UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

SBI-IFUSP
305M810T0827

"TEORIAS MICROSCÓPICAS PARA MOVIMENTOS COLETIVOS DE GRANDE AMPLITUDE"

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
827
INSTITUTO DE FÍSICA

Frederico Firmo de Souza Cruz

Tese de Doutoramento apresentada no Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Data da defesa 12/12/86

ORIENTADOR: Dr. Emerson J. V. de Passos

NOVEMBRO/1986

539.7
C 957t
D

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Cruz, Frederico Firmo de Souza
Teorias microscópicas para movimentos coletivos de grande amplitude. São Paulo, 1986.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo. Instituto de Física. Departamento de Física Matemática.
Área de Concentração: Física Nuclear
Orientador: Prof. Dr. Emerson José Veloso de Passos

Unitermos: 1.Campo médio; 2.Teoria de Hartree Fock dependente do tempo; 3.Trajetórias coletivas; 4.Movimentos coletivos nucleares.

USP/IF/SBI - 36/86

A duas pessoas especiais

Mariangela e Eduardo Ribeiro de Paula

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Departamento de Física-Matemática do IFUSP pelas boas condições de convívio e trabalho.

Agradeço a Emerson J.V. de Passos, Milton Isidro, Rogério Garcia, Paulo Soares Carrilho, Diogenes Galetti, Marcus Aguiar, Sidney Avancini e Manoel Simões pelo que contribuiram para este trabalho.

Agradeço ao Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Catarina pelo suporte durante o período em que, afastado, terminei este trabalho.

Agradeço a FAPESP e CAPES que financiaram parcialmente este trabalho.

Agradeço ainda a Yedda Maria R. de Mendonça pois nessas páginas tem um pouco de sua vida.

Agradeço a Yedda Sampaio R. de Mendonça pelo incentivo e apoio.

Agradeço finalmente a duas pessoas muito especiais Mariangela e Eduardo Ribeiro de Paula que sem pedir nada em troca financiaram minha viagem ao "International Symposium of Time Dependent Hartree Fock and Beyond , Bad Honnef (1982) que muito contribuiu para este trabalho e para minha formação.

Agradeço ao Carlos Duarte pela datilografia deste trabalho.

ABSTRACT

In this work, the many proposals of "Collective Paths" that have appeared in literature, were derived through a local analysis of the Time Dependent Hartree Fock dynamics. Those proposals were compared and validity conditions obtained for Semiclassical Hamiltonians which have only quadratic terms in momenta. A careful analysis of the parametrization of Slater Determinants allowed us to exploit the geometrical features of the Time Dependent Hartree Fock Theory and construct the Paths in a covariant way.

The analysis was applied to a three level model (SU(3)).

RESUMO

Neste trabalho as diversas propostas de "Trajetórias Coletivas" apresentadas na literatura foram derivadas a partir de uma análise local das equações dinâmicas de Hartree Fock Dependente do Tempo. Estas propostas foram comparadas e condições de validade obtidas para hamiltonianas semiclássicas que tem apenas termos de 2ª ordem nos momentos.

Uma análise cuidadosa da parametrização de Determinantes de Slater permitiu-nos explorar as características geométricas da teoria de Hartree-Fock Dependente do tempo e construir as trajetórias num formalismo covariante.

Esta análise foi aplicada a um modelo esquemático de três níveis SU(3).

Í N D I C E

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO 1

CAPÍTULO II - TEORIAS MICROSCÓPICAS PARA MOVIMENTOS COLETIVOS DE GRANDE AMPLITUDE 5

A - Hartree Fock Dependente do Tempo 5

B - Equações de Trajetórias Coletivas 10

CAPÍTULO III - CINEMÁTICA DE MUITOS CORPOS 23

A - Aplicações em Dois Modelos Esquemáticos . 35

CAPÍTULO IV - DINÂMICA DE MUITOS CORPOS 44

A - Dinâmica de Dois Modelos Esquemáticos ... 50

CAPÍTULO V - TRAJETÓRIAS COLETIVAS 59

A - Linha de Força (Trajetórias de Villars) .. 61

B - Vales e Cumeeiras (Trajetória de Rowe-Bassermann) 66

C - Linha de Modos Normais 68

D - Comparação entre as Trajetórias Coletivas 69

CAPÍTULO VI - TRAJETÓRIAS COLETIVAS NO MODELO DE TRÊS NÍVEIS 77

COMENTÁRIOS FINAIS 95

APÊNDICE A - HARTREE FOCK DEPENDENTE DO TEMPO NA APROXIMAÇÃO DE BAIXOS MOMENTOS 96

APÊNDICE B - MEDIDA INVARIANTE E ESTRUTURA SIMPLÉTICA 100

APÊNDICE C - VALORES MÉDIOS DE OPERADORES 104

BIBLIOGRAFIA 108

I - INTRODUÇÃO

Teorias microscópicas têm como objetivo último descrever fenômenos nucleares coletivos e não coletivos a partir da interação nucleon-nucleon.

Obviamente a descrição procurada envolve aproximações sem as quais um problema de muitos corpos não pode ser resolvido. A aproximação de campo médio é neste contexto a aproximação de ordem zero, ponto de partida das teorias microscópicas.

Esta aproximação, cuja justificativa pode ser encontrada em [48,2], permite-nos dar uma interpretação elegante a diversos fenômenos nucleares.

No limite estático, o campo médio, originado da interação entre a coletividade dos nucleons, é responsável pela estrutura de partícula independente. O comportamento coletivo dos nucleons seria, neste cenário, uma manifestação das variações deste campo médio. Assim a dinâmica do mesmo nos dá uma descrição unificada de fenômenos coletivos e não coletivos.

Como a dinâmica deste campo médio é dada pela aproximação de Hartree Fock Dependente do Tempo (HFDT), as teorias para movimentos coletivos são de uma forma explícita ou não devedoras desta aproximação.

Nos últimos anos inúmeros trabalhos envolvendo aplicações de HFDT na análise de fenômenos como fissão, fusão, colisões de ions pesados, demonstraram a riqueza e o alcance desta aproximação[48].

Neste trabalho temos um objetivo restrito, não vamos tratar nenhum sistema físico realista. Faremos uma análise formal de diversas teorias para Movimentos Coletivos de grande amplitude partindo de HFDT.

Visto que a dinâmica de HFDT envolve todos os

graus de liberdade, para especificar este método para movimentos coletivos é necessário a introdução de critérios que possibilitem extrair a dinâmica coletiva, isto é, reduzir o número de graus de liberdade.

A separação da dinâmica coletiva é possível quando há (ao menos aproximadamente) um desacoplamento entre graus de liberdade coletivos e não coletivos.

Na busca de uma dinâmica coletiva duas linhas de ataque estão presentes na literatura.

Na primeira, condições são impostas sobre as equações de HFDT e se obtém uma dinâmica hamiltoniana do tipo clássico. As condições restringem esta dinâmica aos graus de liberdade coletivos. A dinâmica coletiva é obtida por um processo de requantização.

A segunda linha obtém estados (determinantes de Slater) $|\psi(\alpha)\rangle$ com propriedades coletivas a partir de imposições sobre a dinâmica de HFDT. Estes estados constituem uma Trajetória Coletiva. Quando implementados no anzatz de Griffin - Hill Wheeler

$$|\Psi\rangle = \int f(\alpha)\, |\Psi(\alpha)\rangle\, d\alpha$$

estes estados geram um subespaço coletivo[49,50,51]. A dinâmica coletiva é obtida projetando-se a Hamiltoniana de muitos corpos neste subespaço.

Em ambas as linhas a análise das equações de HFDT nos levam à construção de uma trajetória coletiva. Elas diferem apenas no método de obtenção da Hamiltoniana quântica.

Neste trabalho vamos nos fixar na primeira fase que é comum às duas linhas, isto é, analisaremos as diversas prescrições teóricas para Trajetórias Coletivas.

Na literatura os primeiros trabalhos nesta direção surgiram no início da década de 70 (Holzwarth e Yukawa[4] e Rowe e Bassermann[16]. Os trabalhos subseqüentes de Rowe e Bassermann[5], Baranger e Veneroni[10], Villars[6], Marumori[12] geraram duas propostas para trajetórias coletivas que denominamos trajetória de Rowe Bassermann e trajetória de Villars.

Num trabalho de 1982[19] apontamos ainda a existência de uma terceira trajetória que havia sido esboçada no trabalho de Moya Guerra-Villars[7]. Denominamos esta terceira trajetória Linha de Modos Normais.

No Capítulo II, apresentamos as três trajetórias coletivas utilizando um formalismo e argumentos semelhantes aos presentes nos artigos originais.

A partir de 1980 vários trabalhos[29-37] demonstraram a necessidade de uma análise mais rigorosa da parametrização de determinantes e enfocaram aspectos geométricos da dinâmica de HFDT[32].

Estes aspectos foram tratados em detalhe nos Capítulos III e IV onde utilizamos os modelos de dois níveis (Lipkin) e de três níveis (SU(3)) para exemplificar.

A análise cinemática e dinâmica, efetuada nos capítulos supracitados, nos possibilita analisar de um ponto de vista geométrico as diversas trajetórias coletivas. Esta interpretação geométrica nos permite obter as diversas prescrições teóricas para trajetórias coletivas analisando a dinâmica de HFDT na vizinhança de estados arbitrários.

Esta análise local tem como justificativa o reconhecimento do fato de que uma curva (p. exemplo, trajetória coletiva) pode ser definida por um gerador infinitesimal e/ou vínculo. Como geradores e vínculos podem ser definidos ponto a ponto, pode-se dar uma prescrição para eles analisando as condições

dinâmicas de desacoplamento na vizinhança do ponto.

No Capítulo V mostramos que as diversas trajetórias coletivas podem ser obtidas a partir desta análise local.

Este enfoque possibilita o estudo das diversas prescrições de um ponto de vista unificado. Entretanto esta análise não nos garante, a priori, a obtenção de um modo coletivo exatamente desacoplado. Isto, porque a dinâmica é considerada apenas localmente, e as trajetórias não são necessariamente soluções das equações de movimento, isto é, da dinâmica global.

Neste trabalho especificamos nossa análise para hamiltonianas "clássicas" quadráticas nos momentos. Para estas hamiltonianas é possível mostrar, a posteriori, em que casos as condições de desacoplamento locais nos levam a soluções das equações de movimento de HFDT.

Para finalizar nós exibimos vários aspectos de nossa análise num modelo esquemático de três níveis e tecemos alguns comentários finais.

II - TEORIAS MICROSCÓPICAS PARA MOVIMENTOS COLETIVOS DE GRANDE AMPLITUDE

A - Hartree Fock Dependente do Tempo

A aproximação de Hartree Fock Dependente do Tempo (HFDT) [1,2] traz intrinsecamente em sua formulação a interdependência entre fenômenos coletivos e de partícula independente. Esta interpendência fica clara ao notarmos que o campo médio de Hartree Fock é originado pela interação entre a coletividade dos nucleons e ao mesmo tempo, é responsável pela estrutura das excitações de partícula independente.

As equações de HFDT fornecem de forma autoconsistente a evolução temporal do campo médio e das funções de onda de partícula independente sujeitas a este campo médio.

Portanto, HFDT descreve a princípio todos os tipos de excitação (na aproximação de campo médio) de modo que as teorias para movimentos coletivos, baseados em HFDT, devem fornecer meios para extrair os modos coletivos separando-os dos demais graus de liberdade.

Temos então, duas questões: Em primeiro lugar como parametrizar os diversos modos de excitação (graus de liberdade) e em segundo lugar como identificar os graus de liberdade coletivos.

Neste capítulo supondo que exista uma parametrização vamos introduzir critérios de coletividade, obtendo, a partir da Teoria de HFDT, as equações das diversas teorias para movimentos coletivos de grande amplitude [5-12].

A análise rigorosa da parametrização será feita no próximo capítulo.

As equações de HFDT podem ser obtidas do se-

guinte princípio variacional

$$\delta \int \langle \Psi(t) | \hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} | \Psi(t) \rangle \, dt = 0 \qquad \text{(II-1)}$$

onde consideramos $\hbar = 1$. [3]

E onde $\hat{H}$ é uma hamiltoniana de muitos corpos do tipo

$$\hat{H} = \sum_{i,j} T_i + V_{ij}$$

onde V_{ij} é uma interação genérica de dois corpos.

Os estados variacionais são determinantes de Slater.

Vamos supor que exista uma parametrização [vide Cap. III] tal que os determinantes de Slater possam ser escritos como

$$|\Psi(t)\rangle \equiv |\Psi(\bar{q}, \bar{p})\rangle \qquad \text{(II-2)}$$

onde $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3 \ldots p_N)$

$\vec{q} = (q^1, q^2, q^3 \ldots q^N)$

Os parâmetros p_i e q^i identificam de forma completa e unívoca estado $|\psi(t)\rangle$ e cada par (p_i, q^i) está associado a um modo de excitação (i.e. grau de liberdade) do sistema.

As soluções das equações de movimento geradas a partir de (II-1) serão trajetórias no espaço de parâmetros.

Substituindo (II-2) em (II-1) obtém-se

$$\delta \langle \Psi(\bar{q}, \bar{p}) | \hat{H} + \sum_i \dot{p}_i \hat{Q}^i(\bar{q}, \bar{p}) - \sum_i \dot{q}^i \hat{P}_i(\bar{q}, \bar{p}) | \Psi(\bar{q}, \bar{p}) \rangle = 0 \qquad \text{(II-3)}$$

onde os operadores $\hat{Q}^i(\hat{p}, \hat{q})$ e $\hat{P}_i(\hat{p}, \hat{q})$ são geradores infinitesimais

de translações no espaço de parâmetros.

$$\hat{Q}^i(\bar{q},\bar{p})\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle = -i\,\frac{\partial}{\partial p_i}\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle \qquad \text{(II-4.a)}$$

$$\hat{P}_i(\bar{q},\bar{p})\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle = i\,\frac{\partial}{\partial q^i}\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle \qquad \text{(II-4.b)}$$

Por simplicidade vamos denotar os geradores como $\hat{Q}^i$ e $\hat{P}_i$ deixando implícita a dependência nos parâmetros.

Estes geradores podem ser construídos de tal forma que obedeçam as seguintes regras de comutação

$$\langle\Psi(\bar{q},\bar{p})|\,[\hat{Q}^i,\hat{P}_j]\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle = i\,\delta^i_j \qquad \text{(II-5.a)}$$

$$\langle\Psi(\bar{q},\bar{p})|\,[\hat{Q}^i,\hat{Q}^j]\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle = 0 \quad \forall i,j \qquad \text{(II-5.b)}$$

$$\langle\Psi(\bar{q},\bar{p})|\,[\hat{P}_i,\hat{P}_j]\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle = 0 \quad \forall i,j \qquad \text{(II-5.c)}$$

Efetuando a variação (II-3) sobre os estados

$$\delta\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle = \begin{Bmatrix} -i\,\hat{P}_i \\ i\,\hat{Q}^i \end{Bmatrix}\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle$$

obtém-se

$$\dot{p}_i = \langle\Psi(\bar{q},\bar{p})|\,[\hat{H},i\,\hat{P}_i]\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle = -\frac{\partial\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p})}{\partial q^i} \qquad \text{(II-6.a)}$$

$$\dot{q}^i = \langle\Psi(\bar{q},\bar{p})|\,[\hat{H},i\,\hat{Q}^i]\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle = \frac{\partial\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p})}{\partial p_i} \qquad \text{(II-6.b)}$$

onde

$$\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p}) = \langle \Psi(\bar{q},\bar{p}) | \hat{H} | \Psi(\bar{q},\bar{p}) \rangle \qquad \text{(II-7)}$$

Isto é, as equações de HFDT são, em termos dos parâmetros, equações de Hamilton.

A equação variacional (II-3) é apenas uma representação diferente da equação variacional de HFDT, não há portanto nenhum ingrediente novo neste formalismo. No entanto a forma da equação variacional (II-3) nos permite uma interpretação iluminante. [4,5,11,14]

A equação (II-3) é uma equação variacional com vínculo, onde os operadores de vínculo $\hat{Q}^i$ e $\hat{P}_i$ dependem do ponto e os parâmetros de vínculo são $\dot{q}^i$ e $\dot{p}_i$.

Ao mesmo tempo as equações (II-4) nos dizem que $\hat{Q}^i$ e $\hat{P}_i$ são geradores infinitesimais e as equações (II-6) nos mostram que $\dot{q}^i$ e $\dot{p}_i$ devem obedecer equações de movimento do tipo clássico.

Observemos que se existir um grau de liberdade desacoplado dos outros graus deve haver um par (q^j, p_j), por exemplo q^1 e p_1, associado a este grau. Neste caso se impusermos as seguintes condições iniciais

$$\dot{q}^i = \dot{p}_i = 0 \qquad i \neq 1$$

e

$$\dot{q}^i = \dot{p}_i = 0 \qquad i \neq 1$$

A equação (II-3) poderá ser reescrita como

$$\delta \langle \Psi(\bar{q},\bar{p}) | \hat{H} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^1} \hat{Q}^1(\bar{q},\bar{p}) - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_1} \hat{P}_1(\bar{q},\bar{p}) | \Psi(\bar{q},\bar{p}) \rangle = 0 \qquad \text{(II-8)}$$

e os estados obtidos seriam soluções das equações de H.F.D.T.

A equação (II-8) é também uma equação de Hartree Fock com Vínculos (Constrained Hartree-Fock) onde os operadores de vínculo são definidos auto consistentemente. Isto nos mostra que a princípio um cálculo de Hartree-Fock com Vínculos ou um cálculo do tipo "Cranking" pode gerar soluções de HFDT. Entretanto estas soluções só serão soluções de HFDT se duas condições forem satisfeitas.

i) os parâmetros de vínculo são soluções das equações de movimento.

ii) os operadores de vínculo devem ser geradores infinitesimais, definidos auto consistentemente.

Para se obter soluções aproximadas, pode-se relaxar as duas condições acima. Com isto, abdica-se da intenção de encontrar soluções das equações de movimento de HFDT. Porém,

pode-se obter equações de Trajetórias cujos pontos correspondem a estados com propriedades coletivas. Estas propriedades coletivas são garantidas por uma escolha adequada dos operadores de vínculo com base em raciocínios fenomenológicos ou considerações de simetria.

Assim a forma geral de uma equação de Trajetória coletiva é

$$\delta \langle \Psi(\lambda,\mu) | \hat{H} - \lambda \hat{Q}_c - \mu \hat{P}_c | \Psi(\lambda,\mu) \rangle = 0 \qquad \text{(II-9)}$$

onde os operadores $\hat{Q}_c$ e $\hat{P}_c$ são escolhidos por meio de algum critério de coletividade. Isto é $\hat{Q}_c$ e $\hat{P}_c$ podem ser originado de equações adicionais ou de algum "anzatz".

B - Equações de Trajetórias Coletivas

Vamos agora especificar nossa discussão, a fim de obter as equações das diversas trajetórias coletivas encontradas na literatura [5,6,8,10,12].

Nós assumimos como válida a aproximação de baixos momentos (vide Apêndice A) a fim de comparar num mesmo contexto as diversas teorias.

Assim a hamiltoniana clássica será dada por

$$\mathcal{H}(\vec{q},\vec{p}) = \frac{1}{2} B^{\alpha\beta}(\vec{q}) p_\alpha p_\beta + V(\vec{q}) \qquad \text{(II-10)}$$

e as equações variacionais serão (vide Apêndice A)

$$\delta \langle \Psi(\vec{q}) | \hat{H} - \frac{\partial V}{\partial q^\alpha} \hat{Q}^\alpha | \Psi(\vec{q}) \rangle \qquad \text{(II-11)}$$

$$\delta \langle \Psi(\bar{q}) | [\hat{H}, i\hat{Q}^{\alpha}] - B^{\alpha\beta}(\bar{q})\, \hat{P}_{\beta} | \Psi(\bar{q}) \rangle = 0 \qquad \text{(II-12)}$$

com as condições

$$\langle \Psi(\bar{q}) | [\hat{Q}^{\alpha}, \hat{P}_{\beta}] | \Psi(\bar{q}) \rangle = i\, \delta^{\alpha}_{\beta} \qquad \text{(II-13)}$$

$$\hat{P}_{\beta} | \Psi(\bar{q}) \rangle = i \frac{\partial}{\partial q_{\beta}} | \Psi(\bar{q}) \rangle \qquad \text{(II-14)}$$

Como mencionamos no início do capítulo as equações de HFDT descrevem a princípio graus de liberdade coletivos e não coletivos. Para identificar um grau como coletivo, algum critério deverá ser utilizado.

As diversas teorias para movimentos coletivos supoem que os acoplamentos entre os graus coletivos e não coletivos são inexistentes ou mínimos. Assim sendo critérios de desacoplamento são possíveis critérios de coletividade.

A primeira trajetória coletiva que mostraremos, se baseia na hipótese de desacoplamento adiabático, isto é: a velocidade com que se dá o movimento coletivo é muito lenta quando comparada com a velocidade associada a outros tipos de excitação, de tal forma que os estados que compoem a trajetória coletiva são estados quasi-estáticos. [6,9,10,11]

No formalismo apresentado a hipótese de adiabaticidade corresponde a expansão em baixos momentos e a equação de trajetória é uma equação de HF com vínculos cujo operador de vínculo é um operador par com respeito a reversão temporal ($\hat{Q}^{\alpha}$) (Vide II-11).

Para sistemas cujas hamiltonianas clássicas são quadráticas nos momentos todos os graus de liberdade obedecem

equações do mesmo tipo (Vide II-11-14), (equações de Villars). Neste caso a adiabaticidade não é um critério suficiente para identificar um grau de liberdade coletivo.

Assim, o critério de coletividade fica sendo neste caso o de desacoplamento.

Este modo desacoplado pode ser obtido se as seguintes condições forem satisfeitas

i - a força, $-\partial V/\partial q^{\alpha}$, só deve ter componentes na direção do modo coletivo.

ii - o tensor de inércia $B^{\alpha\beta}(\bar{q})$ não gera aco - plamentos com outros modos.

iii - o gerador infinitesimal (tangente à trajetória) é paralelo à força.

Estas condições quando implementadas nas equações de HFDTA nos dão

$$\delta \langle \Psi(\bar{q}) | \hat{H} - \frac{\partial V}{\partial q^1} \hat{Q}^1 | \Psi(\bar{q}) \rangle = 0 \qquad \text{(II-15-A)}$$

$$\delta \langle \Psi(\bar{q}) | [\hat{H}, i\hat{Q}^1] - B^{11}(\bar{q}) \hat{P}_1 | \Psi(\bar{q}) \rangle = 0 \qquad \text{(II-15-B)}$$

$$i \frac{\partial}{\partial q^1} | \Psi(\bar{q}) \rangle = \hat{P}_1 | \Psi(\bar{q}) \rangle \qquad \text{(II-15-C)}$$

$$\langle \Psi(\bar{q}) | [\hat{Q}^1, \hat{P}_1] | \Psi(\bar{q}) \rangle = i \qquad \text{(II-15-D)}$$

onde supusemos que o grau de liberdade coletivo está associado ao índice $\alpha = 1$.

Estas equações são denominadas equações de Villars [6].

Dentro da aproximação de baixos momentos as equações de Villars são tais que: o gerador infinitesimal $\hat{P}_1$ é

compatível (canônicamente conjugado) com o operador de vínculo $,\hat{Q}^1$, e o parâmetro de vínculo é compatível com as equações de movimento. Isto nos mostra que para hamiltonianas quadráticas nos momentos as equações de trajetória de Villars tentam obter soluções das equações de movimento.

Vamos agora mostrar outra equação de trajetória coletiva que partindo de (II-9) não visa obter soluções para as equações de movimento.

Esta é a Trajetória Coletiva de Rowe-Bassermann[5] cuja equação é

$$\delta \langle \Psi(\bar{q}(\lambda,\mu), \bar{p}(\lambda,\mu)) | \hat{H} - \lambda \hat{Q}_{R-B} - \mu \hat{P}_{R-B} | \Psi(\bar{q}(\lambda,\mu), \bar{p}(\lambda,\mu)) \rangle = 0$$

e onde os operadores $\hat{Q}_{R-B}$ e $\hat{P}_{R-B}$ são canônicamente conjugados no sentido fraco

$$\langle \Psi(\bar{q},\bar{p}) | [\hat{Q}_{R-B}, \hat{P}_{R-B}] | \Psi(\bar{q},\bar{p}) \rangle = i$$

e estão associados ao modo normal local de freqüência mais baixa.

