

IFUSP/P 659
B.I.F. - USP

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

PUBLICAÇÕES

INSTITUTO DE FÍSICA
CAIXA POSTAL 20516
01498 - SÃO PAULO - SP
BRASIL

IFUSP/P-659

13 OUT 1987



DINÂMICA EFETIVA DE SUBSISTEMAS E A TEORIA
QUÂNTICA DE MUITOS CORPOS

A.F.R. de Toledo Piza

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Agosto/1987

DINÂMICA EFETIVA DE SUBSISTEMAS E A TEORIA
QUÂNTICA DE MUITOS CORPOS (*)

A.F.R. DE TOLEDO PIZA
INSTITUTO DE FÍSICA - USP
C.P. 20516 - 01000 SÃO PAULO, S.P.

(*) NOTAS DE AULA PREPARADAS PARA A 1ª ESCOLA DE PÓS-GRADUAÇÃO
EM FÍSICA DO NORDESTE, JOÃO PESSOA, PB, JULHO DE 1987.

Índice

1.1- Introdução.....1

1.2- Subsistemas e matrizes densidade.....2

1.3- Correlações, estados naturais e probabilidades de ocupação.....13

1.4- Dinâmica de estados naturais e de probabilidades de ocupação: dinâmica de correlações e geometria da perda de coerência.....17

1.5- Aproximação de campo médio.....22

2.1- O modelo de Jaynes-Cummings coerente.....26

2.2- Operadores de projeção. Equações Pré-cinéticas.....32

3.1- Sistemas de muitos fermions idênticos. Densidade de um corpo, dinâmica e hierarquias.....44

3.2- Truncamento por fatorização: a aproximação de Hartree-Fock-Dirac.....49

4.1- Projeção da densidade de muitos corpos. Equação Pré-cinética.....55

4.2- Correlações a Termos de colisão. Aproximações simples.....65

5 - Aplicações: efeitos colisionais em sistemas de muitos fermions.....70

5.1- Colisões num gás de Fermi em uma dimensão. Energia de correlação e relaxação.....70

5.2- Correlações em estados estacionários e interações nucleares efetivas.....77

5.3- Líquidos de Fermi segundo Landau.....84

6 - Fêcho.....86

Referências.....88

Dança de Entrada

(Tudo 8ª acima)

The image shows a musical score for a piece titled "Dança de Entrada". The score is written on four staves of music. The first staff begins with the instruction "(Tudo 8ª acima)" and a treble clef. The music is in 2/4 time and features a key signature of two flats (B-flat and E-flat). The melody consists of eighth and sixteenth notes, with several triplet markings (indicated by a '3' over a group of notes) and slurs. The score concludes with a double bar line and a final cadence.

1.1 - Introdução

É enorme e crescente a variedade de fenômenos que se sabe ocorrer em sistemas de muitos corpos (ou, dito de forma talvez um pouco mais específica, em sistemas com um número muito grande, embora não necessariamente infinito, de graus de liberdade). Por isso, o esforço teórico no sentido de estabelecer conexões entre os fenômenos a dinâmica de algum tipo de substrato microscópico que os suporte se tornou também muito diversificado. Com algum risco de esquematizar por demais a situação, é possível dizer que o conhecimento e a descrição de fenômenos acaba por dar lugar a "condensações", sob a forma de classificações fenomenológicas, em torno das quais se desenvolvem ou adaptam técnicas específicas, capazes numa certa medida de dar conta, em termos teóricos, dos fenômenos conhecidos e eventualmente de ampliar o elenco dos fenômenos esperados. Os quatro cursos desta escola podem ser vistos, desse ponto de vista, como ilustrando algumas (peço menos quatro, talvez mais) regiões de atividade desse tipo. Em dois deles, a palavra "Fenômenos" aparecer explicitamente no título. E embora isso não tenha ocorrido em relação ao título deste curso, o seu conteúdo está fortemente associado também a uma determinada classe de fenômenos, os chamados fenômenos de transporte. Esses fenômenos estão associados a processos essencialmente cinéticos (no sentido etimológico da palavra) que ocorrem em situações descritas como "fora de equilíbrio". As técnicas que vão ser discutidas podem no entanto ser usadas também para tratar situações de equilíbrio, que podem na realidade ser caracterizadas pela cessação dos fenômenos propriamente cinéticos.

O quadro teórico geral em que vou apresentar e desenvolver essas técnicas é o da mecânica quântica não relativística, e uma característica importante delas é a aplicabilidade de a sistemas com um número grande mas possivelmente finito

de graus de liberdade, embora isso não constitua uma restrição, no sentido de que elas podem também ser utilizadas para sistemas extensos. A aplicabilidade a sistemas finitos reflete o fato de que boa parte da motivação no seu desenvolvimento proveio do estudo de processos e propriedades nucleares. De fato, ao contrário, talvez, da chamada Física da Matéria Condensada, em que o contexto "natural" envolve sistemas extensos de muitos corpos, a situação "natural" da Física Nuclear envolve fenômenos que se manifestam em sistemas pequenos isto é, que podem ser modelados como sendo de um número da ordem de até algumas (poucas) centenas de partículas. Isso não exclui, no entanto, a consideração de objetos extensos, seja ideais como a "matéria nuclear", ou mais concretos, como a "matéria de neutrons" de interesse astrofísico.

Existe uma atitude geral, ou um ponto de vista básico em torno da qual se organizam os resultados e métodos que vão ser discutidos neste curso. Em termos gerais, ela consiste em buscar, manipulando o esquema geral da mecânica quântica, uma descrição (tanto quanto possível) completa e fechada, mas apenas de uma parte (ou de um particular aspecto, ou de uma classe de aspectos) de um dado sistema complexo. Essa atitude contém, desde logo, o intuito de simplificar a descrição do sistema, e com isso eventualmente torná-la viável, reduzindo a sua abrangência. Um de seus resultados mais interessantes, contudo, é que a descrição restrita se exprime através de equações que tem a estrutura de equações cinéticas, como as que são adotadas fenomenologicamente, ou semi-fenomenologicamente, para o tratamento de fenômenos de transporte e equilíbrio, embora refletindo no âmbito de sua restrição os aspectos e características gerais relevantes da dinâmica quântica geral. Essas equações, das quais é fácil obter equações cinéticas genuínas por aproximação, serão por isso chamadas genericamente equações pré-cinéticas.

A apresentação que se segue é baseada no trabalho rea-

lizado na Universidade de São Paulo, em colaboração sobretudo com M.C. Nemes e também com B.V. Carlson e vários estudantes de pós-graduação (referências 1 a 8). Isso não significa, é claro, que não haja antecedentes ou desenvolvimentos paralelos independentes. Como antecedentes imediatos do trabalho desenvolvido em São Paulo devem ser citados os trabalhos de Kubler e Zeh (9), de Willis e Picard (10), este aproximado da área de física nuclear pelo trabalho de Mähring e Smilanski (11), por um lado; e no que se refere à densidade de um corpo para sistemas de muitos fermions idênticos, o trabalho de Ayk (12). Como desenvolvimento paralelo e independente, deve-se citar o trabalho de Allhasid, Balian e Reinhardt (13 e referências aí citadas) que utiliza extensivamente ingredientes ideológicos que se encontram também na versão de Buck e Feldmeier (14). Como existe uma diversidade apreciável de técnicas e pontos de vista entre o trabalho de São Paulo e estas linhas paralelas, é conveniente res-tringir a apresentação, num curso como este, aos limites de um único ponto de vista, até para reduzir as oportunidades de dispersão e incompreensibilidade. Restrinjo-me por isso, à versão que me parece, talvez por motivos compreensíveis, a mais econômica, simples e transparente, remetendo contudo o leitor com interesse enciclopédico ou opinião divergente à literatura citada.

1.2 - Subsistemas e matrizes densidade. (1,9).

Na formulação mais usual da Mecânica Quântica os estados de um sistema são associados a vetores num espaço de Hilbert, em geral de dimensão infinita; os estados de um sistema constituído de dois (ou mais) subsistemas são associados a vetores num espaço produto dos espaços de Hilbert correspondentes aos estados de cada um dos subsistemas. Sendo êsses vários espaços de Hilbert espaços de estados, é conve-

niente e natural chamá-lo genericamente de espaços de fase quânticos.

Por produto de dois espaços de Hilbert (dotados de bases enumeráveis no caso de dimensão infinita) entende-se o seguinte. Sejam os vetores ortonormais

$$\{|u_i\rangle\}, \quad i = 1, 2, \dots$$

uma base no primeiro espaço, \mathcal{H}_1 . (Isso significa que um vetor qualquer desse espaço pode ser escrito como

$$|a\rangle = \sum_i A_i |u_i\rangle).$$

Sejam ainda os vetores ortonormais

$$\{|v_j\rangle\}, \quad j = 1, 2, \dots$$

uma base no segundo espaço, \mathcal{H}_2 . Então uma base no espaço produto $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ é constituída pelos vetores (também ortonormais) da forma

$$|w_{ij}\rangle = |u_i\rangle \otimes |v_j\rangle, \quad i, j = 1, 2, \dots$$

Esse produto (para três ou mais espaços) é associativo. O produto escalar desses vetores é dado como

$$\begin{aligned} \langle w_{ij} | w_{kl} \rangle &= (\langle u_i | \otimes \langle v_j |) (|u_k\rangle \otimes |v_l\rangle) = \\ &= \langle u_i | u_k \rangle \langle v_j | v_l \rangle = \delta_{ik} \delta_{jl}; \end{aligned}$$

e um vetor genérico $|A\rangle$ do espaço produto pode ser escrito como

$$|A\rangle = \sum_{ij} A_{ij} |w_{ij}\rangle, \quad (1.2.1)$$

Em geral um tal vetor não pode ser escrito, como os vetores $|w_{ij}\rangle$, como produtos de um vetor de \mathcal{H}_1 , por um vetor de \mathcal{H}_2 . Para que isso seja possível é preciso que os coeficientes A_{ij} tenham a forma particular

$$A_{ij} = a_i b_j.$$

Nesse caso, de fato

$$\begin{aligned} |A\rangle &= \sum_{ij} a_i b_j |u_i\rangle \otimes |v_j\rangle = \left(\sum_i a_i |u_i\rangle\right) \otimes \left(\sum_j b_j |v_j\rangle\right) \\ &= |a\rangle \otimes |b\rangle. \end{aligned}$$

