



UNIVERSIDADE  
ESTADUAL DE LONDRINA

---

ANTÔNIO CARLOS MASTINE

**DINÂMICA DE CAMPO MÉDIO DE UM SISTEMA  
FERMIÔNICO DESCRITO PELO OSCILADOR  
ANARMÔNICO NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO**

**ANTÔNIO CARLOS MASTINE**

**DINÂMICA DE CAMPO MÉDIO DE UM SISTEMA  
FERMIÔNICO DESCRITO PELO OSCILADOR  
ANARMÔNICO NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Laerte Natti.

Londrina  
2002

**ANTÔNIO CARLOS MASTINE**

**DINÂMICA DE CAMPO MÉDIO DE UM SISTEMA  
FERMIÔNICO DESCRITO PELO OSCILADOR  
ANARMÔNICO NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO**

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Dr. Paulo Laerte Natti

---

Profa. Dra. Lígia Liani Barz

---

Prof. Dr. Wellington da Cruz

Londrina, 28 de fevereiro de 2002.

## **AGRADECIMENTOS**

Em primeiro lugar agradeço a Deus por permitir a realização deste trabalho.

Ao Paulo, por sua dedicação e segura orientação na elaboração desta dissertação.

Ao Professor Dr. Pedro Gordan, pelo apoio no momento necessário.

Ao Professor Dr. Marcos de Castro Falleiros pelo companheirismo e incentivo.

Aos colegas do Departamento de Matemática e de Física da UEL pelo incentivo e apoio.

À Maria pela paciência, apoio e pelas palavras de ânimo.

À Verginia e Odete pela disponibilidade e contribuições.

A todos que contribuíram para que este trabalho fosse concluído de maneira satisfatória.

MASTINE, Antonio Carlos. **Dinâmica de campo médio de um sistema fermiônico descrito pelo oscilador anarmônico na presença de campo magnético.** 2002. 54f. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2002.

## RESUMO

Uma técnica de projeção não perturbativa é usada para tratar o problema de condição inicial no contexto da Mecânica Quântica. Neste formalismo, equações de movimento são deduzidas para o conjunto de observáveis dinâmicas de um corpo. Uma expansão não perturbativa pode ser obtida para estas equações. Tratamos esta expansão em ordem mais baixa, correspondente à Aproximação de Campo Médio, para um sistema fermiônico autointeragente fora do equilíbrio na presença de um campo magnético. Neste regime estudamos o fenômeno de quebra dinâmica de simetrias, associado a transições de fase do sistema, e interpretamos a física de campo médio de nosso sistema.

**Palavras-chave:** Campos magnéticos. Mecânica quântica. Física matemática.

MASTINE, Antonio Carlos. **Dinâmica de campo médio de um sistema fermiônico descrito pelo oscilador anarmônico na presença de campo magnético.** 2002. 54f. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2002.

### **ABSTRACT**

A non-perturbative time-dependent projection technique is used to treat the initial value problem in Quantum Mechanics context. In this formalism, we derive equations for the set of one-body dynamics observables. A non-perturbative expansion can be written for these equations. We treat this expansion in lowest order, which corresponds to the Mean-Field Approximation, for a non-equilibrium self-interacting fermionic system in the presence of an external magnetic field. In this regime we study the dynamical symmetry breaking phenomenon, associated to phase transition, and the mean-field physics of our system.

**Keywords:** Magnetic fields. Quantum mechanics. Mathematical physics.

## SUMÁRIO

<b>CAPÍTULO I</b> .....	07
<b>1 INTRODUÇÃO</b> .....	08
<b>CAPÍTULO II</b> .....	11
<b>2 DINÂMICA DE UM SISTEMA DE MUITOS FÉRMIONS</b> .....	12
2.1 CARACTERIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE .....	12
2.2 DINÂMICA DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE .....	15
2.3 TÉCNICA DE PROJEÇÃO DEPENDENTE DO TEMPO .....	18
2.4 APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO .....	22
<b>CAPÍTULO III</b> .....	23
<b>3 DINÂMICA EFETIVA DO OSCILADOR ANARMÔNICO FERMIÔNICO NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO</b> .....	24
3.1 CARACTERÍSTICAS DO MODELO .....	24
3.2 TRANSFORMAÇÃO DE BOGOLIUBOV E A DINÂMICA DE CAMPO MÉDIO .....	27
3.3 INTERPRETAÇÃO DA DINÂMICA DE CAMPO MÉDIO .....	31
<b>CAPÍTULO IV</b> .....	38
<b>4 RESULTADOS E CONCLUSÕES</b> .....	39
<b>REFERÊNCIAS</b> .....	41
<b>APÊNDICES</b> .....	42
APÊNDICE A – Cálculo de traços .....	43
APÊNDICE B – Rotações em $O(3)$ e em $SU(2)$ .....	47

## **CAPÍTULO I**

## 1 INTRODUÇÃO

As ciências físicas baseiam-se em modelos matemáticos usados na descrição dos fenômenos naturais. Na maioria das vezes esta descrição envolve equações diferenciais que não podem ser resolvidas analiticamente, isto é, não é possível encontrar soluções destas equações em termos de funções matemáticas fundamentais. Normalmente, a descrição de sistemas físicos envolve um número grande de equações acopladas que devem ser resolvidas simultaneamente.

Nestas situações há duas possíveis abordagens, a primeira que consiste em resolver o problema de forma numérica, através de cálculos aproximados realizados em computadores; ou resolver o problema estudando algum limite particular de interesse físico do sistema, limite em que o sistema tem um comportamento simplificado e conseqüentemente é descrito por equações diferenciais que podem ser resolvidas analiticamente.

Estamos interessados em procedimentos matemáticos que permitam descrever o comportamento de sistemas físicos utilizando a segunda abordagem. É conveniente lembrar que ambas as abordagens são complementares, pois enquanto a abordagem numérica permite descrever a evolução do sistema numa grande variedade de regimes, a abordagem analítica simplificada das equações, que descreve o sistema num dado regime particular, permite interpretações que o cálculo numérico não pode fornecer como veremos neste trabalho.

Abordagens analíticas simplificadas podem ser classificadas em duas classes: as perturbativas e as não-perturbativas. As abordagens perturbativas, também chamadas aproximações perturbativas, caracterizam-se por resolverem as equações que descrevem a evolução de sistemas físicos num limite em que um parâmetro físico, que caracteriza o sistema, tende a zero. A idéia das aproximações do tipo perturbativas é de descrever a evolução de observáveis do sistema em termos de uma série em potências do parâmetro físico que tende a zero, analogamente a uma série de Taylor. Nesse sentido, quanto mais próximo de zero for o valor do parâmetro tratado perturbativamente melhor será a aproximação [1]. Como exemplo clássico citamos a Eletrodinâmica Quântica (QED), teoria quântica que descreve a interação de fótons (campos eletromagnéticos) com a matéria (elétrons). Na QED a intensidade da interação entre os campos eletromagnéticos e os elétrons (férmions) é dada pela constante de estrutura fina  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$  de modo que a

abordagem perturbativa é apropriada, fornecendo resultados excelentes. Outro sistema físico para o qual a descrição em termo da abordagem perturbativa fornece resultados simples e elegantes é a descrição da matéria nuclear na fase *quark- gluon plasma*, na qual os quarks são fracamente interagentes (quase-livres), devido às pequenas distâncias envolvidas. Por outro lado, quando as distâncias entre os quarks atinge 1 fermi, diâmetro típico de núcleons (próton e nêutron), a abordagem perturbativa deixa de ser adequada, pois a interação entre os quarks torna-se forte, envolvendo processos do tipo troca de mésons. Neste regime particular a expansão perturbativa em termos da constante de acoplamento entre os quarks já não converge, de modo que a descrição da matéria hadrônica deve ser realizada através de abordagens não- perturbativas. É claro que processos que envolvam fenômenos do tipo quebra de simetria, associados a transições de fase; formação de estados ligados ou ressonantes; troca de mésons massivos; etc... devem ser tratados de maneira não- perturbativa.

O foco deste trabalho é estudar uma técnica não- perturbativa que fornece uma descrição aproximada para sistemas quânticos de muitos corpos fortemente interagentes. Uma característica desta técnica é a sua aplicabilidade na descrição de sistemas com número finito ou infinito de graus de liberdade. Como sistemas finitos citamos os núcleos atômicos que envolvem fenômenos fortemente interagentes em sistemas de alguns até algumas centenas de partículas. Como sistemas infinitos, os quais preferimos denominar extensos, citamos os sistemas da Física da Matéria Condensada e também sistemas (objetos) nucleares extensos tais como estrelas de nêutrons.

Em termos gerais, os métodos não- perturbativos aplicados a tais sistemas consistem em buscar uma descrição quântica completa e fechada, mas apenas de uma parte do sistema completo. O intuito desta abordagem consiste em simplificar a descrição do sistema, e com isso permitir um tratamento analítico do mesmo. Esta técnica teve origem em problemas onde o sistema de interesse físico estava em contato com reservatórios térmicos ou ainda em problemas onde tão-somente os elementos diagonais do operador matriz densidade completa do sistema eram importantes. Nestes problemas, os graus de liberdade do reservatório ou da parte não-diagonal do operador matriz densidade eram considerados irrelevantes e formalmente eliminados através de um operador de projeção.

Entretanto, para sistemas de muitos corpos fortemente acoplados é conveniente ter uma descrição onde cada parte do sistema é considerada relevante. Para tais sistemas Willis e Picard [2] desenvolveram uma técnica de projeção onde os graus de liberdade a serem eliminados eram as correlações (interações de 2 corpos, 3 corpos,..., n

corpos), de modo que esta abordagem é equivalente a aproximações do tipo campo médio ou do tipo Hartree- Fock para sistemas de muitos corpos.

Estudaremos uma técnica de projeção dependente do tempo desenvolvida por Nemes e Toledo Piza [3], que é uma extensão do trabalho de Willis- Picard, a qual permite tratar problemas de condição inicial na mecânica quântica além da aproximação de campo médio. Com o objetivo de interpretar e melhor compreender este método matemático, escolhemos um sistema quântico “didático” de férmions que interagem entre si e com um campo magnético externo.

No capítulo 2 apresentamos o tratamento cinético desenvolvido por Toledo Piza e Nemes [3], encontrando as equações que descrevem a dinâmica efetiva de um sistema de muitos férmions. Em seguida discutimos aproximações necessárias para que estas equações tornemse manipuláveis.

No capítulo 3 implementamos o método matemático estudado e obtemos na aproximação de campo médio as equações dinâmicas que descrevem a evolução temporal de um sistema fermiônico autointeragente na presença de um campo magnético externo constante. A partir destas equações primeiramente discutimos a dinâmica (física) gerada pelo fenômeno de quebra de simetria (transições de fase) do sistema devido ao cálculo variacional realizado e em seguida interpretamos a física de campo médio de nosso sistema fermiônico. Enfim, obtemos e estudamos algumas variáveis (observáveis) de interesse.

No capítulo 4 fazemos um resumo das principais conclusões que o presente estudo permite e traçamos algumas perspectivas de desenvolvimento futuro.

## CAPÍTULO II

## 2 DINÂMICA DE UM SISTEMA DE MUITOS FÉRMIONS

Neste capítulo apresentamos um tratamento não- perturbativo para o problema de condição inicial de um sistema de muitos férmions fora do equilíbrio. Esta técnica desenvolvida por Toledo Piza e Nemes [3] nos fornece as equações dinâmicas que descreve a evolução temporal do sistema fermiônico. A partir destas equações exatas discutimos aproximações conservativas e não- perturbativas para este tratamento, as quais tornam manipuláveis as equações dinâmicas obtidas.