Para se obter os operadores de vínculo $\hat{Q}_{R-B}$ e $\hat{P}_{R-B}$, vamos relembrar que as equações para modos normais são as equações da Aproximação de Fase Aleatória, mais conhecida como equações de R.P.A. (Randon Phase Approximation)

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{X}^\nu \\ \tilde{Y}^\nu \end{pmatrix} = \Omega_\nu \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{X}^\nu \\ \tilde{Y}^\nu \end{pmatrix}$$

onde $\tilde{X}^\nu = X^\nu_{mi}$; $\tilde{Y}^\nu = Y^\nu_{mi}$

$$A \equiv A_{mi;nj} = \langle\phi|[a^{+}_{i}a_{m}, [\hat{H}, a^{+}_{n}a_{j}]]|\phi\rangle$$

$$B \equiv B_{mi;nj} = -\langle\phi|[a^{+}_{i}a_{m}, [\hat{H}, a^{+}_{j}a_{n}]]|\phi\rangle$$

Se efetuarmos uma mudança de representação tomando como base de operadores de um corpo um conjunto $\{\hat{Q}^{\alpha}, \hat{P}_{\alpha}\}$

$$\hat{Q}^{\alpha} = \sum \xi^{\alpha}_{mi} \, (a^{+}_{m}a_{i} + a^{+}_{i}a_{m})$$

$$\hat{P}_{\alpha} = i \sum \pi^{mi}_{\alpha} \, (a^{+}_{m}a_{i} - a^{+}_{i}a_{m})$$

As equações de R.P.A. podem ser escritas variacionalmente como

$$\delta\langle\phi|[\hat{H}, \hat{Q}^{\alpha}] + i B^{\alpha}\hat{P}_{\alpha}|\phi\rangle = 0$$

$$\delta\langle\phi|[\hat{H}, \hat{P}_{\alpha}] - i C_{\alpha}\hat{Q}^{\alpha}|\phi\rangle = 0$$

onde a freqüência ω_{α}

$$\omega_{\alpha} = \sqrt{\Omega_{\alpha}} = \sqrt{C_{\alpha}B^{\alpha}} \qquad \text{(sem soma nos índices)}$$

Observemos que as equações de R.P.A. acima foram definidas com relação a estados $|\phi\rangle$ arbitrários. $|\phi\rangle$ não é necessariamente o estado fundamental de Hartree Fock. Isto indica que a freqüência de R.P.A. não é necessariamente real.

As equações acima definem operadores de R.P.A.

entre os quais o par associado à freqüência mais baixa, que identificaremos com os operadores de vínculo da trajetória Rowe Bassermann.

$$\delta \langle \phi(\bar{q},\bar{p}) | \hat{H} - \lambda \hat{Q}^1(\bar{q},\bar{p}) - \mu \hat{P}_1(\bar{q},\bar{p}) | \phi(\bar{q},\bar{p}) \rangle = 0 \qquad \text{(II-16-a)}$$

$$\delta \langle \phi(\bar{q},\bar{p}) | [\hat{H}, \hat{Q}^1] + i B^1 \hat{P}_1 | \phi(\bar{q},\bar{p}) \rangle = 0 \qquad \text{(II-16-b)}$$

$$\delta \langle \phi(\bar{q},\bar{p}) | [\hat{H}, \hat{P}_1] - i C_1 \hat{Q}^1 | \phi(\bar{q},\bar{p}) \rangle = 0 \qquad \text{(II-16-c)}$$

As equações acima são as equações de Rowe Bassermann.

Observando que

$$\omega_1 = \sqrt{C_1 B^1}$$

é a freqüência mais baixa.

Na aproximação de baixos momentos a equação de trajetória é uma equação para estados $|\phi(q)\rangle$. Neste caso a equação de trajetória é

$$\delta \langle \phi(\bar{q}(\lambda)) | \hat{H} - \lambda \hat{Q}^1(\bar{q}) | \phi(\bar{q}(\lambda)) \rangle = 0 \qquad \text{(II-17)}$$

Desta equação obtém-se

$$\lambda(\bar{q}) = \langle \phi(\bar{q}) | [\hat{H}, i \hat{P}_1] | \phi(\bar{q}) \rangle$$

ou

$$\lambda(\bar{q}) = \frac{\partial V(\bar{q})}{\partial q^1}$$

Isto é, a força que atua sobre o sistema quando está sobre a trajetória coletiva de Rowe Bassermann aponta na direção do modo normal de freqüência mais baixa.

Deve-se ter claro que nesta teoria só se tem hipóteses para o operador de vínculo $\hat{Q}^1$, sendo que $\hat{P}_1$ não é obrigatoriamente o gerador infinitesimal da trajetória.
O gerador da trajetória é dado por

$$\frac{d}{d\lambda}|\phi(\vec{q}(\lambda))\rangle = -\sum_{\alpha=1}^{N} i \frac{\partial q^\alpha}{\partial \lambda} \hat{P}_\alpha |\phi(\vec{q}(\lambda))\rangle \qquad \text{(II-18)}$$

e pode conter componentes na direção de outros modos que não o $\hat{P}_1$.

Esta última observação nos leva a prescrever uma terceira trajetória coletiva que denominaremos <u>Linha de Modos Normais</u>. Nesta vamos usar o mesmo critério de coletividade da trajetória de Rowe Bassermann, (modo normal local de freqüência mais baixa), para definir o gerador da trajetória. Isto é, vamos impor que o vetor tangente à trajetória coletiva seja sempre paralelo ao modo normal de R.P.A. de freqüência mais baixa [19].

Isto é

$$\frac{d}{d\lambda}|\phi(\lambda)\rangle = -i\hat{P}_1|\phi(\lambda)\rangle \qquad \text{(II-19-a)}$$

onde

$$\delta\langle\phi(\lambda)|[\hat{H}, i\hat{Q}^1] - B\hat{P}_1|\phi(\lambda)\rangle = 0 \qquad \text{(II-19-b)}$$

$$\delta\langle\phi(\lambda)|[\hat{H}, i\hat{P}_1] + C\hat{Q}^1|\phi(\lambda)\rangle = 0 \qquad \text{(II-19-c)}$$

onde

$$\omega = \sqrt{CB}$$

é a freqüência mais baixa.

C - Discussão

Nós apresentamos três teorias para movimentos coletivos de grande amplitude. Com o intuito de compará-las nós assumimos que o valor médio da Hamiltoniana de muitos corpos nos estados parametrizados é quadrática nos momentos. Isto é

$$\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p}) = \sum_{i,j=1}^{N} \frac{1}{2} B^{ij}(\bar{q})\, p_i\, p_j + V(\bar{q})$$

Para esta hamiltoniana nós mostramos que as equações de Villars, tentam obter um grau de liberdade desacoplado cuja trajetória é uma solução das equações de movimento. Isto porque, na teoria de Villars há uma prescrição para operadores de vínculo e geradores e uma hipótese de compatibilidade entre os parâmetros de vínculo e as equações "clássicas" de movimento.

Na sua formulação original Villars usa como critério de coletividade o desacoplamento adiabático. Isto é, as excitações coletivas se dariam muito lentamente quado comparadas com as excitações não coletivas. Assim os estados coletivos que comporiam a trajetória coletiva seriam estados quasi-estáticos e pares por reversão temporal [6,10] caracterizados pela coordenada q.

Se a hamiltoniana clássica é quadrática todos os graus de liberdade desacoplados que são soluções das equações

de movimento obedecem as equações de Villars. Portanto para estas hamiltonianas o critério de desacoplamento adiabático não é suficiente para identificar o grau de liberdade coletivo. Além do que as equações de trajetória de Villars só fornecerão uma trajetória coletiva se houver um grau de liberdade coletivo exatamente desacoplado.

Obviamente estas condições acima indicam a necessidade de impor critérios adicionais para identificação da trajetória coletiva de Villars. (Vide [22,17])

As outras trajetórias: Rowe-Bassermann e a linha de Modos Normais são menos ambiciosas e não pretendem obter soluções das equações de movimento. A idéia nestas teorias é utilizando um critério coletivo microscópico construir trajetórias constituídas por estados com boas características de coletividade e desacoplamento. Visto que não pretendem obter soluções de equações de movimento as condições de desacoplamento nestas teorias não são válidas globalmente (para a trajetória como um todo) mas apenas localmente (modos normais locais), isto é, ponto a ponto. Estas trajetórias podem ser formuladas sem qualquer hipótese de adiabaticidade.

Como enfatizamos anteriormente, nas trajetórias de Rowe-Bassermann e na Linha de Modos Normais os critérios de desacoplamento local e de coletividade são os mesmos, porém utilizados para definir, no primeiro caso o operador de vínculo e no segundo caso o gerador.

Estas duas trajetórias são em geral diferentes, mas podem ocorrer situações onde elas coincidem. Nestas situações excepcionais nós teríamos que os geradores e os operadores de vínculo seriam compatíveis (canônicamente conjugados) o que traria as seguintes conseqüências:

1) a força apontaria na direção do modo nor-

mal local de freqüência mais baixa.

2) o tensor de inércia é diagonal e portanto não gera acoplamento.

3) o gerador é paralelo à força.

Isto significa que (ver página II-10) quando a Linha de Modos Normais coincide com a trajetória de Rowe Bassermann ela também é uma trajetória de Villars e portanto é solução da equação de movimento de HFDT. Neste caso nós temos um modo coletivo exatamente desacoplado (para hamiltonianas quadráticas nos momentos).

Para deixar claro a diferença entre desacoplamento local e desacoplamento exato global vamos descrever rapidamente a Teoria de Marumori para Movimentos Coletivos de Grande Amplitude[12,13,20].

Nesta teoria parte-se de uma situação ideal, onde supõe-se a existência de um grau de liberdade coletivo exatamente desacoplado.

Se existe este modo, deve existir uma transformação canônica das coordenadas $\{q^i, p_i\}$ para novas coordenadas $\{\alpha^i, \Pi_i\}$ de tal forma que a hamiltoniana clássica $\mathcal{H}(\vec{q},\vec{p})$ pode ser escrita em termos das novas coordenadas $\{\alpha^i, \Pi_i\}$ como

$$\mathcal{H}(\vec{q},\vec{p}) = \tilde{\mathcal{H}}_{COL}(\alpha^1, \Pi_1) + \tilde{\mathcal{H}}_{NÃO\text{-}COL}(\alpha^2 \ldots \alpha^N; \Pi_2 \ldots \Pi_N)$$

E assim a trajetória coletiva é dada por

$$\alpha^1 \equiv \alpha^1(\vec{q},\vec{p})$$
$$\Pi_1 \equiv \Pi_1(\vec{q},\vec{p})$$

Obviamente neste caso ideal o modo coletivo é desacoplado exata - mente.

Para obter equações de trajetória coletiva Marumori propõe o "Princípio da Invariância da Equação de Schrödinger" [13]. Isto é, à transformação canônica no espaço de parâme - tros corresponde uma transformação unitária $U_{(\vec{\alpha},\ \vec{\Pi})}$ dos estados variacionais $|\psi(\vec{q},\vec{p})>$.

$$|\bar{\alpha},\bar{\Pi}\rangle = U(\bar{\alpha},\bar{\Pi})\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle$$

Em particular existe

$$U(\alpha,\Pi) = U(\alpha^1,\Pi_1\,;\ \alpha^i = \Pi_i = 0) \qquad i \geqslant 2$$

que quando atua sobre $|\psi(\vec{q},\vec{p})>$ gera estados da trajetória coletiva.

Marumori argumenta então que a equação variacional

$$\delta\,\langle\Psi(\bar{q},\bar{p})|\,\hat{H} - i\,\partial_t\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle = 0$$

(que pode gerar a equação de Schrödinger) deve ser invariante sob a ação da transformação $U(\alpha,\Pi)$. Isto é o estado,

$$|\alpha,\Pi\rangle = U(\alpha,\Pi)\,|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle$$

também deve obedecer a mesma equação, o que nos dá.

$$\delta \langle \alpha, \Pi | \hat{H} - \dot{\alpha} \hat{\Pi} + \dot{\Pi} \hat{X} | \alpha, \Pi \rangle = 0$$

onde $\hat{X}$ e $\hat{\Pi}$ são geradores infinitesimais e α e Π obedecem à equações canônicas de movimento

$$\dot{\alpha} = \frac{\partial \mathcal{H}_{\omega L}(\alpha, \Pi)}{\partial \Pi}$$

$$\dot{\Pi} = - \frac{\partial \mathcal{H}_{\omega L}(\alpha, \Pi)}{\partial \alpha}$$

$$\mathcal{H}_{\omega L}(\alpha, \Pi) = \langle \alpha, \Pi | \hat{H} | \alpha, \Pi \rangle$$

Se a equação variacional é invariante com relação à transformação unitária $U_{(\alpha, \Pi)}$ ela deve valer para qualquer ponto da trajetória (α, Π) e em particular para um estado vizinho

$$|\alpha + \delta\alpha, \Pi + \delta\Pi \rangle = (1 - i\, \delta\alpha\, \hat{\Pi} + i\, \delta\Pi\, \hat{X}) | \alpha, \Pi \rangle$$

O que nos leva às equações de Marumori

$$\delta \langle \alpha, \Pi | [\hat{H}, i\hat{X}] - \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}_{\omega L}}{\partial \Pi^2} \right) \hat{\Pi} - \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}_{\omega L}}{\partial \Pi\, \partial \alpha} \right) \hat{X} \; | \alpha, \Pi \rangle = 0$$

$$\delta \langle \alpha, \Pi | [\hat{H}, i\hat{\Pi}] + \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}_{\omega L}}{\partial \alpha^2} \right) \hat{X} + \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}_{\omega L}}{\partial \alpha\, \partial \Pi} \right) \hat{\Pi} \; | \alpha, \Pi \rangle = 0$$

Quando escritas na aproximação adiabática estas equações ficam

$$\delta \langle\alpha| \hat{H} - \frac{\partial V}{\partial \alpha} \hat{X} |\alpha\rangle = 0$$

$$\delta \langle\alpha| [\hat{H}, i\hat{X}] - B(\alpha) \hat{\Pi} |\alpha\rangle = 0$$

$$\delta \langle\alpha| [\hat{H}, i\hat{\Pi}] + C(\alpha) \hat{X} |\alpha\rangle = 0$$

onde

$$\langle\alpha| [\hat{X}, \hat{\Pi}] |\alpha\rangle = i$$

$$B(\alpha) = \left. \frac{\partial^2 \mathcal{H}_{COL}(\alpha, \pi)}{\partial \pi^2} \right|_{\pi=0}$$

$$C(\alpha) = \left. \frac{\partial^2 \mathcal{H}_{COL}(\alpha, \pi)}{\partial \alpha^2} \right|_{\pi=0}$$

$$\frac{\partial V(\alpha)}{\partial \alpha} = \left. \frac{\partial \mathcal{H}_{COL}(\alpha, \pi)}{\partial \alpha} \right|_{\pi=0}$$

As equações de Marumori são idênticas às equações de Rowe Bassermann e como $\hat{X}$ e $\hat{\Pi}$ são geradores estas equações também são similares às equações de Villars e à da Linha de Modos Normais.

Visto que as equações de Marumori tem como hipótese a existência de um modo exatamente desacoplado conclue-se que as diversas teorias para movimentos coletivos são equivalentes quando existir este modo exatamente desacoplado

III - CINEMÁTICA DE MUITOS CORPOS

No tratamento de sistemas de muitos corpos por métodos variacionais, por exemplo HFDT, a parametrização dos estados variacionais (determinantes de Slater) é fundamental.

Esta parametrização, deve ser tal que exista uma relação biunívoca entre pontos no espaço de parâmetros e determinantes de Slater. Além disso, os parâmetros devem estar associados a graus de liberdade do sistema. Como veremos adiante o espaço de parâmetros será um espaço de fase com coordenadas e momentos generalizados.

Um determinante de Slater, genérico, pode ser representado, na linguagem de segunda quantização como [1,2].

$$|\phi_0\rangle = \prod_{i=1}^{N} a_i^+ \, |-\rangle \qquad \text{(III-1)}$$

onde: N indica que $|\phi_0\rangle$ é uma função de onda de N corpos

$|-\rangle$ é o estado de vácuo

a_i^+ são operadores de criação de férmions. a_i^+ cria uma partícula no i-ésimo estado de partícula independente (denotado por $|\psi_i\rangle$)

Os operadores de criação e aniquilação, $\{a_i^+$ e $a_i\}$ formam um conjunto completo de operadores associados ao conjunto completo de funções de onda de um corpo $\{|\psi_i\rangle\}$.

Por serem operadores de criação de férmions eles obedecem às seguintes regras de anticomutação

$$[a_\alpha^+, a_\beta]_+ = \delta_{\alpha\beta}$$

$$[a_\alpha^+, a_\beta^+]_+ = [a_\alpha, a_\beta]_+ = 0 \qquad \forall_{\alpha,\beta} \qquad \text{(III-2)}$$

O determinante de Slater $|\phi_o>$, em (III-1), define uma decomposição dos estados de partícula independente em estados ocupados (buraco) e estados não ocupados (partícula)

$$\{ a_i^+ ; a_i \mid a_m^+ ; a_m \} \qquad \text{(III-3)}$$

$i = 1,2...N$

$m = N + 1.....$

Vamos adotar a convenção i,j,k, como índices para estados de buraco e m,n,o p índices para estados de partícula.

A escolha do estado $|\phi_o>$ é arbitrária e não vai afetar a parametrização. Esta arbitrariedade pode ser usada para uma escolha mais conveniente do estado de referência $|\phi_o>$.

Visto que vamos nos restringir ao subespaço dos determinantes de Slater, um estado variacional genérico será um outro determinante de Slater de N corpos, que definirá uma nova decomposição análoga a (III-3) com novos operadores de criação.

$$\{ b_i^+ ; b_i \mid b_m^+ ; b_m \}$$

Estes novos operadores estão associados a novas funções de onda $\{|\tilde{\psi}_\alpha)\}$ que formam uma nova base completa. Esta nova base pode ser obtida da base $\{|\psi_\alpha)\}$ por meio de uma transformação unitária. Conseqüentemente, os conjuntos de operadores $\{b_\alpha^+, b_\alpha\}$ e $\{a_\alpha^+, a_\alpha\}$ (índice α,β,μ,ν denotarão estados de partícula e buraco indistintamente) também estão relacionados por uma transformação unitária, U.

Isto é

$$|\tilde{\psi}_\alpha) = \sum_\beta |\psi_\beta) U_{\beta\alpha} \qquad \text{(III-4)}$$

onde $U_{\beta\alpha}$ é uma representação da transformação U

$$U U^+ = U^+ U = 1 \qquad \text{(III-5)}$$

Os operadores de criação e aniquilação serão dados por

$$b^+_\alpha = U a^+_\alpha U^+ \qquad \text{(III-6)}$$

Com isso é fácil mostrar que o determinante $|\psi>$ dado por

$$|\psi> = \prod_{i=1}^{N} b^+_i |-> \qquad \text{(III-7)}$$

pode ser escrito como

$$|\psi> = U |\phi_o> \qquad \text{(III-8)}$$

Em resumo, um determinante de Slater qualquer, pode ser obtido a partir de um determinante de referência por meio de uma transformação unitária.

Dois pontos serão fundamentais no que segue: as transformações unitárias formam um grupo e os operadores de um corpo, que <u>geram as excitações elementares</u> do sistema, fornecem uma representação para o grupo.

Tomando o estado $|\phi_o>$ como referência, as excitações elementares deste estado são dadas pela ação de opera

dores de um corpo $\hat{F}$

$$\hat{F} = \sum_{\alpha,\beta} F_{\alpha\beta}\, a^{+}_{\alpha} a_{\beta} \qquad \text{(III-9)}$$

Isto é, um operador de um corpo, qualquer, pode ser escrito como uma combinação linear de operadores bilineares $\{a^{+}_{\alpha}\ a_{\beta}\}$. O conjunto de operadores $\{a^{+}_{\alpha}\ a_{\beta}\}$ constituem um espaço vetorial e formam um conjunto fechado com respeito a operação de comutação

$$[a^{+}_{\alpha} a_{\beta}, a^{+}_{\alpha'} a_{\beta'}] = a^{+}_{\alpha} a_{\beta'} \delta_{\beta\alpha'} - a^{+}_{\alpha'} a_{\beta} \delta_{\alpha\beta'} \qquad \text{(III-10)}$$

Estas propriedades mostram que este conjunto constitue uma álgebra de Lie [24], onde os $\{a^{+}_{\alpha}\ a_{\beta}\}$ são os geradores da álgebra.

O grupo de Lie associado a álgebra é obtido pela exponenciação dos geradores. Este grupo é o grupo das transformações unitárias mencionadas acima.

Um elemento deste grupo pode ser representado por

$$U(T) = \exp\left\{ T_{\alpha\beta}\, a^{+}_{\alpha} a_{\beta} - T^{*}_{\alpha\beta}\, a^{+}_{\beta} a_{\alpha} \right\}$$

Cada elemento do grupo pode ser identificado pelos parâmetros $T_{\alpha\beta}$. Assim atuando com operadores U(T) sobre o estado $|\phi_o\rangle$ pode-se obter qualquer outro determinante variando os parâmetros $T_{\alpha\beta}$.

Como os parâmetros $T_{\alpha\beta}$ estão associados a excitações elementares $a^{+}_{\alpha}\ a_{\beta}$, poderíamos ficar tentados a parametrizar os estados variacionais por meio dos T , porém para que a parametrização se-

ja boa é necessário que a relação; estados no espaço dos determinantes $\longleftrightarrow$ pontos no espaço de parâmetros - seja biunívoca.

Ocorre, no entanto, que existem transformações que deixam invariante, a menos de fase, o estado de referência $|\phi_o>$. Como a presença da fase não modifica o determinante a relação não é biunívoca.

Portanto deve-se subtrair do grupo das transformações unitárias aquelas que deixam o estado $|\phi_o>$ invariante. Para se chegar a estes elementos do grupo vamos analisar a ação dos elementos da álgebra, $a^+_\alpha \; a_\beta$, sobre o estado $|\phi_o>$.

Os geradores da álgebra podem ser classificados conforme sua ação sobre $|\phi_o>$.

Isto é

PARTICULA - PARTÍCULA (P-P) ; BURACO - BURACO (b-b) ; PARTÍCULA - BURACO (P-B) ; BURACO - PARTICULA (b-p)

$$\downarrow \qquad\qquad \downarrow \qquad\qquad \downarrow \qquad\qquad \downarrow$$

$$a^+_m a_n \quad ; \quad a^+_i a_j \quad ; \quad a^+_m a_i \quad ; \quad a^+_i a_n$$

A ação dos dois primeiros conjuntos, p-p e b-b, não modifica o estado $|\phi_o>$ pois

$$a^+_i a_j |\phi_o> = \delta_{ij} |\phi_o>$$

$$a_m a^+_n |\phi_o> = \delta_{mn} |\phi_o> \qquad \text{(III-11)}$$

Isto é, estes operadores não representam excitações elementares. Estes operadores definem duas sub-álgebras, visto que formam um conjunto fechado sob comutação.

As transformações unitárias obtidas pela exponenciação dos geradores $\{a^+_i \; a_j\}$ ($\{a^+_m \; a_n\}$) geram transformações entre estados ocupados (não-ocupados) que mantém o estado $|\phi_o>$

invariante a menos de fase. Estas são portanto as transformações que devem ser subtraídas. Elas constituem um subgrupo, denominado subgrupo de isotropia ou de estabilidade do estado $|\phi_o>$.

Este fato nos permite fatorar o grupo em um "coset". Assim se considerarmos um sistema de N corpos com M estados acessíveis (M corresponde a um truncamento escolhido adequadamente), nós teremos: N estado ocupados e M-N estados não ocupados. O grupo das transformações unitárias será o U(M) e o grupo de isotropia será o grupo produto $U(M-N) \otimes U(N)$, i.é. o grupo das transformações unitárias entre estados não ocupados vezes o grupo das transformações unitárias entre estados ocupados. O grupo U(M) pode então ser escrito como

$$U(M) = \left[U(M) \Big/ U(M-N) \otimes U(N) \right] \otimes U(M-N) \otimes U(N)$$

onde o termo entre colchêtes é o coset cujos elementos "modificam" o estado de referência.

Como cada elemento do coset é identificado pelo valor de um parâmetro, e como, cada determinante, gerado pela ação do elemento do coset, também pode ser identificado pelo mesmo parâmetro, nós temos agora um mapeamento um para um entre o espaço de determinantes e o coset.

