

O desacoplamento dinâmico das variáveis gaussianas que ocorre no caso da seção anterior deixa de valer quando termos anarmônicos são acrescentados à Hamiltoniana. Estes termos representam interações no sistema de muitos bosons que fazem com que a dinâmica das variáveis gaussianas passe a depender também de $F'(t)$. O truncamento que consiste na eliminação desses efeitos de correlação leva imediatamente a uma aproximação de campo médio do tipo Hartree-Fock-Bogolyubov para o sistema de muitos bosons. As refs. [16, 17] desenvolvem e calculam essa aproximação, e a ref. [18] trata da extensão para o caso de um campo escalar unidimensional ϕ com autointeração do tipo ϕ^4 . Essas referências tratam também os efeitos de correlação associados a $F'(t)$, que serão objeto do capítulo 3.

2.4 Modelo de Jaynes-Cummings

Este é um modelo solúvel simples que trata de um “átomo de dois níveis” (formalmente descrito por um spin 1/2) acoplado a um oscilador harmônico conforme descrito pela Hamiltoniana

$$H = \frac{\epsilon}{2}\sigma_3 + a^\dagger a + \lambda(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger)$$

onde σ_3 e $\sigma_\pm = \sigma_1 \pm i\sigma_2$ são matrizes de Pauli. O que torna esse modelo solúvel é a existência da constante de movimento

$$\hat{\mathcal{N}} = \frac{\sigma_3}{2} + a^\dagger a$$

que permite reduzir a hamiltoniana a uma coleção de matrizes 2×2 na representação definida pelos autovetores de σ_3 e $a^\dagger a$ $\{|+\rangle \otimes |n\rangle, |-\rangle \otimes |n+1\rangle\}$.

As matrizes de Pauli podem ser representadas em termos de um par de operadores fermiônicos c_{\pm} pondo

$$\begin{aligned}\sigma_3 &\rightarrow c_+^\dagger c_- - c_-^\dagger c_+ \\ \sigma_{\pm} &\rightarrow c_{\pm}^\dagger c_{\mp}\end{aligned}$$

e uma (dupla) aproximação de campo médio pode ser obtida restringindo o estado do sistema a um produto de densidades gaussianas para os subsistemas fermiônico e bosônico respectivamente [19]

$$F_0 = F_0^{(F)} \otimes F_0^{(B)}$$

com

$$F_0^{(F)} = \prod_{j=\pm 1} [n_j d_j^\dagger d_j + (1 - n_j) d_j d_j^\dagger]$$

e

$$F_0^{(B)} = \frac{1}{1+p} \left(\frac{p}{1+p} \right)^{b^\dagger b}.$$

A interação entre os dois subsistemas introduz efeitos importantes de correlação entre eles, responsáveis em particular por fenômenos de decoerência e de recoerência na evolução temporal de cada um dos dois subsistemas. Um tratamento aproximado desses efeitos foi desenvolvido e calculado também na ref. [19] e será tratado no capítulo seguinte.

Capítulo 3

Correlações e dinâmica efetiva da projeção gaussiana

O propósito central deste capítulo é reincorporar à cinética da projeção gaussiana F_0 de um estado quântico representado por um operador densidade geral F os efeitos das correlações, separadas em F' como indicado na Eq. (1.27) e truncadas nos tratamentos de campo médio descritos no capítulo 2. A existência do operador de projeção \mathcal{P} tem um papel central no procedimento que vai ser descrito, cujo andamento geral em particular não depende da forma explícita desse operador em cada caso. A única propriedade relevante e geral além da propriedade idempotente é (tratando a dependência temporal do sistema na representação de Schrödinger; uma propriedade correspondente existe evidentemente quando se usa a representação de Heisenberg, v. ref. [18])

$$\dot{\mathcal{P}}(t)F(t) = 0 \quad (3.1)$$

como conseqüência da qual se tem

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}F = \dot{\mathcal{P}}F + \mathcal{P}\dot{F} = \dot{F}_0.$$

Devido a isso, o desenvolvimento formal que consiste na projeção da equação de Liouville-von Neumann será descrito inicialmente e de forma independente da determinação efetiva da forma explícita de \mathcal{P} . Esta é necessária para a efetiva implementação do procedimento a casos concretos e será tratada numa seção subsequente.

3.1 Projeção da equação de Liouville-von Neumann

A existência do projetor \mathcal{P} com a propriedade (3.1) e usando a notação introduzida em (1.27), permite reescrever a equação de Liouville-von Neumann como um par de equações acopladas para $F_0(t)$ e $F'(t)$. Essas equações se escrevem como