### 2.1 CARACTERIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE

A idéia básica do tratamento que utilizaremos consiste no estudo da dinâmica efetiva (evolução temporal) do conjunto de variáveis de um corpo (densidades de um corpo e de emparelhamento) de um sistema de muitos férmions. A motivação de estudarmos a evolução temporal de densidades de um corpo é que a maioria dos observáveis físicos (excessão feita à Hamiltoniana) são operadores de um corpo e conseqüentemente o estudo de tais densidades é desejável.

Com o objetivo de implementar nosso estudo, comecemos por caracterizar as variáveis fermiônicas de um corpo. Primeiramente consideremos na representação de Heisenberg os operadores fermiônicos  $a_i^\dagger$  e  $a_i$ , para  $i = 1, 2$ , que representam operadores de criação e aniquilação de partículas de spin  $1/2$ , onde os índice  $i = 1, 2$  indicam as possíveis projeções de spin  $+\frac{1}{2}$  e  $-\frac{1}{2}$ , respectivamente. Como veremos, a generalização do formalismo para partículas (férmions ou bósons) com qualquer spin é imediata. No caso definido acima os operadores fermiônicos obedecem as regras usuais de anticomutação a tempos iguais

$$\{a_i^\dagger(t), a_j(t')\}_{t=t'} = \delta_{i,j} \quad \text{para } i, j = 1, 2 \quad (2.1)$$

$$\{a_i^\dagger(t), a_j^\dagger(t')\}_{t=t'} = \{a_i(t), a_j(t')\}_{t=t'} = 0 .$$

Consideremos o operador matriz densidade estendida de um corpo  $\mathcal{R}$  escrito na base dos operadores de criação e aniquilação acima definidos, ou seja,

$$\mathcal{R} = \begin{bmatrix} A_2 & -\Pi_2 \\ \Pi_2^* & I_2 - A_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle a_i^\dagger(t) a_j(t) \rangle & \langle a_i(t) a_j(t) \rangle \\ \langle a_i^\dagger(t) a_j^\dagger(t) \rangle & \langle a_i(t) a_j^\dagger(t) \rangle \end{bmatrix}, \quad (2.2)$$

onde: i)  $A_{ij} = \text{Tr}[(a_i^\dagger a_j)F]$ , para  $i, j = 1, 2$ , são os elementos da matriz quadrada  $A_2$ ,

ii)  $\Pi_{ij} = -\text{Tr}[(a_i a_j)F]$ , para  $i, j = 1, 2$ , são os elementos da matriz quadrada  $\Pi_2$ ,

iii)  $I_2$  é a matriz (2X2) identidade e

iv)  $F$  é o operador matriz densidade completa de muitos corpos que descreve o estado do sistema. Enquanto  $R$  contém somente as densidades de um corpo, a matriz densidade completa contém as densidades de um corpo, dois corpos,..., n corpos.

Observamos que  $R$  contém todas as possíveis variáveis fermiônicas de um corpo, de modo que estudar a dinâmica efetiva destas variáveis é equivalente a estudar a dinâmica de  $R$ . Logo, estudemos melhor o operador matriz densidade estendida de um corpo na base de partículas, o qual é composto das matrizes densidade  $A_2$  e  $\Pi_2$ . Notamos que a matriz densidade  $A_2$ , conhecida como matriz densidade normal de um corpo, é hermitiana.

Por outro lado, a matriz densidade  $\Pi_2$ , conhecida como matriz densidade anormal ou de emparelhamento, é antissimétrica. Portanto, podemos concluir que  $R$  é hermitiana e conseqüentemente pode ser diagonalizada, via uma transformação unitária, tendo autovalores reais. Os respectivos autoestados são conhecidos como orbitais naturais, enquanto os autovalores são as correspondentes probabilidades de ocupação.

Quando  $R$  é escrito na base de partículas, ou seja, em termos dos operadores de campo  $a_i^\dagger$  e  $a_i$ , ele é não-diagonal, pois em geral existem densidades do tipo emparelhamento na matéria fermiônica. Por outro lado  $R$  pode ser diagonalizado através de uma transformação unitária e quando escrito nesta outra base, conhecida como base de quase-partículas, as densidades de emparelhamento são nulas. A transformação que diagonaliza  $R$  é conhecida como transformação de Bogoliubov [4].

A transformação de Bogoliubov capacita-nos a estudar por exemplo, o estado fundamental de um gás de partículas interagindo em pares através de um gás não-interagente de quase-partículas. Isto pode ser facilmente entendido quando consideramos a transformação de Bogoliubov abaixo,

$$\begin{bmatrix} \lambda_1(t) \\ \lambda_2(t) \\ \lambda_1^\dagger(t) \\ \lambda_2^\dagger(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Omega_2^\dagger & Z_2^\dagger \\ Z_2^T & \Omega_2^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ a_1^\dagger(t) \\ a_2^\dagger(t) \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

onde observamos que um operador de campo na base de quase-partículas de Bogoliubov é escrito como uma combinação linear de todos os outros operadores de campo da base de partículas e assim, uma densidade normal de um corpo na base de quase-partículas, por exemplo  $\lambda_2^\dagger \lambda_2$ , contém densidades de emparelhamento quando escrita na base de partículas. Portanto, vemos que é possível tratar uma parte das correlações de pares, o emparelhamento, através da técnica conhecida na teoria de muitos corpos como Hartree-Fock-Bogoliubov.

O fato da transformação que diagonaliza  $R$  (transformação de Bogoliubov) ser unitária, implica que os operadores de campo  $\lambda_i^\dagger(t)$  e  $\lambda_i(t)$ , para  $i = 1, 2$ , obedecem as mesmas regras de anticomutação de  $a_i^\dagger(t)$  e  $a_i(t)$  a tempos iguais, ou seja,

$$\begin{aligned} \{\lambda_i^\dagger(t), \lambda_j(t')\}_{t=t'} &= \delta_{i,j} \quad \text{para } i, j = 1, 2 \\ \{\lambda_i^\dagger(t), \lambda_j^\dagger(t')\}_{t=t'} &= \{\lambda_i(t), \lambda_j(t)\}_{t=t'} = 0. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Finalmente, a matriz densidade estendida de um corpo escreve-se na base de quase partículas como

$$\mathcal{N} = \begin{bmatrix} P_2 & 0_2 \\ 0_2 & I_2 - P_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \lambda_i^\dagger(t) \lambda_j(t) \rangle & \langle \lambda_i(t) \lambda_j(t) \rangle \\ \langle \lambda_i^\dagger(t) \lambda_j^\dagger(t) \rangle & \langle \lambda_i(t) \lambda_j^\dagger(t) \rangle \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

onde a matriz quadrada  $P_2$  é a densidade normal de um corpo na base de quase-partículas, a qual é diagonal com autovalores  $p_1$  e  $p_2$  que são as probabilidades de ocupação do respectivo estado (orbital natural), e a matriz quadrada  $O_2$  é a matriz nula.

## 2.2 DINÂMICA DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE

Com o objetivo de tratar correlações de emparelhamento ao se estudar densidades de um corpo empregaremos a técnica de Hartree-Fock-Bogoliubov também conhecida como *Time Dependent Hartree-Fock-Bogoliubov* (TDHFB) [4]. Ela consiste primeiramente em diagonalizar  $R$  com o propósito de tratar as correlações de emparelhamento em termos dos orbitais naturais. Em seguida toma-se as derivadas temporais das variáveis de interesse e utilizando-se a equação de movimento de Heisenberg, obtém-se a dinâmica efetiva de  $R$ .

Começamos por diagonalizar  $R$ , ou seja,

$$W^\dagger R W = \mathcal{N} \quad , \quad (2.6)$$

onde  $W$  é a transformação de Bogoliubov (2.3) que diagonaliza o operador matriz densidade estendida  $R$  (2.2) escrito na base de partículas, enquanto  $\mathcal{N}$  é o operador matriz densidade estendida (2.5) escrito na base de quase-partículas de Bogoliubov. A transformação  $W$  obedece as seguintes equações de unitariedade

$$W^\dagger W = I_4 \quad \text{e} \quad W W^\dagger = I_4 \quad , \quad (2.7)$$

onde

$$W = \begin{bmatrix} \Omega_2 & Z_2^* \\ Z_2 & \Omega_2^* \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad W^\dagger = \begin{bmatrix} \Omega_2^\dagger & Z_2^\dagger \\ Z_2^T & \Omega_2^T \end{bmatrix} \quad . \quad (2.8)$$

Podemos então, em termos das matrizes  $\Omega_2$  e  $Z_2$ , obter as seguintes equações matriciais

$$\Omega_2 \Omega_2^\dagger + Z_2^* Z_2^T = \mathbf{I}_2 \quad Z_2 \Omega_2^\dagger + \Omega_2^* Z_2^T = \mathbf{0}_2 \quad (2.9)$$

$$\Omega_2^\dagger \Omega_2 + Z_2^\dagger Z_2 = \mathbf{I}_2 \quad \Omega_2^\dagger Z_2^* + Z_2^\dagger \Omega_2^* = \mathbf{0}_2 \quad . \quad (2.10)$$

Derivando temporalmente a equação matricial (2.6) e utilizando as relações de unitariedade (2.7) de  $W$ , obtemos

$$W^\dagger \dot{R} W = \dot{N} - \dot{W}^\dagger W N + N \dot{W}^\dagger W = \dot{N} + [N, \dot{W}^\dagger W] . \quad (2.11)$$

Substituindo (2.5) e (2.8) em (2.11) e utilizando-se das relações de unitariedade (2.9) e (2.10) obtemos a seguinte equação matricial

$$W^\dagger \dot{R} W = \begin{bmatrix} \dot{P}_2 + [P_2, \dot{\Omega}_2^\dagger \Omega_2 + \dot{Z}_2^\dagger Z_2]_- & \{P_2, \dot{\Omega}_2^\dagger Z_2^* + \dot{Z}_2^\dagger \Omega_2^*\}_+ - (\dot{\Omega}_2^\dagger Z_2^* + \dot{Z}_2^\dagger \Omega_2^*) \\ \dot{\Omega}_2^T Z_2 + \dot{Z}_2^T \Omega_2 - \{P_2, \dot{\Omega}_2^T Z_2 + \dot{Z}_2^T \Omega_2\}_+ & -\dot{P}_2 - [P_2, \dot{\Omega}_2^T \Omega_2^* + \dot{Z}_2^T Z_2^*]_- \end{bmatrix} , \quad (2.12)$$

onde  $\{ , \}_+$  denota um anticomutador e  $[ , ]_-$  denota um comutador.

Como trabalhamos na representação de Heisenberg, a matriz densidade completa de muitos corpos  $F$  é independente do tempo, enquanto a matriz densidade estendida de um corpo  $R$  depende do tempo, através dos operadores  $a_i^\dagger(t)$  e  $a_i(t)$ . Derivando com relação ao tempo a matriz densidade normal e a matriz densidade de emparelhamento

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_2 &= Tr \left( \left\{ \frac{d}{dt} [a_i^\dagger(t) a_j(t)] \right\} \mathcal{F} \right) \\ \frac{d}{dt} \Pi_2 &= Tr \left( \left\{ \frac{d}{dt} [a_i(t) a_j(t)] \right\} \mathcal{F} \right) \end{aligned} \quad (2.13)$$

e utilizando-se a equação de Heisenberg, além da invariância cíclica do traço, obtemos as seguintes expressões

$$\begin{aligned} i \dot{A}_2 &= Tr \left( [a_i^\dagger a_j, H] \mathcal{F} \right) \\ i \dot{\Pi}_2 &= Tr \left( [a_i a_j, H] \mathcal{F} \right) , \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde  $H$  é a Hamiltoniana que descreve a dinâmica do sistema fermiônico.