Este mapeamento é muito útil visto que estes cosets possuem propriedades analíticas e geométricas importantes [24]. Os elementos do coset podem ser representados por:

i) Representação exponencial

$$U(T) = \exp\left\{ \sum_{mi} T_{mi}\, a^{+}_{m} a_i - T^{*}_{mi}\, a^{+}_{i} a_m \right\} \qquad \text{(III-12)}$$

(observe que apenas operadores p-b e b-p estão presentes)

ii) Representação matricial

$$b^{+}_{\alpha}(T) = \sum_{\beta} a^{+}_{\beta} U_{\beta\alpha}(T)$$

$$U_{\beta\alpha}(T) = \begin{pmatrix} \cos\sqrt{T^{+}T} & -\dfrac{\operatorname{sen}\sqrt{T^{+}T}}{\sqrt{T^{+}T}}\,T^{+} \\ T\,\dfrac{\operatorname{sen}\sqrt{T^{+}T}}{\sqrt{T^{+}T}} & \cos\sqrt{TT^{+}} \end{pmatrix} \qquad \text{(III-13)}$$

onde

$$\cos\sqrt{T^{+}T} = \delta_{ij} - \frac{T^{+}_{im}T_{mj}}{2!} + \frac{T^{+}_{im}T_{mj'}T^{+}_{j'n}T_{nj}}{4!} \cdots\cdots$$

(III-14)

$$T\,\frac{\sin\sqrt{T^{+}T}}{\sqrt{T^{+}T}} = T_{mi} - \frac{T_{mj}T^{+}_{jn}T_{ni}}{3!} \cdots\cdots$$

(com soma nos índices repetidos).

As matrizes (T_{mi}, T^{+}_{im}) são coordenadas do coset.

O mapeamento obtido a partir de U(T) é contínuo e nos permite visualizar as variações contínuas dos parâmetros T_{mi} e T^{*}_{mi} como curvas no espaço de determinantes mapeadas no espaço de parâmetros. Como cada T_{mi} está associado a uma excitação elementar e como cada T_{mi} funciona como uma curva coordenada nós temos assim curvas coordenadas associadas a graus de liberdade (excitações do sistema). Os geradores infinitesimais de translação seriam os vetores tangentes (derivadas direcionais $\frac{\partial}{\partial T_{mi}}$, $\frac{\partial}{\partial T^{+}_{im}}$). Estes vetores tangentes estão por sua vez associa-

dos aos operadores $a_m^+ a_i$ e $a_i^+ a_m$ na vizinhança de $|\phi_o\rangle$ (Vide Figura III-1,2).

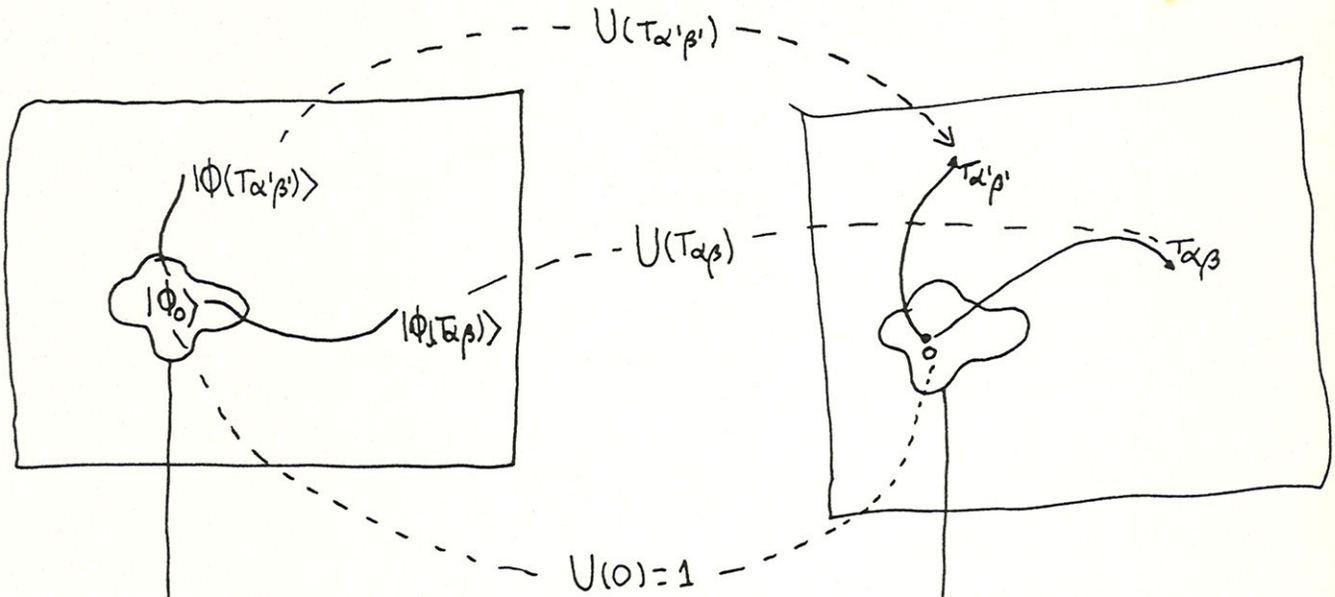


Figura III-1

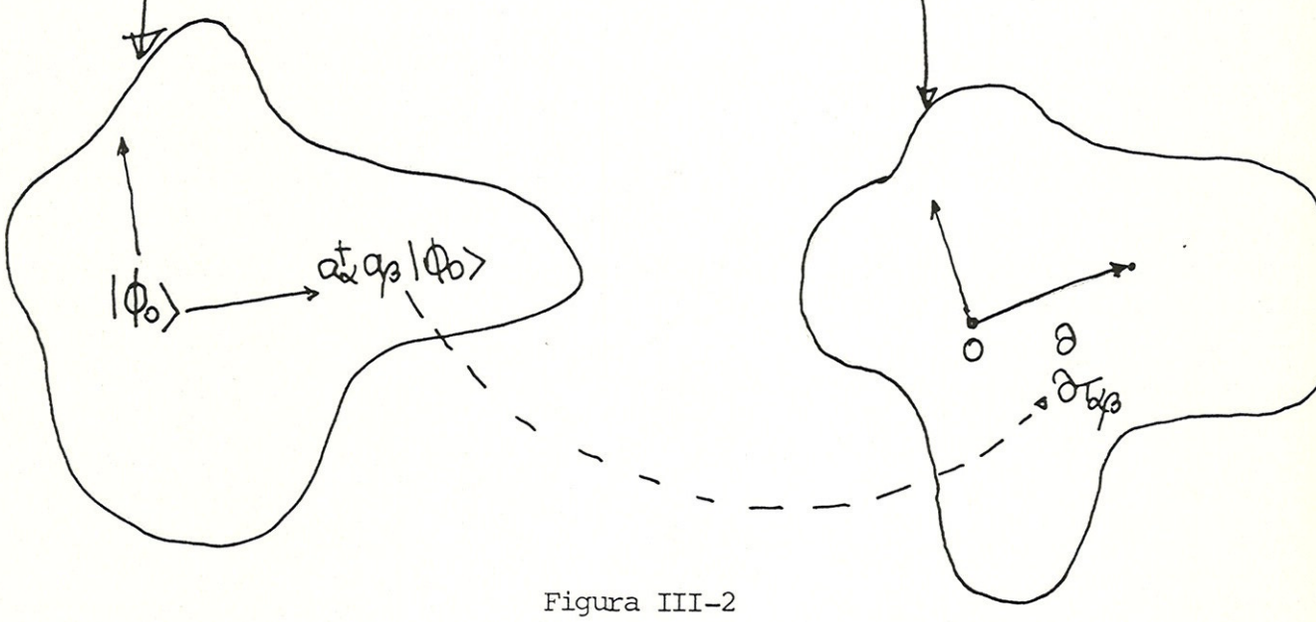


Figura III-2

Estes cosets admitem outras coordenadas representativas[24]. Duas formas em particular são importantes pois como veremos admitem interpretações físicas interessantes.

A primeira delas, será denominada "representação bosônica" por razões que ficarão claras posteriormente. As coordenadas representativas são neste caso

$$\beta_{mi} = \left[\frac{T \operatorname{sen} \sqrt{T^{+}T}}{\sqrt{T^{+}T}} \right]_{mi} \tag{III-15}$$

e a transformação unitária na representação matricial é

$$U(\beta) = \begin{bmatrix} (1-\beta^{+}\beta)^{1/2} & -\beta^{+} \\ \beta & (1-\beta\beta^{+})^{1/2} \end{bmatrix} \tag{III-16}$$

A segunda denominaremos "representação de Thouless", cujas coordenadas podem ser obtidas a partir de β_{mi} como

$$Z_{mi} = \beta_{mj} \left(1-\beta^{+}\beta\right)^{-1/2}_{ji} \tag{III-17}$$

e a inversa

$$\beta_{mi} = Z_{mj} \left(1+Z^{+}Z\right)^{-1/2}_{ji} \tag{III-18}$$

(soma nos índices repetidos).

A transformação unitária é dada por

$$U(Z) = \begin{bmatrix} (1 + Z^{+}Z)^{-1/2} & (-[1+Z^{+}Z]^{-1/2} Z^{+}) \\ (Z(1+Z^{+}Z)^{-1/2}) & (1 + ZZ^{+})^{-1/2} \end{bmatrix} \qquad \text{(III-19)}$$

Esta transformação unitária corresponde a

$$|Z\rangle = \exp\{Z_{mi}\, a^{+}_{m} a_{i}\}\, |\phi_0\rangle$$

$$|Z) = \mathcal{N}(Z)\, |Z\rangle \qquad \text{(III-20)}$$

que é a expressão do teorema de Thouless ($\mathcal{N}(Z)$ - normalização).

A coordenada Z pode ainda ser escrita em função da coordenada T

$$Z_{mi} = T_{mj} \left(\frac{tg\sqrt{T^{+}T}}{\sqrt{T^{+}T}} \right)_{ji} \qquad \text{(III-21)}$$

Uma característica importante destes cosets é que os estados gerados pela atuação de seus elementos no estado de referência (espaço dos determinantes de Slater) constituem um conjunto de estados coerentes generalizados, como definidos por Perelomov[25].

Entre as propriedades notáveis deste conjunto nós temos, que pode-se através dele definir uma resolução da identidade.

Assim tomando os estados $|Z)$ definidos em (III-20) nós teremos

$$\int |Z)\mu(Z)(Z|\, dZ dZ^* = 1 \qquad \text{(III-22)}$$

onde (Ver Apêndice B)

$$\mu(Z) = \mu(0)\left(\det(1+Z^+Z)\right)^{-M} \qquad \text{(III-23)}$$

é uma medida invariante. $\mu(0)$ é uma constante e M é a dimensão do grupo U(M); i.e., o número de estados de partícula mais o número de estados de buraco.

$$dZ\, dZ^* = \prod_{mi} \frac{Re(dZ_{mi})\, Im(dZ_{mi})}{i\pi} \qquad \text{(III-24)}$$

Para se mostrar que a integral é efetivamente uma representação da unidade deve-se mostrar que o operador

$$\hat{\mathcal{J}} = \int |Z)\, \mu(Z)\, (Z|\, dZ\, dZ^*$$

comuta com todos os elementos do grupo U(M). O que é facilmente demonstrado observando-se que a atuação de elementos do grupo sobre os estados $|Z>$ geram uma transformação de coordenadas de Z para $\tilde{Z}$.[26,27,28,29,37]

Isto é se $\hat{T}$ é um elemento do grupo então

$$\hat{T}\,|Z) = |\tilde{Z})$$

e

$$\hat{T}\,\hat{\mathcal{J}}\,\hat{T}^{-1} = \int |\tilde{Z})\, \mu(Z)\, (\tilde{Z}|\, dZ\, dZ^*$$

Efetuando uma mudança nas variáveis de integração

$$\int |\tilde{z}\rangle\, \mu(z)\, |J(z,\tilde{z})|\, \langle\tilde{z}|\, d\tilde{z}\, d\tilde{z}^*$$

onde $J(Z,\tilde{Z})$ é o jacobiano da transformação.

Se $\mu(Z)$ é uma medida invariante nós temos

$$\mu(\tilde{z}) = \mu(z)\,|J(z,\tilde{z})| \tag{III-25}$$

de onde

$$\hat{T}\,\hat{\mathcal{J}}\,\hat{T}^{-1} = \int |\tilde{z}\rangle\, \mu(\tilde{z})\, \langle\tilde{z}|\, d\tilde{z}\, d\tilde{z}^* = \hat{\mathcal{J}}$$

Isto é $\hat{\mathcal{J}}$ comuta com todos os elementos do grupo. Pelo Lema de Schur[24] este operador deve ser um múltiplo da identidade. Uma escolha adequada da constante $\mu(o)$ nos permite identificar $\hat{\mathcal{J}}$ com a unidade.

Cálculos da medida invariante e outros detalhes matemáticos podem ser encontrados em[26,27,28,37] e no Apêndice B.

Assim os estados coerentes generalizados formam um conjunto supercompleto visto que não são ortogonais.

$$\langle z|\tilde{z}\rangle = \det\,(1 + z^+\tilde{z}) \tag{III-26}$$

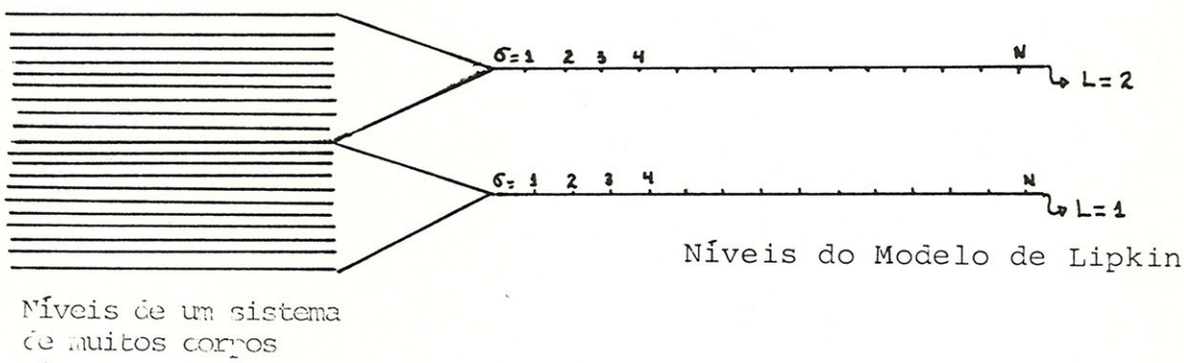
A identificação do espaço de determinantes de Slater com uma variedade de estados coerentes generalizados nos permite (como veremos no próximo capítulo) associar ao espaço dos determinantes uma estrutura de espaço de fase clássico (estrutura simplética), e com isso se tem uma ponte entre tratamento semi-clássicos e quânticos. (Ver referência [31])

A - Aplicações em Dois Modelos Esquemáticos

Para exemplificar a análise que fizemos, vamos aplicá-la a dois modelos esquemáticos de sistemas de muitos corpos - o modelo de Lipkin[38,39,40] e o modelo SU(3)[41,8].

Modelo de Lipkin

Este modelo é uma versão simplificada de um sistema de muitos corpos onde todos os níveis abaixo do nível de Fermi são contraídos formando um único nível degenerado, ocorrendo o mesmo para os níveis acima do nível de Fermi. Assume-se ainda que a degenerescência dos dois níveis é a mesma.



O índice σ denotará os subníveis (a degenerescência) dos níveis L.

Neste modelo as transições permitidas são apenas aquelas envolvendo partículas com diferentes valores de L e mesmo valor de σ (ver hamiltoniana do modelo no próximo capítulo).

Vamos tomar como estado de referência $|\phi_o>$ o estado onde N partículas ocupam o nível inferior L = 1.

O conjunto de operadores de criação e aniquilação podem ser identificados pelos índices L e σ.

$$\{ a^{+}_{L\sigma} ; a_{L\sigma} \}$$

E o estado de referência $|\phi_0>$ é o determinante

$$|\phi_0\rangle = \prod_{\sigma=1}^{N} a^{+}_{1\sigma} |-\rangle \qquad \text{(III-24)}$$

onde o vácuo $|->$ descreve o nível $L = 1$ totalmente desocupado.

Visto que as transições possíveis conservam o número quântico σ, as excitações elementares do sistema estarão associadas a operadores do tipo $a^{+}_{L\sigma}\, a_{L'\sigma}$.

Estes operadores podem ser combinados formando um conjunto de operadores de quasi-spin

$$\{ J_0 , J_+ , J_- , \hat{N} \}$$

$$\begin{aligned} J_0 &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma=1}^{N} (a^{+}_{2\sigma} a_{2\sigma} - a^{+}_{1\sigma} a_{1\sigma}) \\ J_+ &= \sum_{\sigma=1}^{N} a^{+}_{2\sigma} a_{1\sigma} \\ J_- &= \sum_{\sigma=1}^{N} a^{+}_{1\sigma} a_{2\sigma} \\ \hat{N} &= \sum_{L=1}^{2} \sum_{\sigma=1}^{N} a^{+}_{L\sigma} a_{L\sigma} \end{aligned} \qquad \text{(III-25)}$$

que obedecem às seguintes regras de comutação

$$\begin{aligned} [J_0 , J_\pm] &= \pm J_\pm \\ [J_+ , J_-] &= 2 J_0 \end{aligned} \qquad \text{(III-26)}$$

enquanto que $\hat{N}$ (operador número de partículas) comuta com todos os elementos.

Estes operadores são classificados como

J_+ → partícula-buraco

J_- → buraco-partícula

$J_o, \hat{N}$ → buraco-buraco; partícula-partícula

Eles constituem a álgebra de Lie u(2) associada ao grupo U(2).

Os elementos de U(2) podem ser obtidos pela exponenciação da álgebra, isto é

$$U(\alpha_+, \alpha_-, \alpha_o, \alpha_N) = \exp\{\alpha_+ J_+ + \alpha_- J_- + \alpha_o J_o + \alpha_N \hat{N}\} \qquad \text{(III-27)}$$

onde $\alpha+$,$\alpha-$,α_o e α_N devem ser tais que U seja unitário.

Segundo a análise que fizemos na secção anterior, devemos eliminar das transformações unitárias, aquelas que quando atuam no estado $|\phi_o>$ apenas geram uma fase.

Para eliminar estas transformações o procedimento adotado é: separar a álgebra em duas partes, uma envolvendo operadores p-b e b-p e a segunda com operadores p-p e b-b.

Isto é

$$\mathcal{U}(2) = \underbrace{\{J_+ ; J_-\}}_{c} \oplus \underbrace{J_o \oplus \hat{N}}_{k}$$

J_o e $\hat{N}$ são geradores do grupo de transformações U(1).

Com isto nós podemos fatorar o grupo num coset $U(2)/U(1) \otimes U(1)$, o que pode ser feito pela exponenciação da álgebra como no esquema abaixo.

$$
\begin{tikzcd}
\text{ÁLGEBRA} & & \text{GRUPO} \\
\mathcal{U}(2) \arrow[rr, "\exp\{\mathcal{U}(2)\}"] \arrow[d, "\text{DECOMPOSIÇÃO DA ÁLGEBRA}"'] & & U(2) \arrow[d, "\text{FATORAÇÃO DO GRUPO}"'] \\
\mathcal{U}(2) = C \oplus k \arrow[rr, "\exp\{C\} \otimes \exp\{k\}"] & & \left[U(2)/_{U(1)\otimes U(1)}\right] \otimes U(1) \otimes U(1)
\end{tikzcd}
$$

Os elementos do coset $[U(2)/U(1) \otimes U(1)]$ podem ser representados por

$$U(T) = \exp\{T J_+ - T^* J_-\} \qquad \text{(III-28)}$$

Esta expressão é um caso particular da expressão (III-12) da secção anterior.

A representação matricial pode ser obtida pela exponenciação das matrizes de Pauli J_+ e J_-.

$$U(T) = \begin{pmatrix} \cos\sqrt{TT^*} & -\dfrac{T^* \operatorname{sen}\sqrt{TT^*}}{\sqrt{TT^*}} \\ \dfrac{T \operatorname{sen}\sqrt{TT^*}}{\sqrt{TT^*}} & \cos\sqrt{T^*T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -e^{-i\varphi}\operatorname{sen}\theta \\ e^{i\varphi}\operatorname{sen}\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \qquad \text{(III-29)}$$

onde $T = \theta e^{i\psi}$

A representação de Thouless seria

$$|z\rangle = \mathcal{N}(z)\, e^{z J_+} |\phi_0\rangle \qquad \text{(III-30)}$$

onde $Z = \mathrm{tg}\Theta\, e^{i\psi}$

ou na forma matricial

$$\begin{pmatrix} (1+zz^*)^{-1/2} & -z^*(1+zz^*)^{-1/2} \\ z(1+zz^*)^{-1/2} & (1+zz^*)^{-1/2} \end{pmatrix} \qquad \text{(III-31)}$$

A representação bosônica é dada matricialmente por

$$\begin{pmatrix} (1-\beta^*\beta)^{1/2} & -\beta^* \\ \beta & (1-\beta\beta^*)^{1/2} \end{pmatrix} \qquad \text{(III-32)}$$

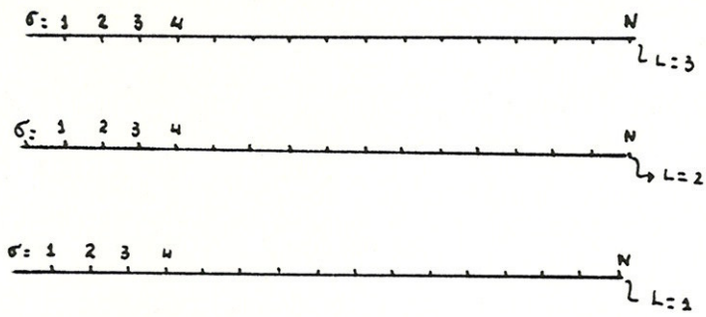
onde

$$\beta = \mathrm{sen}\,\Theta\, e^{i\varphi}$$

Portanto no modelo de Lipkin os estados variacionais são mapeados numa carta com uma coordenada complexa ou duas reais. Esta coordenada descreverá um único grau de liberdade associado aos operadores de excitação J_+ e de deexcitação J_-.

- Modelo de três níveis SU(3)

Neste modelo os níveis abaixo do nível de Fermi são condensados num único nível de degenerescência N como no modelo de Lipkin, mas os níveis acima do nível de Fermi são condensados em dois níveis de degenerescência N.



Os operadores de criação e aniquilação são

$$\{ a^{+}_{L\sigma} \; ; \; a_{L\sigma} \}$$

com L = 1,2,3 e σ = 1,2...N

Como no modelo de Lipkin o estado de referência $|\phi_o>$ corresponde ao nível inferior totalmente preenchido

$$|\phi_o\rangle = \prod_{\sigma=1}^{N} a^{+}_{1\sigma} \, |-\rangle \qquad \text{(III-33)}$$

e as excitações permitidas envolverão apenas transições entre níveis diferentes, mantendo constante o número quântico σ.

Por isso é conveniente definir operadores

$$K_{LL'} = \sum_{\sigma=1}^{N} a^{+}_{L\sigma} \, a_{L'\sigma} \qquad \text{(III-34)}$$

que geram as excitações elementares do sistema e constituem uma álgebra de Lie caracterizada pela seguinte regra de comutação

$$[K_{LL'}, K_{JJ'}] = K_{LJ'} \delta_{L'J} - K_{JL'} \delta_{LJ'} \qquad \text{(III-35)}$$

Esta álgebra de Lie, denotada por u(3) está associada ao grupo de transformações unitárias em três dimensões U(3).

Os geradores da álgebra podem ser classifi - cados como

p-p - partícula-partícula - $K_{32}, K_{23}, K_{33}, K_{22}$

b-b - buraco-buraco - K_{11}

p-b; b-p - partícula-buraco; buraco-partícula - $K_{21}, K_{31}, K_{12}, K_{13}$

Os operadores (p-p) formam uma subálgebra u(2) associada ao grupo U(2). Basta notar que estes operadores podem ser associados a $\{J_+, J_-, J_o, \hat{N}\}$.

$$K_{32} \longrightarrow J_+$$
$$K_{23} \longrightarrow J_-$$
$$\frac{1}{2}(K_{33} - K_{22}) \longrightarrow J_o$$
$$K_{33} + K_{22} \longrightarrow \hat{N}$$

Isto porque correspondem a um modelo de dois níveis formado apenas pelos dois níveis superiores análogo ao modelo de Lipkin.

O operador (b-b) K_{11} é o gerador u(1) do grupo U(1).

Com isso pode-se decompor a álgebra u(3) em

$$\mathcal{U}(3) = \mathcal{B} \oplus (\mathcal{U}(1) \oplus \mathcal{U}(2))$$

onde $\mathcal{B} = \{K_{31}, K_{13}, K_{21}, K_{12}\}$

$$\mathcal{U}(1) = \{K_{11}\}$$
$$\mathcal{U}(2) = \{K_{32}, K_{23}, K_{33}, K_{22}\}$$

O grupo U(3) pode então ser fatorado como

$$U(3) = \left\{ U(3) / U(1) \otimes U(2) \right\} \otimes U(1) \otimes U(2)$$

onde o grupo de isotropia [U(1) ⊗ U(2)] apenas gera uma fase quando atua sobre o estado $|\phi_o>$.