Exemplo simples: Partícula com spins S num oscilador harmônico. Nesse caso, tomando \mathcal{H}_1 como o espaço de fases de uma partícula (sem spin) num oscilador harmônico,

$$|u_i\rangle \rightarrow |n_x, n_y, n_z\rangle, \quad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots,$$

o espaço \mathcal{H}_2 deve então ser tomado como o espaço de fases de um spin S :

$$|v_j\rangle \rightarrow |S m\rangle, \quad -S \leq m \leq +S.$$

Uma base do espaço produto $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, que contém os estados da partícula com spin (que pode então ser vista como o sistema composto da partícula e do spin) será

$$|w_{ij}\rangle \rightarrow |n_x, n_y, n_z\rangle \otimes |S m\rangle.$$

Note que a base do oscilador pode, por sua vez, ser escrita como uma base produto

$$|n_x, n_y, n_z\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \otimes |n_z\rangle,$$

isto é, o oscilador (tridimensional) pode ser visto como um sistema composto de três osciladores unidimensionais. É claro então que o sistema partícula com spin pode, deste ponto de vista, ser analisado de várias maneiras como formado de, digamos, dois subsistemas, considerando as diversas associações possíveis dos fatores de

$$|w_{ij}\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \otimes |n_z\rangle \otimes |S m\rangle$$

em dois grupos. Em cada caso se obtém uma descrição que privilegia diferentes subsistemas. O uso de uma ou outra partícula de composição depende fundamentalmente das propriedades ou características que se queira estudar, como ficará claro mais adiante.

É óbvio mas importante ter em vista que toda essa análise não tem compromisso algum com equações dinâmicas que rejam o comportamento do sistema. Determinadas dinâmicas podem ser mais fácil ou convenientemente tratadas em algum esquema particular, mas o conteúdo final não depende do particular esquema adotado no caso de um tratamento exato. A maior conveniência de um ou outro esquema se manifesta também, quando se queira ou quando se tenha que recorrer a esquemas de aproximação. Todas essas afirmações vão ser ilustradas adiante.

Vamos considerar agora o caso de um sistema que pode ser visto como composto de dois subsistemas, isto é, seu espaço de fases está sendo realizado como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, com \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 escolhidos de alguma forma, e do qual pretendemos estudar variáveis dinâmicas relativas a um dos dos subsistemas apenas. (Por exemplo, estamos interessados em observar variáveis de spin, apenas, no exemplo simples dado acima). Formalmente, isso significa que estamos interessados em variáveis dinâmicas que são operadores (hermiteanos) agindo não trivialmente num dos espaços envolvidos no produto, digamos

\mathcal{H}_1 , apenas. Em termos da base $\{|u_i\rangle\}$, $i=1,2,\dots$ desse espaço, êsses operadores podem ser escritos como

$$\hat{\sigma} = \sum_{ij'k} |w_{ik}\rangle \sigma_{ij'} \langle w_{jk}| ; \quad (1.2.2)$$

$$\sigma_{ij'} \delta_{kl} = \langle w_{ik} | \hat{\sigma} | w_{j'l} \rangle = \langle u_i | \hat{\sigma} | u_j \rangle \delta_{kl}.$$

Note que o operador $\hat{\sigma}$ é um operador do espaço \mathcal{H}_1 estendido ao espaço produto $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$: êle age como a identidade no que concerne o espaço \mathcal{H}_2 , o que dá lugar à propriedade de serem os elementos de matriz de $\hat{\sigma}$, na base produto $\{|w_{ij}\rangle\}$, diagonais no índice referente a \mathcal{H}_2 e independentes desse índice. Um operador de \mathcal{H}_2 , pelo contrário, seria estendido de forma a agir trivialmente (como a identidade) em \mathcal{H}_1 e não trivialmente em \mathcal{H}_2 .

Quantidades relevantes, relativas ao primeiro subsistema, aparecem como valores esperados de operadores como $\hat{\sigma}$, eq. (1.2.2), em algum estado do sistema cuja forma é dada pela eq. (1.2.1):

$$\begin{aligned} \langle \hat{\sigma} \rangle_A &= \langle A | \hat{\sigma} | A \rangle = \sum_{ij'kl} A_{ik}^* \langle w_{ik} | \hat{\sigma} | w_{j'l} \rangle A_{jl} = \\ &= \sum_{ijl} A_{il}^* \sigma_{ij} A_{jl} \end{aligned} \quad (1.2.3)$$

Uma forma conveniente de escrever valores esperados que será usada constantemente a seguir é

$$\langle \hat{\sigma} \rangle_A = \text{Tr} \hat{\sigma} \hat{F}_A, \quad \hat{F}_A \equiv |A\rangle \langle A| \quad (1.2.4)$$

onde Tr significa o traço (isto é, a soma dos elementos de matriz diagonais numa representação matricial do operador, numa base ortogonal qualquer) do operador que segue êsse símbolo. Utilizando a base $\{|w_{ik}\rangle\}$, a (1.2.4) dá, de fato

$$\begin{aligned} \langle \hat{\sigma} \rangle_A &= \sum_{ik} \langle w_{ik} | \hat{\sigma} | A \rangle \langle A | w_{ik} \rangle = \\ &= \sum_{ik} \langle A | w_{ik} \rangle \langle w_{ik} | \hat{\sigma} | A \rangle = \langle A | \hat{\sigma} | A \rangle. \end{aligned} \quad (1.2.5)$$

Uma propriedade simples e importante do traço que é trivial e imediato verificar é a chamada invariança cíclica, isto é (por exemplo, para três operadores)

$$\text{Tr} \hat{\sigma} \hat{\rho} \hat{A} = \text{Tr} \hat{A} \hat{\sigma} \hat{\rho} = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{A} \hat{\sigma}$$

de modo que é possível também escrever

$$\langle \hat{\sigma} \rangle_A = \text{Tr} \hat{\sigma} \hat{F}_A = \text{Tr} \hat{F}_A \hat{\sigma}.$$

Como o operador $\hat{\sigma}$ se refere a apenas um dos subsistemas (tendo a forma da eq. (1.2.2), é possível escrever a (1.2.5).

$$\begin{aligned} \langle \hat{\sigma} \rangle_A &= \sum_{ij} \sigma_{ij} \sum_k A_{jk} A_{ik}^* \\ &\equiv \sum_{ij} \sigma_{ij} \rho_{ji} = \text{Tr}_1 \hat{\sigma} \hat{\rho} \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

onde agora $\hat{\sigma}$ e $\hat{\rho}$ são operadores em \mathcal{H}_1 , apenas

$$\hat{\sigma} = \sum_{ij} |u_i\rangle \sigma_{ij} \langle u_j|$$

e

$$\hat{\rho} = \sum_{ij} |u_j\rangle \rho_{ji} \langle u_i| = \hat{\rho}^+$$

com

$$\begin{aligned} \rho_{ji} &= \sum_k A_{jk} A_{ik}^* = \sum \langle w_{jk} | A \rangle \langle A | w_{ik} \rangle \\ &= \langle u_j | (\text{Tr}_2 \hat{F}_A) | u_i \rangle = \langle u_j | \hat{\rho} | u_i \rangle. \end{aligned} \quad (1.2.7)$$

Como $\hat{\sigma}$ age trivialmente em \mathcal{H}_2 , é possível execu

tar trivialmente (isto é, sem interferência de \hat{G}) a parte referente a \mathcal{H}_2 do traço sobre o espaço produto. Dessa forma, a parte não trivial do traço (1.2.4) é a que aparece na equação (1.2.6), envolvendo apenas operadores de \mathcal{H}_1 .

Definições: Objetos (operadores) como \hat{F}_A (eq. (1.2.4)) e $\hat{\rho} = \text{Tr}_2 \hat{F}_A$ (eq. (1.2.7) são chamados operadores (ou "matrizes") densidade. Usualmente se usa algum adjetivo para, por exemplo, distinguir \hat{F}_A de $\hat{\rho}$: \hat{F}_A é a "densidade completa", por exemplo, e $\hat{\rho}$ a densidade "reduzida" relativa ao subsistema \mathcal{H}_1 , correspondente a \hat{F}_A . É importante notar que quantidades observáveis (os traços) são lineares nas densidades (que são por sua vez "quadráticos" nos vetores de estado). Isso significa que as densidades se situam no nível de "probabilidades", quanto à interpretação da teoria quântica, na mesma medida em que os vetores de estado se situam no nível de amplitudes de probabilidade.

Propriedades: 1) Se $|A\rangle$ é um estado normalizado, isto é, $\langle A|A\rangle = 1$, então

$$\hat{F}_A = \hat{F}_A^2 = \hat{F}_A^+$$

isto é, \hat{F}_A , a densidade completa, é um operador de projeção. Seus autovalores são 1 e 0, e o único autovetor com autovalor 1 é $|A\rangle$. Dessa forma, é possível interpretar os autovalores de \hat{F}_A como probabilidades de que o sistema, cujo estado é descrito por \hat{F}_A , se encontre no autovetor correspondente a esse autovalor. Tais probabilidades são chamadas probabilidades de ocupação associadas aos respectivos vetores de estado. E é fácil ver que a probabilidade de um sistema quântico, cujo estado é descrito por \hat{F}_A , seja observado no estado $|B\rangle$ (normalizado) pode ser escrita como

$$\langle B|\hat{F}_A|B\rangle = |\langle B|A\rangle|^2 = \text{Tr} \hat{F}_A \hat{F}_B$$

com $\hat{F}_B = |B\rangle\langle B|$.