A partir da equação matricial (2.12), sabendo que  $W$  é a matriz que transforma  $R$  (ou sua derivada) da base de partículas para a base de quase-partículas, e utilizando-se de (2.14), obtemos as equações matriciais (2X2) que descrevem a dinâmica efetiva de  $R$  na base das quase-partículas de Bogoliubov

$$\dot{P}_2 + [P_2, \dot{\Omega}_2^\dagger \Omega_2 + \dot{Z}_2^\dagger Z_2]_- = -i \text{Tr}([\lambda_i^\dagger \lambda_j, H] \mathcal{F}) \quad (2.15)$$

$$\{P_2, \dot{\Omega}_2^\dagger Z_2^* + \dot{Z}_2^\dagger \Omega_2^*\}_+ - (\dot{\Omega}_2^\dagger Z_2^* + \dot{Z}_2^\dagger \Omega_2^*) = -i \text{Tr}([\lambda_i \lambda_j, H] \mathcal{F}) ,$$

onde  $P_2$  é a matriz (2X2) de ocupação de quase-partículas (quase- antipartículas) de Bogoliubov definida em (2.5),

$$P_2 = \langle \lambda_i^\dagger(t) \lambda_j(t) \rangle = \begin{bmatrix} p_1(t) & 0 \\ 0 & p_2(t) \end{bmatrix} . \quad (2.16)$$

Enfim, devemos observar que as variáveis de interesse na base de partículas (densidades de um corpo), quando escritas na base de quase-partículas, contêm os elementos da matriz de transformação de Bogoliubov, os quais são as incógnitas das equações matriciais diferenciais (2.15) juntamente com as ocupações  $p_i$  (densidades de um corpo na base de quase-partículas). Assim, dado um modelo (Hamiltoniana  $H$  que descreva a interação dos férmions ou quase-férmions) e dadas as condições iniciais (ocupação inicial  $p_i$  das quasepartículas e valores iniciais para os elementos da matriz de transformação de Bogoliubov), as equações dinâmicas (2.15), via um princípio variacional embutido na equação de Heisenberg, descreverão a evolução temporal destas variáveis.

Na seção seguinte estudaremos a técnica de projeção desenvolvida por Toledo Piza e Nemes [3], que nos permitirá tratar a dinâmica efetiva da matriz densidade estendida de um corpo.

### 2.3 TÉCNICA DE PROJEÇÃO DEPENDENTE DO TEMPO

As equações matriciais (2.15) que descrevem a dinâmica efetiva da matriz densidade estendida de um corpo  $R$  de um sistema de muitos férmions de spin  $1/2$ , formam um sistema acoplado de equações diferenciais que fornecem a evolução temporal das ocupações de quase- partículas de Bogoliubov  $p_i$  e dos elementos da transformação de Bogoliubov. Contudo, não podemos resolver exatamente estas equações, pois dada a matriz densidade completa de muitos férmions  $F$ , devemos observar que estas equações contêm a Hamiltoniana do sistema e no caso desta conter interações de dois corpos, as equações que encontraremos para a dinâmica de  $R$  envolverão densidades de dois corpos, além das densidades de um corpo que estudamos. Conseqüentemente, as equações (2.15) não serão fechadas em nossas variáveis.

Uma maneira de controlar estas dificuldades é através da técnica de operadores de projeção. Esta técnica é utilizada em vários contextos para reduzir a descrição do sistema às variáveis relevantes. O uso de técnicas que utilizam operadores de projeção com o objetivo de tratar equações dinâmicas não é recente. Esta técnica extremamente geral foi muito usada a partir dos anos sessenta em problemas onde os sistemas de interesse estavam em contato com reservatórios (térmicos, de partículas ...), ou ainda em problemas onde tão somente os elementos diagonais do operador matriz densidade eram importantes. Nestes problemas, os graus de liberdade do reservatório ou da parte não- diagonal do operador densidade eram considerados irrelevantes e formalmente eliminados através de um operador de projeção.

Entretanto, para sistemas dinâmicos de muitos férmions acoplados é conveniente ter uma descrição onde cada parte do sistema (subsistema) é considerada relevante. Willis e Picard [2] derivaram equações de evolução para um sistema dinamicamente acoplado, onde os graus de liberdade a serem eliminados, não eram um subsistema ou uma parte do próprio sistema (reservatório), mas sim as correlações entre os subsistemas produzidas pela interação. Eles tratavam a parte não- diagonal do operador densidade não considerando as correlações dos subsistemas, conhecidas como termos de colisão, através de um operador projeção.

Logo, para sistemas dinâmicos acoplados, onde cada subsistema interage fortemente não podendo ser considerado irrelevante, a abordagem de Willis e Picard,

equivalente à uma aproximação do tipo *Time Dependent Hartree-Fock* (TDHF), era claramente mais adequada.

O trabalho desenvolvido por Toledo Piza e Nemes [3] é uma extensão do trabalho de Willis e Picard [2] (aproximação do tipo TDHF) e do trabalho de Kerman e Troudet [4] (aproximação do tipo TDHFB), pois ele considera as correlações dinâmicas dos subsistemas (Termos de Colisão). Esta técnica de projeção dependente do tempo consiste em decompor a matriz densidade completa de muitos corpos  $F$  em duas partes,

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0(t) + \mathcal{F}'(t) \quad , \quad (2.17)$$

onde  $F_0(t)$  é uma densidade hermitiana de muitos corpos descrevendo completamente os aspectos de um corpo da densidade completa  $F$  sem conter qualquer informação relativa às correlações dinâmicas, ou seja,  $F_0(t)$  contém todas as informações sobre as variáveis estudadas, enquanto que  $F'(t)$  descreve as correlações dinâmicas (efeitos de colisão) da matriz densidade completa de muitos corpos  $F$ . Observe que correlações do tipo Pauli, devido as relações de anticomutação, e de emparelhamento, devido a transformação de Bogoliubov, estão embutidas em  $F_0(t)$ .

A forma mais geral de uma densidade de muitos corpos  $F_0(t)$  com as propriedades exigidas, pode ser encontrada no trabalho de Des Cloiseaux [5]. O objetivo de nosso estudo consiste em tratar a dinâmica efetiva de  $R$  para um sistema de muitos férmions e neste caso a matriz densidade hermitiana de muitos férmions  $F_0(t)$  mais geral que descreve completamente os aspectos de um corpo da densidade completa  $F$  é dada por

$$\mathcal{F}_0(t) = \prod_a \left[ p_a \lambda_a^\dagger \lambda_a + (1 - p_a) \lambda_a \lambda_a^\dagger \right] \quad , \quad (2.18)$$

onde  $p_a$  são as probabilidades de ocupação dos respectivos orbitais naturais, ou em outras palavras, são as densidades de um corpo na base de quase-partículas dadas em (2.16). Observe que o índice  $a$  representa todos os possíveis estados quânticos do sistema fermiônico, estados de spin, sítios, orbitais, momento, etc... . No Apêndice A calculamos didaticamente alguns traços. A partir do Apêndice A temos que

$$\begin{aligned} \text{Tr} (\lambda_a \mathcal{F}_0) &= \text{Tr} (\lambda_a^\dagger \mathcal{F}_0) = 0 \\ \text{Tr} (\lambda_a \lambda_b \mathcal{F}_0) &= \text{Tr} (\lambda_a^\dagger \lambda_b^\dagger \mathcal{F}_0) = 0 \\ \text{Tr} (\lambda_a^\dagger \lambda_b \mathcal{F}_0) &= p_a \delta_{a,b} \\ \text{Tr} (\lambda_a \lambda_b^\dagger \mathcal{F}_0) &= (1 - p_a) \delta_{a,b} \quad , \end{aligned}$$

onde os índices  $a$  e  $b$  designam os possíveis estados quânticos do sistema estudado.

No caso do cálculo de densidades de dois corpos torna-se mais evidente ainda as propriedades de  $F_0(t)$ . Em geral temos que

$$\text{Tr} \left[ \lambda_a^\dagger \lambda_b^\dagger \lambda_c \lambda_d \mathcal{F} \right] = p_a p_b (\delta_{ad} \delta_{bc} - \delta_{ac} \delta_{bd}) + C_{ab;cd} \ ,$$

onde  $C_{ab;cd}$  está ligado à estrutura das correlações dinâmicas de dois corpos presentes. Por outro lado, um cálculo simples (veja Apêndice A) nos fornece que

$$\text{Tr} \left[ \lambda_a^\dagger \lambda_b^\dagger \lambda_c \lambda_d \mathcal{F}_0 \right] = p_a p_b (\delta_{ad} \delta_{bc} - \delta_{ac} \delta_{bd}) \ .$$

Como exigido, a densidade de muitos corpos  $F_0(t)$  descreve completamente os aspectos de um corpo da matriz densidade completa  $F$ , sendo que uma densidade de  $N$  corpos calculada a partir de  $F_0(t)$  exprime-se como o produto de densidades de um corpo [3]. Enfim, temos que  $F_0(t)$  tem traço unitário e da condição de normalização temos

$$\text{Tr} \mathcal{F} = 1 = \text{Tr} \mathcal{F}_0(t) \quad \Rightarrow \quad \text{Tr} \mathcal{F}'(t) = 0 \ . \quad (2.19)$$

A segunda etapa da técnica de projeção dependente do tempo [3] consiste em expressar  $\mathcal{F}'(t)$  em termos de  $F_0(t)$ , de modo que a matriz densidade completa  $F$  possa ser escrita como um funcional de  $F_0(t)$ . O ponto crucial é a possibilidade de construir um projetor dependente do tempo a partir de  $F_0(t)$ , tal que

$$\mathcal{F}_0(t) = \mathcal{P}(t) \mathcal{F} \quad \text{com} \quad \mathcal{P}(t) \mathcal{P}(t) = \mathcal{P}(t) \ . \quad (2.20)$$

Notamos que  $\mathcal{P}$  não é um operador no espaço de vetores de estado, mas é um operador no espaço de matrizes densidade, também conhecido como espaço de Liouville. A propriedade exigida para a construção de  $\mathcal{P}(t)$ , além de (2.20), é

$$i\dot{\mathcal{F}}_0(t) = [\mathcal{P}(t), \mathcal{L}] \mathcal{F} = [\mathcal{F}_0(t), H] + \mathcal{P}(t) [H, \mathcal{F}] \ , \quad (2.21)$$

onde  $L$  é um operador que age no espaço de Liouville, chamado Liouvilliano e que tem a forma

$$\mathcal{L} \cdot = [H, \cdot] , \quad (2.22)$$

sendo  $H$  a Hamiltoniana do sistema estudado. A equação (2.21) é a representação de Heisenberg da equação  $\dot{F}_0(t) = P(t)F$ .

Em [3] mostra-se que as condições (2.20) e (2.21) tornam a construção de  $P(t)$  única. Por outro lado, devemos ter o cuidado de observar que a sua construção na representação de Schrödinger é diferente da sua construção na representação de Heisenberg, já que a equação (2.21) é diferente nas duas representações. Dado  $P(t)$ , podemos obter uma equação para  $F'(t)$  em termos de  $F_0(t)$  a partir de (2.17), (2.20) e (2.21), ou seja,

$$i(\partial_t + \mathcal{P}(t)\mathcal{L})\mathcal{F}'(t) = (\mathcal{I} - \mathcal{P}(t))\mathcal{L}\mathcal{F}_0(t) . \quad (2.23)$$

Esta equação tem como solução formal

$$\mathcal{F}'(t) = \mathcal{G}(t,0)\mathcal{F}'(0) - i \int_0^t dt' \mathcal{G}(t,t') (\mathcal{I} - \mathcal{P}(t')) \mathcal{L}\mathcal{F}_0(t') , \quad (2.24)$$

onde  $\mathcal{F}'(0)$  é o termo que contém as correlações iniciais (condições iniciais) e  $\mathcal{G}(t, t')$  é a função de Green ordenada temporalmente

$$\mathcal{G}(t, t') = T \left( \exp \left[ i \int_{t'}^t d\tau \mathcal{P}(\tau) \mathcal{L} \right] \right) . \quad (2.25)$$

Desta forma  $\mathcal{F}'(t)$ , e conseqüentemente  $F$ , podem ser expressas formalmente em termos de  $F_0(t)$  (para  $t' < t$ ) e das correlações iniciais  $\mathcal{F}'(0)$ . Assim, as equações cinéticas (2.15) que descrevem a dinâmica efetiva das densidades de um corpo de nosso sistema de muitos férmions são formalmente fechadas em nossas variáveis. Na realidade a complicada dependência temporal de (2.24) impede cálculos exatos. Uma expansão sistemática é discutida nas referências [3].