Portanto os determinantes de Slater serão dados pela ação de membros do coset [U(3)/U(1) ⊗ U(2)]. Um elemento deste coset pode ser representado por

$$U(T) = \exp\left\{ T_2 K_{21} - T_2^* K_{12} + T_3 K_{31} - T_3^* K_{13} \right\} \qquad \text{(III-36)}$$

ou na forma matricial

$$U(T) = \begin{bmatrix} \cos|T| & -\frac{T_2^* \operatorname{sen}|T|}{|T|} & -T_3^* \frac{\operatorname{sen}|T|}{|T|} \\ \frac{T_2 \operatorname{sen}|T|}{|T|} & \left(1 + \frac{|T_2|^2(\cos|T|-1)}{|T|^2}\right) & \frac{T_2 T_3^*(\cos|T|-1)}{|T|^2} \\ T_3 \frac{\operatorname{sen}|T|}{|T|} & \frac{T_3 T_2^*(\cos|T|-1)}{|T|^2} & \left(1 + \frac{|T_3|^2(\cos|T|-1)}{|T|^2}\right) \end{bmatrix}$$

onde

$$|T| = \sqrt{T_2 T_2^* + T_3 T_3^*}$$

$$|T_i| = \sqrt{T_i T_i^*}$$

As coordenadas da representação bosônica são dadas por

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \frac{\operatorname{sen}|T|}{|T|} \begin{pmatrix} T_2 \\ T_3 \end{pmatrix}$$

enquanto que as coordenadas Z da representação de Thouless são

dadas por

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \frac{tg\,|T|}{|T|} \begin{pmatrix} T_2 \\ T_3 \end{pmatrix}$$

RESUMO

Neste capítulo nós mostramos que o subespaço variacional para teorias de Campo Médio pode ser mapeado de forma unívoca num espaço de parâmetros. Cada ponto deste espaço está associado a um estado variacional e soluções do problema variacional serão dados por curvas no espaço de parâmetros.

Os estados variacionais parametrizados formam uma base não ortogonal, supercompleta de estados coerentes generalizados.

Esta última propriedade dos estados variacionais parametrizados nos permitirá associar uma estrutura de espaço de fase clássico ao espaço dos determinantes. Como veremos no próximo capítulo, as soluções de HFDT serão soluções das equações de Hamilton.

IV - DINÂMICA DE MUITOS CORPOS

Os estados variacionais parametrizados do capítulo anterior vão ser agora implementados no princípio de mínima ação quântica. Vamos em particular utilizar estados na representação de Thouless.

$$|Z\rangle = \exp\{Z_{mi}\, a^{+}_{m} a_{i}\}\, |\Phi_0\rangle \tag{IV-1}$$

Sendo que $|Z\rangle$ não está normalizado

$$\langle Z|Z\rangle = \det(\delta_{ij} + Z^{+}_{im} Z_{mj}) \tag{IV-2}$$

onde

$i = 1,2...N$ (estados ocupados)

$m = N+1,...M$ (estados não-ocupados)

Quando utilizamos os estados $|Z\rangle$ no princípio variacional de mínima ação quântico

$$\delta \int \langle Z|\hat{H} - i\partial_t|Z\rangle\, dt = 0$$

a lagrangeana quântica (o integrando na equação variacional) é complexa. Ela é então modificada (ver discussão em Kramers-Saraceno[32]) e a equação variacional toma a seguinte forma

$$\delta \int \left(\frac{i}{2} \left\{ \frac{\langle Z|\dot{Z}\rangle - \langle \dot{Z}|Z\rangle}{\langle Z|Z\rangle} \right\} - \frac{\langle Z|\hat{H}|Z\rangle}{\langle Z|Z\rangle} \right) dt = 0 \tag{IV-3}$$

Para simplificar a notação vamos denotar as matrizes cujos elementos são Z_{mi}, apenas por Z e denotaremos os

elementos Z_{mi} como Z_α.

A Lagrangeana pode então ser escrita como

$$\mathcal{L}(z,z^*) = \frac{i}{2}\left\{ \dot{z}_\alpha \frac{\partial}{\partial z_\alpha} \ln\langle z|z\rangle - \dot{z}^*_\alpha \frac{\partial}{\partial z^*_\alpha} \ln\langle z|z\rangle \right\} - \mathcal{H}(z,z^*) \tag{IV-4}$$

onde

$$\mathcal{H}(z,z^*) = \frac{\langle z|\hat{H}|z\rangle}{\langle z|z\rangle} \tag{IV-5}$$

Para desvendar a estrutura de espaço de fase presente no espaço dos determinantes é conveniente definir

$$\phi(z,z^*) = \ln\langle z|z\rangle \tag{IV-6}$$

A ação quântica pode ser reescrita como

$$S = \int \frac{i}{2}\left\{ dz_\alpha \frac{\partial\phi(z,z^*)}{\partial z_\alpha} - dz^*_\alpha \frac{\partial\phi(z,z^*)}{\partial z^*_\alpha} \right\} - \mathcal{H}(z,z^*)\,dt \tag{IV-7}$$

E a variação $\delta S = 0$ nos dá

$$\begin{aligned} i\,\sigma^{\alpha\beta}\,\dot{z}_\beta &= \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial z^*_\alpha} \\ -i\,\bar{\sigma}^{\alpha\beta}\,\dot{z}^*_\beta &= \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial z_\alpha} \end{aligned} \tag{IV-8}$$

A matriz $\sigma^{\alpha\beta}$ dada por

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 \phi(Z,Z^*)}{\partial Z^*_\alpha \, \partial Z_\beta} \tag{IV-9}$$

$$\bar{\sigma}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 \phi(Z,Z^*)}{\partial Z_\alpha \, \partial Z^*_\beta} \tag{IV-10}$$

Sua inversa é denotada por

$$(\sigma^{\alpha\beta})^{-1} = \sigma_{\alpha\beta}$$

cuja forma explícita está no apêndice B.

As equações de movimento (IV-8) podem ser re escritas como

$$i \, \dot{Z}_\alpha = \sigma_{\alpha\beta} \frac{\partial \mathcal{H}(Z,Z^*)}{\partial Z^*_\beta} \tag{IV-11}$$

$$-i \, \dot{Z}^*_\alpha = \bar{\sigma}_{\alpha\beta} \frac{\partial \mathcal{H}(Z,Z^*)}{\partial Z_\beta}$$

A matriz $\sigma_{\alpha\beta}$ é denominada matriz simplética pois a partir dela pode-se definir colchetes generalizados de Poisson

$$\{ Z_\alpha, Z^*_\beta \} = \sigma_{\alpha\beta}$$

$$\{ Z^*_\alpha, Z_\beta \} = -\bar{\sigma}_{\alpha\beta} = -\sigma_{\beta\alpha} \tag{IV-12}$$

Tais que para quaisquer funções, $h(Z,Z^*)$, $f(Z,Z^*)$, $g(Z,Z^*)$ o colchete generalizado de Poisson é

$$\{f,g\} = \frac{\partial f}{\partial z_\alpha}\,\sigma_{\alpha\beta}\,\frac{\partial g}{\partial z^*_\beta} - \frac{\partial f}{\partial z^*_\alpha}\,\bar{\sigma}_{\alpha\beta}\,\frac{\partial g}{\partial z_\beta} \tag{IV-13}$$

e satisfaz as seguintes propriedades

$$\{f,g\} = -\{g,f\}$$

$$\{\{f,g\}h\} + \{\{h,f\},g\} + \{\{g,h\},f\} = 0 \tag{IV-14}$$

isto é antissimetria e a identidade de Jacobi.

As equações de movimento (IV-11) podem ainda ser escritas como

$$i\,\overset{\circ}{z}_\alpha = \{z_\alpha, \mathcal{H}(z,z^*)\}$$

$$i\,\overset{\circ}{z}{}^*_\alpha = \{z^*_\alpha, \mathcal{H}(z,z^*)\} \tag{IV-15}$$

Se calcularmos os colchetes de Poisson para as variáveis "bosônicas" definidos no capítulo anterior

$$\beta_\alpha = \left(z\,(1+z^+z)^{-1/2}\right)_\alpha$$

Obtém-se

$$\{\beta_\alpha, \beta^*_{\alpha'}\} = \delta_{\alpha\alpha'}$$

$$\{\beta^*_{\alpha'}, \beta_\alpha\} = -\delta_{\alpha\alpha'} \tag{IV-16}$$

Nesta representação as equações de movimento são dadas como

$$i\,\mathring{\beta}_\alpha = \frac{\partial\,\mathcal{H}(\beta,\beta^*)}{\partial\beta^*_\alpha}$$

$$i\,\mathring{\beta}^*_\alpha = -\,\frac{\partial\,\mathcal{H}(\beta,\beta^*)}{\partial\beta_\alpha} \qquad \text{(IV-17)}$$

Estas são equações de Hamilton complexas. Para obter equações de Hamilton na forma usual pode-se efetuar a seguinte transformação

$$\beta_\alpha = (q^\alpha + i\,p_\alpha)/\sqrt{2} \qquad \text{(IV-18)}$$

que nos leva a

$$\dot{q}^\alpha = \frac{\partial\,\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p})}{\partial p_\alpha}$$

$$\dot{p}_\alpha = -\,\frac{\partial\,\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p})}{\partial q^\alpha} \qquad \text{(IV-19)}$$

As expressões (IV-18) e (IV-19) mostram a importância das variáveis bosônicas β_α e a sua denominação como tal se deve principalmente a (IV-18). Esta expressão de β_α é análoga a definição de operadores bosônicos.

Estas variáveis β_α foram associadas à imagens clássicas de bosons [ver por exemplo [29], e a hamiltoniana $\mathcal{H}(\beta,\beta^*)$ como imagem clássica de uma hamiltoniana de bosons interactuantes.

É importante observar que a estrutura de espaço de fase que obtivemos é uma propriedade do coset, isto é, da identificação do espaço dos determinantes com o coset. Qualquer sistema para o qual é possível associar estados coerentes generalizados tem uma estrutura de espaço de fase.

Portanto, as equações de movimento de HFDT obedecem a uma dinâmica Hamiltoniana mas são apenas "formalmente clássicas".

Deve-se enfatizar que as variáveis canônicamente conjugadas, q^{α} e p_{α}, estão associadas aos operadores de partícula-buraco e buraco-partícula que descrevem excitações elementares do sistema. Um dado par (q^{α},p_{α}) vai descrever a evolução de um certo tipo de excitação elementar. Desta forma os diversos tipos de excitações elementares descrevem os diversos graus de liberdade aos quais associamos coordenadas e momentos generalizados $\{q^{\alpha},p_{\alpha}\}$.

Um outro ponto a ser enfatizado é que, q^{α} e p_{α} estão associados a probabilidades de ocupação como veremos em detalhe nos exemplos. Como tal q^{α} e p_{α} estão limitados a uma certa região do espaço de fase determinada por [29]

$$1 - \beta^{+}\beta \geqslant 0$$

No apêndice C nós temos as expressões para o valor médio de diversos operadores de um corpo e de uma hamiltoniana de muitos corpos genéricos.

Na próxima secção vamos aplicar este formalismo aos dois modelos esquemáticos tratados anteriormente, onde esperamos que as observações aqui feitas fiquem claras.

A - Dinâmica de Dois Modelos Esquemáticos

1. Modelo de Lipkin

A hamiltoniana deste modelo cuja cinemática foi analisada no capítulo anterior é

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon}{2} \sum_{\sigma} (a^{+}_{2\sigma} a_{2\sigma} - a^{+}_{1\sigma} a_{1\sigma}) + \frac{V}{2} \sum_{L \neq K} \left(\sum_{\sigma} a^{+}_{L\sigma} a_{K\sigma} \right)^{2} \qquad \text{(IV-20)}$$

onde L e K indicam os dois níveis e σ os subníveis.

Em termo dos operadores de quasi-spin, (geradores de SU(2)) J_o, J_+ e J_- definidos em (III-25) a hamiltoniana pode ser escrita como

$$\hat{H} = \varepsilon_0 J_0 + \frac{V}{2} (J_+^2 + J_-^2) \qquad \text{(IV-21)}$$

Os estados variacionais $|Z\rangle$ são dados por

$$|Z\rangle = \exp\left\{ Z \left(\sum_{\sigma} a^{+}_{2\sigma} a_{1\sigma} \right) \right\} |\phi_0\rangle$$

Isto é, os estados variacionais dependem apenas de um parâmetro complexo Z.

O valor médio da hamiltoniana foi obtido explicitamente no apêndice C

$$\mathcal{H}(Z,Z^*) = -N \left[\frac{\varepsilon}{2} \frac{(1 - ZZ^*)}{(1 + ZZ^*)} + \frac{V(1-N)}{2} \frac{Z^{*2} + Z^2}{(1 + ZZ^*)^2} \right] \qquad \text{(IV-22)}$$

Definindo o parâmetro de interação

$$\chi = \frac{V(1-N)}{\varepsilon} \tag{IV-23}$$

e efetuando a transformação para a representação β nós teremos

$$\beta = z / \sqrt{1+zz^*}$$

$$z = \beta / \sqrt{1-\beta\beta^*} \tag{IV-24}$$

De onde

$$\mathcal{H}(\beta\beta^*) = -\frac{\varepsilon N}{2}\left(1 - 2\beta\beta^* + \chi\,(\beta^2+\beta^{*2})\,(1-\beta\beta^*)\right) \tag{IV-25}$$

A Lagrangeana pode ser escrita como

$$\mathcal{L}(\beta,\beta^*) = \frac{i}{2} N \left\{ \dot{\beta}\beta^* - \dot{\beta}^*\beta \right\} - \mathcal{H}(\beta,\beta^*) \tag{IV-26}$$

Introduzindo q e p a partir de

$$\beta = (q + ip)/\sqrt{2} \tag{IV-27}$$

obtém-se

$$\mathcal{H}(q,p) = \varepsilon N \left[\frac{p^2(1+\chi)}{2} + \frac{q^2(1-\chi)}{2} + \frac{\chi q^4}{4} - \frac{\chi p^4}{4} - 1 \right] \tag{IV-28}$$

O princípio de mínima ação pode então ser escrito como

$$\delta \int \left(p\dot{q} - \bar{\mathcal{H}}(q,p) \right) dt = 0 \qquad \text{(IV-29)}$$

onde

$$\bar{\mathcal{H}}(q,p) = \frac{\mathcal{H}(q,p)}{\varepsilon N}$$

i.e. em unidades de ε.

As equações de Hamilton nos dão

$$\begin{aligned} \dot{q} &= 2(1+x)p - 2x p^3 \\ \dot{p} &= -2(1-x)q + 2x q^3 \end{aligned} \qquad \text{(IV-30)}$$

As soluções das equações de movimento acima, nos fornecem q,p (e portanto β) em função do tempo para uma dada condição inicial. Com isso pode-se escrever o determinante de Slater que é solução de HFDT como

$$|\tilde{\beta}(t)\rangle = \prod_{\sigma=1}^{N} c^{+}_{1\sigma}(\beta)\,|-\rangle \qquad \text{(IV-31)}$$

onde $|\tilde{\beta}_{(t)}\rangle$ é o estado determinantal normalizado e (Vide III-13)

$$c^{+}_{1\sigma}(\beta) = \left(1 - \beta(t)\beta^{*}(t)\right)^{1/2} a^{+}_{1\sigma} + \beta\, a^{+}_{2\sigma} \qquad \text{(IV-32)}$$

onde $a^{+}_{L\sigma}$ são operadores tais que

$$|\phi_0\rangle = \prod_{\sigma=1}^{N} a^{+}_{1\sigma}\,|-\rangle \qquad \text{(IV-33)}$$

A expressão (IV- 32) mostra claramente que ($\beta\beta^*$) é a probabilidade de ocupação do estado (2σ), isto é, é a probabilidade do nucleon estar num certo instante de tempo no nível superior.

Portanto nós temos uma dinâmica hamiltoniana para probabilidades de ocupação. Neste sentido é bom recordar que

$$\beta\beta^* \leq 1$$

como se requer de qualquer probabilidade.

Isto mostra que as equações de HFDT são formalmente clássicas mas preservam um conteúdo quântico.

2. Modelo de três níveis

Neste modelo os nucleons tem acesso a três níveis de igual degenerescência N. Os níveis se encontram a energias $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ e como no capítulo III os estados de partícula única são caracterizados pelos números quânticos L = 1,2,3 e σ = 1,2...N, níveis e subníveis respectivamente.

No estado fundamental N nucleons ocupam o nível mais baixo L = 1. Este estado é

$$|\phi_0\rangle = \prod_{\sigma=1}^{N} a^{+}_{1\sigma} |-\rangle$$

A interação de dois corpos apenas mistura estados em níveis diferentes (L $\neq$ L') e não mistura estados com valores diferentes de σ.

Estas hipóteses nos levam à seguinte hamiltoniana

$$\hat{H} = \sum_{L=1}^{3} \sum_{\sigma=1}^{N} \varepsilon_L a^{+}_{L\sigma} a_{L\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{L,L'=1}^{3} V_{LL'} \left[\sum_{\sigma=1}^{N} a^{+}_{L\sigma} a_{L'\sigma} \right]^2 \qquad \text{(IV-34)}$$

onde

$$\varepsilon_L = \left\{ \varepsilon_1 = -\varepsilon \; ; \; \varepsilon_2 = 0 \; ; \; \varepsilon_3 = \varepsilon \right\}$$

e

$$V_{L'L} = V(1 - \delta_{L'L})$$

Utilizando os operadores $\hat{K}_{LL'}$ definidos no capítulo anterior a hamiltoniana pode ser reescrita como

$$\hat{H} = -\varepsilon K_{11} + \varepsilon K_{33} + \frac{1}{2} V \left(K_{31}^2 + K_{21}^2 + K_{32}^2 + K_{13}^2 + K_{12}^2 + K_{23}^2 \right) \qquad \text{(IV-35)}$$

Os estados variacionais serão

$$|z\rangle = \exp\{ z_2 K_{21} + z_3 K_{31} \} |\phi_0\rangle \qquad \text{(IV-36)}$$

De onde se tem

$$\langle z | z \rangle = (1 + |z_2|^2 + |z_3|^2)^{-N/2} \qquad \text{(IV-37)}$$

O valor médio da hamiltoniana pode ser calculado como

$$\mathcal{H}(z, z^*) = \frac{-N\varepsilon}{(1 + |z_2|^2 + |z_3|^2} \left\{ 1 - |z_3|^2 + \frac{x}{2} \frac{(z_2^2 + z_3^2 + z_2^2 z_3^{*2} + C.C.)}{(1 + |z_2|^2 + |z_3|^2)} \right\} \qquad \text{(IV-38)}$$

onde $X = \frac{(1-N)V}{\varepsilon}$

(CC - complexo conjugado)

Na representação β

$$\beta_i = z_{i+1}\,(1 + |z_2|^2 + |z_3|^2)^{-1/2} \qquad i = 1, 2 \tag{IV-39}$$

A hamiltoniana pode ser reescrita como

$$\mathcal{H}(\beta,\beta^*) = -N\varepsilon\left[(1 - |\beta_1|^2 - 2|\beta_2|^2) + \frac{X}{2}(1 - |\beta_1|^2 - |\beta_2|^2)(\beta_1^2 + \beta_2^2 + \beta_1\beta_2^* + CC)\right] \tag{IV-40}$$

Em termo de variáveis canônicas

$$\beta_i = (q^i + i\,p_i)/\sqrt{2} \tag{IV-41}$$

a hamiltoniana pode ser escrita como

$$\tilde{\mathcal{H}}(\bar{q},\bar{p}) = N\varepsilon\left\{\frac{1}{2}B^{ij}(\bar{q})\,p_i p_j + V(\bar{q})\right\} - N\varepsilon X\left\{\frac{p_1^4}{4} + \frac{p_2^4}{4} - \frac{3}{4}p_1^2 p_2^2\right\} \tag{IV-42}$$

onde identificamos $B^{ij}(\vec{q})$ como um tensor de inércia

$$\begin{aligned} B^{11}(\bar{q}) &= [1 + X + \frac{X}{2}(q^2)^2] \\ B^{12}(\bar{q}) &= B^{21}(\bar{q}) = -X\,q^1 q^2 \\ B^{22}(\bar{q}) &= [2 + X + \frac{X}{2}(q^1)^2] \end{aligned} \tag{IV-43}$$

e

$$V(\bar{q}) = -1 + \frac{1}{2}(1-x)(q^1)^2 + \frac{1}{2}(2-x)(q^2)^2 + \frac{1}{4}x\left((q^1)^4 + (q^2)^4 + (q^1 q^2)^2\right) \qquad \text{(IV-44)}$$

é o potencial.

Neste modelo temos dois graus de liberdade o que nos permite analisar condições de desacoplamento para um sistema de muitos corpos. Nós vamos exibir e analisar trajetórias coletivas neste modelo (Ver capítulo VI).

No que segue vamos supor que os termos quárticos no momento são desprezíveis e trabalharemos com uma hamiltoniana adimensional

$$\mathcal{H}(q,p) = \frac{\tilde{\mathcal{H}}(q,p)}{N\varepsilon} = \frac{1}{2} B^{ij}(\bar{q})\, p_i p_j + V(\bar{q}) \qquad \text{(IV-45)}$$

Os graus de liberdade identificados por (q^i, p_i) estão associados aos operadores de excitação e (deexcitação) $\hat{K}_{21}$, $\hat{K}_{31}$ e $(\hat{K}_{12}, \hat{K}_{13})$ e a evolução temporal do sistema ao longo destes graus de liberdade obedecem equações de Hamilton.

Uma vez mais pode-se escrever os determinantes de Slater como

$$|\tilde{\beta}\rangle = \prod_{\sigma=1}^{N} c^{+}_{1\sigma}(\beta)\, |-\rangle \qquad \text{(IV-46)}$$

onde

$$c^{+}_{1\sigma}(\beta) = (1 - |\beta_1|^2 - |\beta_2|^2)^{1/2}\, a^{+}_{1\sigma} - \beta_1 a^{+}_{2\sigma} - \beta_2 a^{+}_{3\sigma} \qquad \text{(IV-47)}$$

Onde os estados $|\beta\rangle$ representam estados com

a seguinte ocupação

$$n_1(\beta) = \langle\beta|K_{11}|\beta\rangle = N(1 - |\beta_1|^2 - |\beta_2|^2)$$

$$n_2(\beta) = \langle\beta|K_{22}|\beta\rangle = N|\beta_1|^2 \qquad \text{(IV-48)}$$

$$n_3(\beta) = \langle\beta|K_{33}|\beta\rangle = N|\beta_2|^2$$

Como no modelo de dois níveis temos uma dinâmica hamiltoniana para ocupações.

Para se entender como a análise desta dinâmica hamiltoniana pode nos levar a identificação de modos (graus de liberdade) com características coletivas, vamos supor que a hamiltoniana $\mathcal{H}(\vec{q},\vec{p})$ fosse tal que não houvesse acoplamento entre os graus de liberdade β_1 e β_2. Neste caso se tomássemos como condição inicial $\beta_2(t=0)=0$ e $\dot{\beta}_2(t=0)=0$ o sistema evoluiria sempre ao longo de β_1.

Com isso nós teríamos que o determinante de Slater seria

$$|\tilde{\beta}_1\rangle = \prod_{\sigma=1}^{N} c^{+}_{1\sigma}(\beta_1)|-\rangle$$

onde

$$c^{+}_{1\sigma}(\beta) = (1 - |\beta_1|^2)^{1/2} a^{+}_{1\sigma} - \beta_1 a^{+}_{2\sigma}$$

O que nos diria que apenas excitações entre os níveis L=1 e L=2 ocorreriam. Se o estado inicial fosse o estado $|\phi_0\rangle$ todos os nucleons no nível mais baixo) as excitações se dariam dentro do multipleto coletivo do modelo de Lipkin[38,39,40].

Com esse exemplo, se tem que a análise da hamiltoniana clássica nos permite identificar situações de desa-

coplamento entre graus de liberdade e que a estes graus de liberdade corresponde uma certa combinação de estados de partícula independente, entre as quais podem existir combinações coerentes que nos fornecem estados com propriedades coletivas.

Neste capítulo nós mostramos como obter uma dinâmica Hamiltoniana do tipo clássico para sistemas de muitos corpos, vamos a seguir obter equações de Trajetórias Coletivas dentro deste cenário "clássico".

V - TRAJETÓRIAS COLETIVAS

Nos dois últimos capítulos, nós mostramos que um sistema de muitos corpos pode ser interpretado como um sistema clássico, cujas soluções das equações de movimento, descrevem curvas num espaço de fase com coordenadas e momentos generalizados associados à excitações elementares do sistema de muitos corpos.

Ao mesmo tempo, nós observamos no capítulo II que trajetórias coletivas são obtidas a partir de hipóteses sobre geradores e/ou operadores de vínculo. Estes dois ingredientes são formas de definir curvas num dado espaço. Assim, unindo o conteúdo dos capítulos anteriores, nós temos um espaço coordenatizado, e uma dinâmica a partir da qual se pode (fazendo hipóteses) construir curvas caracterizadas por geradores (vetores tangentes) e/ou equações de vínculo.