2) Se \hat{F}_A é um operador de projeção, em geral $\hat{\rho} = \text{Tr}_1 \hat{F}_A$ não tem essa propriedade. De fato, embora seja verdade que

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^+$$

é falso em geral que $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. Quando isso ocorre, os autovalores de $\hat{\rho}$ são 1 e 0, o que significa que $\hat{\rho}$ é da forma

$$\hat{\rho} = |a_1\rangle\langle a_1|, \quad \langle a_1|a_1\rangle = 1$$

com $|a_1\rangle$ em \mathcal{H}_1 . Como, por outro lado, $\hat{\rho} = \text{Tr}_2 \hat{F}_A$ e $\hat{F}_A = |A\rangle\langle A|$, isso significa que $|A\rangle$ deve ter a forma de um produto de estados normalizados

$$|A\rangle = |a_1\rangle \otimes |a_2\rangle, \quad |a_1\rangle \in \mathcal{H}_1, |a_2\rangle \in \mathcal{H}_2$$

o que, como já foi observado antes, em geral é falso. Por exemplo, se $|A\rangle = \sin\alpha |u_i\rangle + \cos\alpha |u_k\rangle$ com $i \neq k, j \neq l$; então

$$\hat{\rho} = |u_i\rangle \sin^2\alpha \langle u_i| + |u_k\rangle \cos^2\alpha \langle u_k|$$

que é diferente de $\hat{\rho}^2$ para $\alpha \neq \frac{\pi}{2}$.

3) Embora não sendo um operador de projeção, $\hat{\rho}$ tem propriedades muito simples devido ao fato de que esse operador é, como \hat{F}_A , positivo semi-definido e tem traço finito. (De fato $\text{Tr}_1 \hat{\rho} = \text{Tr} \hat{F}_A = 1$). Nessas condições, a ele se aplica o teorema de Hilbert-Schmidt⁽¹⁵⁾, segundo o qual o espectro de $\hat{\rho}$ é discreto e, caso haja um número infinito de autovalores positivos não nulos, o único ponto de acumulação possível para o espectro é zero. Dessa forma é possível, em particular, escolher a base $\{|u_i\rangle\}$ de \mathcal{H}_1 como constituída pelos autovalores (devidamente ortonormalizados) de $\hat{\rho}$:

$$\hat{\rho} |u_i\rangle = p_i |u_i\rangle, \quad p_i \geq 0, \quad \langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (1.2.8)$$

Nesse caso, $\hat{\rho}$ tem a forma simples

$$\hat{\rho} = \sum_i |u_i\rangle p_i \langle u_i| \quad (1.2.9)$$

e o fato de que $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$ aparece como diretamente ligado à existência de mais de um autovalor p_i diferente de zero, dada a normalização $\text{Tr}_1 \hat{\rho} = \sum_i p_i = 1$.

Os autovalores p_i podem ser interpretados também como probabilidades de ocupação: eles dão, de fato, a probabilidade de que o sistema composto no estado associado à densidade completa \hat{F}_A , tenha o subsistema associado a \mathcal{H}_1 no estado $|u_i\rangle$:

$$\begin{aligned} p_i &= \langle A | (|u_i\rangle \langle u_i| \otimes 1_2) |A\rangle = \\ &= \text{Tr} (|u_i\rangle \langle u_i| \otimes 1_2) \hat{F}_A = \text{Tr}_1 |u_i\rangle \langle u_i| \hat{\rho}. \end{aligned}$$

4) Dado o estado $|A\rangle$, que pertence a $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, e a base $\{|u_i\rangle\}$ de \mathcal{H}_1 , formada pelos autovetores de $\hat{\rho}$, podemos expandir $|A\rangle$ sob a forma

$$|A\rangle = \sum_i |u_i\rangle \otimes |a_{2i}\rangle \quad (1.2.10)$$

onde os vetores $|a_{2i}\rangle$ de \mathcal{H}_2 são os "coeficientes" da expansão, dados pelos produtos escalares em \mathcal{H}_1

$$|a_{2i}\rangle = \langle u_i | A \rangle.$$

É fácil verificar que esses vetores são ortogonais (para $|u_i\rangle$'s ortogonais), mas não normalizados:

$$\begin{aligned} \langle a_{2j} | a_{2i} \rangle &= \text{Tr}_2 |a_{2i}\rangle \langle a_{2j}| = \\ &= \text{Tr}_2 \langle u_i | A \rangle \langle A | u_j \rangle = \\ &= \langle u_i | \text{Tr}_2 \hat{F}_A | u_j \rangle = p_i \delta_{ij}. \end{aligned}$$

Esse cálculo mostra ainda que vetores $|u_i\rangle$ tais que $p_i = 0$ não figuram na expansão (1.2.10) (pois os "coeficientes" correspondentes têm norma nula); e que introduzindo os vetores normalizados em \mathcal{H}_2

$$|v_i\rangle = p_i^{-1/2} |a_{2i}\rangle, \quad p_i \neq 0,$$

é possível reescrever a expansão (1.2.10) como

$$|A\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |u_i\rangle \otimes |v_i\rangle. \quad (1.2.11)$$

É útil enfatizar as características especiais dessa expansão:

- a) Devido à aplicabilidade do teorema de Hilbert-Schmidt a $\hat{\rho}$ ela é uma expansão discreta, sempre.
- b) Os vetores $\{|u_i\rangle\}$ e $\{|v_j\rangle\}$ formam conjuntos ortogonais respectivamente em \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 .
- c) Os coeficientes da expansão, $\sqrt{p_i}$ estão diretamente ligados às probabilidades de ocupação dos estados $|u_i\rangle$ pelo subsistema correspondente a \mathcal{H}_1 .

Por outro lado, em analogia a $\hat{\rho}$, podemos também definir um operador densidade reduzido para o subsistema correspondente a \mathcal{H}_2 :

$$\hat{R} \equiv \text{Tr}_1 \hat{F}_A.$$

Com o uso da expansão (1.2.11) resulta então

$$\hat{R} = \sum_i |v_i\rangle p_i \langle v_i|$$

que, comparada à (1.2.9) mostra que os $|v_i\rangle$ são autovetores de \hat{R} associados aos autovalores p_i , que são também autovalores de $\hat{\rho}$. Em outras palavras, \hat{R} e $\hat{\rho}$ têm o mesmo espectro. Os autovetores $|v_i\rangle$ (associados a autovalores $p_i \neq 0$) podem, como no caso dos $|u_i\rangle$, ser completados com autovetores de autovalor nulo de modo a constituírem uma base em \mathcal{H}_2 . De posse dessas duas bases, é imediato obter a base produto $|w_{ij}\rangle = |u_i\rangle \otimes |v_j\rangle$ na qual agora a expansão geral (1.2.1) fica reduzida à forma (1.2.11), em que apenas aparecem termos $i=j$.

Devido à propriedade de diagonalizarem respectivamente as densidades reduzidas $\hat{\rho}$ e \hat{R} , os estados $|u_i\rangle$ e $|v_i\rangle$ são chamados estados naturais relativos aos subsistemas associados a \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 , relativamente à densidade completa \hat{F}_A . Como visto, esses estados ficam determinados (a menos de fases irrelevantes, como discutido adiante), a partir do estado $|A\rangle$ (ou da densidade completa \hat{F}_A) e da particular escolha de subsistemas (isto é, da "fatoração" adotada para o espaço de fases, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$). Nesse sentido, eles dão, com as respectivas probabilidades de ocupação p_i , propriedades intrínsecas do sistema composto.

1.3 - Correlações, estados naturais e probabilidades de ocupação.

Que propriedades intrínsecas?

Operadores densidade que são, como \hat{F}_A , operadores de projeção correspondem ao que se chama de estados quânticos puros, e podem ser associados a um único vetor de estado, como $|A\rangle$. Da secção anterior resulta então que mesmo que \hat{F}_A corresponda a um estado quântico puro do sistema composto, as densidades reduzidas $\hat{\rho} = \text{Tr}_2 \hat{F}_A$ e $\hat{R} = \text{Tr}_1 \hat{F}_A$ não

correspondem em geral a estados quânticos puros dos respectivos subsistemas. Densidades da forma (1.2.9) ou (1.2.12) (com mais de uma probabilidade de ocupação p_i distinta de zero) correspondem ao que se chama uma "mistura estatística" de estados. Uma tal mistura estatística nada mais é de fato, que uma média, ponderada com as probabilidades de ocupação p_i , de densidades correspondentes aos estados quânticos puros ortogonais $|u_i\rangle, |v_i\rangle$. Os valores esperados de observáveis em tais misturas aparecem também como somas incoerentes dos valores esperados nos respectivos estados puros, ponderados igualmente com as probabilidades de ocupação:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\theta} \rangle_A &= \text{Tr}_1 \hat{\theta} \hat{\rho} = \text{Tr}_1 \sum_i |u_i\rangle p_i \langle u_i| \hat{\theta} = \\ &= \sum_i p_i \langle u_i | \hat{\theta} | u_i \rangle = \sum_i p_i \langle \hat{\theta} \rangle_{u_i} \quad (1.3.1) \end{aligned}$$