## 2.4 APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

Como vimos na seção precedente, podemos separar a matriz densidade de muitos corpos em dois termos. A aproximação de campo médio consiste em tomar  $F'(t) = 0$ , como no trabalho de A. K. Kerman e T. Troudet [4], ou seja, nesta aproximação consideramos que não há correlações dinâmicas (a menos das correlações do tipo Pauli e de emparelhamento introduzidas via transformação de Bogoliubov) no sistema de muitos férmions. Portanto, Aproximação de Campo Médio (MF) e Aproximação de Hartree-Fock Dependente do Tempo (TDHF) são equivalentes.

Notamos que nestas aproximações  $F$ , na representação de Heisenberg, passa a depender do tempo

$$\mathcal{F} \longrightarrow \mathcal{F}_0(t) . \quad (2.26)$$

Substituindo (2.26) em (2.15) temos as equações que descrevem a dinâmica efetiva de  $R$  (das densidades de um corpo e de emparelhamento) na aproximação de campo médio para um sistema uniforme de muitos férmions, ou seja,

$$\begin{aligned} \dot{P}_2 + [P_2, \dot{\Omega}_2^\dagger \Omega_2 + \dot{Z}_2^\dagger Z_2]_- &= -i \text{Tr} \left( [\lambda_i^\dagger \lambda_j, H] \mathcal{F}_0 \right) \\ \{P_2, \dot{\Omega}_2^\dagger Z_2^* + \dot{Z}_2^\dagger \Omega_2^*\}_+ - (\dot{\Omega}_2^\dagger Z_2^* + \dot{Z}_2^\dagger \Omega_2^*) &= -i \text{Tr} \left( [\lambda_i \lambda_j, H] \mathcal{F}_0 \right) . \end{aligned} \quad (2.27)$$

No próximo capítulo vamos utilizar este formalismo para descrever a evolução temporal de um sistema de spin 1/2 descrito pelo modelo do oscilador anarmônico fermiônico na presença de um campo externo constante.

## **CAPÍTULO III**

### 3 DINÂMICA EFETIVA DO OSCILADOR ANARMÔNICO FERMIONICO NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO

Métodos aproximativos para tratar problemas de condições iniciais em teorias quânticas são essenciais, já que o tratamento exato destes problemas raramente é possível, exceto via métodos numéricos. O Oscilador Anarmônico Fermiônico na presença de um campo Magnético externo (MFAO) é um modelo exatamente solúvel que pode ser utilizado em vários campos da Física, além de ser suficientemente simples, o que faz dele um laboratório ideal para o estudo de novas técnicas e métodos da Física- Matemática.

Começamos o capítulo descrevendo as principais características do MFAO. Em seguida, aplicando o método variacional do tipo TDHFB apresentado no capítulo 2, obtemos as equações de movimento que descrevem a dinâmica de campo médio de um sistema discreto de férmions descritos pelo MFAO. Finalmente interpretamos a dinâmica efetiva de campo médio do sistema e estudamos a evolução de alguns observáveis de interesse nesta aproximação.

#### 3.1 CARACTERÍSTICAS DO MODELO

As equações de evolução temporal (2.15) da dinâmica efetiva de  $R$  necessitam de uma Hamiltoniana que descreva as interações entre os férmions de nosso sistema. Conforme justificativas abaixo, escolhemos o MFAO para este fim. A Hamiltoniana do oscilador anarmônico fermiônico na presença de um campo magnético externo constante de intensidade  $B$  é dada por

$$H = \hbar \omega \left( a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 \right) + U \left( a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 \right) + g_B B \left( a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2 \right) , \quad (3.1)$$

onde  $a_i^\dagger$  e  $a_i$  são respectivamente operadores fermiônicos de spin 1/2 de criação e aniquilação, que satisfazem as relações usuais de anticomutação, enquanto índices  $i = 1, 2$  representam respectivamente spins  $\uparrow$  e  $\downarrow$ . O parâmetro  $U$  representa uma interação repulsiva entre os elétrons do sistema e  $g_B$  é a intensidade de acoplamento do momento magnético intrínseco

(spin) dos férmions com o campo magnético externo  $B$ . O nome do modelo deriva de uma analogia com o modelo do oscilador anarmônico bosônico.

Com o objetivo de melhor compreender a física descrita pelo modelo, estudemos os seus possíveis autoestados e respectivos autovalores associados. Sendo  $|0\rangle$  o vácuo do sistema segue que

$$H |0\rangle = [\hbar\omega (a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2) + U (a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2) + g_B B (a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2)] |0\rangle = 0 |0\rangle . \quad (3.2)$$

Logo, o estado fundamental do sistema (vácuo) tem autovalor de energia associado nulo. Os demais autoestados da Hamiltoniana são

$$H (a_1^\dagger |0\rangle) = [\hbar\omega + g_B B] (a_1^\dagger |0\rangle) \quad (3.3)$$

$$H (a_2^\dagger |0\rangle) = [\hbar\omega - g_B B] (a_2^\dagger |0\rangle) \quad (3.4)$$

$$H (a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle) = [2\hbar\omega + U] (a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle) . \quad (3.5)$$

Observe que estes são todos os possíveis autoestados da Hamiltoniana (3.1). Para justificar este fato notamos que  $H \hat{O} a_i |0\rangle = 0 |0\rangle$ , onde  $\hat{O}$  é um operador qualquer,  $H a_i^\dagger a_j a_j^\dagger |0\rangle = H a_i^\dagger |0\rangle$  e  $H a_1^\dagger a_2^\dagger a_j a_j^\dagger |0\rangle = H a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle$ , de modo que recaímos nos estados citados acima. Portanto, consistentemente com o princípio de Pauli que proíbe a existência de férmions idênticos no mesmo estado quântico, nosso sistema tem quatro estados que correspondem às seguintes configurações:

- i)  $|0\rangle$ , estado este que chamamos de vácuo, o qual não contém nenhum férmion,
- ii)  $(a_2^\dagger |0\rangle)$  estado contendo um férmion com spin  $\downarrow$ ,
- iii)  $(a_1^\dagger |0\rangle)$  estado contendo um férmion com spin  $\uparrow$  e
- iv)  $(a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle)$  estado contendo dois férmion com spins opostos (emparelhados).

Observe também que a presença do campo magnético  $B$  elimina a degenerescência de energia dos estados  $(a_1^\dagger | 0 \rangle)$  e  $(a_2^\dagger | 0 \rangle)$ , não afetando os estados  $| 0 \rangle$  e  $(a_1^\dagger a_2^\dagger | 0 \rangle)$ , pois estes últimos estados têm momento magnético nulo. Segue que o estado inicial mais geral da Hamiltoniana (3.1) é dado por

$$| \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \left( \rho \hat{1} + \beta a_1^\dagger + \alpha a_2^\dagger + \tau a_1^\dagger a_2^\dagger \right) | 0 \rangle, \quad (3.6)$$

onde  $\rho$ ,  $\beta$ ,  $\alpha$  e  $\tau$  são números complexos e  $N = \rho^2 + \beta^2 + \alpha^2 + \tau^2$  é a constante de normalização do estado. É conveniente notar que este estado não tem um número definido de férmions com spin  $\uparrow$  e  $\downarrow$  sendo portanto chamado de estado de mistura. Fica claro agora que na base de partículas a matriz densidade de emparelhamento  $\Pi_2$  é não-nula, pois sendo o estado do sistema dado por (3.6), segue que  $\langle \Psi | a_1 a_2 | \Psi \rangle \neq 0$ . Observamos que a ausência em  $| \Psi \rangle$  do estado de dois férmions e/ou do vácuo ( $\tau = 0$  e/ou  $\rho = 0$ ) implica que a matriz densidade de emparelhamento se anula.

Como consequência das considerações acima, ao contrário do Oscilador Anarmônico Bosônico que apresenta somente soluções (espectro de energia e estados associados) aproximadas [1], o Oscilador Anarmônico Fermiônico permite obter soluções exatas, as quais descrevem a interação, em um único sítio, de dois férmions idênticos quando sujeitos a um potencial anarmônico e um campo magnético externo.

Finalmente, convém salientar que o modelo MFAO é uma versão simplificada dos modelos de Hubbard e de Ising, frequentemente aplicados à descrição de fenômenos da Física do Estado Sólido, quando reduzidos à dimensão espacial zero (um único sítio ou orbital), de modo que somente os graus de liberdade internos são considerados. Mais detalhes a respeito das aplicações físicas do MFAO podem ser encontradas nas referências [6, 7].

Na próxima seção através de uma transformação do tipo Bogoliubov, obteremos a dinâmica efetiva na aproximação de campo médio para um sistema discreto de férmions descritos pelo MFAO.

### 3.2 TRANSFORMAÇÃO DE BOGOLIUBOV E A DINÂMICA DE CAMPO MÉDIO

A partir da Hamiltoniana MFAO na base de quase- partículas encontramos as equações de evolução que descrevem a dinâmica do operador matriz densidade estendida para nosso sistema discreto de férmions na aproximação de campo médio. Para isto utilizamos a transformação definida por

$$\lambda_i^\dagger(t) = \sum_j [\omega_{ji}(t) a_j^\dagger + z_{ji}(t) a_j] \quad (3.7)$$

ou numa forma mais explícita

$$\begin{bmatrix} \lambda_1(t) \\ \lambda_2(t) \\ \lambda_1^\dagger(t) \\ \lambda_2^\dagger(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega_{11}^*(t) & \omega_{21}^*(t) & z_{11}^*(t) & z_{21}^*(t) \\ \omega_{12}^*(t) & \omega_{22}^*(t) & z_{12}^*(t) & z_{22}^*(t) \\ z_{11}(t) & z_{21}(t) & \omega_{11}(t) & \omega_{21}(t) \\ z_{12}(t) & z_{22}(t) & \omega_{12}(t) & \omega_{22}(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ a_1^\dagger(t) \\ a_2^\dagger(t) \end{bmatrix}, \quad (3.8)$$

onde as matrizes  $\Omega_2$  e  $Z_2$  definidas em (2.3) escrevem-se como

$$\Omega_2 = \begin{bmatrix} \omega_{11}(t) & \omega_{12}(t) \\ \omega_{21}(t) & \omega_{22}(t) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad Z_2 = \begin{bmatrix} z_{11}(t) & z_{12}(t) \\ z_{21}(t) & z_{22}(t) \end{bmatrix}. \quad (3.9)$$

Impondo que a transformação de Bogoliubov  $W$  satisfaça as condições de unitariedade (2.9) e (2.10), onde os elementos das matrizes  $\Omega_2$  e  $Z_2$  são dados em (3.9), verificamos que necessitamos de apenas quatro parâmetros reais independentes para satisfazer tais condições.