Isto nos permite interpretar geometricamente as diversas trajetórias coletivas. Em uma formulação covariante, as características geométricas nos permitirão elucidar de forma precisa as diferenças entre as trajetórias assim como as condições de validade.

No que segue vamos considerar apenas um grau de liberdade coletivo e a dinâmica será dada por uma hamiltoniana quadrática nos momentos. Isto é

$$\mathcal{H}_0(\bar{q},\bar{p}) = \frac{1}{2} B^{ij} p_i p_j + V(\bar{q}) \qquad \text{(V-1)}$$

Como critério básico (necessário mas nem sempre suficiente) para identificar um grau de liberdade coletivo utilizaremos o desacoplamento. Notando que os dois ingredientes fundamentais (geradores e/ou vínculos) são definidos ponto

a ponto ao longo de uma curva, nós vamos construir geradores e equações de vínculo analisando condições de desacoplamento na vizinhança de pontos.

Estas condições de desacoplamento serão obtidas analisando a Hamiltoniana Local definida por

$$\mathcal{H}_{LOCAL}(\vec{q},\vec{p}) = \frac{1}{2} B^{\alpha\beta}(\vec{q}_0)\, p_\alpha p_\beta + (q^\alpha - q_0^\alpha)\, V_\alpha(\vec{q}_0) + \frac{1}{2}(q^\alpha - q_0^\alpha)\, V_{\alpha;\beta}(\vec{q}_0)\,(q^\beta - q_0^\beta) + \ldots\ldots \tag{V-2}$$

Isto é, por uma expansão da hamiltoniana (V-1) em torno de uma posição arbitrária $\vec{q}_0$ e um momento $\vec{p} = 0$.

Sendo $\vec{q}_0$ um ponto arbitrário, o termo linear só se anulará quando $\vec{q}_0$ for um ponto de mínimo, pois

$$V_\alpha(\vec{q}_0) = \left.\frac{\partial V(\vec{q})}{\partial q^\alpha}\right|_{\vec{q}=\vec{q}_0} \tag{V-3}$$

O coeficiente do termo quadrático nas coordenadas, denominado Hessiano, é a derivada segunda covariante do potencial

$$V_{\alpha;\beta}(\vec{q}_0) = \left[\frac{\partial^2 V(\vec{q})}{\partial q^\alpha \partial q^\beta} - \Gamma^\mu_{\alpha\beta}\frac{\partial V}{\partial q^\mu}\right]_{\vec{q}=\vec{q}_0} \tag{V-4}$$

Aqui a introdução do símbolo de Christoffel $\Gamma^\mu_{\alpha\beta}$ é necessária para que a expansão seja covariante. O símbolo de Christoffel é dado por[43]

$$\Gamma^\mu_{\alpha\beta} = \frac{B^{\mu\nu}}{2}\left[\frac{\partial M_{\alpha\nu}}{\partial q^\beta} + \frac{\partial M_{\beta\nu}}{\partial q^\alpha} - \frac{\partial M_{\alpha\beta}}{\partial q^\nu}\right] \tag{V-5}$$

onde $M_{\alpha\beta}$ é o tensor de massa inverso de $B^{\alpha\beta}$

$$B^{\alpha\nu} M_{\nu\beta} = \delta^{\alpha}_{\beta} \qquad \text{(V-6)}$$

A definição (V-5) do símbolo de Christoffel significa que o tensor de massa foi escolhido como métrica. Neste caso as soluções das equações de movimento são interpretadas como curvas num espaço Riemanniano cuja métrica é $M_{\alpha\beta}(\vec{q})$. [Ver Ref. [43], pág. 228]

É importante frisar que no enfoque local, a hipótese de baixos momentos não é necessária pois a expansão pode ser feita na vizinhança de qualquer ponto do espaço de fase.

Por outro lado, uma análise local nos garante um desacoplamento apenas na vizinhança de um ponto. Isto significa que as trajetórias, assim obtidas, não correspondem à priori a um grau de liberdade desacoplado globalmente. Pode-se, no entanto, mostrar que sob certas condições o enfoque local nos leva a soluções com propriedades globais de desacoplamento.

Nas próximas secções vamos obter as trajetórias do capítulo II analisando a dinâmica local.

A - Linha de Força (Trajetória de Villars)

Uma curva pode ser obtida a partir de seu vetor tangente definido em cada ponto. Assim uma prescrição para uma trajetória coletiva pode ser obtida analisando a Hamiltoniana Local (V-2) e definindo um vetor tangente em cada ponto.

Tomando os termos de ordem mais baixa da Hamiltoniana Local

$$\mathcal{H}_{LOCAL}(\bar{q},\bar{p}) = \frac{1}{2} B^{ij}(\bar{q}_0)\, p_i p_j + (q^i - q^i_0)\, V_i(\bar{q}_0) + \ldots$$

pode-se fazer as seguintes hipóteses de desacoplamento

1) Desacoplamento Inercial - existe um sistema de coordenadas locais onde o tensor de inércia é diagonal e portanto não acopla diferentes graus de liberdade;

2) O gradiente do potencial, isto é a força, só tem componentes na direção de um grau de liberdade (coletivo).

Isto nos permite formular a seguinte prescrição para o gerador

- O gerador (vetor tangente à curva) é paralelo ao gradiente do potencial em cada ponto, caracterizando esta curva como uma Linha de Força ou Linha de Gradiente.

Portanto esta trajetória só pressupõe hipóteses sobre os termos de ordem mais baixa nas coordenadas (1ª ordem) e nos momentos (2ª ordem).

A curva é dada por uma função $X^o(q^1, q^2 \ldots q^N)$. Em cada ponto X^o corresponde a um dos eixos de coordenadas locais $X^j(q)$. Para cada ponto da curva nós temos que

1) O tensor de inércia é desacoplado

$$\mathcal{M}^{-1} = \frac{\partial X^o}{\partial q^\alpha} B^{\alpha\beta} \frac{\partial X^o}{\partial q^\beta} \qquad \text{(V-7)}$$

$$\frac{\partial X^o}{\partial q^\alpha} B^{\alpha\beta} \frac{\partial X^j}{\partial q^\beta} = 0 \qquad j \neq o$$

2) $X^{o}(q)$ descreve uma curva cujo vetor tangente é paralelo ao gradiente do potencial

$$\frac{\partial X^{o}}{\partial q^{\alpha}} = \frac{M^{-1/2}}{F} V_{\alpha} \tag{V-8}$$

onde F é o módulo do gradiente

$$F = \left(B^{ij} V_i V_j \right)^{\frac{1}{2}} \tag{V-9}$$

Substituindo (V-8 em V-7) nós temos

$$\frac{\partial q^{\alpha}}{\partial X^{o}} = \frac{M^{1/2}}{F} B^{\alpha\beta} V_{\beta} \tag{V-10}$$

Pode-se mostrar que esta equação é a versão "clássica" das equações de Villars[15,17]

B - <u>Vales e Cumeeiras</u> - (Trajetória de Rowe-Bassermann)

Esta trajetória será definida a partir de um vínculo, que será obtido impondo condições de desacoplamento na hamiltoniana local. Porém neste caso nós vamos um pouco mais além na expansão local

$$\mathcal{H}_{LOCAL}(\bar{q},\bar{p}) = \frac{B^{ij}(q_o)}{2} p_i p_j + (q^i - q_o^i) V_i + \frac{1}{2}(q^i - q_o^i) V_{ij} (q^j - q_o^j)$$

Isto é, vamos considerar termos em 2ª ordem

nas coordenadas na análise do desacoplamento.

Para se ter uma dinâmica desacoplada pode-se efetuar uma transformação para coordenadas normais. Estas coordenadas (X^i, Π_i) são tais que os tensores elástico $V_{i;j}$ e de inércia B^{ij} são diagonais

$$\tilde{C}_i \, \delta^i_j = \frac{\partial q^\alpha}{\partial x^i} V_{\alpha;\beta} \frac{\partial q^\beta}{\partial x^j}$$

$$\tilde{B}^i \, \delta_i^j = \frac{\partial x^i}{\partial q^\alpha} B^{\alpha\beta} \frac{\partial x^j}{\partial q^\beta} \qquad \text{(V-11)}$$

$$\tilde{V}_j = \frac{\partial q^\alpha}{\partial x^j} V_\alpha$$

o que nos dá

$$\mathcal{H}_{LOCAL}(\vec{x}, \vec{\pi}) = \frac{1}{2}\left[\tilde{B}^i \Pi_i^2 + \tilde{C}_i (X^i)^2\right] + X^j \tilde{V}_j \qquad \text{(V-12)}$$

A hamiltoniana acima descreve n-modos normais desacoplados. Temos ainda o termo linear por não estarmos necessariamente num ponto de equilíbrio.

A presença do termo linear $(X^j \tilde{V}_j)$ pode gerar acoplamentos, visto que, se o sistema for lançado com uma certa velocidade na direção de um dos modos normais, a presença de uma força apontando na direção de outros modos gera acoplamentos.

Isto sugere a imposição de um vínculo tal que a força seja paralela a um modo normal em cada ponto da trajetória. Portanto se o nosso sistema for fixado num ponto desta trajetória, quando liberado ele será acelerado na direção de um modo normal desacoplado dos restantes. Esta condição corresponde ao desacoplamento máximo local.

De todos os modos normais, aquele associado à freqüência mais baixa, w_i,

$$w_i = \sqrt{\tilde{C}_i \tilde{B}^i}$$ (sem soma nos índices)

é o candidato preferencial a grau de liberdade coletivo, pois na vizinhança do ponto de equilíbrio ele corresponde ao modo coletivo de R.P.A.[1]

Para obter as equações de trajetória nós devemos definir a matriz que quando diagonalizada nos dá os modos normais locais (a matriz generalizada de RPA).

$$A^i_j(\bar{q}) = B^{il}_{(\bar{q})} V_{l;j}(\bar{q}) \qquad \text{(V-13)}$$

Se $u^i_{(\lambda)}(q)$ designa a i-ésima componente do versor associado ao modo normal λ, $u^i_{(\lambda)}(q)$ obedece a seguinte equação

$$A^i_j(\bar{q})\ u^j_{(\lambda)}(\bar{q}) = \Omega_\lambda(\bar{q})\ u^i_{(\lambda)}(q) \qquad \text{(V-14)}$$

Como, por definição, o gradiente é paralelo a um modo normal a componente contravariante do gradiente é

$$V^i = B^{ij} V_j$$

$$V^i = F(q)\ u^i_{(\lambda)}$$

e satisfaz a seguinte equação

$$A^i_j(\bar{q})\ V^j(\bar{q}) = \Omega_\lambda(\bar{q})\ V^i(\bar{q}) \qquad \text{(V-15)}$$

onde (λ) se refere ao particular modo normal escolhido.

Se tomarmos um vetor $\tilde{\chi}$ ortogonal ao gradiente e multiplicarmos escalarmente pela expressão acima nós obteremos

i.é.

$$\tilde{\chi} \,/\, \tilde{\chi}_i V^i = 0$$

então

$$\tilde{\chi}_i A^i_j V^j = 0 \qquad \text{(V-16)}$$

Substituindo a definição (V-13) e relembrando que

$$\tilde{\chi}^m = B^{mi} \tilde{\chi}_i$$

teremos

$$\tilde{\chi}^m \tilde{V}_{m;j} V^j = 0 \qquad \text{(V-17)}$$

a curva definida por (V-17) é a trajetória de Rowe Bassermann.

Para interpretar geometricamente a equação de trajetória (V-17) vamos mostrar que esta é uma trajetória extremal[45].

- Um ponto pertence a uma trajetória extremal se e só se o módulo do gradiente neste ponto, é um extremo com respeito a variações ao longo da superfície equipotencial.

Visto que o módulo do gradiente é

$$F = B^{ij} V_i V_j = V^i V_i$$

e que a variação ao longo de uma superfície equipotencial é dada pela derivada direcional na direção de um vetor χ tangente à equipotencial, (ortogonal ao gradiente), nós temos que em todos os pontos de uma trajetória extremal a seguinte equação deve ser satisfeita

$$\chi(F) = \chi^i \frac{\partial F}{\partial q^i} = 0 \qquad \text{(V-18)}$$

Usando a definição de F pode-se mostrar que

$$\chi(F) = \chi^i V_{ij} \nabla^j = 0 \qquad \text{(V-19)}$$

Portanto a trajetória que obtivemos é uma trajetória extremal. A trajetória é denominada extremal porque é constituida por pontos onde o gradiente é um extremo, máximo ou mínimo ao longo de equipotencial.

Isto é

$$\chi(F) = 0$$

Para sabermos se é um máximo ou mínimo devemos analisar o sinal da derivada direcional segunda

$$\chi^2(F) = \chi^j \frac{\partial}{\partial q^j}\left(\chi^i \frac{\partial F}{\partial q^i}\right)$$

Assim uma curva pode ser um vale (cume) maximal ou minimal se $\chi^2(F)$ for negativo ou positivo.

Ela será um vale se

$$\chi^i V_{ij} \chi^j > 0 \qquad \text{(V-20)}$$

e um cume se

$$\chi^i V_{ij} \chi^j < 0 \qquad \text{(V-21)}$$

Os vales, possuem as melhores características para descrever um modo desacoplado estável e em particular deve existir um vale que contenha os pontos de mínimo e pontos de sela. Este vale é o melhor condidato a um modo coletivo, visto que no ponto de mínimo corresponde ao modo de freqüência mais baixa de R.P.A.

C - Linha de Modos Normais

Como enfatizamos anteriormente, geradores e vínculos são os ingredientes básicos na definição de trajetórias. A trajetória tratada na secção anterior foi construída estabelecendo um vínculo após análise dos modos normais da hamiltoniana local. Este procedimento sugere uma terceira trajetória onde a análise dos modos normais locais nos levem à definição de um gerador.

Assim, vamos definir uma nova trajetória cujo vetor tangente (gerador) em cada ponto é paralelo ao modo de freqüência mais baixa.

Quando usamos como condição inicial, o ponto de mínimo, esta trajetória sai paralela ao modo normal coletivo de RPA. Assim, ela é uma extensão deste modo para grandes amplitudes.

Se esta trajetória for denotada por um parâmetro S seus vetores tangentes terão componentes

$$u^{\alpha}_{(\lambda)} = \frac{\partial q^{\alpha}}{\partial s}$$

que satisfazem

$$A^{\alpha}_{\beta}(\bar{q})\, u^{\beta}_{(\lambda)}(\bar{q}) = \Omega_{\lambda}(\bar{q})\, u^{\alpha}_{(\lambda)}(\bar{q}) \tag{V-22}$$

onde $\sqrt{\Omega_{\lambda}}$ é a freqüência mais baixa de R.P.A. local.

Isto é

$$A^{\alpha}_{\beta}(\bar{q})\, \frac{\partial q^{\beta}}{\partial s} = \Omega_{\lambda}(\bar{q})\, \frac{\partial q^{\alpha}}{\partial s} \tag{V-23}$$

Esta equação nos fornece uma curva que vamos denominar por motivos óbvios linha de Modos Normais.

D - Comparação entre as trajetórias coletivas

As trajetórias que apresentamos, foram construídas sem nenhuma intenção a priori de resolver as equações de movimento do sistema. A dinâmica foi analisada apenas localmente, sendo que a análise da hamiltoniana local em ordem mais baixa (2ª ordem nos momentos e 1ª ordem nas coordenadas) nos levou às equações de Villars. Nesta trajetória o ingrediente básico na definição foi o gerador.

Nas trajetórias extremais definimos um vínculo analisando a primeira e segunda ordem da hamiltoniana local. Sendo que o critério chave foi a análise dos modos normais locais. Este mesmo critério foi utilizado na construção da tercei-

ra trajetória, porém, o ingrediente básico na definição desta foi o gerador.

Como dissemos no capítulo II a compatibilidade entre vínculo e gerador nos leva a soluções das equações de movimento. No que segue podemos comprovar esta afirmativa.

Se o gerador de uma trajetória extremal associada ao modo de freqüência mais baixa for compatível com o vínculo, ele será paralelo ao gradiente em cada ponto. Como ao longo de um vale o gradiente é paralelo a um modo normal, o gerador será paralelo ao modo normal.

Ou seja o vale será uma linha de força e uma linha de modo normal. Isto é, as diferentes trajetórias colapsam numa única trajetória.

Uma conseqüência fundamental deste colapso é que a linha de força será uma geodésica com respeito à métrica $M_{ij}(\vec{q})$.

Isto porque a curvatura é dada pela componente ortogonal a curva, da derivada direcional do gerador ao longo da mesma. Visto que neste caso o gerador é paralelo ao vetor-gradiente, nós temos que a derivada direcional* é

$$(\nabla_{\vec{V}} \vec{V})_j = V^i V_{i;j}$$

onde $\vec{V}$ é o vetor gradiente com componentes $V^i = B^{ij}V_j$.

A componente ortogonal à curva é neste caso o produto escalar de $\nabla_{\vec{V}}\vec{V}$ por um vetor $\vec{X}$ tal que

$$\langle \vec{X}, \vec{V} \rangle = X^i V_i = 0$$

---

* ${}_A B = A(B)$ é a derivada direcional covariante A de um vetor B
$A(B) = A^i B_{j,i}$

isto é, a curvatura é dada por

$$\langle \vec{X}, \nabla_{\vec{V}} \vec{V} \rangle = X^i V_{i;j} V^j \qquad \text{(V-24)}$$

Comparando com a equação de um vale vemos que a curvatura é neste caso nula, ou seja esta curva é uma geodésica.

Provaremos a seguir que esta é uma trajetória natural e consequentemente solução das equações de movimento.

Observemos que, quando um sistema é obrigado a se deslocar sobre uma curva ele está sujeito a uma força de vínculo oposta à reação da curva. Se a curva for uma trajetória natural (solução da equação de movimento) esta reação deve ser obviamente nula não havendo necessidade do vínculo.

Isto pode ser formalizado construindo-se em cada ponto da curva um sistema ortogonal cujos versores são denotados por $\hat{e}_{(i)}$. Este sistema é uma generalização do triedro de Frenet-Serret[44] e é tal que: o primeiro versor, $\hat{e}_{(i)}$ é tangente à curva. O versor $\hat{e}_{(2)}$, normal à curva, é denominado normal principal e às normais secundárias serão denotadas por $\hat{e}_{(i)}$ para $i \geq 3$.

Se a curva tem, S, como parâmetro de comprimento os versores $\hat{e}_{(i)}$ satisfazem as seguintes relações

$$\hat{e}_{(1)} = \left(\frac{dq^1}{ds}, \frac{dq^2}{ds}, \dots \frac{dq^N}{ds} \right) \qquad \text{(V-25)}$$

$$\frac{\delta \hat{e}_{(i)}}{\delta s} = K_{i,i-1} \hat{e}_{(i-1)} + K_{i,i+1} \hat{e}_{(i+1)} \qquad \text{(V-26)}$$

$$\langle \hat{e}_{(i)}, \hat{e}_{(j)} \rangle = \delta_{ij} \qquad \text{(V-27)}$$

A matriz K_{ij} é antissimétrica

$$K_{ij} = -K_{ji} \tag{V-28}$$

Estas são as equações generalizadas de Frenet-Serret.

Os elementos de matriz K_{12} e K_{23} são respectivamente curvatura e torção

$$K_{12} = \varkappa$$

$$K_{23} = \tau$$

Um sistema ao se deslocar sobre uma curva num espaço N-dimensional estará sujeito a uma força $\bar{f}$ que pode ser escrita em termos dos versores $\hat{e}_{(i)}$.

$$\bar{f} = \frac{dT}{ds}\hat{e}_{(1)} + 2T\varkappa\,\hat{e}_{(2)} \tag{V-29}$$

onde

$T = \frac{1}{2} M_{ij}\dot{q}^i\dot{q}^j$ é a energia cinética

$\hat{e}_{(1)}$ - versor tangente

$\hat{e}_{(2)}$ - normal principal

$\varkappa$ - curvatura

Como o sistema está sendo obrigado a se deslocar ao longo da curva, a força $\bar{f}$ tem uma componente de origem potencial e outra denotada por $\bar{R}$ que é a reação da curva. $\bar{R}$ é sempre normal à curva.

Isto é

$$\bar{f} = -\nabla V + \bar{R} \tag{V-30}$$

Se os versores de base forem denotados por

$$\hat{e}_{(\alpha)} = (\lambda^1_{(\alpha)}, \lambda^2_{(\alpha)}, \ldots\ldots)$$

onde $\lambda^i_{(\alpha)}$ é a componente i-ésima do versor $\hat{e}_\alpha$, nós teremos as seguintes equações

$$-V_i \lambda^i_{(1)} = \frac{dT}{ds} \tag{V-31}$$

$$-V_i \lambda^i_{(2)} + R_i \lambda^i_{(2)} = 2Tx \tag{V-32}$$

$$V_i \lambda^i_{(\alpha)} = R_i \lambda^i_{(\alpha)} \qquad \alpha \geqslant 3 \tag{V-33}$$

onde

$\lambda^i_{(1)}$ - tangente

$\lambda^i_{(2)}$ - normal principal

$\lambda^i_{(\alpha)}$ - normais secundárias

Vamos agora analisar as trajetórias coletivas à luz das equações (V-31,32,33).

Tomemos as equações (V-31,32,33) supondo que a trajetória é uma Linha de Força. Isto nos leva a

$$-V_i \lambda^i_{(1)} = \frac{dT}{ds} \tag{V-34}$$

$$R_i \lambda^i_{(2)} = 2Tx \tag{V-35}$$

$$R_i \lambda^i_{(\alpha)} = 0 \qquad \alpha \geqslant 3 \tag{V-36}$$

Como mencionamos anteriormente se a linha de força é uma trajetória extremal (vale ou cumeeira) ela tem curvatura nula $\mathfrak{x} = 0$. As equações (V-35 e 36) nos dizem então que $\overline{R} = 0$, isto é - quando a linha de força é também um vale (cumeeira) ela é uma trajetória natural.

Ao mesmo tempo isto implica que a trajetória é uma linha de Modos Normais porque o vetor tangente (paralelo ao gradiente), é paralelo ao vetor modo normal (por ser um vale). Isto é quando duas trajetórias coincidem elas são iguais à terceira e mais do que isto são soluções das equações de movimentos.

Vamos agora fazer o caminho inverso, partindo da suposição que a trajetória é natural. Neste caso as seguintes equações são satisfeitas (Vide [44]).

$$- V_i \, \lambda^i_{(2)} = 2 T \mathfrak{x} \tag{V-37}$$

$$- \lambda^i_{(1)} \, V_{i;j} \, \lambda^j_{(2)} = 2 \mathfrak{x} \, \sigma T \tag{V-38}$$

$$V_i \, \lambda^i_{(\alpha)} = 0 \qquad \alpha \geqslant 3 \tag{V-39}$$

Se esta trajetória é também uma linha de força nós temos que (V-31)

$$- V_i \, \lambda^i_{(\alpha)} = \frac{dT}{ds} \, \delta_{\alpha 1}$$

Isto é, a equação (V-37) se anula o que implica que $\mathfrak{x} = 0$, de onde se tem

$$\lambda^i_{(1)} \, V_{i;j} \, \lambda^i_{(2)} = 0 \qquad \text{(V-38.a)}$$

Ao mesmo tempo tomando a derivada direcional ao longo da curva de expressão (V-39) teremos

$$\lambda^i_{(1)} \, V_{i;j} \, \lambda^j_{(\alpha)} = - V_i \, \frac{\delta \lambda^i_{(\alpha)}}{\delta s} \qquad \alpha \geq 3$$

o que nos dá

$$\lambda^i_{(1)} \, V_{i;j} \, \lambda^j_{(\nu)} = 0 \qquad \nu \neq 1 \qquad \text{(V-40)}$$

Comparando (V-40) com (V-17) notamos que ela nos dá um vale.

A equação (V-40) ainda nos diz que o versor tangente $\lambda^i_{(1)}$ é um modo normal, isto é, a trajetória também é uma linha de modos normais.

Portanto quando as trajetórias - linha de Força, Vale, e Linha de Modos Normais - coincidem, nós temos uma trajetória coletiva com propriedades de desacoplamento globais. Isto porque esta trajetória representa a evolução do sistema ao longo de uma curva que é solução da dinâmica global (equações de movimento). A esta trajetória denominaremos trajetória coletiva ótima ou simplesmente trajetória coletiva.

Resumo

Neste capítulo nós obtivemos as equações para a trajetória de Villars, Rowe-Bassermann e para linha de Modos Normais, partindo de uma análise das condições de desacoplamento de uma hamiltoniana local. Isto foi possível porque os

dois ingredientes fundamentais, (geradores e vínculos), na definição de uma curva são grandezas definidas ponto a ponto.

Explorando as características geométricas nós vimos as diferenças entre as diversas teorias e mostramos que a coincidência de duas trajetórias quaisquer implica na coincidência com a terceira e vai implicar que esta é solução das equações de movimento. Neste caso nós temos uma Trajetória Coletiva Ótima.