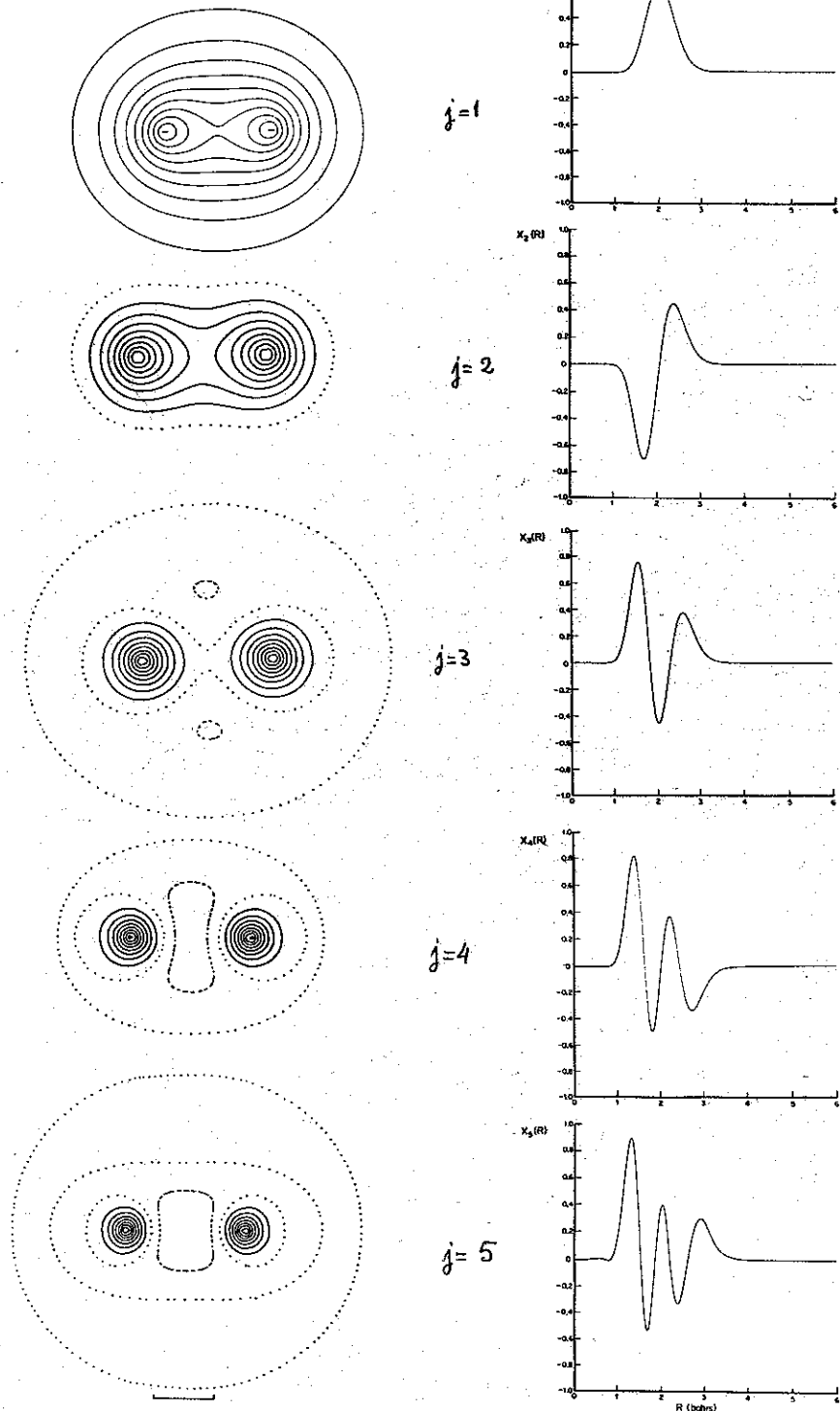
O grau de incoerência (por exemplo, e qualitativamente, o número de termos na soma incoerente) de (1.3.1) está diretamente relacionado com as probabilidades de ocupação p_i que controlam também o número de termos na expansão em estados naturais de $|A\rangle$ eq. (1.2.11). Além disso, é claro que um determinado estado natural ($|u_i\rangle$ de \mathcal{H}_1 ou $|v_i\rangle$ de \mathcal{H}_2) ocorre uma única vez nessa expansão e isso des- de que o correspondente p_i seja não nulo. Isso estabelece uma correspondência biunívoca entre estados naturais de \mathcal{H}_1 e de \mathcal{H}_2 e implica, de acordo com as regras interpretativas usuais da mecânica quântica, que dado que o subsistema corresponde a \mathcal{H}_1 esteja no estado $|u_i\rangle$ então o subsistema corresponde a \mathcal{H}_2 estará necessariamente no estado correspondente $|v_i\rangle$. A ortogonalidade dupla da expansão, seja nos $|u_i\rangle$, seja nos $|v_i\rangle$, implica que tais probabilidades condicionais são mutuamente exclusivas (isto é, e por exemplo, a probabi-

lidade de que o primeiro subsistema se encontre em $|u_i\rangle$, dado que ele se encontra em $|u_j\rangle$ com $j \neq i$, é zero).

Nesse sentido, tanto a expansão em estados naturais de $|A\rangle$, eq. (1.2.11), como das densidades reduzidas, eqs. (1.2.9) e (1.2.12) põe a descoberto correlações entre os subsistemas do sistema composto dado que êste seja descrito pelo estado $|A\rangle$. Um maior número de termos nessas expansões significa um maior grau de condicionamento recíproco dos estados dos subsistemas. Nesse sentido, diremos que os subsistemas estão então mais correlacionados (Schrödinger, em 1936, usou para isso a palavra "emaranhados" (entangled)). A menor correlação possível, nesse sentido, corresponde a um único termo $|u_i\rangle \otimes |v_i\rangle$ com $p_i = 1$, o que pela eq. (1.2.11) corresponde a um estado $|A\rangle$ fatorizado.

Não é estranho, dessa discussão, que essas idéias tenham tido um forte apêlo em conexão com os problemas da "redução do pacote de ondas" num processo de medida, bem como dos "paradoxos" tipo Einstein, Podolski, Rosen. Foi nesse contexto, de fato, que elas foram usadas por Schrödinger em 1936 e também na monografia clássica de Von Neuman (16). No que segue, no entanto, vamos aplicá-las em contextos algo mais prosaicos.

Uma primeira ilustração desse tipo de uso dos orbitais naturais é o cálculo feito em 1979 por Bishop e Cheung (18) sobre funções de onda não adiabáticas para a mais simples das moléculas, que é H_2^+ . As funções de onda analisadas são expansões (no sentido da eq. 1.2.11, onde os dois subsistemas são respectivamente o electron e os dois núcleos) contendo de 300 a 500 termos, e que foram capazes de reproduzir resultados espectroscópicos de alta precisão. Essas funções de onda foram usadas como os estados $|A\rangle$ na discussão precedente para gerar através da diagonalização das densidades reduzidas correspondentes aos dois subsistemas, os orbitais naturais correspondentes, o que permite reescrever



$|A\rangle$ sob a forma (1.2.11). A tabela abaixo dá probabilidades de ocupação obtidas para os produtos de estados naturais mais importantes, no caso do estado fundamental e do primeiro estado excitado "não rotacional". Nos dois casos, a expansão em estados naturais converge rapidamente, sendo dominada fortemente pelo primeiro termo. O quinto termo da expansão, no caso mais desfavorável, envolve uma probabilidade de ocupação que é apenas 10^{-6} da que corresponde ao termo dominante. Isso significa que, apesar da complexidade das funções de onda em termos da base utilizada no cálculo, elas são muito aproximadamente simples produtos de um estado eletrônico por um estado nuclear. Isso implica numa correlação muito fraca entre os dois subsistemas. Os estados naturais mais importantes para o estado fundamental aparecem na fig. 1. O primeiro estado eletrônico é, em particular, bastante próximo do orbital obtido para o estado fundamental na aproximação de Born-Oppenheimer.

1.4 - Dinâmica de estados naturais e de probabilidades de ocupação: dinâmica de correlações e geometria da perda de coerência(1).

A incidência da dinâmica sobre a análise do estado de um sistema composto em termos dos estados naturais dos seus subsistemas pode ser examinada da forma mais simples na descrição (picture) de Schrödinger, em que o estado dependente do tempo $|A(t)\rangle$ evolui de acordo com a equação

$$i \frac{\partial}{\partial t} |A(t)\rangle = \hat{H} |A(t)\rangle. \quad (1.4.1)$$

De fato, a decomposição (1.2.11) pode ser levada a cabo para cada instante t:

$$|A(t)\rangle = \sum_i \alpha_i(t) |u_i(t)\rangle \otimes |v_i(t)\rangle \quad (1.4.2)$$

TABLE I. Occupation numbers (n_j) in the natural orbital expansions of the two lowest nonrotational nonadiabatic wave functions of H_2^+ .

j	n_j (ground state)	n_j (excited state)
1	0.995 722 219 5	0.987 902 504 5
2	0.004 244 341 2	0.011 998 513 8
3	0.000 033 061 8	0.000 096 899 7
4	0.000 000 372 8	0.000 001 640 6
5	0.000 000 004 6	0.000 000 419 2

V. texto à pag. 17

onde por simplicidade, foi introduzida a notação $\alpha_i(t)$ para $\sqrt{p_i(t)}$. O lado esquerdo de (1.4.1) envolve a derivada temporal de (1.4.2), a qual por sua vez contém as derivadas temporais dos estados naturais:

$$\frac{\partial}{\partial t} |A(t)\rangle = \sum_i \left[\frac{d\alpha_i}{dt} |u_i(t)\rangle \otimes |v_i(t)\rangle + \alpha_i(t) \left(\frac{\partial}{\partial t} |u_i(t)\rangle \otimes |v_i(t)\rangle + |u_i(t)\rangle \otimes \frac{\partial}{\partial t} |v_i(t)\rangle \right) \right] \quad (1.4.3)$$

Essas derivadas podem ser tratadas lembrando que, em cada instante t , o conjunto de orbitais naturais com probabilidade de ocupação não nula é ortogonal e normalizável; e que ele pode, também em cada instante t , ser completado com estados naturais de ocupação nula de forma a constituírem uma base ortonormal. Dêsse modo, a transformação que relaciona os estados naturais em dois tempos é unitária, e a derivada temporal dos estados naturais pode ser escrita em termos do gerador hermiteano dessa transformação unitária:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |u_i(t)\rangle = \hat{h}_1(t) |u_i(t)\rangle \quad (1.4.4)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} |v_i(t)\rangle = \hat{h}_2(t) |v_i(t)\rangle \quad (1.4.5)$$

onde os geradores (em geral dependendo do tempo) \hat{h}_1 e \hat{h}_2 são operadores hermiteanos em \mathcal{H}_1 e em \mathcal{H}_2 respectivamente.