Portanto, em termos dos parâmetros reais  $\theta$ ,  $\varphi$ ,  $\gamma$  e  $\xi$  construímos  $\Omega_2$  e  $Z_2$  como

$$\Omega_2 = \begin{bmatrix} \cos \gamma(t) \cos \xi(t) & -\exp[-i \varphi(t)] \sin \gamma(t) \cos \xi(t) \\ \exp[i \varphi(t)] \sin \gamma(t) \cos \xi(t) & \cos \gamma(t) \cos \xi(t) \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

$$Z_2 = \begin{bmatrix} \exp[i \theta(t)] \sin \gamma(t) \sin \xi(t) & \exp(i [\theta(t) - \varphi(t)]) \cos \gamma(t) \sin \xi(t) \\ -\exp(i [\theta(t) - \varphi(t)]) \cos \gamma(t) \sin \xi(t) & \exp(i [\theta(t) - 2\varphi(t)]) \sin \gamma(t) \sin \xi(t) \end{bmatrix}.$$

Convém salientar que a transformação de Bogoliubov dada em (3.10) não é única. Por exemplo, poderíamos ter utilizado funções do tipo hiperbólicas, desde que as condições unitariedade fossem satisfeitas.

Para obter a evolução temporal dos observáveis de nosso sistema na aproximação de campo médio em termos dos parâmetros acima definidos, devemos primeiramente escrever a Hamiltoniana MFAO na base de quase- partículas, utilizando a transformação unitária definida em (3.8) e (3.10). Em seguida, calculando os traços das equações matriciais de movimento (2.15) obtemos:

$$\begin{aligned}
Tr([\lambda_1^\dagger \lambda_1, H] \mathcal{F}_0) &= 0 \\
Tr([\lambda_1^\dagger \lambda_2, H] \mathcal{F}_0) &= -g_B B (p_1 - p_2) \text{sen}(2\gamma) \exp(i\varphi) \\
Tr([\lambda_2^\dagger \lambda_1, H] \mathcal{F}_0) &= -g_B B (p_2 - p_1) \text{sen}(2\gamma) \exp(-i\varphi) \\
Tr([\lambda_2^\dagger \lambda_2, H] \mathcal{F}_0) &= 0
\end{aligned}
\tag{3.11}$$

$$\begin{aligned}
Tr([\lambda_1 \lambda_1, H] \mathcal{F}_0) &= 0 \\
Tr([\lambda_1 \lambda_2, H] \mathcal{F}_0) &= -\frac{1}{2} (1 - p_1 - p_2) (2\hbar\omega + U) \text{sen}(2\xi) \exp[-i(\theta - \varphi)] \\
Tr([\lambda_2 \lambda_1, H] \mathcal{F}_0) &= +\frac{1}{2} (1 - p_1 - p_2) (2\hbar\omega + U) \text{sen}(2\xi) \exp[-i(\theta - \varphi)] \\
Tr([\lambda_2 \lambda_2, H] \mathcal{F}_0) &= 0 .
\end{aligned}$$

Por outro lado, como  $P_2$  é uma matriz diagonal, o comutador  $[P_2, \hat{\Omega}_2^\dagger \Omega_2 + \hat{Z}_2^\dagger Z_2]$ , no primeiro membro da primeira equação dada em (2.15), possui somente termos não-nulos fora da diagonal, de onde concluímos que

$$\dot{p}_1 = 0 \quad \text{e} \quad \dot{p}_2 = 0 .
\tag{3.12}$$

Logo, as ocupações dos orbitais naturais são independentes do tempo como esperado na aproximação de campo médio [3]. Calculando os termos fora da diagonal da primeira equação, obtemos a equação de movimento abaixo

$$\begin{aligned}
& -i g_B B (p_2 - p_1) \exp(-i \varphi) \text{sen}(2 \gamma) = \\
& (p_2 - p_1) \left[ -\exp(-i \varphi) \text{sen} \gamma \cos \xi \frac{d}{dt} \{\cos \gamma \cos \xi\} \right. \\
& \quad + \cos \gamma \cos \xi \frac{d}{dt} \{\exp(-i \varphi) \text{sen} \gamma \cos \xi\} \\
& \quad + \exp[i(\theta - \varphi)] \cos \gamma \text{sen} \xi \frac{d}{dt} \{\exp(-i \theta) \text{sen} \gamma \text{sen} \xi\} \\
& \quad \left. - \exp[i(\theta - 2\varphi)] \text{sen} \gamma \text{sen} \xi \frac{d}{dt} \{\exp[-i(\theta - \varphi)] \cos \gamma \text{sen} \xi\} \right]
\end{aligned} \tag{3.13}$$

e a sua equação complexo conjugada. A partir da segunda equação de movimento dada em (2.15) e dos traços dados em (3.11), obtemos a outra equação de movimento para os parâmetros de Bogoliubov

$$\begin{aligned}
& i \frac{1}{2} (1 - p_1 - p_2) (2 \hbar \omega + U) \exp[-i(\theta - \varphi)] \text{sen}(2 \xi) = \\
& (1 - p_1 - p_2) \left[ -\exp(i \varphi) \text{sen} \gamma \cos \xi \frac{d}{dt} \{\exp(-i \theta) \text{sen} \gamma \text{sen} \xi\} \right. \\
& \quad - \cos \gamma \cos \xi \frac{d}{dt} \{\exp(-i \varphi) \cos \gamma \text{sen} \xi\} \\
& \quad + \exp[-i(\theta - \varphi)] \cos \gamma \text{sen} \xi \frac{d}{dt} \{\cos \gamma \cos \xi\} \\
& \quad \left. + \exp[-i(\theta - 2\varphi)] \text{sen} \gamma \text{sen} \xi \frac{d}{dt} \{\exp(-i \varphi) \text{sen} \gamma \cos \xi\} \right] .
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Resolvendo as derivadas temporais indicadas em (3.13) e (3.14), e separando as partes reais e imaginárias, obtemos as equações diferenciais que descrevem a dinâmica efetiva de campo médio do sistema, ou seja,

$$\dot{\gamma} = 0$$

$$\dot{\xi} = 0$$

(3.15)

$$\dot{\varphi} = 2 g_B B$$

$$\dot{\theta} = 2 g_B B + 2 \hbar \omega + U .$$

Observe que nossa aproximação é conservativa [3] e portanto, um teste para as equações cinéticas acima é verificar se elas conservam a energia do sistema. Calculando a energia na aproximação de campo médio para nosso sistema fermiônico a partir de (3.1) e (2.18),

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = \text{Tr} [H \mathcal{F}_0(t)] = \hbar \omega \left[ 2 \text{sen}^2 \xi + \cos 2\xi (p_1 + p_2) \right] + g_B B \cos 2\gamma (p_1 - p_2) + \\ + U \left[ (p_1 p_2) + \text{sen}^2 \xi (1 - p_1 - p_2) \right] \end{aligned} \quad (3.16)$$

e derivando-a temporalmente, ou seja, com relação a  $\gamma(t)$ ,  $\xi(t)$ ,  $\varphi(t)$ ,  $\theta(t)$ ,  $p_1(t)$  e  $p_2(t)$ , podemos verificar a conservação da energia do sistema, ou seja,

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle |_{\text{equações cinéticas}} = 0 , \quad (3.17)$$

quando substituimos as equações cinéticas (3.12) e (3.15) em (3.17). O teste da conservação da energia é um meio para verificarmos se não cometemos nenhum erro ao deduzirmos as equações cinéticas.

Na próxima seção iremos interpretar os resultados acima obtidos. Analisaremos a dinâmica gerada pelo fenômeno de quebra de simetria e então interpretaremos a física de campo médio do sistema. Enfim, estudaremos alguns observáveis de interesse, verificando, em particular, a possibilidade da existência de magnetização espontânea neste sistema.

### 3.3 INTERPRETAÇÃO DA DINÂMICA DE CAMPO MÉDIO

Para interpretar os resultados obtidos na seção precedente, inicialmente iremos identificar processos físicos presentes na transformação de Bogoliubov que geram as equações dinâmicas (3.15). Em seguida, a partir das equações dinâmicas, obtemos a Hamiltoniana clássica associada e interpretamos a física de campo médio do sistema. Enfim, utilizamos as equações de evolução para o estudo da dinâmica de algumas variáveis (observáveis) de interesse (número de partículas com spin  $+\frac{1}{2}$  e  $-\frac{1}{2}$ , magnetização ...).

Como primeiro passo devemos identificar processos físicos (transições de fase devido a quebra de simetrias do sistema) presentes na transformação de Bogoliubov. Para isso notamos imediatamente que a Hamiltoniana (3.1) escrita na base de partículas é invariante por transformações do tipo rotação em SU(2). Por outro lado, a mesma Hamiltoniana escrita na base de quase-partículas, devidos aos ângulos (parâmetros) da transformação (3.8)- (3.10), deixa de apresentar tais simetrias. Portanto, com o objetivo de melhor compreender os resultados obtidos anteriormente, estudemos tais processos de quebra de simetria. Primeiramente, consideremos a transformação particular de Bogoliubov que é implementada quando impomos que

$$\xi = 0 \quad \text{e} \quad \theta = 0 \quad (3.18)$$

na transformação geral de Bogoliubov (3.10). Neste caso temos as seguintes formas para as matrizes  $\Omega_2$  e  $Z_2$

$$\Omega_2 = \begin{bmatrix} \cos \gamma(t) & -\exp(-i \varphi(t)) \sin \gamma(t) \\ \exp(i \varphi(t)) \sin \gamma(t) & \cos \gamma(t) \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

$$Z_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

de modo que os operadores de criação e aniquilação relacionam-se da seguinte forma

$$\begin{aligned}
\lambda_1^\dagger &= [\cos \gamma a_1^\dagger + \exp(i \varphi) \operatorname{sen} \gamma a_2^\dagger] \\
\lambda_2^\dagger &= [-\exp(-i \varphi) \operatorname{sen} \gamma a_1^\dagger + \cos \gamma a_2^\dagger] \\
\lambda_1 &= [\cos \gamma a_1 + \exp(-i \varphi) \operatorname{sen} \gamma a_2] \\
\lambda_2 &= [-\exp(i \varphi) \operatorname{sen} \gamma a_1 + \cos \gamma a_2] .
\end{aligned}
\tag{3.20}$$

Notamos que a nova mudança de base definida em (3.20) não mistura operadores de criação com operadores de aniquilação. De (3.19), observando a estrutura de 2, vemos que tal transformação corresponde a uma rotação do espaço de Fock em  $SU(2)$ , a qual diagonaliza a matriz densidade normal  $A_2$ , conforme verificado em [6]. Por outro lado,  $Z_2$  é nula, de modo que na base de quase-partículas os elementos da matriz densidade de emparelhamento,  $\Pi_{i,j} = \operatorname{Tr}[(\lambda_i \lambda_j) \mathcal{F}]$  para  $i, j = 1, 2$  dados em (2.2), permanecem não-nulos. Dizemos que tal transformação quebra a simetria de rotação, do tipo espacial, em  $SU(2)$  do sistema. No apêndice B definimos e comparamos as estruturas dos grupos  $O(3)$  e  $SU(2)$ . Veja também referência [8]. Enfim, calculando as equações dinâmicas (2.15) com este tipo de quebra de simetria, obtemos

$$\dot{\gamma} = 0
\tag{3.21}$$

$$\dot{\varphi} = 2 g_B B ,$$

onde notamos que a autointeração entre os férmions do sistema, caracterizada pelo parâmetro  $U$  da Hamiltoniana (3.1), não está presente nas equações dinâmicas (3.21), consistente com o fato da simetria de Bogoliubov (emparelhamento) permanecer intacta. O processo aproximativo utilizado acima para a obtenção das equações dinâmicas (3.21) é também chamado de aproximação do tipo Hartree-Fock.