Visto que uma trajetória Coletiva Ótima é uma trajetória natural do sistema, ela é tal que a reação da curva $\overline{R}$ é nula. Isto sugere que $\overline{R}$ é uma boa medida da validade de uma trajetória. As equações (V-31,32,33) nos dão meios para calcular $\overline{R}$ para uma curva genérica.

VI - TRAJETÓRIAS COLETIVAS NO MODELO DE TRÊS NÍVEIS

Neste capítulo vamos construir e analisar as trajetórias coletivas discutidas no capítulo anterior, no sistema de três níveis.

No capítulo III e IV discutimos a cinemática e as equações dinâmicas deste modelo para o qual obtivemos uma hamiltoniana do tipo clássico

$$\mathcal{H}(\vec{q},\vec{p}) = \frac{1}{2} B^{ij}_{(\vec{q})} p_i p_j + V(\vec{q}) + \mathcal{O}(p^4)$$

Por conveniência vamos reescrever o tensor de inércia $B^{ij}(\vec{q})$ e $V(\vec{q})$ em termos de variáveis X e Y e do parâmetro de interação Z; isto é $q^1 = X$, $q^2 = Y$ e $\chi = Z$

$$\begin{aligned} B^{11} &= \left(1 + Z + \frac{Z}{2} Y^2\right) \\ B^{22} &= \left(2 + Z + \frac{Z}{2} X^2\right) \\ B^{21} &= B^{12} = -ZXY \end{aligned} \qquad \text{(VI-1)}$$

O potencial é

$$V(\vec{q}) = \frac{(1-Z)}{2} X^2 + \frac{(2-Z)}{2} Y^2 + \frac{Z}{4}\left[X^4 + Y^4 + X^2Y^2\right] - 1 \qquad \text{(VI-2)}$$

Este potencial tem termos quadráticos com coeficientes que dependem do parâmetro de interação Z. Dependendo do valor de Z poderemos ter termos quadráticos do tipo estável, (oscilador harmônico) ou instável em uma ou duas direções.

Os termos quárticos terão uma influência maior a medida que Z aumenta.

Esta análise qualitativa nos mostra que a variação de Z vai modificar a estrutura dos pontos críticos (pontos de sela, máximo e mínimo). Estas mudanças no comportamento do potencial são usualmente denominadas transições de fase, e as mostraremos nas figuras de equipotenciais.

Estes pontos de mínimo, estão associados a soluções estacionárias de Hartree-Fock. Estas soluções serão classificadas conforme o valor de Z.

Numa primeira faixa onde $Z < 1$ - (REGIÃO I) o potencial apresenta um mínimo no ponto (0, 0) (Ver figura I-1).

Microscopicamente este estado é tal que todas as partículas ocupam o nível 1, o mais baixo.

Este é um estado de Hartree Fock não deformado.

Quando $2 > Z > 1$ (REGIÃO II) o antigo ponto de mínimo se transforma num ponto de sela e surgem dois mínimos simétricos

$$(X_{MIN}, Y_{MIN}) = \left(\pm\sqrt{\frac{Z-1}{Z}}, 0\right)$$

(Vide Figura II-1).

Estes dois novos estados de Hartree-Fock tem partículas ocupando os dois primeiros níveis com uma ocupação dada por

$$n_L = \langle X_{MIN}\, Y_{MIN} | K_{LL} | X_{MIN}\, Y_{MIN} \rangle \qquad \text{(VI-3)}$$

de onde

$$n_1 = N\left(1 - \frac{Z-1}{2Z}\right)$$

$$n_2 = \frac{N(Z-1)}{2Z}$$

$$n_3 = 0$$

Estes são estados deformados de Hartree-Fock.

REGIÃO III - $3 > Z > 2$. Nesta região não há modificação do ponto de mínimo mas o ponto (0, 0) se torna um máximo local e surgem dois pontos de sela simétricos $(0, \pm\sqrt{\frac{Z-2}{Z}})$. Ver figura III-1.

REGIÃO IV - $Z > 3$. Quando o parâmetro Z passa pelo valor Z = 3 o sistema sofre uma segunda transição de fase e aparecem quatro mínimos simétricos

$$(X_{MIN}, Y_{MIN}) = \left(\pm\sqrt{\frac{2}{3}}, \pm\sqrt{\frac{2Z-6}{3Z}}\right)$$

quatro pontos de sela

$$(X_S, Y_S) = \begin{cases} \left(\pm\sqrt{\frac{Z-1}{Z}}, 0\right) \\ \left(0, \pm\sqrt{\frac{Z-2}{Z}}\right) \end{cases}$$

e um ponto de máximo em (0, 0)

(Vide Figura IV.1)

Os estados de Hartree Fock tem, neste caso, partículas ocupando todos os níveis

$$n_1 = \frac{N}{3}\left[2 - \frac{Z-3}{Z}\right]$$

$$n_2 = \frac{N}{3}$$

$$n_3 = \frac{N(Z-3)}{3Z}$$

Vamos agora analisar as diversas trajetórias coletivas neste modelo

Devido a simetria do potencial nós vamos analisar as trajetórias coletivas no primeiro quadrante, isto é, X e Y positivos.

Como nosso sistema é bidimensional as equações de trajetórias se simplificam

- TRAJETÓRIA LINHA DE FORÇA

No caso bidimensional a equação V-10 pode ser reescrita como

$$\frac{dY}{dX} = \frac{B^{21}V_1 + B^{22}V_2}{B^{11}V_1 + B^{12}V_2} \qquad \text{(VI-4)}$$

O gradiente do potencial, V_i, tem componentes

$$V_1 = (1-Z)X + \frac{Z}{2}XY^2 + ZX^3$$

(VI-5)

$$V_2 = (2-Z)Y + \frac{Z}{2}YX^2 + ZY^3$$

A equação (VI-4) foi integrada numericamente pelo método Runge-Kutta para diversas condições iniciais e diversos valores do parâmetro. Os resultados serão apresentados mais adiante

- TRAJETÓRIA LINHA DE MODOS NORMAIS

Como no caso anterior elimina-se a dependência paramétrica e as equações (V-23) se transformam em

$$\frac{dY}{dX} = \frac{\Omega_\lambda - A^1_1}{A^1_2} \qquad \text{(VI-6)}$$

onde

$$A^i_j = B^{il} V_{l;j}$$

e Ω_λ é o quadrado da freqüência mais baixa.

Utilizando pontos de mínimo e pontos de sela, nós integramos a equação (VI-5) pelo método de Runge-Kutta para diversos valores do parâmetro de interação Z.

- TRAJETÓRIAS EXTREMAIS - VALES E CUMEEIRAS

Neste modelo a equação de trajetórias extremais

$$\chi^i V_{i;j} V^j = 0$$

gerou um polinômio em X e Y cujas raízes foram obtidas por método numérico padrão para diversos valores de Z.

As trajetórias extremais foram classificadas em maximais e minimais, vales e cumeeiras como discutido no capí

tulo V.

Em nossa análise estamos particularmente interessados no vale que une pontos de sela a pontos de mínimo, isto porque nosso objetivo era exibir a factibilidade das prescrições teóricas e analisar o comportamento de todas as trajetórias na vizinhança deste vale.

Este vale é em geral considerado como o melhor candidato a uma trajetória coletiva ótima. Na literatura [15] sugeriu-se a possibilidade de construir este vale a partir de linhas de força lançadas na vizinhança do vale. A expectativa nestes trabalhos era de que tais linhas de força tangenciariam o vale que seria uma espécie de envoltória. Como veremos isto só ocorre quando as trajetórias coincidem ou estão muito próximas. Quando isto ocorre, esta trajetória é denominada trajetória coletiva ótima ou simplesmente trajetória coletiva.

- RESULTADOS E GRÁFICOS

A região I, onde $Z < 1$ não nos interessa por ter apenas um ponto de mínimo como mostra a figura I-1.

Nesta região nós temos basicamente a prevalência dos termos harmônicos do potencial na região física $X^2+Y^2<2$.

REGIÃO II - $2 > Z \geq 1$

Nesta região há uma inversão da constante elástica do termo quadrático em X. Isto fez com que o ponto de mínimo se desloque transformando a origem num ponto de sela (Figura II-1).

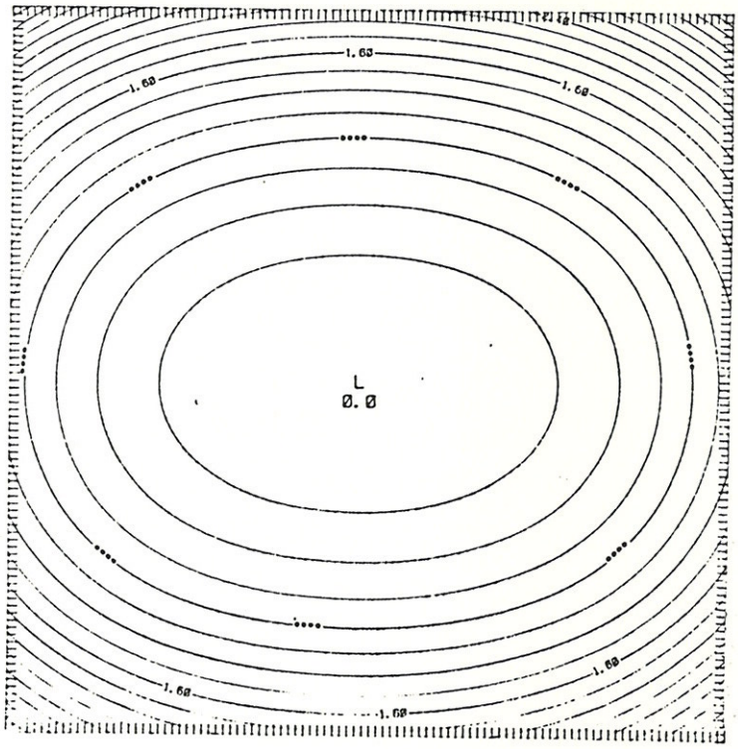


Figura I-1

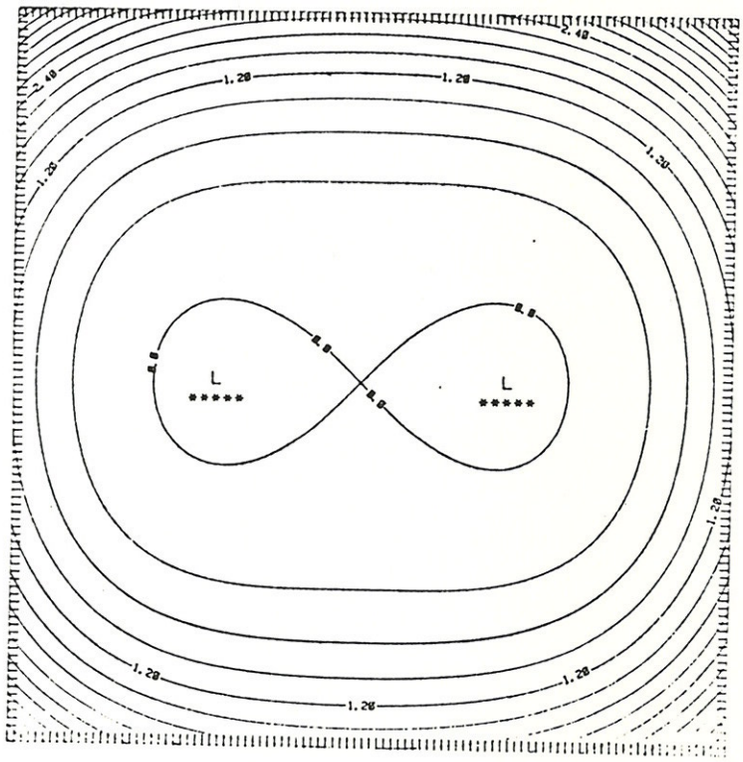


Figura II-1

Na Região II as trajetórias coincidem e temos uma trajetória coletiva dada pelo segmento de reta do eixo X que une o ponto de sela ao ponto de mínimo. Como neste caso a coordenada $Y = 0, (q^2 = 0, \beta_2 = 0)$, apenas os dois níveis inferiores estão ocupados.

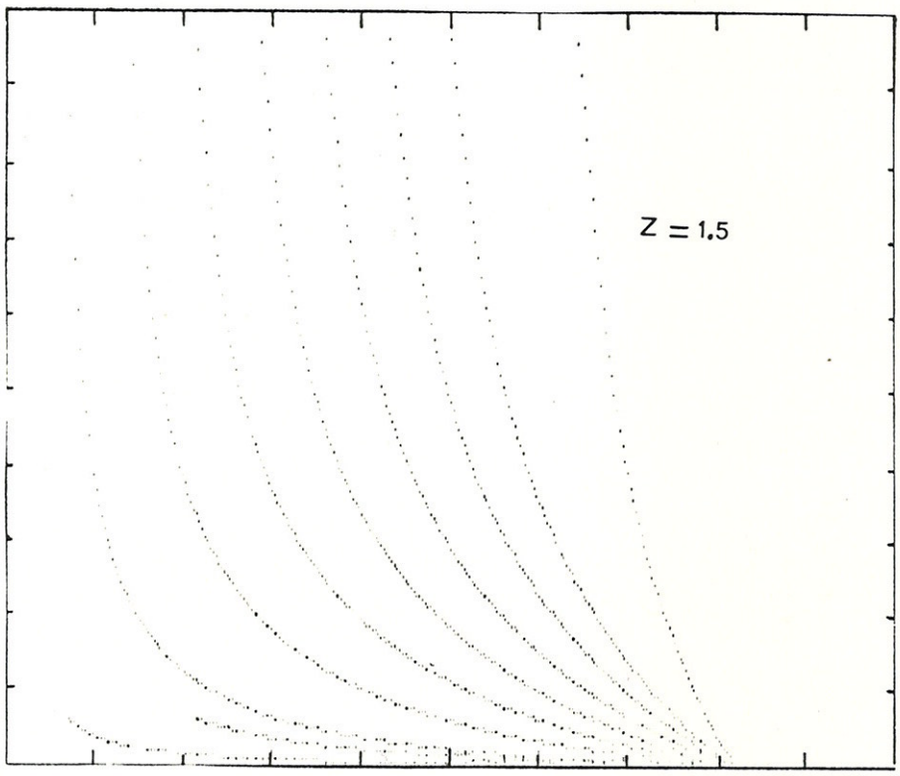


Figura II-2

Na Figura II-2 temos várias linhas de força que se aproximam do ponto de mínimo tangenciando o vale dado pela reta $Y = 0$.

REGIÃO III - $3 > Z > 2$

Para estes valores de Z a superfície de energia apresenta dois mínimos, dois pontos de sela e um ponto de máximo. Esta estrutura dos pontos críticos está na Figura III-1. Pa

ra todos os cálculos desta secção usamos Z = 2.5.

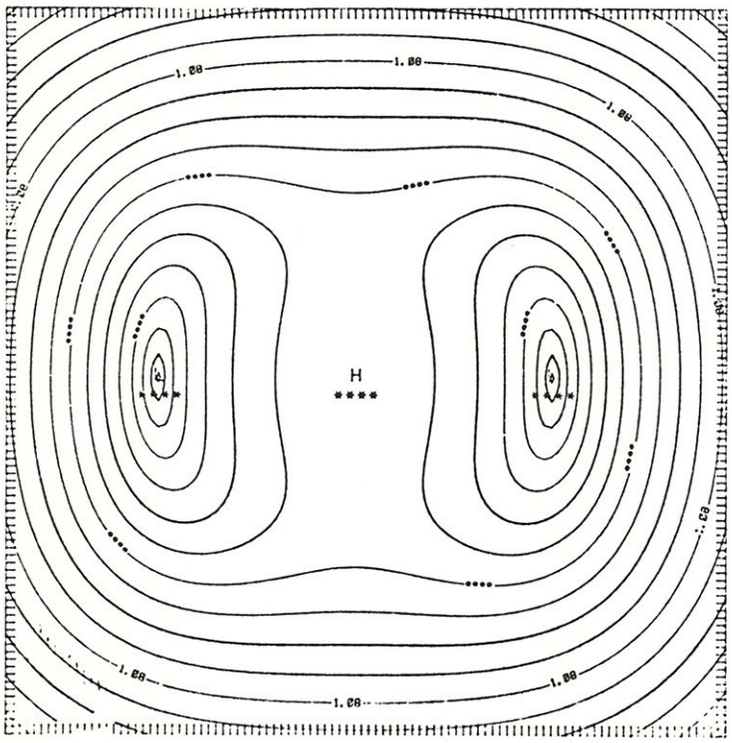


Figura III-1

Na Figura III-2 exibimos trajetórias extremais no primeiro quadrante. Os vales e cumes minimais foram mostrados explicitamente.

Na Figura III-3 temos diversas linhas de força lançadas de vários pontos. Sendo que uma delas foi lançada de de um ponto do vale próximo ao ponto de sela. Esta linha separa linhas de força com "concavidades" diferentes e é representada por uma linha tracejada.

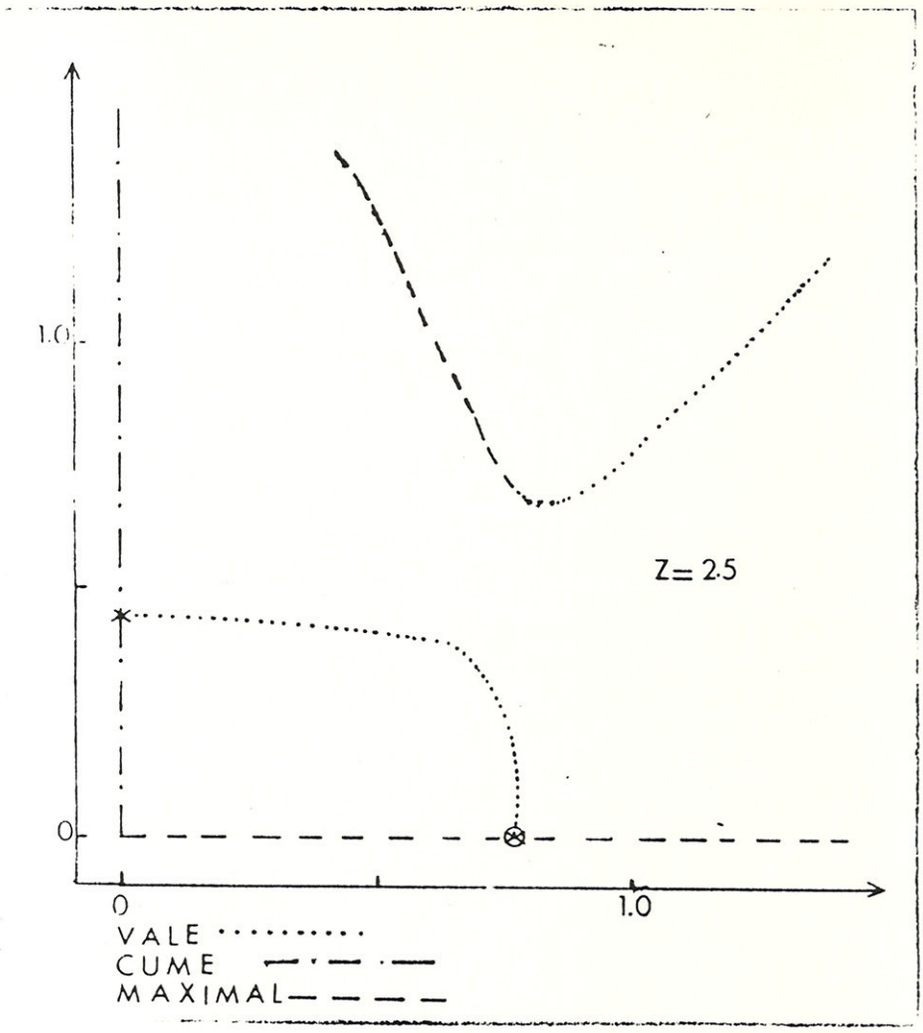


Figura III-2

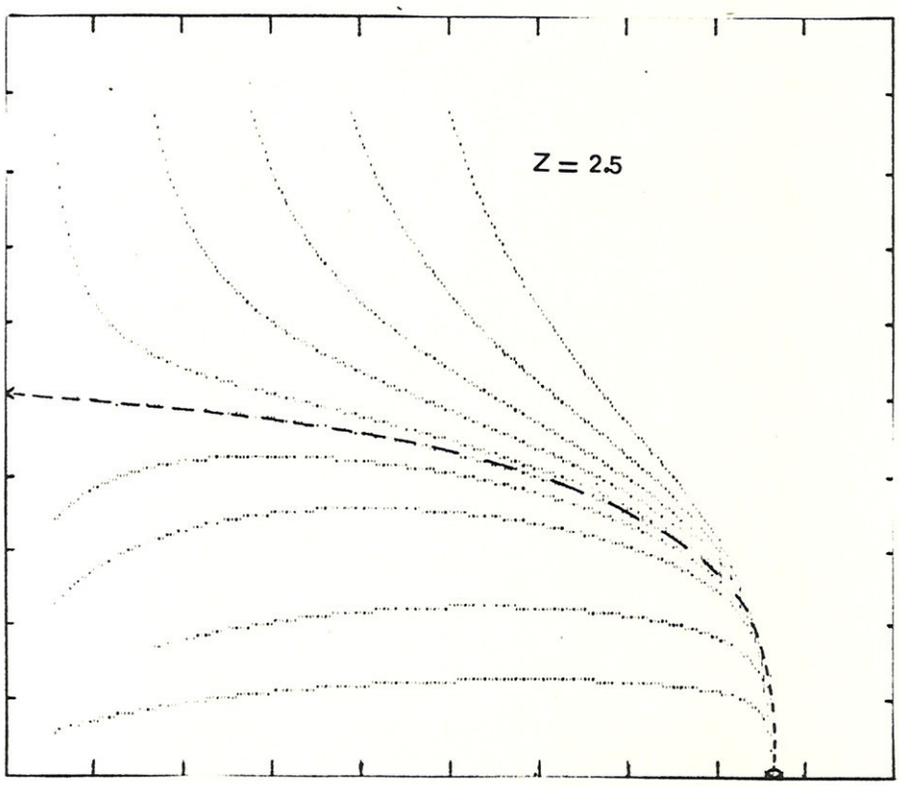


Figura III-3

Poderíamos ser tentados a identificá-la com o vale, mas como se vê na figura III-4, esta curva se afasta do vale e se aproxima novamente na vizinhança do ponto de mínimo.

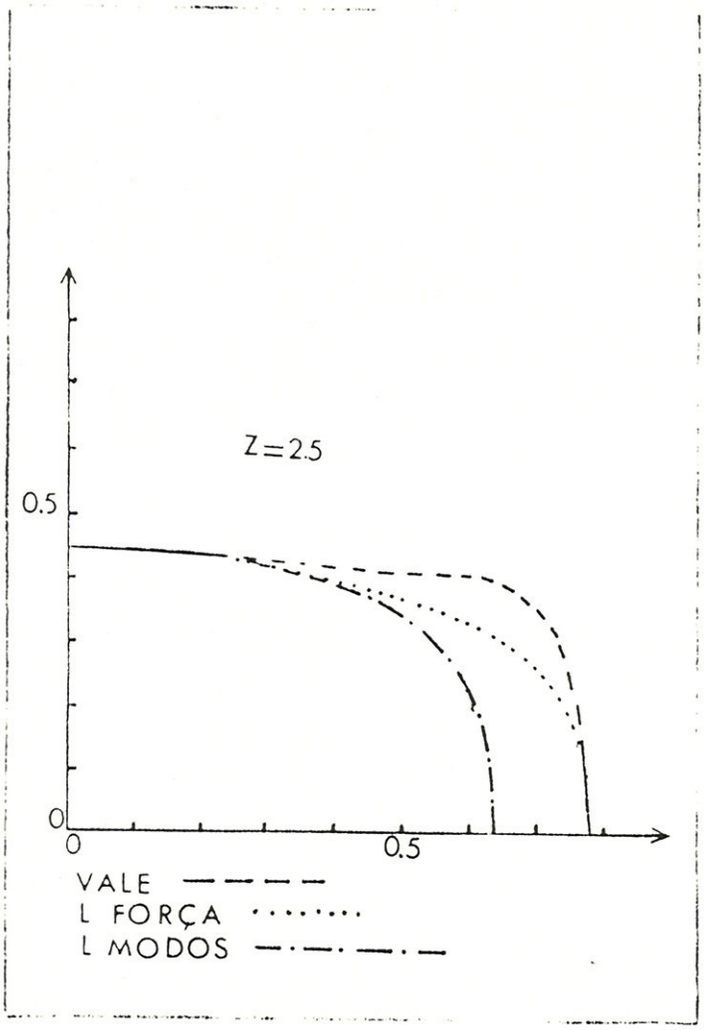


Figura III-4

Na mesma figura temos uma linha de modos normais lançada do ponto de sela $(0, \sqrt{\frac{Z-2}{Z}})$ que se afasta mais do vale e não alcança o ponto de mínimo. Na Figura III-5 lançamos uma linha de modos normais a partir do ponto de mínimo. A curva se mantém praticament sobre o vale até a região de curvatura mais pronunciada, quando então se afasta.