Levando as equações (1.4.2) a (1.4.5) à (1.4.1) é imediato obter

$$(\alpha_i \pm \alpha_j) \left[\langle v_j | \hat{h}_2 | v_i \rangle \pm \langle u_i | \hat{h}_1 | u_j \rangle \right] = \quad (1.4.6)$$

$$= \langle u_i v_j | \hat{H} | A \rangle \pm \langle A | \hat{H} | u_j v_i \rangle, \quad j \neq i$$

$$\alpha_i \left[\langle u_i | \hat{h}_1 | u_i \rangle + \langle v_i | \hat{h}_2 | v_i \rangle \right] = \text{Re} \langle u_i v_i | \hat{H} | A \rangle \quad (1.4.7)$$

$$\frac{d\alpha_i}{dt} = \text{Im} \langle u_i v_i | \hat{H} | A \rangle \quad (1.4.8)$$

onde foi usada a notação $|u_i v_j\rangle$ para o estado produto $|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle$ de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. As duas primeiras dessas três relações determinam, através dos geradores \hat{h}_1 e \hat{h}_2 a dinâmica dos orbitais naturais. É fácil ver que essas duas equações não determinam todos os elementos de matriz desses geradores (nas bases naturais), mas a indefinição está ligada unicamente à indefinição dos estados naturais de ocupação nula. Da mesma forma, a equação (1.4.7) determina apenas a soma dos elementos de matriz diagonais de \hat{h}_1 e \hat{h}_2 pelo fato de que a (1.4.1) controla apenas a soma das fases dos estados naturais $|u_i\rangle$ e $|v_i\rangle$ e não as fases individuais de cada um deles. Lembrando, por outro lado, que $p_i = \alpha_i^2$, decorre da equação (1.4.8) que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_i p_i(t) &= 2 \sum_i \alpha_i(t) \frac{d\alpha_i}{dt} = \\ &= 2 \sum_i \alpha_i(t) \text{Im} \langle u_i v_i | \hat{H} | A \rangle = \\ &= 2 \text{Im} \langle A | \hat{H} | A \rangle = 0 \quad (\hat{H} = \hat{H}^\dagger) \end{aligned}$$

isto é, da hermiticidade da hamiltoniana completa \hat{H} resulta a conservação da soma das probabilidades de ocupação. Em geral, no entanto, os $p_i(t)$ dependem do tempo. Como essas quantidades são autovalores das densidades reduzidas $\hat{\rho}(t)$ e $\hat{R}(t)$, isso implica imediatamente que a dinâmica efetiva dessas entidades, induzida por (1.4.1), contém em geral

ingredientes não unitários. Fisicamente, isso significa que a evolução hamiltoniana do sistema composto em geral altera a estrutura das correlações entre os subsistemas, alterando as propriedades de coerência das respectivas densidades reduzidas, conservando no entanto a probabilidade total.

Uma interpretação geométrica dos processos não unitários que representam essa dinâmica das correlações entre os subsistemas pode ser obtida da seguinte forma. Em termos das bases naturais (no tempo t), a unidade do espaço produto $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ pode ser resolvida como

$$\hat{1} = \sum_{ij} |u_i v_j\rangle \langle u_i v_j|$$

Devido à forma especial (1.4.2) de $|A(t)\rangle$ em termos dessa base, no entanto, é claro que esse vetor de estado está sempre contido no subespaço de \mathcal{H} associado ao operador de projeção (dependente do tempo)

$$\hat{P}(t) = \sum_i |u_i v_i\rangle \langle u_i v_i|$$

Esse projetor evolui unitariamente de uma forma controlada pelos geradores \hat{h}_1 e \hat{h}_2 :

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{P}(t) = [\hat{h}_1 + \hat{h}_2, \hat{P}(t)] \quad (1.4.9)$$

Devido à equação (1.4.8) é claro então que a evolução não unitária dos subsistemas é controlada por uma transformação infinitesimal ortogonal, dentro do subespaço $\hat{P}(t)$, dada por

$$i \frac{d\alpha_i}{dt} = \sum_j K_{ij}(t) \alpha_j(t)$$

com

$$K_{ij}(t) = \text{Im} \langle u_i v_i | \hat{H} | u_j v_j \rangle = -K_{ji}(t) \quad (1.4.10)$$

A decomposição de $|A(t)\rangle$ em estados naturais permite assim decompor a dinâmica de Schrödinger (1.4.1) numa subdinâmica unitária, eq. (1.4.9), que controla a evolução temporal dos estados naturais e numa subdinâmica não unitária que pode ser escrita como uma transformação ortogonal de amplitudes de ocupação $\alpha_i(t)$ eq. (1.4.10). Esta tem o sentido de um movimento do vetor de estado $|A\rangle$ dentro do subespaço, dependente do tempo, associado ao projetor $\hat{P}(t)$.

Finalmente, é fácil também ver que a subdinâmica não unitária depende essencialmente da interação entre os dois subsistemas. De fato, decompondo a hamiltoniana \hat{H} como

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_{int}$$

em que \hat{H}_1 e \hat{H}_2 estão associados unicamente aos respectivos subsistemas, que interagem através de \hat{H}_{int} , resulta, do fato de que $K_{ii} = 0$ e da ortogonalidade de estados naturais, que

$$K_{ij}(t) = \text{Im} \langle u_i v_i | \hat{H}_{int} | u_j v_j \rangle$$

isto é, $K_{ij}(t) = 0$ se $\hat{H}_{int} = 0$. Isso se deve obviamente a que a estrutura de correlações entre os subsistemas só pode ser alterada pela interação entre eles.

1.5 - Aproximação do campo médio⁽¹⁾.

Um primeiro devidendo dessa análise é a possibilidade imediata de construir uma aproximação de campo médio à evolução temporal do vetor de estado $|A(t)\rangle$ simplesmente congelando a subdinâmica não unitária, isto é, substituindo a eq. (1.4.8) por

$$\frac{d\alpha_i}{dt} = 0$$

Isso pode ser feito mesmo a partir de um estado inicial correlacionado isto é, para o qual a expansão (1.4.2) tenha mais de um termo (mais de uma probabilidade de ocupação p_i diferente de zero). O caso em que o estado inicial $|A(0)\rangle$ é um estado produto, isto é

$$|A(0)\rangle = |u_0(0)\rangle \otimes |v_0(0)\rangle, \quad (1.5.1)$$

no entanto, é particularmente transparente. Como nesse caso $\alpha_0 = 1$, $\alpha_i = 0$ ($i \neq 0$), as equações (1.4.6) e (1.4.7) dão

$$\langle u_0 | \hat{h}_1 | u_i \rangle = \langle u_0 v_0 | \hat{H} | u_i v_0 \rangle = \langle u_0 | \langle \hat{H} \rangle_{v_0} | u_i \rangle$$

isto é, a evolução do estado $|u_0(t)\rangle$ é controlada pela média da hamiltoniana completa sobre o estado do outro subsistema. Analogamente

$$\langle v_0 | \hat{h}_2 | v_i \rangle = \langle v_0 | \langle \hat{H} \rangle_{u_0} | v_i \rangle.$$

Dêsse modo

$$i \frac{d}{dt} |u_0(t)\rangle = \langle \hat{H} \rangle_{v_0} |u_0(t)\rangle \quad (1.5.2)$$

$$e \quad i \frac{d}{dt} |v_0(t)\rangle = \langle \hat{H} \rangle_{u_0} |v_0(t)\rangle \quad (1.5.3)$$

Essas equações não lineares acopladas são características das chamadas aproximações de campo médio dependentes do tempo. Equações desse tipo foram propostas em 1930 por Dirac (2i) como uma aproximação para a dinâmica de muitos fermions idênticos, chamada hoje aproximação de Hartree-Fock dependente do tempo.

Juntamente com uma tal aproximação de campo médio é possível introduzir uma medida quantitativa simples da urgência dos efeitos não unitários (ignorados nessa aproximação) calculando um tempo característico associado à validade de um ansatz fatorado do tipo (1.5.1) na presença de interação entre os subsistemas. De fato, para tempos curtos (nessa escala), após $t=0$

$$\alpha_{i \neq 0}(t) \approx \frac{d\alpha_i(t=0)}{dt} t.$$

Pela conservação da probabilidade total

$$p_0(t) \approx 1 - \sum_{i \neq 0} \alpha_i^2(t) = 1 - t^2 \sum_{i \neq 0} \left[\frac{d\alpha_i(t=0)}{dt} \right]^2 \\ \approx 1 - \frac{t^2}{\tau^2}$$

mostrando que a "vida média da aproximação de campo médio"

τ é dada como

$$\tau^2 = \left[\sum_{i \neq 0} \left[\frac{d\alpha_i(t=0)}{dt} \right]^2 \right]^{-1} = \left[\sum_{i \neq 0} \langle u_0 v_0 | \hat{H} | u_i v_i \rangle \langle u_i v_i | \hat{H} | u_0 v_0 \rangle \right]^{-1} \quad (1.5.4)$$

onde foi usado o fato, resultante da equação (1.4.7) de que $Re \langle u_0 v_0 | \hat{H} | u_i v_i \rangle = 0$ para o estado inicial (1.5.1) e $i \neq 0$. A degenerescência (quanto às probabilidades de ocupação, $p_i = 0$ para $i \neq 0$) dos estados intermediários permite saturar a soma sobre estados intermediários de (1.5.4) com um único estado $|D\rangle$ dado por

$$|D\rangle = N (1 - |u_0\rangle \langle u_0|) (1 - |v_0\rangle \langle v_0|) \hat{H} |u_0 v_0\rangle \quad (1.5.5)$$

onde N é um coeficiente de normalização que faz com que $\langle D | D \rangle = 1$. Esse estado $|D\rangle$ é o "doorway" que resulta da ação de \hat{H} (na realidade, de \hat{H}_{int}) sobre o estado inicial. Em geral, ele não é um estado produto, mas pode ser decomposto em orbitais naturais

$$|D\rangle = \sum_i \beta_i |u_i\rangle \otimes |v_i\rangle$$

que são, por construção, ortogonais respectivamente a $|u_0\rangle$ e a $|v_0\rangle$ e que são portanto os orbitais de ocupação nula em $|A(0)\rangle$ relevantes para transições de primeira ordem induzidas por H_{int} .