Consideremos agora uma segunda parametrização particular de Bogoliubov que é implementada quando impomos que

$$\varphi = 0 \quad \text{e} \quad \gamma = 0 \quad (3.22)$$

na transformação geral de Bogoliubov (3.10). As matrizes  $\Omega_2$  e  $Z_2$  escrevem-se agora como

$$\Omega_2 = \begin{bmatrix} \cos \xi & 0 \\ 0 & \cos \xi \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

$$Z_2 = \begin{bmatrix} 0 & \exp(i\theta) \operatorname{sen} \xi \\ -\exp(i\theta) \operatorname{sen} \xi & 0 \end{bmatrix},$$

de modo que os operadores de criação e aniquilação relacionam-se da seguinte forma

$$\begin{aligned} \lambda_1^\dagger &= [\cos \xi a_1^\dagger + \exp(i\theta) \operatorname{sen} \xi a_2] \\ \lambda_2^\dagger &= [-\exp(i\theta) \operatorname{sen} \xi a_1 + \cos \xi a_2^\dagger] \\ \lambda_1 &= [\cos \xi a_1 + \exp(-i\theta) \operatorname{sen} \xi a_2^\dagger] \\ \lambda_2 &= [-\exp(-i\theta) \operatorname{sen} \xi a_1^\dagger + \cos \xi a_2] . \end{aligned} \quad (3.24)$$

Notamos que nesta segunda parametrização, a estrutura da matriz  $\Omega_2$  indica que a simetria de rotação, do tipo espacial, em  $SU(2)$ , é conservada, enquanto a estrutura da matriz  $Z_2$  mistura operadores de criação de uma base com operadores de aniquilação da outra base, o que caracteriza a quebra da simetria de rotação, do tipo emparelhamento, em  $SU(2)$ . Em outras palavras, através da transformação (3.23), os elementos da matriz densidade de emparelhamento,  $\Pi_{i,j} = \operatorname{Tr}[(\lambda_i \lambda_j) \mathcal{F}]$  para  $i, j = 1, 2$  dados em (2.2), se anulam, lembrando que no caso de sistemas fermiônicos os elementos diagonais

$\Pi_{1,1} = \langle \lambda_1 \lambda_1 \rangle$  e  $\Pi_{2,2} = \langle \lambda_2 \lambda_2 \rangle$  são sempre nulos, independentemente da base escolhida.

Enfim, calculando as equações dinâmicas (2.15) com a parametrização (3.23), obtemos

$$\begin{aligned} \dot{\xi} &= 0 \\ \dot{\theta} &= 2 g_B B + 2 \hbar \omega + U, \end{aligned} \tag{3.25}$$

onde notamos agora a presença do parâmetro  $U$  da Hamiltoniana (3.1), responsável pela intensidade da autointeração entre os férmions, ou seja, pela existência de emparelhamento. O processo aproximativo utilizado acima para a obtenção das equações dinâmicas (3.25) é também chamado de aproximação do tipo Bogoliubov.

A partir do estudo dos processos de quebra dinâmica de simetria envolvidos na obtenção das equações dinâmicas (3.15), verificamos que as variáveis angulares  $\gamma$  e  $\varphi$  estão associadas a rotações, do tipo espacial, em  $SU(2)$ , ou ainda, estão associadas a transições de fase do sistema onde a simetria de rotação em  $SU(2)$ , do tipo espacial, é quebrada. Por outro lado, as variáveis angulares  $\xi$  e  $\theta$  estão associadas a rotações, do tipo emparelhamento, em  $SU(2)$ , em outras palavras, estão associadas a transições de fase do sistema onde a simetria de rotação de  $SU(2)$ , do tipo emparelhamento, é quebrada. Finalmente, gostaríamos de citar como exemplo de transição de fase, associada a estas quebras de simetrias, a transição de fase associada a supercondutividade (transição do tipo BCS).

Como proposto no início desta seção, identifiquemos agora a Hamiltoniana clássica associada às equações dinâmicas (3.15), ou seja, a Hamiltoniana efetiva clássica  $H_{ef}$  que gera a dinâmica de campo médio das variáveis  $\gamma$ ,  $\xi$ ,  $\varphi$  e  $\theta$ . Assim, a partir das equações de movimento de Hamilton e das equações (3.15), procuramos a  $H_{ef}$  que satisfaça as equações abaixo

$$\begin{aligned}
\dot{\varphi} &= 2 g_B B = \frac{\partial}{\partial \gamma} H_{ef}(\gamma, \xi, \varphi, \theta) \\
\dot{\gamma} &= 0 = - \frac{\partial}{\partial \varphi} H_{ef}(\gamma, \xi, \varphi, \theta) \\
\dot{\theta} &= 2 g_B B + 2 \hbar \omega + U = \frac{\partial}{\partial \xi} H_{ef}(\gamma, \xi, \varphi, \theta) \\
\dot{\xi} &= 0 = - \frac{\partial}{\partial \theta} H_{ef}(\gamma, \xi, \varphi, \theta) .
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Integrando estas equações verificamos de imediato que uma Hamiltoniana efetiva clássica que descreve a dinâmica de campo médio de nosso sistema é dada por

$$H_{ef} = ( 2 g_B B + 2 \hbar \omega + U ) \xi + ( 2 g_B B ) \gamma . \tag{3.27}$$

Para interpretar a física associada à Hamiltoniana acima, devemos notar que devido à escolha da estrutura de (3.26), os parâmetros  $\varphi$  e  $\theta$  são coordenadas generalizadas, enquanto  $\gamma$  e  $\xi$  são momentos generalizados. Notando que a Hamiltoniana (3.27) é função apenas dos parâmetros  $\gamma$  e  $\xi$  e os mesmos aparecem acoplados ao campo magnético  $B$ , concluímos que  $\gamma$  e  $\xi$  são momentos magnéticos (spins). Para melhor justificar a interpretação acima realizamos a seguinte transformação

$$\begin{aligned}
j_1(t) &= \cos \gamma(t) \\
\alpha_1(t) &= \theta(t) \\
j_2(t) &= \cos \xi(t) \\
\alpha_2 &= \varphi(t) ,
\end{aligned} \tag{3.28}$$

onde definimos respectivamente as variáveis momento magnético  $j_1$  e  $j_2$  conjugadas aos ângulos  $\theta$  e  $\varphi$ , respectivamente. Em termos destas novas variáveis a Hamiltoniana do sistema escreve-se como

$$H_{ef}(\alpha_1, \alpha_2, j_1, j_2) = (2g_B B + 2\hbar\omega + U)j_1 + (2g_B B)j_2. \quad (3.29)$$

Convém salientar que a transformação (3.28) não é canônica [9], de modo que não podemos obter as equações de movimento do sistema nas variáveis  $\alpha_1, \alpha_2, j_1$  e  $j_2$ .

De imediato, dada as condições iniciais sobre  $\gamma$  e  $\xi$  vemos que  $j_1$  e  $j_2$  são constantes, podendo assumir valores entre 1 e  $-1$ . Neste sentido podemos relacionar a Hamiltoniana (3.29), dada em termos de variáveis ângulo-ação, com a descrição do movimento angular de precessão de duas partículas clássicas com momento magnético  $\vec{j}_1$  e  $\vec{j}_2$  de módulo unitário na presença de um campo magnético externo  $\vec{B}$ . Nesta descrição as variáveis do tipo ação  $j_1$  e  $j_2$ , associadas aos ângulos  $\varphi$  e  $\theta$ , respectivamente, representam as projeções constantes do momento angular de precessão na direção do campo magnético externo. Neste sentido,  $\alpha_1(t) = \theta(t)$  e  $\alpha_2 = \varphi(t)$ , são os ângulos longitudinais da precessão de  $j_1$  e  $j_2$ . Finalmente, a partir da transformação (3.28), podemos relacionar as variáveis angulares  $\gamma$  e  $\xi$  com as colatitudes entre o campo magnético externo  $\vec{B}$  constante e os momentos angulares de precessão  $\vec{j}_1$  e  $\vec{j}_2$ , respectivamente. Portanto, concluímos que a dinâmica de campo médio de um sistema quântico fermiônico descrito pelo MFAO é matematicamente idêntica à dinâmica de um sistema clássico de dois momentos angulares independentes na presença de um campo magnético externo constante de módulo  $B$  [10].

Conforme indicado no início da seção, resta-nos estudar a dinâmica de campo médio dos observáveis de interesse. Consideremos a evolução temporal dos valores esperados das seguintes quantidades: do número de partículas com spin  $+\frac{1}{2}$  e  $-\frac{1}{2}$ , da magnetização e da energia do sistema. Calculando tais quantidades obtemos

$$\begin{aligned} \langle N_1 \rangle &= Tr \left( a_1^\dagger a_1 \mathcal{F}_0 \right) = \text{sen}^2 \gamma \text{sen}^2 \xi (1 - p_1) + \text{cos}^2 \gamma \text{sen}^2 \xi (1 - p_2) \\ &+ \text{cos}^2 \gamma \text{cos}^2 \xi (p_1) + \text{sen}^2 \gamma \text{cos}^2 \xi (p_2) \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} \langle N_2 \rangle &= Tr \left( a_2^\dagger a_2 \mathcal{F}_0 \right) = \text{cos}^2 \gamma \text{sen}^2 \xi (1 - p_1) + \text{sen}^2 \gamma \text{sen}^2 \xi (1 - p_2) \\ &+ \text{sen}^2 \gamma \text{cos}^2 \xi (p_1) + \text{cos}^2 \gamma \text{cos}^2 \xi (p_2) \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\langle M_z \rangle = \langle N_1 \rangle - \langle N_2 \rangle = \text{cos}(2\gamma) (p_1 - p_2) , \quad (3.32)$$

enquanto o valor esperado da energia do sistema já foi calculado em (3.16). Observe que tais quantidades dependem apenas das variáveis  $\gamma$  e  $\xi$ , as quais não apresentam evolução temporal de acordo com (3.15). Logo, dada as condições iniciais para os parâmetros de Bogoliubov  $\gamma$ ,  $\xi$ ,  $\varphi$  e  $\theta$ , e para as ocupações  $p_1$  e  $p_2$ , os observáveis acima são constantes, o que no caso da energia do sistema é esperado, pois como verificado na seção 3.2 a mesma é conservada. Por outro lado, a magnetização constante é resultado do fato que o sistema descrito pelo MFAO possui um número reduzido de graus de liberdade. Observe que em nosso sistema a magnetização depende apenas das ocupações iniciais e independe da intensidade do campo magnético externo. No caso do modelo de Ising unidimensional [11], onde ocorre interação entre spins de sítios vizinhos, verifica-se que a magnetização deste sistema depende da intensidade do campo magnético externo.

Finalmente, no capítulo seguinte apresentaremos as conclusões deste trabalho e indicamos as possibilidades de desenvolvimentos futuros.

## **CAPÍTULO IV**

## 4 RESULTADOS E CONCLUSÕES

Mostramos com este trabalho uma forma de tratar o problema de condição inicial, no contexto da Mecânica Quântica, além da aproximação de campo médio. Este tratamento [3] possibilita incluir correlações dinâmicas (além do emparelhamento) às equações usuais de campo médio. Embora o formalismo seja bastante geral, no capítulo 2 nós o adaptamos ao tratamento de um sistema discreto de férmions de spin  $1/2$  descritos pelo modelo do oscilador anarmônico fermiônico na presença de um campo magnético externo (MFAO). Sendo um modelo simples, além de ser didático, ele nos foi útil na interpretação dos resultados obtidos e na compreensão do método descrito.