Percorrendo o vale a partir do ponto de mínimo no eixo X (na figura ⊗), observa-se que ele é quase paralelo ao eixo Y até a região de curvatura mais pronunciada. Ultrapassando a região de curvatura o vale segue agora quase paralelo ao eixo X.

Fora da região de curvatura pode-se aproximar o vale por retas paralelas aos eixos. Nesta aproximação a região de curvatura corresponderia a uma transição súbita de um grau de liberdade (coordenada X) para o ortogonal (coordenada Y). Do ponto de vista microscópico teríamos um modo onde ocorreriam

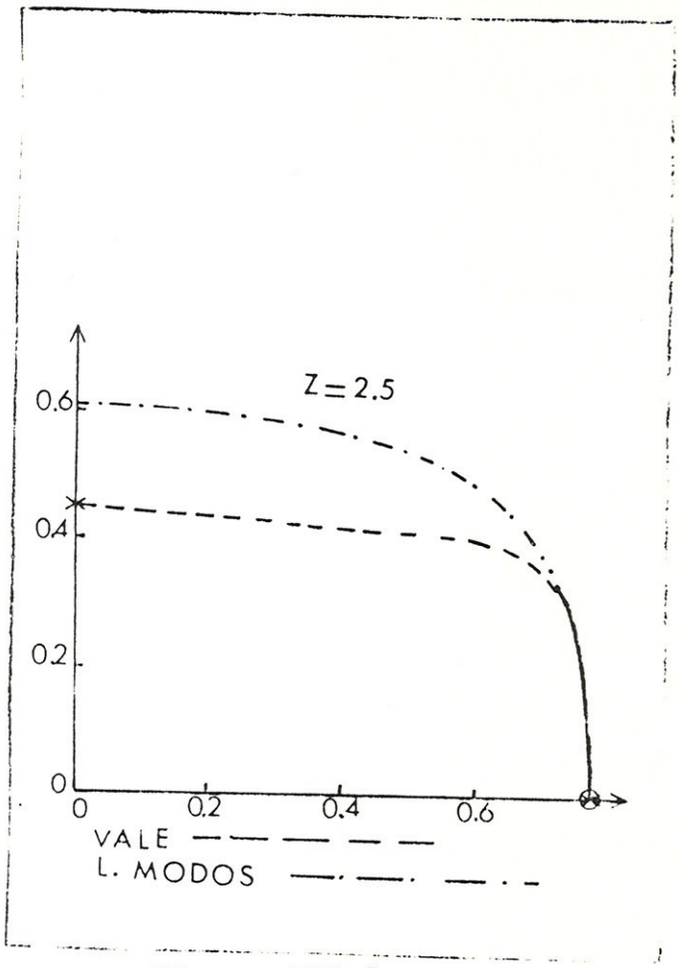


Figura III-5

transições apenas entre o nível 1 e 3 (variação da coordenada Y) e um modo com transições entre os níveis 1 e 2. Na região de curvatura as transições ocorreriam entre os três níveis.

As figuras III-4 e III-5 mostram ainda que a linha de modos prefere descrever o grau de liberdade associado a coordenada Y pois quando lançada do ponto de sela, se encurva rapidamente enquanto que quando é lançada do ponto de mínimo se encurva suavemente. Isto é, a linha de modos é sensível à mudança de um modo para outro mas tende a ficar paralela ao modo associado à freqüência mais baixa no ponto de mínimo.

REGIÃO IV - Z > 3

Nesta região três valores de Z serão tratados: Z = 3.5, 7.0, 10. A estrutura das equipotenciais é a mesma para os três parâmetros e por isso mostraremos apenas a equipotencial para Z = 3.5, ver Figura IV-1.

Onde se vê quatro pontos de mínimo simétricos em $(\pm\sqrt{\frac{2}{3}}, \pm\sqrt{\frac{2Z-6}{2Z}})$ e quatro pontos de sela: $(0, \pm\sqrt{\frac{Z-2}{Z}})$ e $(\pm\sqrt{\frac{Z-1}{Z}}, 0)$.

Uma vez mais a simetria nos permite analisar

apenas o primeiro quadrante.

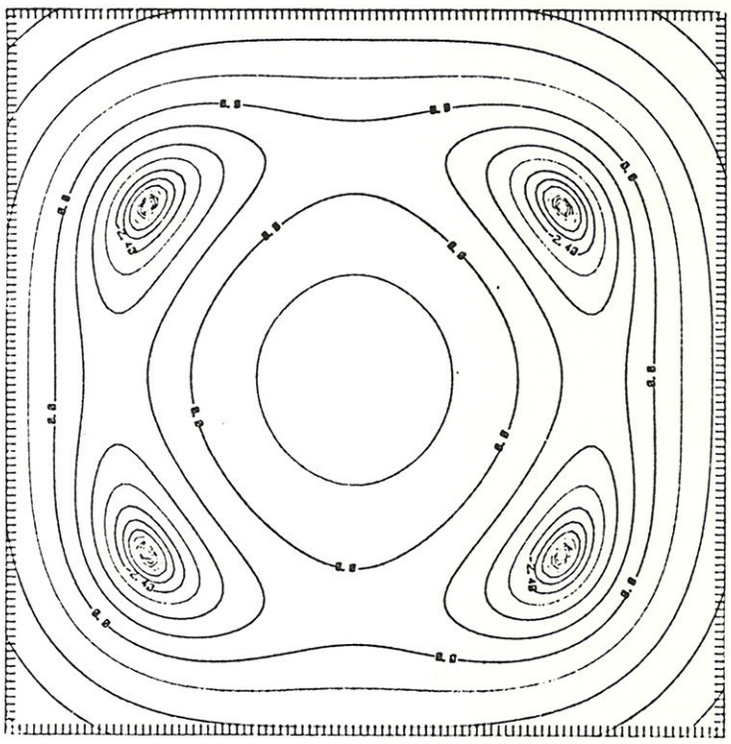


Figura IV-1

Seguindo a mesma sistemática anterior, mostramos na Figura IV-2 as linhas de força para Z = 3.5

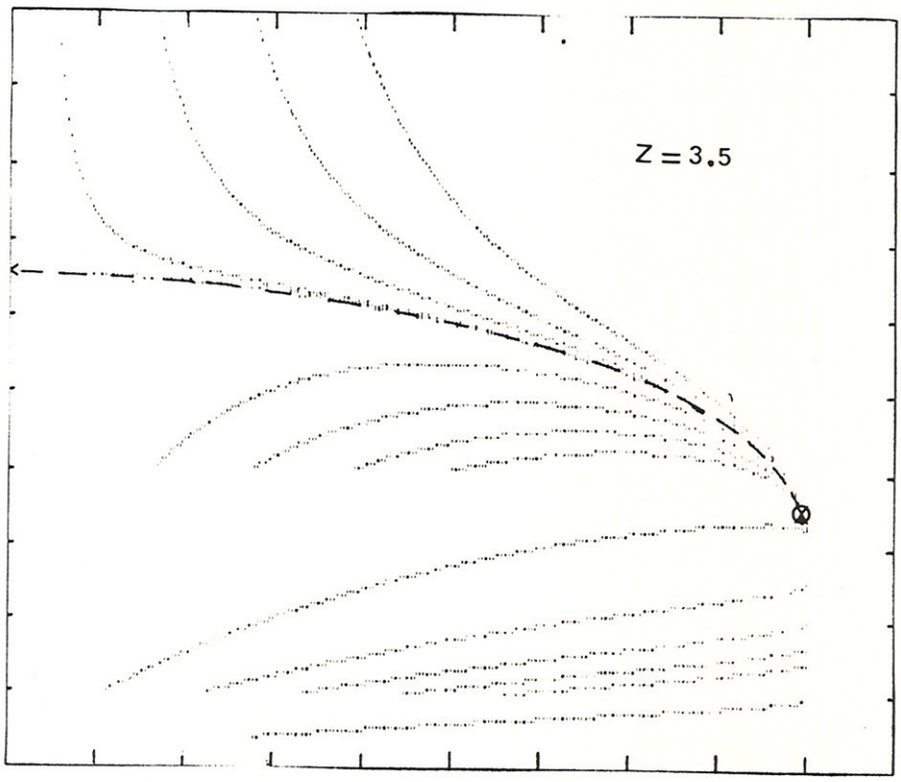


Figura IV-2

A linha traço pontilhada foi lançada de um ponto do vale e separa linhas de força com concavidades opostas, que a tangenciam. Esta linha parece se confundir com o vale que une o ponto de mínimo aos pontos de sela (ver vale na Figura IV-3).

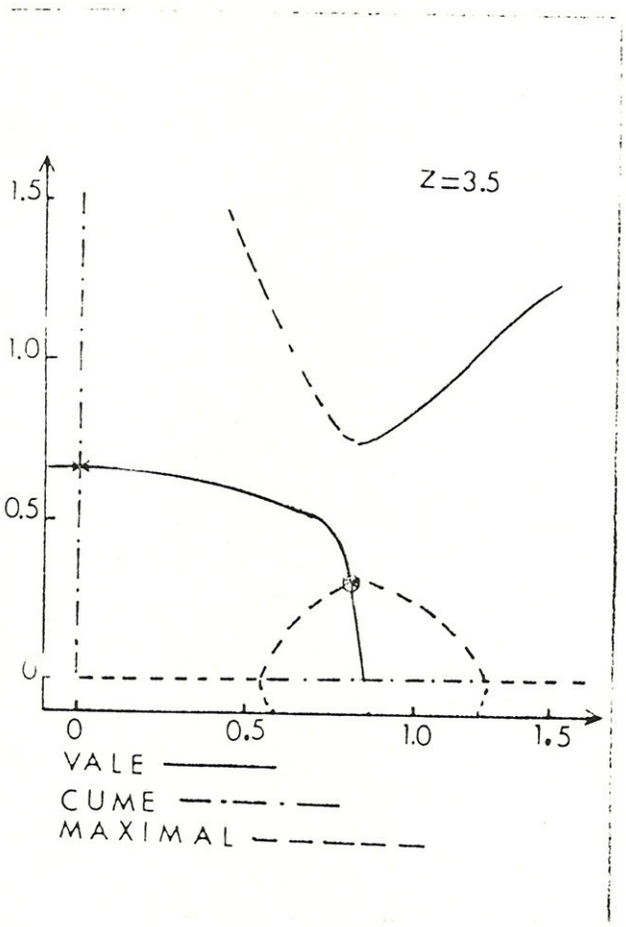


Figura IV-3

Analisando com maior detalhe na Figura IV-4, notamos que esta linha de força e o vale se afastam significativamente na região de curvatura, quando percorremos o vale a partir do ponto de sela no eixo Y. Na figura temos também uma linha de modos normais lançada do mesmo ponto de sela.

Fazendo a mesma análise a partir do ponto de sela no eixo X, vemos que na região que vai deste ao ponto de mínimo as três trajetórias colapsam numa única. Podemos concluir que nesta região temos uma trajetória ótima, isto é, um grau de liberdade coletivo desacoplado (Ver Figura IV-5).

Ainda nesta figura temos o restante do vale e uma trajetória de modos normais lançada do ponto de mínimo na direção do ponto de sela superior. Como se vê uma extensão para grande amplitude do modo coletivo de RPA, se afasta bastante do vale nesta região.

Já na região coletiva a extensão se dá corretamente, i.é., quando lançada na direção do eixo X ela coincide com as outras trajetórias.

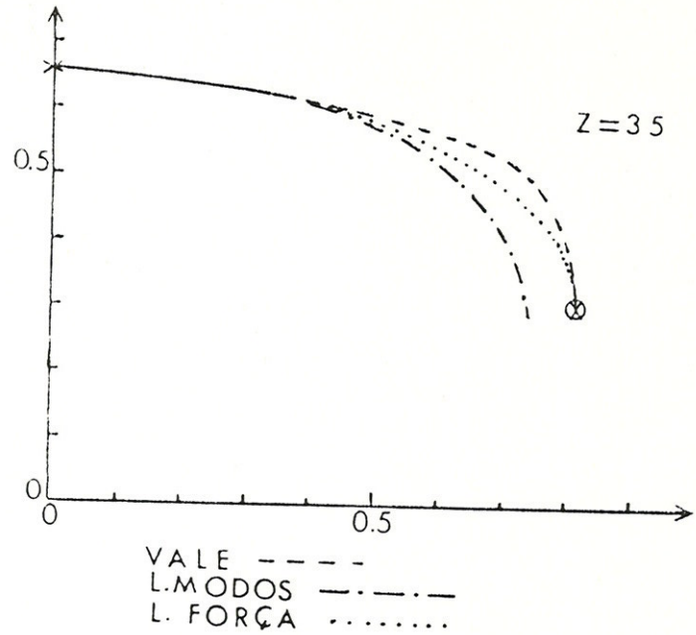


Figura IV-4

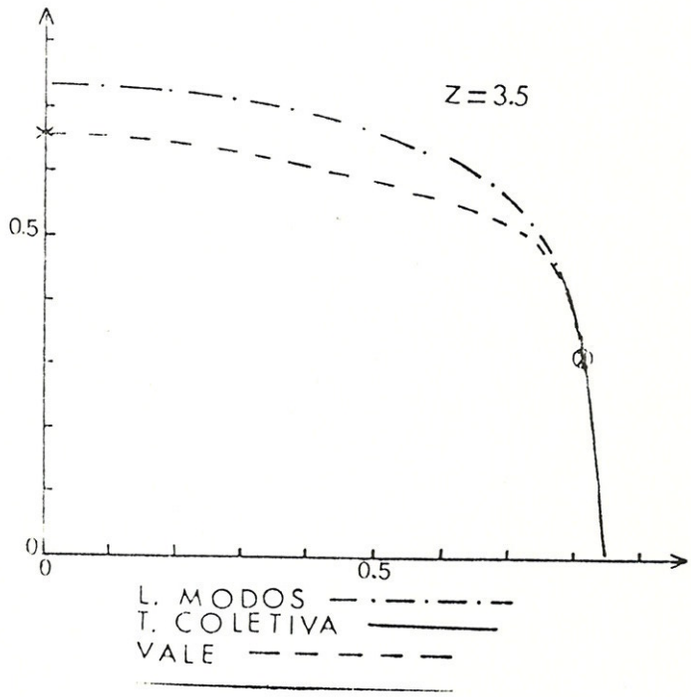


Figura IV-5

Obtivemos também as trajetórias para Z = 7. Neste caso a estrutura das equipotenciais e das linhas de força é semelhante ao caso anterior. Desta forma mostraremos apenas o compor-

tamento das trajetórias na vizinhança do vale.

Na Figura IV-6 temos as trajetórias lançadas do ponto de sela superior. Observa-se que para este parâmetro as trajetórias estão muito próximas. Na região de curvatura mais pronunciada, não se percebe a diferença entre vale e linha de força, mas a linha de modos se afasta do vale não alcançando o ponto de mínimo

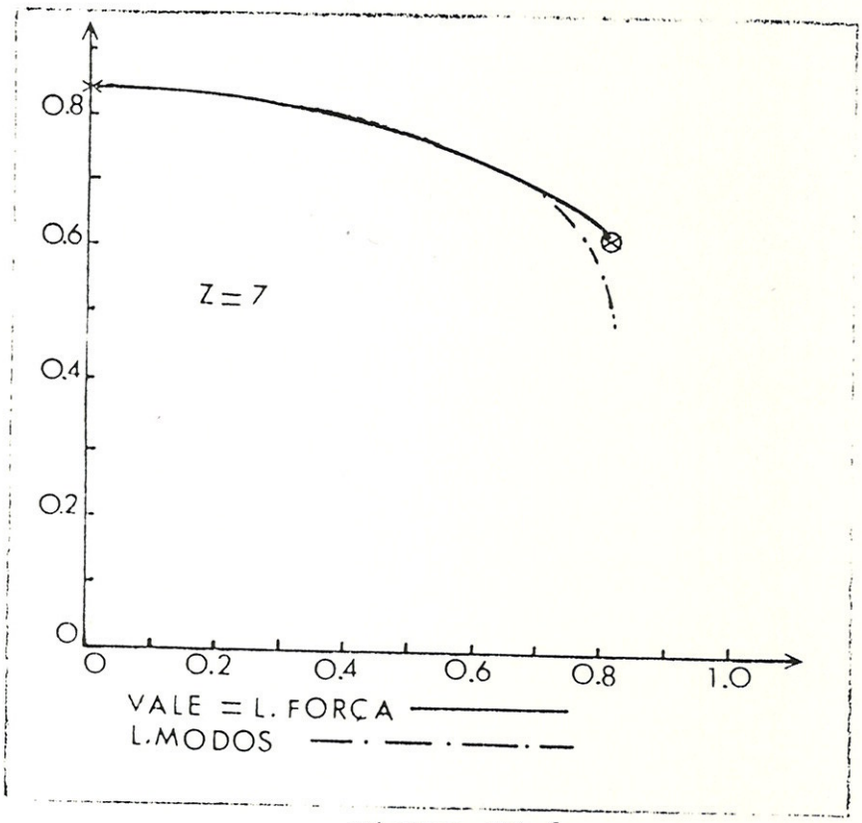


Figura IV-6

Quando lançamos as trajetórias do ponto de sela inferior, temos mais uma vez que na região que liga este ponto de sela ao ponto de mínimo as três trajetórias colapsam configurando uma trajetória coletiva ótima (Figura IV-7).

Ainda na Figura IV-7 lançamos a linha de modos normais a partir do ponto de mínimo. Na direção do ponto de sela inferior (região coletiva) a linha de modos permanece sobre o vale. Já na direção do ponto de sela superior ela se afasta do vale mas não fica tão distante como no caso de Z = 3.5.

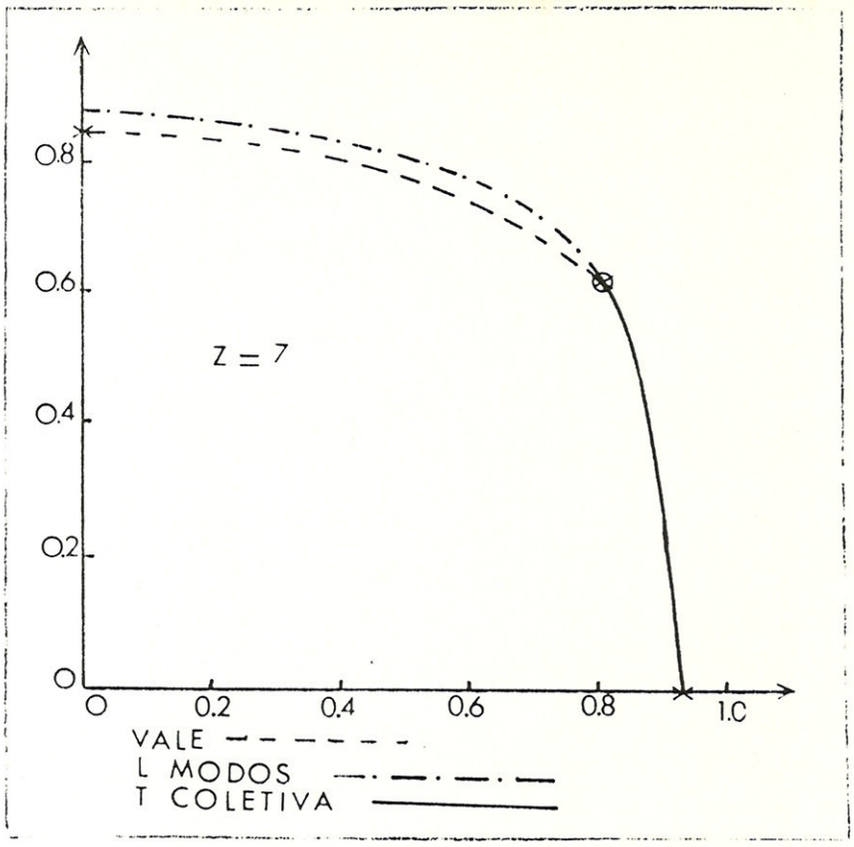


Figura IV-7

Em todos os casos observa-se que as diferenças mais significativas se dão quando há uma curvatura pronunciada (mudança abrupta de grau de liberdade) e que a linha de modos normais é mais sensível à estas mudanças.

Neste modelo a medida que Z cresce o ponto de sela superior se afasta da origem, subindo no eixo Y, isto faz com que o vale tenha uma curvatura menos pronunciada. Assim para maiores valores de Z todo o vale tende a ser uma trajetória coletiva. Na figura abaixo temos a trajetória coletiva (L de força = L de Modos = Vale) para Z = 10, com algumas linhas de força tangenciando o vale sem cruzá-lo.

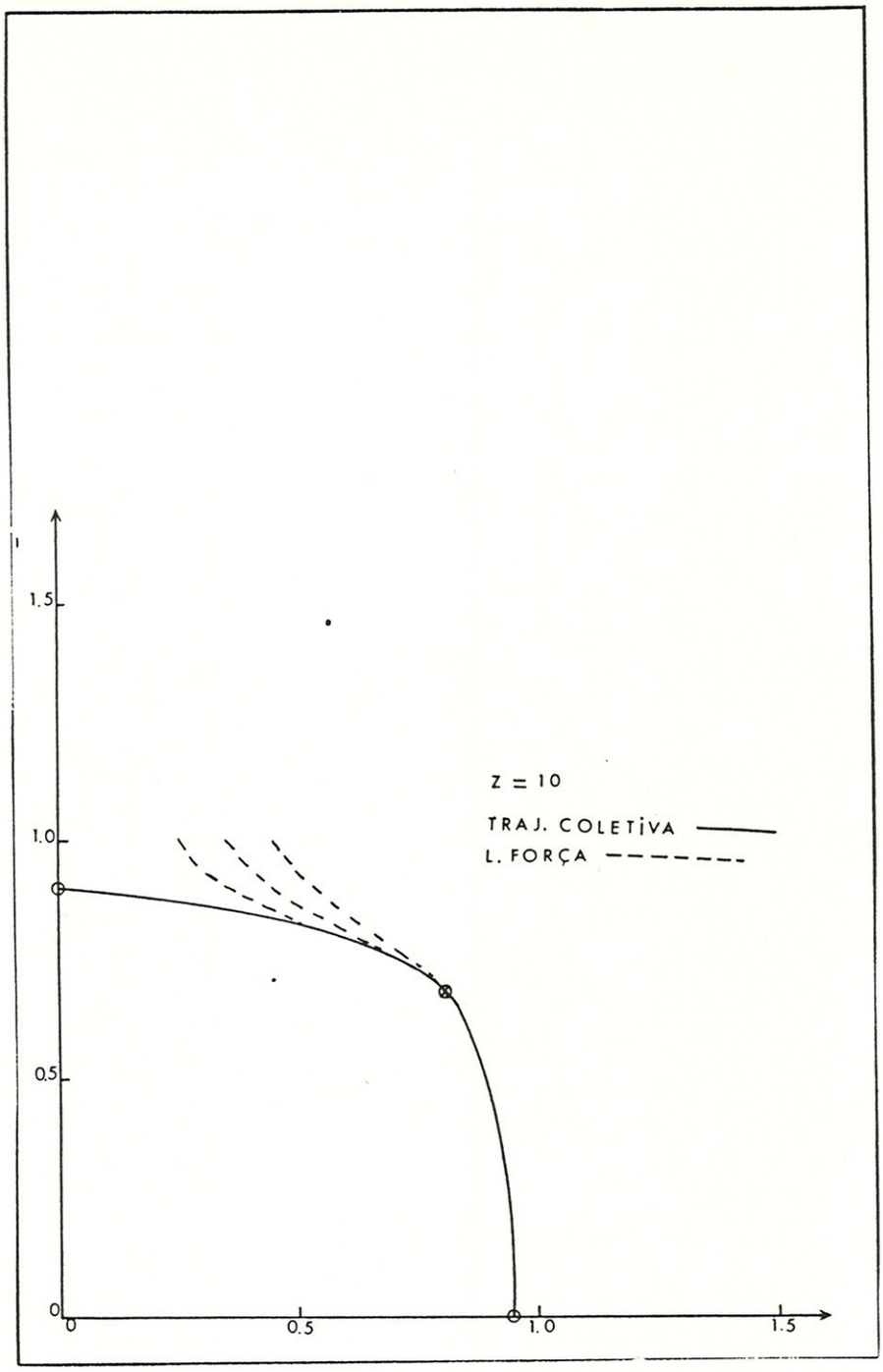


Figura IV-8

COMENTÁRIOS FINAIS

As diversas propostas de trajetórias coletivas apresentadas na literatura foram obtidas e comparadas a partir de uma análise cuidadosa da dinâmica local. Este enfoque local nos permitiu interpretar a trajetória de Villars como resultante de considerações de desacoplamento em primeira ordem na hamiltoniana local enquanto que as trajetórias de Rowe Bassermann e a Linha de Modos Normais surgem de considerações de desacoplamento em 2ª ordem.