É também importante notar que, da eq. (1.4.6), resulta que

$$\langle u_i v_j | \hat{H} | u_0 v_0 \rangle = 0, \quad i \neq j, \quad i, j \neq 0.$$

Desse modo, sempre que $|D\rangle$ for um estado fatorado,

$$Z^2 = |\langle u_0 v_0 | \hat{H} | D \rangle|^{-2} \quad (1.5.7)$$

e os elementos de matriz de (1.5.7) contém apenas as transições que destroem a forma fatorizada de $|A(t)\rangle$, eq.(1.5.1).

2.1 - O modelo de Jaynes-Cummings coerente ^(3,19)

A operacionalidade das idéias expostas no capítulo anterior é ilustrada, num contexto dinâmico, pela análise do caso particular da Hamiltoniana de Dicke

$$\hat{H} = \frac{\epsilon}{2} \sigma_3 + \hbar \omega a^\dagger a + \lambda (a \sigma_+ + a^\dagger \sigma_-) \quad (2.1.1)$$

onde a, a^\dagger são operadores de aniquilação e criação bosônicos ("fotons" de um particular modo do campo de radiação, de energia $\hbar\omega$, que será tomada sem perda de generalidade como igual a 1), e

$$\sigma_3, \sigma_\pm = \frac{\sigma_1 \pm i \sigma_2}{2}$$

são matrizes de Pauli. Estas variáveis dinâmicas descrevem uma "partícula" num sistema de dois níveis e esquematizam a sua interação com o modo normal do campo de radiação. É fácil verificar que o último termo (o termo de interação) de \hat{H} é uma constante do movimento, o que torna o modelo solúvel em termos da diagonalização de matrizes 2×2 . Essa circunstância tem um papel essencial na análise das refs.(19), mas não será utilizada na discussão que segue. Ela se concentra sobre o chamado modelo de Jaynes-Cummings coerente, que consiste na hamiltoniana (2.1.1) suplementada pela condição inicial

$$|t=0\rangle = |v\rangle \otimes |+\rangle \quad (2.1.2)$$

em que o primeiro fator é um estado coerente do modo normal

$$a|v\rangle = v|v\rangle, \quad \langle v|v\rangle = 1. \quad (2.1.3)$$

O segundo fator, $|+\rangle$, é um autovetor de σ_3 com autovalor positivo ("partícula no nível superior"). Nos termos

do capítulo anterior, o modelo envolve dois subsistemas ("modo normal" e "partícula") em interação. A ele é dada uma condição inicial na qual, em particular, inexistem correlações entre os subsistemas.

A evolução temporal do estado do sistema completo assistirá o estabelecimento de correlações entre os subsistemas, através do último termo de \hat{H} . O tempo característico associado a esse processo pode ser avaliado através da equação (1.5.7). Neste caso, o "doorway" relevante pode ser calculado explicitamente:

$$|D\rangle = (\alpha^+ - v^*) |v\rangle \otimes |-\rangle \quad (2.1.4)$$

donde um cálculo imediato mostra que

$$\tau^{-2} = \lambda^2 |\langle t=0 | \hat{H} | D \rangle|^2 = \lambda^2 \quad (2.1.5)$$

ou seja $\tau = 1/\lambda$: o tempo característico associado ao estabelecimento das correlações entre os subsistemas é dado diretamente pelo inverso ($\kappa = 1!$) da constante de acoplamento λ . Em particular, não haverá jamais correlações se $\lambda = 0$.

Esse não é, no entanto, o único tempo característico inicial que caracteriza o sistema. Um outro tempo característico interessante é o que está associado a transições da "partícula" entre os dois níveis, independentemente do estabelecimento ou não de correlações entre os subsistemas. Ele pode ser estimado a partir da dependência temporal, para tempos curtos, do valor esperado $\langle t | \sigma_3 | t \rangle = \langle \sigma_3 \rangle_t$. Escrevendo então

$$\begin{aligned} |t\rangle &\approx |t=0\rangle + \left. \frac{d|t\rangle}{dt} \right|_{t=0} t = \\ &= |t=0\rangle - i H |t=0\rangle t \end{aligned}$$

um cálculo imediato mostra que

$$\langle \sigma_3 \rangle_t \approx 1 - \frac{t^2}{\tau_R^2}$$

com

$$\tau_R = [2\lambda^2 (1 + |v|^2)]^{-1/2} \quad (2.1.6)$$

Para $|v| \gg 1$, em particular, $\tau_R \approx 1/\sqrt{2}\lambda|v|$ é muito menos que o tempo de correlação τ . É fácil interpretar fisicamente esse resultado: para $|v| \gg 1$ os campos intensos associados ao modo normal induzem transições rápidas entre os dois níveis (ou a "precessão do spin"). Em termos desta última imagem essas transições correspondem à chamada precessão de Rabi. O fato de que $\tau_R \ll \tau$ indica que esse efeito não está associado diretamente ao "emaranhamento" dos dois subsistemas através de correlações.

Também é fácil implementar, nesse modelo, uma aproximação de campo médio, no sentido discutido na seção 1.5. De fato, as equações de campo médio (1.5.2) e (1.5.3) são, nesse caso, resolvidas pelo ansatz

$$|t\rangle = e^{i\zeta(t)} |v(t)\rangle \otimes |z(t)\rangle \quad (2.1.7)$$

onde $\zeta(t)$ é uma fase e agora $|v(t)\rangle$ é um estado coerente dependente do tempo. O estado de spin $|z(t)\rangle$ também é um estado coerente (e também dependente do tempo) definido como

$$|z(t)\rangle = \frac{e^{z(t)\sigma_-} |+\rangle}{\sqrt{1 + |z(t)|^2}}$$

No caso presente de spin $\frac{1}{2}$ ele corresponde, de fato, ao estado mais geral (superposição coerente de $|+\rangle$ e $|-\rangle$). Os parâmetros $v(t)$, $z(t)$ e a fase $\zeta(t)$ podem então ser obtidos por integração numérica de equações de movimento ob

tidas das equações (1.5.2) e (1.5.3). A função $\langle \sigma_3 \rangle_t$ calculada a partir da solução mostra oscilações de Rabi de amplitude constante.

Como para $|v| \gg 1$ as correlações se estabelecem numa escala de tempo τ que é grande na escala das oscilações de Rabi, é possível ainda estudar os aspectos não unitários da dinâmica (eq. (1.4.10)) para tempos muito menores que τ (embora possivelmente suficientemente longos para incluir várias oscilações de Rabi) utilizando a solução de campo médio dependente do tempo no lado direito da equação (1.4.10). Esse procedimento "perturbativo" mostra que a amplitude de ocupação $\alpha_0(t)$ associada à solução de campo médio (2.17) decresce com o tempo na escala τ , embora contendo oscilações na escala do tempo de Rabi τ_R ; ao mesmo tempo, cresce a amplitude de ocupação do "doorway", agora dependente do tempo,

$$|D(t)\rangle = [\alpha^\dagger - v^\dagger(t)] |v(t)\rangle \otimes e^{-z^\dagger(t)\sigma_+} |-\rangle e^{i\xi(t)} \quad (2.1.8)$$

$$\equiv |\Omega(t)\rangle \otimes |S(t)\rangle \quad \frac{1}{\sqrt{1+|z(t)|^2}}$$

que, no caso deste modelo, é novamente um estado fatorado, sendo os fatores ortogonais aos da eq. (2.1.7).

Dentro dos limites dessa aproximação, portanto, o estado do sistema no tempo $t < \tau$ aparece como dado por

$$|\psi(t)\rangle = \alpha_1(t) |t\rangle + \alpha_2(t) |D(t)\rangle \quad (2.1.9)$$

com $\alpha_1(0) = 1$ e $\alpha_2(0) = 0$. A densidade reduzida associada ao subsistema descrito por $\vec{\sigma}$ é então

$$\hat{\rho}(t) = \text{Tr}_{osc} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = |z(t)\rangle \alpha_1^2 |z(t)\rangle + |S(t)\rangle \alpha_2^2 |S(t)\rangle \quad (2.1.10)$$

onde Tr_{osc} significa o traço sobre o modo normal. Ela dá para $\langle \sigma_3 \rangle_t = \text{Tr} \sigma_3 \hat{\rho}(t)$ um comportamento oscilatório (com