No capítulo 3, através de uma transformação de Bogoliubov que quebra as simetrias de rotação, do tipo espacial e do tipo emparelhamento, do sistema, obtivemos as equações que descrevem a dinâmica efetiva das variáveis de um férmion deste sistema na aproximação de Hartree-Fock-Bogoliubov Dependente do Tempo (TDHFB). Como discutido na seção 3.3, em geral uma aproximação do tipo Hartree-Fock-Bogoliubov Dependente do Tempo é melhor que a usual aproximação do tipo Hartree-Fock Dependente do Tempo para a descrição de sistemas de muitos corpos, desde que a primeira capacita-nos a tratar as correlações do tipo emparelhamento. No final da seção 3.3, a partir de uma redefinição dos parâmetros variacionais de Bogoliubov, mostramos que na aproximação TDHFB a evolução temporal de um sistema quântico fermiônico discreto autointeragente de spin  $1/2$  descrito pela Hamiltoniana MFAO é equivalente à evolução de um sistema clássico de dois spins independentes que realizam um movimento de precessão em torno do campo magnético externo constante. Logo, apesar dos graus de liberdade de sistemas quânticos fermiônicos serem descritos por variáveis anticomutantes, sem contrapartida na descrição clássica, podemos utilizar tais equivalências matemáticas entre sistemas clássicos e quânticos com o objetivo de obter um melhor entendimento físico de sistemas quânticos. Finalmente, calculamos alguns observáveis de interesse, verificando que devido à simplicidade do sistema, os mesmos são constantes, dependendo apenas das condições iniciais. No caso específico do valor esperado da magnetização de nosso sistema, verificamos que o mesmo não apresenta magnetização induzida pelo campo magnético, pois como citado anteriormente, o seu número de graus de liberdade é reduzido (apenas um sítio).

Como perspectiva de futuros trabalhos, pretendemos estudar a dinâmica efetiva de sistemas mais realísticos, tais como sistemas descritos pelos modelos de Ising ou de

Hubbard, tanto na aproximação de campo médio como também na aproximação que utiliza a técnica do operador de projeção dependente do tempo [3]. A grande vantagem da técnica de operador projeção apresentado no capítulo 2 é a possibilidade de incluir outras correlações, além das correlações do tipo emparelhamento, em nosso estudo. Observe que neste caso, o grau de liberdade das ocupações de quase-partículas,  $p_1$  e  $p_2$ , não serão constantes e a dinâmica efetiva destas variáveis mudará fortemente a dinâmica efetiva das variáveis de Bogoliubov [12]. Finalmente, cálculos a temperatura não-nula [7] permitirá o estudo das propriedades termodinâmicas destes sistemas tais como a magnetização como função da temperatura, do potencial químico e do campo magnético externo.

**REFERÊNCIAS**

- [1] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, The Benjamin/Cummings Publishing Company Inc., California (1985).
- [2] C. Willis e R. Picard, Phys. Rev. A9, 1343 (1974).
- [3] A. F. R. de Toledo Piza, Dinâmica Efetiva de Subistemas e a Teoria de Muitos Corpos, Curso da I Escola de Pós-Graduação de Física do Nordeste, João Pessoa, (1987); M. C. Nemes e A. F. R. de Toledo Piza, Physica 137A, 367 (1986).
- [4] A. Kerman e T. Troudet, Ann. of Phys. 154, 456 (1984).
- [5] J. des Cloiseaux, Problème à N Corps, École d'été de Physique Théorique les Houches, Gordon and Breach (1967).
- [6] M. C. D. Barrozo, M. T. Thomaz e A. F. R. de Toledo Piza, Am. J. Phys. 63, 463 (1995).
- [7] S. M. de Souza, S. M. de Oliveira e M. T. Thomaz, Am. J. Phys. 60, 1122 (1992).
- [8] L. H. Ryder, Quantum Field Theory, Cambridge University Press, Cambridge (1985).
- [9] L. Landau e E. Lifshitz, Mecânica, Editora Mir, Moscou (1978); H. Goldstein, Classical Mechanics, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Massachusetts (1980).
- [10] M. T. Thomaz e A. F. R. de Toledo Piza, Physica A218, 237 (1995).
- [11] S. R. A. Salinas, Introdução à Física Estatística, Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo (1997).
- [12] E. R. Takano Natti e A. F. R. de Toledo Piza, Physica A236, 321 (1997).

## **APÊNDICES**

**APÊNDICE A**  
**CÁLCULO DE TRAÇOS**

## APÊNDICE A – Cálculo de traços

Calculemos alguns traços no espaço de Fock (espaço de ocupações). Para simplificar o problema vamos reduzir o seu número de graus de liberdade (estados quânticos). Consideremos um sistema fermiônico discreto de spin 1/2 formado de um único sítio, de modo que respeitando o Princípio de Pauli, esse sítio ou está vazio, ou contém um férmion de spin  $+\frac{1}{2}$ , ou  $-\frac{1}{2}$ , ou dois férmions com spins opostos. Sejam  $\lambda_1^\dagger$  e  $\lambda_1$  respectivamente operadores fermiônicos de criação e aniquilação de partículas de spin  $+\frac{1}{2}$ , e  $\lambda_2^\dagger$  e  $\lambda_2$  respectivamente operadores fermiônicos de criação e aniquilação de partículas de spin  $-\frac{1}{2}$ . Neste caso calculemos o traço abaixo

$$Tr [\lambda_1^\dagger \lambda_1 \mathcal{F}_0] = Tr \left\{ \lambda_1^\dagger \lambda_1 \prod_i [p_i \lambda_i^\dagger \lambda_i + (1 - p_i) \lambda_i \lambda_i^\dagger] \right\}, \quad (\text{A.1})$$

onde os índices  $i = 1, 2$  referem-se aos dois possíveis estados de spin. Convém salientar que, caso o sistema fermiônico tivesse mais que um sítio (estados quânticos), a matriz densidade  $F_0$  deveria conter também uma produtória sobre os demais estados quânticos acessíveis. Continuando, sendo  $N_1 = \lambda_1^\dagger \lambda_1$  e  $N_2 = \lambda_2^\dagger \lambda_2$  os operadores número de férmions com spins  $+\frac{1}{2}$  e  $-\frac{1}{2}$  respectivamente, escrevemos os autoestados dos operadores número como  $|n_1, n_2\rangle$ , onde

$$\begin{aligned} N_1 |n_1, n_2\rangle &= (N_1 \otimes I_2) (|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle) \\ &= (N_1 |n_1\rangle) \otimes (I_2 |n_2\rangle) \\ &= (n_1 |n_1\rangle) \otimes (1 |n_2\rangle) \\ &= n_1 (|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle) \\ &= n_1 |n_1, n_2\rangle, \end{aligned}$$

de modo que  $n_i$  é o autovalor do operador  $N_i$  correspondente ao autoestado  $|n_1, n_2\rangle$ , representando portanto o número de férmions com spin  $+\frac{1}{2}$  do respectivo estado. Note que os índices 1 e 2 dos operadores indicam em qual subespaço de Fock os mesmos atuam, de modo

que  $I_2$  é o operador identidade que atua somente no subespaço de Fock correspondente ao índice  $i = 2$ . Analogamente temos que

$$N_2 | n_1, n_2 \rangle = n_2 | n_1, n_2 \rangle . \quad (\text{A.2})$$

Voltando ao cálculo do traço, segue que

$$\begin{aligned} Tr [\lambda_1^\dagger \lambda_1 \mathcal{F}_0] = \\ Tr \left( \left\{ (\lambda_1^\dagger \lambda_1) \otimes (I_2) \right\} \left\{ [p_1 \lambda_1^\dagger \lambda_1 + (1 - p_1) \lambda_1 \lambda_1^\dagger] \otimes [p_2 \lambda_2^\dagger \lambda_2 + (1 - p_2) \lambda_2 \lambda_2^\dagger] \right\} \right) , \end{aligned}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} Tr [\lambda_1^\dagger \lambda_1 \mathcal{F}_0] = \quad (\text{A.3}) \\ Tr \left( \left\{ \lambda_1^\dagger \lambda_1 [p_1 \lambda_1^\dagger \lambda_1 + (1 - p_1) \lambda_1 \lambda_1^\dagger] \right\} \otimes \left\{ I_2 [p_2 \lambda_2^\dagger \lambda_2 + (1 - p_2) \lambda_2 \lambda_2^\dagger] \right\} \right) . \end{aligned}$$

Observe que

$$Tr \left\{ I_2 [p_2 \lambda_2^\dagger \lambda_2 + (1 - p_2) \lambda_2 \lambda_2^\dagger] \right\} = 1 , \quad (\text{A.4})$$

pois se o único estado quântico (sítio, por exemplo) contiver um spin  $-\frac{1}{2}$ , ou seja,  $p_2 = 1$ , então

$$\begin{aligned} Tr \left\{ I_2 [p_2 \lambda_2^\dagger \lambda_2 + (1 - p_2) \lambda_2 \lambda_2^\dagger] \right\} &= Tr (\lambda_2^\dagger \lambda_2) = \langle n_1, 1 | \lambda_2^\dagger \lambda_2 | n_1, 1 \rangle \\ &= \langle n_1, 1 | \lambda_2^\dagger | n_1, 0 \rangle = \langle n_1, 1 | n_1, 1 \rangle \\ &= \langle n_1 | n_1 \rangle \langle -\frac{1}{2} | -\frac{1}{2} \rangle = \langle -\frac{1}{2} | -\frac{1}{2} \rangle = 1 \end{aligned}$$

e analogamente, se o estado quântico não contiver spin  $-\frac{1}{2}$ , ou seja,  $p_2 = 0$ , então

$$\begin{aligned} Tr \left\{ I_2 [p_2 \lambda_2^\dagger \lambda_2 + (1 - p_2) \lambda_2 \lambda_2^\dagger] \right\} &= Tr (\lambda_2 \lambda_2^\dagger) = \langle n_1, 0 | \lambda_2 \lambda_2^\dagger | n_1, 0 \rangle \\ &= \langle n_1, 0 | \lambda_2 | n_1, 1 \rangle = \langle n_1, 0 | n_1, 0 \rangle \\ &= \langle n_1 | n_1 \rangle \langle 0 | 0 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1 . \end{aligned}$$

Portanto, segue que

$$Tr [\lambda_1^\dagger \lambda_1 \mathcal{F}_0] = Tr \left\{ \lambda_1^\dagger \lambda_1 \left[ p_1 \lambda_1^\dagger \lambda_1 + (1 - p_1) \lambda_1 \lambda_1^\dagger \right] \right\} = p_1 \quad , \quad (\text{A.5})$$

pois se o estado quântico contiver um spin  $+\frac{1}{2}$ , que implica em  $p_l = 1$ , segue que

$$\begin{aligned} Tr [\lambda_1^\dagger \lambda_1 \mathcal{F}_0] &= Tr \left\{ \lambda_1^\dagger \lambda_1 \left[ \lambda_1^\dagger \lambda_1 \right] \right\} = \langle 1, n_2 | \lambda_1^\dagger \lambda_1 \lambda_1^\dagger \lambda_1 | 1, n_2 \rangle \\ &= \langle 1, n_2 | \lambda_1^\dagger \lambda_1 \lambda_1^\dagger | 0, n_2 \rangle = \langle 1, n_2 | \lambda_1^\dagger \lambda_1 | 1, n_2 \rangle \\ &= \langle 1, n_2 | \lambda_1^\dagger | 0, n_2 \rangle = \langle 1, n_2 | 1, n_2 \rangle = \\ &= \langle +\frac{1}{2} | +\frac{1}{2} \rangle \langle n_2 | n_2 \rangle = \langle +\frac{1}{2} | +\frac{1}{2} \rangle = 1 = p_1 \quad , \end{aligned}$$

enquanto se estado quântico não contiver um spin  $+\frac{1}{2}$ , que implica em  $p_l = 0$ , temos

$$\begin{aligned} Tr [\lambda_1^\dagger \lambda_1 \mathcal{F}_0] &= Tr \left\{ \lambda_1^\dagger \lambda_1 \left[ \lambda_1 \lambda_1^\dagger \right] \right\} = \langle 0, n_2 | \lambda_1^\dagger \lambda_1 \lambda_1 \lambda_1^\dagger | 0, n_2 \rangle \\ &= \langle 0, n_2 | \lambda_1^\dagger \lambda_1 | 0, n_2 \rangle = 0 = p_1 \quad , \end{aligned}$$

pois  $\lambda_1 | 0, n_2 \rangle = 0$ . Destas considerações obtemos que

$$Tr [\lambda_1^\dagger \lambda_1 \mathcal{F}_0] = p_1 \quad . \quad (\text{A.6})$$

Convém salientar que caso nosso sistema contivesse  $m$  sítios, o traço dado em (A.4) resultaria em uma produtória de 1 com  $m$  fatores. A partir deste exemplo, torna-se óbvio o cálculo dos demais traços dados no capítulo 2.