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{F}_0(t) &= \mathcal{P}(t)[H, F_0(t)] + \mathcal{P}(t)[H, F'(t)] \\ i\hbar\dot{F}'(t) &= \mathcal{Q}(t)[H, F_0(t)] + \mathcal{Q}(t)[H, F'(t)] \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde $\mathcal{Q}(t) = 1 - \mathcal{P}(t)$. A segunda dessas duas equações pode ser reescrita sob a forma

$$\left[i\hbar\frac{d}{dt} - \mathcal{Q}(t)L \right] F'(t) = \mathcal{Q}(t)LF_0(t)$$

onde, além de um rearranjo óbvio de termos, o Liouvilliano L foi definido (por conveniência de notação) como o (super)operador $[H, \]$. É importante notar que (super)operadores como êsse são objetos que agem linearmente sobre operadores (como, no caso, o operador densidade) dando como resultado outros operadores. A última equação pode ser resolvida formalmente com a ajuda da função de Green

$$G(t, t') = T \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \mathcal{Q}(\tau)L \right) \quad (3.3)$$

onde $T \exp$ indica uma exponencial ordenada temporalmente em vista da dependência temporal e da possível não comutatividade em tempos diferentes de \mathcal{Q} . A expressão resultante para $F'(t)$ é

$$F'(t) = G(t, 0)F'(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' G(t, t') \mathcal{Q}(t')LF_0(t'). \quad (3.4)$$

O primeiro termo dessa equação tem em conta as condições iniciais. Esse termo se anula para estados iniciais gaussianos, para os quais $F'(0) = 0$. Ela exprime a parte de correlações $F'(t)$ de $F(t)$ em termos de uma integral *sobre a história* do componente gaussiano $F_0(t)$, além da contribuição relacionada com as correlações iniciais. Substituindo-a na primeira das equações (3.2), resulta uma equação, formal mas *exata*, para $F_0(t)$ que é além do mais *fechada* nessa densidade, além de depender explicitamente da parte de correlação das condições iniciais:

$$i\hbar\dot{F}_0(t) = \mathcal{P}(t)LF_0(t) - \frac{i}{\hbar} \mathcal{P}(t) \int_0^t dt' LG(t, t') \mathcal{Q}(t')LF_0(t') + \mathcal{P}(t)LG(t, 0)F'(0). \quad (3.5)$$

O resultado final dessas manipulações é portanto um par de equações (Eqs. (3.4) e (3.5)) que remetem a determinação tanto de $F_0(t)$ como de $F'(t)$ à determinação *apenas* de sua projeção gaussiana, além evidentemente das condições iniciais. Quando a parte de correlações $F'(t)$ é simplesmente ignorada elas reproduzem a equação de movimento para $F_0(t)$ obtida na aproximação de campo médio.

Em termos práticos, aproximações são indispensáveis para o uso efetivo dessas equações. O objeto que força isso é a função de Green (3.3), que descreve o desenvolvimento progressivo *de correlações* (filtradas por meio da ação repetida do operador \mathcal{Q}) no sistema de muitos corpos. Nas aplicações que foram feitas dessas equações foi usada uma aproximação que consiste essencialmente em substituir essa função de Green por uma função de green *de campo médio* que simplesmente propaga as correlações geradas pela primeira ação de L no integrando das Eqs. (3.4) e (3.5).

3.2 Forma explícita dos operadores de projeção

3.3 Aplicações e resultados numéricos

Bibliografia

- [1] R. Omnès, *The Interpretation of Quantum Mechanics*, Princeton U. Press, 1994, Cap. 7.
- [2] E. Schmidt, *Math. Annalen* **63**, 433 (1906).
- [3] M. C. Nemes e A. F. R. de Toledo Piza, *Physica* **137A**, 367 (1986) e referencias aí citadas.
- [4] Lin Chi Yong, tese de doutoramento, USP (1991) (não publicada); Lin Chi Yong e A. F. R. de Toledo Piza, *Phys. Rev.* **D46**, 742 (1992).
- [5] P. Ring e P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer-Verlag 1980, Cap. 7.
- [6] A. K. Kerman e T. Troudet, *Ann. Phys. (N.Y.)* **154**, 456 (1984).
- [7] P. L. Natti, Tese de doutoramento, USP (1995) (não publicada).
- [8] J. Des Cloiseaux, em “Many-Body Physics”, C. de Witt e R. Balian (eds.), Gordon and Breach, 1968.
- [9] R. Balian e M. Vénéroni, *Ann. Phys. (N.Y.)* **187**, 29 (1988).
- [10] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin 1972, p. 30.
- [11] P. R. I. Tommasini, Tese de Doutoramento, USP (1995) (não publicada).
- [12] P. A. M. Dirac, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **26**, 376 (1930).
- [13] B. V. Carlson, M. C. Nemes e A. F. R. de Toledo Piza, *Nucl Phys* **A457**, 261 (1986).
- [14] D. J. Thouless, *The Quantum Mechanics of Many Body Systems*, Academic Press, N.Y. 1961, p. 97.
- [15] A. F. R. de Toledo Piza, *Phys. Rev.* **A51**, 1612 (1995).

- [16] Lin Chi Yong e A. F. R. de Toledo Piza, *Mod. Phys. Lett.* **A5**, 1605 (1990).
- [17] A. F. R. de Toledo Piza e Chi-Yong Lin, *Proc. Int. Conf. on Many-body Physics*, C. Fiolhais et al., eds, World Scientific, 1994, p.277.
- [18] Lin Chi Yong e A. F. R. de Toledo Piza, *Phys. Rev.* **D46**, 742 (1992).
- [19] Érica R. Takano Natti, *Relatório de Atividades, Programa de Doutorado, USP, Janeiro de 1995* (não publicado).