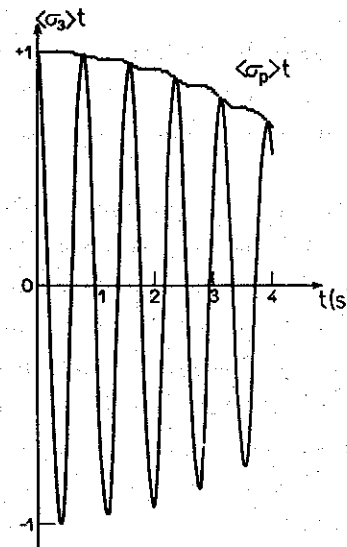


Fig.2 - v. texto à pag. 32

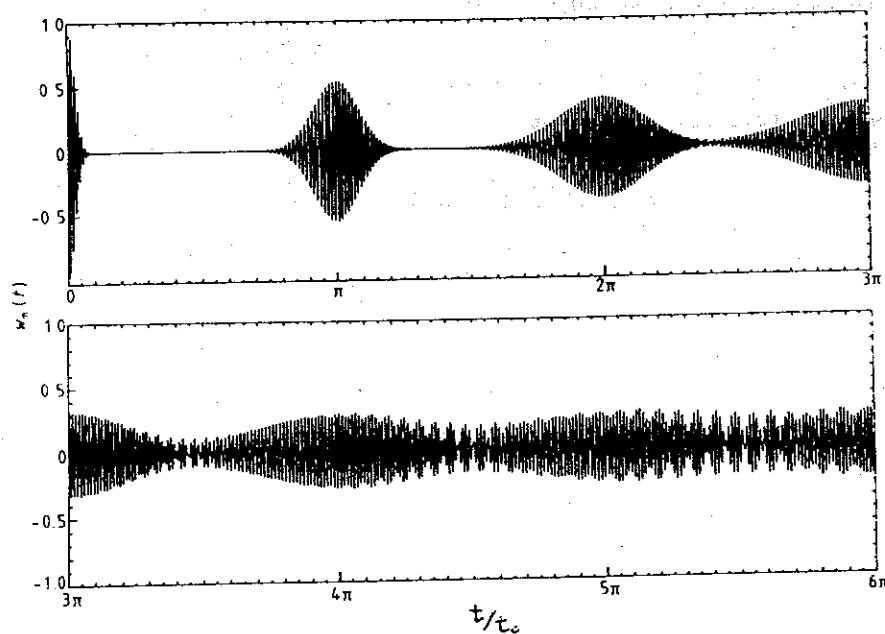


Fig.3 - v. texto à pag. 32

frequência de Rabbi) mas agora de amplitude decrescente, na escala τ , devido ao crescimento das correlações entre os subsistemas e ao conseqüente crescimento do termo envolvendo α_2^2 em $\hat{\rho}$.

A redução da amplitude das oscilações de Rabbi como conseqüência das correlações pode ser entendida fisicamente de uma forma muito simples. De fato, as correlações estão diretamente ligadas ao grau de mistura, na densidade reduzida $\hat{\rho}$, entre os dois estados ortogonais de spin $|z(t)\rangle$ e $|s(t)\rangle$. Esse grau de mistura se liga diretamente ao grau de polarização do spin, que pode ser medido através do valor esperado da projeção σ_p do operador de spin $\vec{\sigma}$ sobre a direção de polarização $\langle \vec{\sigma} \rangle_t / |\langle \vec{\sigma} \rangle_t|$:

$$\sigma_p = \vec{\sigma} \cdot \frac{\langle \vec{\sigma} \rangle_t}{|\langle \vec{\sigma} \rangle_t|}$$

Note que a direção de $\langle \vec{\sigma} \rangle_t$ sofre a precessão de Rabbi. Para o estado (2.1.7) é fácil verificar que $\langle \sigma_p \rangle = 1$, ou seja, o "spin" está sempre 100% polarizado. No caso da densidade reduzida (2.2.10), no entanto

$$\langle \sigma_p \rangle_t = \alpha_1^2(t) - \alpha_2^2(t).$$

Por outro lado, é fácil também calcular, da eq. (2.1.10),

$$\langle \sigma_3 \rangle_t = \frac{[\alpha_1^2(t) - \alpha_2^2(t)]}{1 + |z(t)|^2}$$

Nesta última expressão, o último fator contém as oscilações de Rabbi com amplitude constante que caracterizam a dinâmica de campo médio. O primeiro fator, igual a $\langle \sigma_p \rangle_t$, modula a amplitude dessas oscilações. Dessa forma, é possível pensar que, em geral, $\langle \sigma_3 \rangle_t$ revela a precessão de Rabbi da polarização intrínseca $\langle \sigma_p \rangle_t$ a qual está, como visto,

inteiramente vinculada às correlações entre os dois subsistemas.

As figuras abaixo ilustram numericamente esses resultados, bem como dão um exemplo de uma solução "exata" para $\langle \sigma_3 \rangle_t$, até tempos muito maiores que o tempo de correlação τ .

2.2 - Operadores de Projeção. Equações Pre-Cinéticas⁽¹⁾

Para estudar observáveis associadas a um dos subsistemas de um sistema composto (como é o caso das observáveis no modelo discutido na seção anterior) é suficiente dispor da densidade reduzida associada ao subsistema de interesse conforme eq. (2.2.10)). Nessas condições, seria também útil e conveniente dispor de equações dinâmicas efetivas que descrevem a evolução temporal das densidades reduzidas sem uma referência explícita à informação adicional contida no estado completo $|A(t)\rangle$ do sistema (note, por exemplo, que fases relativas entre diferentes estados naturais, essenciais para o estado $|A(t)\rangle$ (ver eq. (1.2.11)), são inteiramente irrelevantes para as densidades reduzidas $\hat{\rho}$ e \hat{R} , eqs. (1.2.9) e (1.2.12)). O fato de, no caso dos subsistemas, colocarmos a questão da evolução temporal em termos da densidade reduzida se deve a que, como já mencionado antes, o estado quântico do subsistema não é em geral um estado puro, ao qual pode ser associada uma função de onda, mas uma mistura incoerente, inclusive dependente do tempo, por força da dinâmica de correlações entre os subsistemas.

Equações de movimento formais para as densidades reduzidas podem ser escritas derivando as equações (1.2.9) e (1.2.12) em relação ao tempo, e usando as definições (1.4.4) e (1.4.5). O que se obtém assim é

$$i \dot{\hat{\rho}}(t) = [\hat{L}_1(t), \hat{\rho}(t)] + i \sum_i |u_i(t)\rangle \dot{p}_i(t) \langle u_i(t)| \quad (2.2.1)$$

$$i \dot{\hat{R}}(t) = [\hat{L}_2(t), \hat{R}(t)] + i \sum_i |v_i(t)\rangle \dot{p}_i(t) \langle v_i(t)| \quad (2.2.2)$$

O problema óbvio com essas equações é que elas não são fechadas, no sentido de que os ingredientes dinâmicos essenciais (que são os geradores \hat{h}_1 e \hat{h}_2 e os \hat{p}_i) foram escritos nas equações (1.4.6) a (1.4.8) em termos do estado $|A(t)\rangle$ completo, que como já dito, envolve informações adicional à que se torna imediatamente disponível através da integração de (2.2.1) e (2.2.2).

Para evitar essa dificuldade é preciso buscar expressões alternativas para os ingredientes dinâmicos que aparecem nessas duas equações que envolvam apenas as próprias densidades reduzidas. Dessa forma as equações (2.2.1) e (2.2.2) passam a constituir equações fechadas, descrevendo a dinâmica efetiva dos subsistemas, independentemente de uma referência constante e explícita ao estado $|A(t)\rangle$. Embora possa parecer excessivamente arrojada, uma tal empresa é viável com a técnica desenvolvida por Willis e Picard em 1974⁽¹⁰⁾.

Como o objetivo diz respeito às equações dinâmicas para densidades reduzidas, é conveniente tomar como ponto de partida a equação, essencialmente equivalente à (1.4.1), mas escrita para a densidade completa (cf. eq. (1.2.4))

$$\hat{F}(t) = |A(t)\rangle\langle A(t)| \quad (2.2.3)$$

Essa equação, conhecida como equação de Liouville von Neumann se obtém simplesmente derivando a (2.2.3) com relação a t e usando a (1.4.1):

$$i\hat{F}(t) = [\hat{H}, \hat{F}(t)] \quad (2.2.4)$$

Como $\text{Tr}_2 \hat{F}(t) = \hat{\rho}(t)$ e $\text{Tr}_1 \hat{F}(t) = \hat{R}(t)$, traços parciais levam a equações análogas às (2.2.1) e (2.2.2). No entanto, da mesma forma que , a densidade completa contém informação concernente a correlações que não é imediatamente disponível a partir de $\hat{\rho}(t) + \hat{R}(t)$.

O ponto crucial é que, embora não de forma imediata, a informação concernente a correlações pode ser obtida a partir das densidades reduzidas. Para mostrar isso, é preciso em primeiro lugar identificar e isolar essa informação de forma precisa. Dadas as densidades reduzidas, a densidade referente ao sistema composto

$$\hat{F}_0(t) = \hat{\rho}(t) \hat{R}(t) = \sum_{ij} |u_i v_j\rangle \rho_i \rho_j \langle u_i v_j| \quad (2.2.5)$$

é tal que $\text{Tr}_2 \hat{F}_0 = \hat{\rho}$ e $\text{Tr}_1 \hat{F}_0 = \hat{R}$, que são relações satisfeitas também por $\hat{F}(t)$. No entanto, $\hat{F}_0(t)$ é construída inteiramente a partir de $\hat{\rho}$ e \hat{R} , sem informação adicional. É claro então que as correlações entre os subsistemas estão contidas numa densidade $\hat{F}'(t)$, também referente ao sistema composto, tal que

$$\hat{F}(t) = \hat{F}_0(t) + \hat{F}'(t) \quad (2.2.6)$$

Propriedades imediatas de $\hat{F}'(t)$ são

$$\text{Tr}_1 \hat{F}'(t) = \text{Tr}_2 \hat{F}'(t) = \text{Tr}_1 \text{Tr}_2 \hat{F}'(t) = 0 \quad (2.2.7)$$

O problema do fechamento das dinâmicas efetivas (2.1.1.) e (2.1.2) se reduz agora ao de exprimir $\hat{F}'(t)$ em termos de $\hat{F}_0(t)$. Para conseguir isso Willis e Picard notam que \hat{F}_0 pode ser escrito como

$$\hat{F}_0(t) = \hat{\hat{\rho}}(t) \hat{\hat{R}}(t) \quad (2.2.8)$$

com

$$\hat{\hat{\rho}}(t) = \hat{\rho}(t) \text{Tr}_1 + \hat{R}(t) \text{Tr}_2 - \hat{\rho}(t) \hat{R}(t) \text{Tr}_1 \text{Tr}_2 \quad (2.2.9)$$