**APÊNDICE B**  
**Rotações em  $O(3)$  e em  $SU(2)$**

## APÊNDICE B – Rotações em O(3) e em SU(2)

Neste apêndice faremos um estudo da equivalência entre o Grupo de Rotação O(3) e o Grupo SU(2). Começamos estudando o grupo O(3). Uma rotação geral espacial tem a forma

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = (R) \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad \text{ou} \quad r' = R r , \quad (\text{B.1})$$

onde  $R$  é a matriz de rotação. Como a rotação preserva a distância da origem, segue que

$$(x')^2 + (y')^2 + (z')^2 = x^2 + y^2 + z^2 \quad \text{ou ainda} , \quad (\text{B.2})$$

$$r^T R^T R r = r^T r \quad \text{que implica em} \quad R^T R = 1 , \quad (\text{B.3})$$

portanto  $R$  é uma matriz ortogonal (3X3). O conjunto das matrizes Ortogonais (3X3) de rotação formam o grupo denotado O(3).

Como um exemplo consideremos uma rotação de um vetor  $r$  em torno do eixo  $z$ . Utilizando a representação matricial para esta rotação temos

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \text{sen } \theta & 0 \\ -\text{sen } \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} , \quad (\text{B.4})$$

onde a matriz que realiza uma rotação de um ângulo  $\theta$  em torno do eixo  $z$  é dada por

$$R_z(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & \text{sen } \theta & 0 \\ -\text{sen } \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.5})$$

Analogamente, as matrizes que representam rotações em torno dos eixos  $x$  e  $y$  são

$$R_x(\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & \text{sen } \phi \\ 0 & -\text{sen } \phi & \cos \phi \end{bmatrix} \text{ e} \quad (\text{B.6})$$

$$R_y(\psi) = \begin{bmatrix} \cos \psi & 0 & -\text{sen } \psi \\ 0 & 1 & 0 \\ \text{sen } \psi & 0 & \cos \psi \end{bmatrix}, \quad (\text{B.7})$$

respectivamente. Verifica-se imediatamente a partir das definições acima que o grupo  $O(3)$  é não-abeliano, pois duas rotações em torno de diferentes eixos não comutam. Definamos agora os geradores do grupo  $O(3)$ . Como uma matriz de rotação no caso geral tem nove elementos e a equação (B.3) fornece seis equações acopladas destes elementos, então efetivamente uma rotação geral é descrita por três elementos, por exemplo, os ângulos de Euler. De (B.5)-(B.7) definimos os três geradores de rotação como

$$J_z = \frac{1}{i} \left[ \frac{d R_z(\theta)}{d\theta} \right]_{\theta=0} = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.8})$$

$$J_x = \frac{1}{i} \left[ \frac{d R_x(\phi)}{d\phi} \right]_{\phi=0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \text{ e} \quad (\text{B.9})$$

$$J_y = \frac{1}{i} \left[ \frac{d R_y(\psi)}{d\psi} \right]_{\psi=0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.10})$$

Sendo os geradores  $J_x$ ,  $J_y$  e  $J_z$  hermitianos, segue que uma rotação infinitesimal, por exemplo, em torno do eixo z de um ângulo  $(\delta\theta)$ , é dada por

$$R_z(\delta\theta) = 1 + iJ_z(\delta\theta), \quad (\text{B.11})$$

enquanto uma rotação finita de um ângulo  $\theta = N(\delta\theta)$ , onde  $N \rightarrow \infty$ , é obviamente

$$\begin{aligned} R_z(\theta) &= [R_z(\delta\theta)]^N \\ &= \left[ 1 + iJ_z \frac{\theta}{N} \right]^N = \exp(iJ_z\theta). \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Consideraremos agora grupo  $SU(2)$  que consiste de matrizes  $(2 \times 2)$  unitárias com determinante igual a unidade, ou seja, matrizes que satisfazem as relações

$$U U^\dagger = U^\dagger U = I \quad \text{e} \quad \det U = 1, \quad (\text{B.13})$$

conseqüentemente

$$U = \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix} \quad \text{com} \quad a a^* + b b^* = 1 . \quad (\text{B.14})$$

Notamos que analogamente ao grupo  $O(3)$ , como  $a$  e  $b$  são números complexos que satisfazem a condição (B.14), então transformações do grupo  $SU(2)$  também são descritas por três parâmetros.

As matrizes complexas  $U$  transformam vetores complexos ( $2 \times 1$ ), chamados espinores e representados por

$$\xi = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} , \quad (\text{B.15})$$

da seguinte forma

$$\xi' = U \xi \quad (\text{B.16})$$

ou explicitamente

$$\begin{aligned} \xi_1' &= a \xi_1 + b \xi_2 \\ \xi_2' &= -b^* \xi_1 + a^* \xi_2 . \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Verifiquemos que uma transformação de  $SU(2)$  nos espinores  $\xi$  é equivalente a uma transformação de  $O(3)$  nos vetores  $r$ , quando as componentes de  $\xi$  e  $r$  relacionam-se como

$$x = \frac{1}{2} [(\xi_2)^2 - (\xi_1)^2] , \quad y = \frac{1}{2i} [(\xi_2)^2 + (\xi_1)^2] \quad \text{e} \quad z = \xi_1 \xi_2 . \quad (\text{B.18})$$

Logo, isolando  $\xi_1$  e  $\xi_2$  em termo de  $x$ ,  $y$  e  $z$  em (B.18) e substituindo em (B.17), obtemos que sob uma transformação de  $SU(2)$

$$\begin{aligned}
x' &= \frac{1}{2} [a^2 + (a^*)^2 - b^2 - (b^*)^2] x - \frac{i}{2} [a^2 - (a^*)^2 + b^2 - (b^*)^2] y - (a^*b^* + ab) z \\
y' &= \frac{i}{2} [a^2 - (a^*)^2 - b^2 + (b^*)^2] x - \frac{1}{2} [a^2 + (a^*)^2 + b^2 + (b^*)^2] y + i (a^*b^* - ab) z \\
z' &= (b^*a + a^*b) x + (a^*b - b^*a) y + (a^*a - b^*b) z .
\end{aligned} \tag{B.19}$$

Impondo que  $a = \exp(i\alpha/2)$  e  $b = 0$ , que satisfazem a relação  $a^*a + b^*b = 1$ , a equação (B.19) escreve-se como

$$\begin{aligned}
x' &= x \cos \alpha + y \sin \alpha \\
y' &= -x \sin \alpha + y \cos \alpha \\
z' &= z ,
\end{aligned} \tag{B.20}$$

as quais descrevem uma rotação em torno do eixo  $z$  de um ângulo  $\alpha$ . Portanto, assumindo as relações (B.18), obtemos a correspondência abaixo entre uma transformação  $U$  de  $SU(2)$  e uma transformação  $R$  de  $O(3)$ , ou seja,

$$U = \begin{bmatrix} \exp(i\alpha/2) & 0 \\ 0 & \exp(-i\alpha/2) \end{bmatrix} \text{ com } R = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} . \tag{B.21}$$

Tomando como geradores das transformações de  $SU(2)$  as matrizes de Pauli

podemos escrever as transformações dadas em (B.21), em termos dos geradores  $\sigma_z$  de  $SU(2)$  e  $J_z$  de  $O(3)$ , como

$$U = \exp(i \sigma_z \alpha/2) \quad \text{e} \quad R = \exp(i J_z \alpha) . \quad (\text{B.23})$$

De maneira análoga, tomando  $a = \cos(\beta/2)$  e  $b = \text{sen}(\beta/2)$ , que também satisfazem a relação  $a^2 + b^2 = 1$ , a partir (B.19) temos a correspondência

$$U = \begin{bmatrix} \cos(\beta/2) & \text{sen}(\beta/2) \\ -\text{sen}(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{bmatrix} \quad \text{com} \quad R = \begin{bmatrix} \cos \beta & 0 & -\text{sen} \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \text{sen} \beta & 0 & \cos \beta \end{bmatrix} , \quad (\text{B.24})$$

ou ainda, em termos dos geradores de SU(2) e O(3) considerados acima,

$$U = \exp(i \sigma_y \beta/2) \quad \text{e} \quad R = \exp(i J_y \beta) . \quad (\text{B.25})$$

Finalmente, para  $a = \cos(\gamma/2)$  e  $b = i \text{sen}(\gamma/2)$  temos a correspondência

$$U = \begin{bmatrix} \cos(\gamma/2) & i \text{sen}(\gamma/2) \\ i \text{sen}(\gamma/2) & \cos(\gamma/2) \end{bmatrix} \quad \text{com} \quad R = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \gamma & \text{sen} \gamma \\ 0 & -\text{sen} \gamma & \cos \gamma \end{bmatrix} , \quad (\text{B.26})$$

ou ainda, em termos dos geradores de SU(2) e O(3),

$$U = \exp(i \sigma_x \gamma/2) \quad \text{e} \quad R = \exp(i J_x \gamma) . \quad (\text{B.27})$$

Portanto, no caso geral a correspondência entre uma transformação  $U$  de SU(2) no espaço dos espinores  $\xi$  e uma transformação  $R$  de O(3) no espaço de vetores  $r$  é

$$U = \exp(i \vec{\sigma} \cdot \vec{\varphi}/2) \quad \text{e} \quad R = \exp(i \vec{J} \cdot \vec{\varphi}) . \quad (\text{B.28})$$

Esta correspondência entre as transformações de SU(2) e O(3) implica que os grupos têm estruturas semelhantes e desta forma seus geradores obedecem as mesmas relações de comutação, ou seja,

$$[J_x, J_y] = i J_z \quad \text{e permutações cíclicas} \tag{B.29}$$

$$\left[ \frac{\sigma_x}{2}, \frac{\sigma_y}{2} \right] = i \frac{\sigma_z}{2} \quad \text{e permutações cíclicas} .$$

Por outro lado, existe uma diferença topológica global entre SU(2) e O(3) , pois em (B.19) tanto para  $a = \exp (i \alpha/2)$  e  $b = 0$  , bem como para  $a = \exp (i [\alpha + 2 \pi] /2\pi) = -\exp (i \alpha/2)$  e  $b = 0$  , obtemos as mesmas relações dadas em (B.20), de modo que com as parametrizações acima definidas temos que  $U \rightarrow R$  e  $-U \rightarrow R$  . Conclui-se que os elementos  $U$  e  $-U$  de SU(2) correspondem a mesma rotação  $R$  de O(3) , portanto existem um mapeamento 2 por 1 dos elementos de SU(2) nos elementos de O(3).