Nós especificamos nossa análise para hamiltonianas quadráticas nos momentos, mas isto não é necessário neste enfoque. Entretanto deve-se frisar que as condições de validade apresentadas no Capítulo V são restritas a este tipo de hamiltoniana.

A generalização desta análise para hamiltonianas mais gerais e a quantização da dinâmica coletiva são problemas que deixamos em aberto.

Aqui, não apresentamos a análise comparativa entre nosso enfoque e a proposta de Marumori. Esta análise pode ser encontrada em E.J.V. de Passos e F.F. de Souza Cruz[52].

APÊNDICE A

HARTREE FOCK DEPENDENTE DO TEMPO NA APROXIMAÇÃO DE BAIXOS MOMENTOS

A equação variacional (II-1)

$$\delta \int \langle \Psi(t) | \hat{H} - i\partial_t | \Psi(t) \rangle \, dt = 0 \tag{A-1}$$

gera equações de Hartree Fock dependente do tempo quando os estados variacionais $|\psi_{(t)}\rangle$ são determinantes de Slater e a variação $\delta|\psi_{(t)}\rangle$ é efetuada com operadores de um corpo.

Quando os estados são parametrizados

$$|\Psi(t)\rangle \equiv |\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle$$

a equação variacional A-1 se transforma em

$$\delta \int \langle \Psi(\bar{q},\bar{p}) | \hat{H} - \dot{q}^\alpha \hat{P}_\alpha(\bar{q},\bar{p}) + \dot{p}_\alpha \hat{Q}^\alpha(\bar{q},\bar{p}) | \Psi(\bar{q},\bar{p}) \rangle \, dt \tag{A-2}$$

(com soma nos índices repetidos).

É sempre possível (Ver [22]) obter uma parametrização tal que

$$\langle \Psi(\bar{q},\bar{p}) | \hat{Q}^\alpha | \Psi(\bar{q},\bar{p}) \rangle = - \frac{\partial S(\bar{q},\bar{p})}{\partial p_\alpha} \tag{A-3}$$

$$\langle \Psi(\bar{q},\bar{p}) | \hat{P}_\alpha | \Psi(\bar{q},\bar{p}) \rangle = p_\alpha + \frac{\partial S(\bar{q},\bar{p})}{\partial q^\alpha} \tag{A-4}$$

onde deixamos implícita a dependência de $\hat{Q}^\alpha$ e $\hat{P}_\alpha$ com os parâmetros e $S_{(\vec{q},\vec{p})}$ é uma função arbitrária.

Quando substituimos (A-3) e (A-4) na equação (A-2) obtém-se

$$\delta \int \left(\mathcal{H}(\bar{q},\bar{p}) - p_\alpha \dot{q}^\alpha \right) dt = 0 \tag{A-5}$$

onde desprezamos a derivada total com relação ao tempo

$$\frac{\partial S}{dt} \quad \text{e} \quad \mathcal{H}(\bar{q},\bar{p}) = \langle \Psi(\bar{q},\bar{p}) | \hat{H} | \Psi(\bar{q},\bar{p}) \rangle$$

A equação (A-5) gera óbviamente equações de movimento do tipo clássico (equações de Hamilton) para os parâmetros

$$\dot{q}^\alpha = \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{q},\bar{p})}{\partial p_\alpha} \tag{A-6.a}$$

$$\dot{p}_\alpha = - \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{q},\bar{p})}{\partial q^\alpha} \tag{A-6.b}$$

A equação variacional (A-1) também nos dá a equação

$$\delta \langle \Psi(t) | \hat{H} - i\partial_t | \Psi(t) \rangle = 0$$

que se transforma numa equação variacional de Hartree Fock com vínculos quando escrita em termos dos parâmetros

$$\delta \langle \Psi(\bar{q},\bar{p}) | \hat{H} - \dot{q}^\alpha \hat{P}_\alpha + \dot{p}_\alpha \hat{Q}^\alpha | \Psi(\bar{q},\bar{p}) \rangle \tag{A-8}$$

Esta última equação é denominada equação de trajetória.

Na aproximação baixos momentos as equações de movimento (A-6) são calculadas até segunda ordem nos $p_{\alpha,s}$.

Nesta aproximação a hamiltoniana $\mathcal{H}(\vec{q},\vec{p})$ é

$$\hat{\mathcal{H}}(\bar{q},\bar{p}) = \frac{1}{2} B^{\alpha\beta}(\bar{q})\, p_\alpha p_\beta + V(\bar{q}) \tag{A-9}$$

onde

$$B^{\alpha\beta}(\bar{q}) = \left.\frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{q},\bar{p})}{\partial p_\alpha\, \partial p_\beta}\right|_{\bar{p}=0} \tag{A-10}$$

$$V(\bar{q}) = \langle \Psi(\bar{q},\bar{p}) | \hat{H} | \Psi(\bar{q},\bar{p}) \rangle |_{\bar{p}=0} \tag{A-11}$$

As equações de movimento são neste caso

$$\dot{q}^\alpha = B^{\alpha\beta}(\bar{q})\, p_\beta \tag{A-12.a}$$

$$\dot{p}_\alpha = - V_\alpha(\bar{q}) - \frac{p_\mu p_\beta}{2} \frac{\partial B^{\mu\beta}(\bar{q})}{\partial q^\alpha} \tag{A-12.b}$$

onde

$$V_\alpha(\bar{q}) = \frac{\partial V(\bar{q})}{\partial q^\alpha} \tag{A-13}$$

Para o cálculo da equação de trajetória nesta aproximação os estados variacionais devem ser expandidos em potências de p_s

$$|\Psi(\bar{q},\bar{p})\rangle = \left(1 + i\, p_\alpha \hat{Q}^\alpha - \frac{p_\alpha p_\beta}{2!} \left[\hat{Q}^\alpha \hat{Q}^\beta + i \frac{\partial \hat{Q}^\alpha}{\partial p_\beta}\right]\right) |\Psi(\bar{q})\rangle \tag{A-14}$$

Substituindo (A-14) em (A-2) e separando os termos em potências de p_s obtém-se

$$\text{I} - \quad \delta \langle \Psi(\bar{q}) | \hat{H} - \nu_\alpha \hat{Q}^\alpha | \Psi(\bar{q}) \rangle = 0$$

$$\text{II} - \quad \delta \langle \Psi(\bar{q}) | [\hat{H}, i\hat{Q}^\alpha] - B^{\alpha\beta}(\bar{q}) \hat{P}_\beta | \Psi(\bar{q}) \rangle = 0$$

$$\delta \langle \Psi(\bar{q}) | [\hat{Q}^\alpha, [\hat{H}, \hat{Q}^\beta]] + [\hat{H}, i \frac{\partial \hat{Q}^\alpha}{\partial p_\beta}] + 2 B^{\mu\beta}(\bar{q}) \frac{\partial \hat{Q}^\alpha}{\partial q^\mu} -$$

$$- \frac{\partial B^{\alpha\beta}(\bar{q})}{\partial q^\mu} \frac{\hat{Q}^\mu}{2} | \Psi(\bar{q}) \rangle = 0 \qquad \text{(A-15)}$$

Nas equações I, II e (A-15) as expressões de $\dot{q}^\alpha$ e $\dot{p}_\alpha$ foram substituidas pelas equações (A-8).

As equações I e II são respectivamente de ordem zero e um nos momentos e (A-15) é de ordem dois.

As equações I, II juntamente com

$$\text{III} - \quad \langle \Psi(\bar{q}) | [\hat{Q}^\alpha, \hat{P}_{\alpha'}] | \Psi(\bar{q}) \rangle = i \, \delta^\alpha_{\alpha'}$$

$$\text{IV} - \quad \hat{P}_{\alpha'}(\bar{q}) | \Psi(\bar{q}) \rangle = + i \frac{\partial}{\partial q^\alpha} | \Psi(\bar{q}) \rangle$$

são denominadas na literatura equações de Villars[6,14,23] ou equações de Hartree Fock Dependente do tempo na aproximação adiabática denotada por HFDTA.

APÊNDICE B

MEDIDA INVARIANTE E ESTRUTURA SIMPLÉTICA

A transformação unitária U(Z) introduzida no capítulo III

$$U(Z) = \begin{bmatrix} (1+Z^{+}Z)^{-1/2}_{ij} & -[Z^{+}(1+ZZ^{+})^{-1/2}]_{in} \\ [Z(1+Z^{+}Z)^{-1/2}]_{mn} & [1+ZZ^{+}]^{-1/2}_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \qquad \text{(B-1)}$$

quando atua sobre um estado $|Z)$ gera um novo estado $|Z')$. Isto é, gera uma transformação de coordenadas de Z para Z'. ($Z \equiv [Z_{mi}]$, $Z' \equiv [Z'_{mi}]$ são matrizes e i,j [m.n] são índices de buraco [partícula]).

Pode-se mostrar que as novas e velhas coordenadas, Z' e Z, obedecem à seguinte relação (ver referência [29]).

$$Z'(A+BZ) = (C+DZ) \qquad \text{(B-2)}$$

Um elemento de volume no espaço de parâmetros Z é definido por

$$dV = \mu(Z) \prod_{mi} dZ_{mi}\, dZ^{*}_{mi} \qquad \text{(B-3)}$$

onde

$$\prod_{mi} dZ_{mi}\, dZ^{*}_{mi} = \prod \frac{d(\mathrm{Re}\, Z_{mi})\; d(\mathrm{Im}\, Z_{mi})}{i\,\pi}$$

UNIVERSIDADE DE SÃO P
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
827
INSTITUTO DE FÍS

O fator μ(Z) em (B-3) é uma medida invariante

por transformações de coordenadas que satisfazem (B-2).

Isto é $\mu(Z)$ deve obedecer

$$\mu(Z) = \mu(Z') \, |J(Z',Z)| \tag{B-4}$$

onde $|J(Z',Z)|$ é o determinante do Jacobiano da transformação, $J(Z',Z)$, de Z para Z'.

Uma expressão para $\mu(Z)$ pode ser obtida calculando (B-4) para Z' = 0. Isto é

$$\mu(Z) = \mu(0) \, |J(0,Z)| \tag{B-5}$$

onde $\mu(0)$ é uma constante que pode ser calculada impondo condições adicionais (ver Capítulo III).

Diferenciando a equação (B-2) obtém-se

$$dZ'(A + BZ) + Z'B\,dZ = D\,dZ \tag{B-6}$$

Expressando Z em função de Z' nós temos

$$Z = (D - Z'B)^{-1}(Z'A - C) \tag{B-7}$$

Substituindo (B-7) em (B-6) obtemos

$$dZ'(A + B[D - Z'B]^{-1}[Z'A - C]) + Z'B\,dZ = D\,dZ \tag{B-8}$$

fazendo Z' = 0 e escrevendo (B-8) explicitamente

$$dZ'_{mi} \, [A - BD^{-1}C]_{ij} = D_{mn} \, dZ_{nj}$$

de onde

$$\left.\frac{dz'_{mi}}{dz_{nj}}\right|_{z'_{mi}=0} = D_{mn}\,[A - BD^{-1}C]^{-1}_{ij} \tag{B-9}$$

Substituindo as formas explícitas de A,B,C e D dadas em (B-1) temos

$$(A - BD^{-1}C)_{ji} = (1 + z^{+}z)^{1/2}_{ji}$$

o que nos dá

$$\left.\frac{dz'_{mi}}{dz_{nj}}\right|_{z'=0} = (1 + z\,z^{+})^{-\frac{1}{2}}_{mn} \otimes (1 + z^{+}z)^{-\frac{1}{2}}_{ji} \tag{B-10}$$

$$|J(0,z)| = \det\left\{(1 + z\,z^{+})^{-1}_{mn} \otimes (1 + z^{+}z)^{-1}_{ji}\right\}$$

A medida invariante pode ser escrita como

$$\mathcal{H}(z) = \mathcal{H}(0)\left[\det(1 + z z^{+})\right]^{-n_p - n_b} \tag{B-11}$$

onde n_p (n_b) é o número de estados de partícula (buraco).

- <u>Estrutura Simplética</u>

No Capítulo IV nós definimos a estrutura simplética a partir de

$$\sigma^{mi;nj} = \frac{\partial^2 \ln \langle z|z\rangle}{\partial z^{*}_{mi}\,\partial z_{nj}} \tag{B-12}$$

Lembrando que

$$\langle z | z \rangle = \det (1 + z z^{+}) \tag{B-13}$$

A forma explícita de $\sigma^{mi;nj}$ pode ser calculada tomando a derivada de (B-13) o que nos dá (detalhes do cálculo podem ser encontrados em [32])

$$\sigma^{mi;nj} = (1 + z z^{+})^{-1}_{mn} \otimes (1 + z^{+} z)^{-1}_{ji} \tag{B-14}$$

enquanto que a inversa

$$\sigma_{mi;nj} = \{ z^{+}_{jn}, z_{mi} \} = (1 + z z^{+})_{mn} \otimes (1 + z^{+} z)_{ij} \tag{B-15}$$

é o parêntesis generalizados de Poisson.

De onde se pode escrever a medida invariante como

$$\mu(z) = \mu(0) \left(\det \{ z^{+}_{jn}, z_{mi} \} \right)^{-1} \tag{B-17}$$

e o elemento de volume como

$$dV = \mu(0) \left(\det \{ z^{+}_{jn}, z_{mi} \} \right)^{-1} \prod_{mi} dz_{mi} \, dz^{*}_{mi} \tag{B-18}$$

De (B-17) conclue-se que as transformações unitárias preservam a estrutura simplética, isto é, são transformações canônicas generalizadas, e dV em (B-18) é o invariante integral de Poincaré[46,47].

APÊNDICE C

VALORES MÉDIOS DE OPERADORES

Neste apêndice vamos mostrar os valores esperados de operadores de um corpo e da hamiltoniana de muitos corpos em determinantes de Slater na representação de Thouless e de Bosons.

Estas expressões foram tiradas de Blaizot-Orland[29].

Para um estado

$$|Z\rangle = \exp \sum_{mi} Z_{mi}\, a^{+}_{m} a_{i} \; |\phi_0\rangle$$

a matriz densidade de um corpo é

$$\rho_{\alpha\beta}(Z,Z^{*}) = \frac{\langle Z|\, a^{+}_{\beta} a_{\alpha} |Z\rangle}{\langle Z|Z\rangle} \tag{C-1}$$

com α e β genéricos.

Pode-se ainda escrever valores médios de operadores de dois corpos em termos de $\rho_{\alpha\beta}$.

$$\frac{\langle Z|\, a^{+}_{\alpha} a^{+}_{\beta} a_{\gamma} a_{\delta} |Z\rangle}{\langle Z|Z\rangle} = \rho_{\delta\alpha}(Z,Z^{*})\, \rho_{\gamma\beta}(Z,Z^{*}) - \rho_{\delta\beta}(Z,Z^{*})\, \rho_{\gamma\alpha}(Z,Z^{*}) \tag{C-2}$$

As formas explícitas de são

$$\rho_{mi} = Z_{mi'} \left(1 + Z^{+}Z\right)^{-1}_{i'i} \tag{C-3}$$

$$\rho_{im} = \left(1 + Z^{+}Z\right)^{-1}_{ij} Z^{+}_{jm} \tag{C-4}$$

$$\rho_{mn} = (Z(1+Z^{+}Z)^{-1}Z^{+})_{mn} \tag{C-5}$$

$$\rho_{ij} = (1+Z^{+}Z)^{-1}_{ij} \tag{C-6}$$

onde Z e Z^{+} são as matrizes cujos elementos são

$$Z \equiv Z_{mi}$$
$$Z^{+} = Z^{*}_{im}$$

Se tomarmos a representação bosônica

$$\rho_{\alpha\beta}(\beta,\beta^{*}) = \frac{\langle\beta|\, a^{+}_{\beta} a_{\alpha}\, |\beta\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}$$

teremos

$$\rho_{mi} = [\beta(1+\beta^{+}\beta)^{1/2}]_{mi} \tag{C-7}$$

$$\rho_{im} = \rho^{*}_{mi} \tag{C-8}$$

$$\rho_{mn} = (\beta\beta^{+})_{mn} \tag{C-9}$$

$$\rho_{ij} = \delta_{ij} - (\beta^{+}\beta)_{ij} \tag{C-10}$$

Uma hamiltoniana genérica de muitos corpos pode ser escrita em linguagem de segunda quantização como [1,2]

$$\hat{H} = \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a^{+}_{\nu} a_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} V_{\mu\nu\mu'\nu'}\, a^{+}_{\mu} a^{+}_{\nu} a_{\nu'} a_{\mu'} \tag{C-11}$$

onde

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'} = -V_{\mu\nu\nu'\mu'} = -V_{\nu\mu\mu'\nu'} = V_{\nu\mu\nu'\mu'}$$

Desta expressão obtém-se

$$\mathcal{H}(Z,Z^*) = \frac{\langle Z|\hat{H}|Z\rangle}{\langle Z|Z\rangle} = \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'}\rho_{\nu'\nu} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{\mu\mu'\\ \nu\nu'}} V_{\mu\nu\mu'\nu'}\rho_{\mu'\mu}\rho_{\nu'\nu} \qquad \text{(C-12)}$$

Se a matriz $V_{\mu\nu\mu'\nu'}$, da interação é especificada pode-se obter formas explícitas para $H(Z,Z^*)$.

Para exemplificar vamos tomar a hamiltoniana do modelo de Lipkin

$$H = \frac{\varepsilon}{2}\sum_{\sigma}(a^{+}_{2\sigma}a_{2\sigma} - a^{+}_{1\sigma}a_{1\sigma}) + \frac{1}{2}\sum_{KL} V_{KL}\left(\sum_{\sigma} a^{+}_{K\sigma}a_{L\sigma}\right)^2$$

relembrando a notação do Capítulo III é o número quântico especificado o subnível e varia de 1 até N. L é o número quântico que especifica o nível superior (L = 2) e inferior L = 1 e $V_{KL} = V(1-\delta_{KL})$ [42].

A matriz densidade neste caso deve ser indiciada como

$$\rho_{L\sigma;L'\sigma'} = \frac{\langle Z|\, a^{+}_{L'\sigma'}\, a_{L\sigma}|Z\rangle}{\langle Z|Z\rangle}$$

Visto que para a hamiltoniana do modelo $\sigma' = \sigma$ sempre vamos definir uma nova densidade de matriz

$$\tilde{\rho}_{LL'} = \sum_{\sigma}\rho_{L\sigma;L'\sigma}$$

Utilizando as fórmulas gerais (C-3,4,5,6) nós

temos

$$\tilde{\rho}_{21} = N z / (1 + z z^*)$$

$$\tilde{\rho}_{12} = N z^* / (1 + z z^*)$$

$$\tilde{\rho}_{22} = N z z^* / (1 + z z^*)$$

$$\tilde{\rho}_{11} = N (1 + z z^*)^{-1}$$

O valor médio da hamiltoniana é dado por

$$\mathcal{H}(z z^*) = \frac{\varepsilon}{2} N \left(\frac{\tilde{\rho}_{22} - \tilde{\rho}_{11}}{N} \right) + \frac{V N(N-1)}{2} \left[\frac{(\tilde{\rho}_{21})^2}{N^2} + \frac{(\tilde{\rho}_{12})^2}{N^2} \right]$$

De onde

$$\mathcal{H}(z, z^*) = -\frac{\varepsilon}{2} N \frac{(1 - z z^*)}{(1 + z z^*)} - \frac{V N(1-N)}{2} \left[\frac{z^2 + z^{*2}}{(1 + z z^*)^2} \right] \qquad \text{(C-13)}$$

BIBLIOGRAFIA

[1] D.J. Rowe - Nuclear Collective Motion - Methuen and Co Ltd. (1970).

[2] P. Ring, P. Schuck - The Nuclear Many Body Problem - Springer Verlag (1980).

[3] A.K. Kerman - S. Koonin - Ann. Phys. 100, (1976), 332.

[4] G. Holzwarth - T. Yukawa - Nuc. Phys. A219, (1974), 125.

[5] D.J. Rowe, R. Bassermann - Can. J. Phys. 54, (1976), 1941.

[6] F. Villars - Nuc. Phys. A285, (1977), 269.

[7] E. Moya-Guerra, F. Villars - Nuc. Phys. A285, (1977), 297.

[8] E. Moya-Guerra, F. Villars - Nuc. Phys. A298, (1978), 109.

[9] D.M. Brink, M.J. Giannoni, M. Vénéroni - Nuc. Phys. A258 (1976), 237.

[10] M. Baranger, M. Vénéroni - Ann. Phys. 114, (1978), 123.

[11] K. Goeke, P.G. Reinhard - Ann. Phys. 112, (1978), 121.

[12] T. Marumari - Prog. Theor. Phys. 57, (1977), 112.

[13] T. Marumori et al - Prog. Theor. Phys. 63, (1980), 1576.

[14] P.G. Reinhard, K. Goeke - Nuc. Phys. A312, (1978) 121.

[15] K. Goeke, P.G. Reinhard, D.J. Rowe - Nuc. A359, (1981), 408.

[16] D.J. Rowe, R. Bassermann - Nuc. Phys. A220, (1974), 404.

[17] A.K. Mukherjee, M.K. Pal - Nuc. Phys. A373 (1982), 289.

[18] K. Goeke et al - Suplement of Prog. Theor. Phys. 74 & 75, (1983).

[19] E.J.V. de Passos - Lecture Notes In Physics, 171, 350-7.

[20] J. da Providência - J.N. Urbano - Lecture Notes In Physics 171, 343-9.

[21] A. Kuryama - Suplement of Prog. Theor. Phys. 74 & 75, (1983).

[22] A. Kuryama, M. Yamamura - Prog. Theor. Phys. 71, (1984), 122.

[23] G. do Dang, A. Klein - Phys. Rev. Letters 21, (1985), 2265.

[24] R. Gilmore - Lie Group, Lie Algebras and Some of Their Applications, John Wiley & Sons, (1974).

[25] A.M. Perelomov - Sov. Phys. Usp. 20, (1977), 703.
Com. Math. Phys. 26, (1972), 222.

[26] M.T. Monastyrsky, A.M. Perelomov - Rep. Math. Phys. 6,(1974),1.

[27] E. Onofri - J. Math. Phys. 16, (1975), 1087.

[28] H. Kuratsuji, T. Suzuki - J. Math. Phys. 21, (1980), 472.

[29] J.P. Blaizot, H. Orland - Phys. Rev. 24, (1981), 1740.

[30] J.P. Provost, G. Vallee - Comm. Math. Phys. 76, (1980), 289.

[31] D.J. Rowe, A.G. Ryman - Phys. Rev. Letters 45, (1980), 406.

[32] P. Kramers, M. Saraceno - Lecture Notes in Physics 140, Springer Verlag.

[33] G. Rosensteel, D.J. Rowe - Phys. Rev. A24, (1981), 673.

[34] D.J. Rowe, A. Ryman - Phys. Rev. A22, (1980), 2362.

[35] D.J. Rowe - Contribution to the Sclay TDHF Workshop (1979).

[36] D.J. Rowe - Nuc. Phys. A391, (1982), 307.

[37] T. Suzuki - Nuc. Phys. A 398,(1983),557.

[38] H.J. Lipkin, N. Meshkov, A.J. Glick - Nuc. Phys. 62, (1965), 166.

[39] A. Glick, H.J. Lipkin, N. Meshkov - Nuc. Phys. 62, (1965), 118, 199, 211.

[40] D. Agassi, H.J. Lipkin - Nuc. Phys. 86, (1966), 321.

[41] S.Y. Li, A. Klein, R.M. Dreizler - J. Math. Phys. 11, (1970), 975.

[42] R.D. Williams, S.E. Koonin - Nuc. Phys. A391, (1982), 72.

[43] A.J. McConnell - Applications of Tensor Analysis - Dover (1957).

[44] B. Schutz - Geometrical Methods for Physicists -

[45] D.J. Rowe, A. Ryman - J. Math. Phys. 23, (1982), 732.

[46] Sudarshan, Mukunda - Classical Mechanics a Modern Perspective- J. Wiley & Sons.

[47] H. Goldstein - Mecânica Clasica - Aguilar (1975).

[48] J.N. Negele - Rev. Mod. Phys. 54, (1982), 913.

[49] A.F.R. de Toledo Piza, E.J.V. Passos - Il Nuovo Cimento 45B, (1978), 1.

[50] E.J.V. de Passos, A.F.R. de Toledo Piza - Phys. Rev. C21, (1980), 425.

[51] E.J.V. de Passos, F.F. de Souza Cruz - Phys. Rev. C24, (1981), 690.

[52] E.J.V. de Passos, F.F. de Souza Cruz - J. Phys A 19, (1986), 1333.