Esse objeto é um "operador" agindo sobre as densidades do sistema composto. Na realidade, as densidades $|u_i v_j\rangle\langle u_k v_l|$ (a densidade mais geral sendo uma combinação linear desses objetos) adquirem o status de base ortogonal num espaço vetorial complexo definido e produto escalar

$$\begin{aligned} & (|u_i v_j\rangle\langle u_k v_l|, |u_i' v_j'\rangle\langle u_k' v_l'|) \equiv \\ & \equiv \text{Tr} (|u_i v_j\rangle\langle u_k v_l|)^+ |u_i' v_j'\rangle\langle u_k' v_l'| = \\ & = \text{Tr} |u_k' v_l'\rangle\langle u_i' v_j'| |u_i v_j\rangle\langle u_k v_l| = \\ & = \langle u_i' v_j' | u_i v_j \rangle \langle u_k v_l | u_k' v_l' \rangle = \\ & = \delta_{ii'} \delta_{jj'} \delta_{kk'} \delta_{ll'}. \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

Dessa forma, $\hat{F}(t)$ adquire o status de vetor nêsse espaço vetorial de densidades, e $\hat{P}(t)$ é operador linear agindo nêsse espaço. Como as densidades são operadores no espaço de vetores de estado (amplitudes), os operadores como $\hat{P}(t)$ são às vêzes chamados "Superoperadores", e o espaço vetorial de densidades (probabilidades) é às vêzes chamado "espaço de Liouville".

Na realidade, é fácil verificar que $\hat{P}(t)$ é um operador de projeção no espaço de Liouville, isto é

$$\hat{P}(t) = \hat{P}^2(t)$$

Por construção, êsse é um operador de projeção dependente do tempo. Portanto, em geral

$$\frac{d}{dt} (\hat{P}(t) \hat{G}(t)) = \frac{d\hat{P}}{dt} \hat{G}(t) + \hat{P}(t) \frac{d\hat{G}}{dt}$$

No entanto, é fácil também verificar explicitamente que

$$\frac{d\hat{P}}{dt} \hat{F}(t) = 0$$

de modo que, quando age sobre $\hat{F}(t)$, $\hat{P}(t)$ é tal que

$$\frac{d}{dt} (\hat{P}(t) \hat{F}(t)) = \frac{d\hat{F}_0}{dt} = \hat{P}(t) \frac{d\hat{F}}{dt} \quad (2.2.11)$$

Desse modo, a projeção $\hat{P}(t)$ da equação de Liouville-von Neumann (2.24) dá

$$\begin{aligned} i \dot{\hat{F}}_0(t) &= \hat{P}(t) [\hat{H}, \hat{F}(t)] \equiv \\ & \equiv \hat{P}(t) \hat{L} \hat{F}(t) = \\ & = \hat{P}(t) \hat{L} (\hat{F}_0(t) + \hat{F}'(t)) \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

onde foi definido o superoperador que gera deslocamentos da densidade completa

$$\hat{L} \equiv [\hat{H}, \] ,$$

chamado o Liouvilliano do sistema composto.

Como projeção da (2.2.4), a (2.2.12) contém apenas parte da dinâmica do sistema composto. Para completá-la basta projetar novamente a (2.2.4) com o projetor complementar a \hat{P}

$$\hat{Q}(t) \equiv \hat{1} - \hat{P}(t),$$

sendo $\hat{1}$ a identidade do espaço de Liouville.

Isso dá

$$i \dot{\hat{F}}'(t) = \hat{Q}(t) \hat{L} (\hat{F}_0(t) + \hat{F}'(t)) \quad (2.2.13)$$

Essa é a equação que permite exprimir \hat{F}' em termos de \hat{F}_0 . De fato, reescrita como

$$\left[i \frac{d}{dt} - \hat{a}(t) \hat{L} \right] \hat{F}'(t) = \hat{a}(t) \hat{L} \hat{F}_0(t)$$

ela pode ser formalmente resolvida através do propagador (também um superoperador!)

$$\hat{G}(t, t') = T_{exp} -i \int_{t'}^t \hat{a}(\tau) \hat{L} \quad (2.2.14)$$

onde T_{exp} denota a exponencial ordenada temporalmente, dando

$$\hat{F}'(t) = \hat{G}(t, 0) \hat{F}'(0) - i \int_0^t dt' \hat{G}(t, t') \hat{a}(t') \hat{L} \hat{F}_0(t'). \quad (2.2.15)$$

Essa expressão não é inteiramente fechada em $\hat{F}_0(t)$ devido ao termo que contém as correlações iniciais $\hat{F}'(t=0)$. Na realidade, o segundo termo reconstrói o restante de $\hat{F}'(t)$ através de uma integral sobre o passado de $\hat{F}_0(t)$ e uma tal reconstrução é obviamente inviável para as correlações presentes no estado inicial, dado em $t=0$. É claro também que $\hat{F}'(0) = 0$ significa um estado inicial fatorizado, como é o caso da eq. (2.1.2) para o exemplo discutido do modelo de Jaynes-Cummings coerente.

Usando agora as eqs. (2.2.6) e (2.2.13) juntamente com a eq. (2.2.4), e também tomando traços parciais Tr_2 e Tr_1 desta última, resultam

$$i \dot{\hat{\rho}} = \text{Tr}_2 \hat{L} \hat{F}_0(t) + \text{Tr}_2 \hat{L} \hat{G}(t, 0) \hat{F}'(0) - i \text{Tr}_2 \int_0^t dt' \hat{L} \hat{G}(t, t') \hat{a}(t') \hat{L} \hat{F}_0(t') \quad (2.2.16)$$

e

$$i \dot{\hat{R}} = \text{Tr}_1 \hat{L} \hat{F}_0(t) + \text{Tr}_1 \hat{L} \hat{G}(t, 0) \hat{F}'(0) - i \text{Tr}_1 \int_0^t dt' \hat{L} \hat{G}(t, t') \hat{a}(t') \hat{L} \hat{F}_0(t'). \quad (2.2.17)$$

Os primeiros termos do lado direito dessas duas equações podem ser imediatamente reconhecidos como contribuições de campo médio às dinâmicas efetivas. De fato

$$\begin{aligned} \text{Tr}_2 \hat{L} \hat{F}_0(t) &= \text{Tr}_2 \hat{L} \hat{R}(t) \hat{\rho}(t) = \text{Tr}_2 (\hat{H} \hat{R} \hat{\rho} - \hat{R} \hat{\rho} \hat{H}) \\ &= [\text{Tr}_2 \hat{H} \hat{R}(t)] \hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t) [\text{Tr}_2 \hat{H} \hat{R}(t)] \equiv \hat{\ell}_1(t) \hat{\rho}(t) \end{aligned} \quad (2.2.18)$$

onde foram usadas a propriedade cíclica do traço e as definições

$$\hat{\ell}_1(t) = [\hat{\ell}_1^{(0)}(t),] \quad \text{e} \quad \hat{\ell}_1^{(0)}(t) = \text{Tr}_2 \hat{H} \hat{R}(t).$$

Analogamente

$$\text{Tr}_1 \hat{L} \hat{F}_0(t) = \hat{\ell}_2(t) \hat{R}(t). \quad (2.2.19)$$

É claro, por outro lado, que as equações (2.2.16) e (2.2.17) correspondem às equações (2.2.1) e (2.2.2), e isso permite identificar expressões fechadas para $\hat{h}_n(t)$, $n=1,2$ e $\hat{\rho}_i(t)$. Para separar esses dois ingredientes, que descrevem respectivamente os aspectos unitários e não unitários das dinâmicas efetivas, basta escrever as equações (2.2.16) e (2.2.17) na representação de estados naturais, na qual eles correspondem a termos não diagonais e diagonais, respectivamente (cf. eqs. (2.2.1) e (2.2.2)). O que se obtém dessa forma é

$$\begin{aligned}
 (p_j - p_i) \langle u_i | \hat{Q}_1 | u_j \rangle &= (p_j - p_i) \langle u_i | \hat{Q}_1^{(0)} | u_j \rangle + \\
 &+ \langle u_i | \text{Tr}_2 \left\{ \hat{L} \hat{G}(t, t') \hat{F}^{(0)} - i \int_0^t dt' \hat{L} \hat{G}(t, t') \hat{Q}(t') \hat{L} \hat{R}(t') \hat{p}(t') \right\} | u_j \rangle \\
 &\quad (i \neq j) \quad (2.2.20)
 \end{aligned}$$

$$\dot{p}_i(t) = \langle u_i | \text{Tr}_2 \left\{ \hat{L} \hat{G}(t, t') \hat{F}^{(0)} - i \int_0^t dt' \hat{L} \hat{G}(t, t') \hat{Q}(t') \hat{L} \hat{R}(t') \hat{p}(t') \right\} | u_i \rangle \quad (2.2.21)$$

além de duas equações análogas, envolvendo \hat{Q}_2 , $\hat{Q}_2^{(0)}$, Tr_1 e elementos de matriz em estados naturais $|v_i\rangle$ do segundo subsistema. Devido à identidade dos espectros de $\hat{p}(t)$ e $\hat{R}(t)$ no caso em que $\hat{F}(t)$ é independente (v. secção 1.2), as duas formas distintas da equação para \dot{p}_i são, nesse caso, equivalentes, embora isso não ocorra no caso de uma $\hat{F}(t)$ geral, envolvendo misturas (v. ref. (1), apêndice A, a respeito deste caso).

O último termo das equações (2.2.20) e (2.2.21) provém das correlações entre os subsistemas. É claro portanto que tais correlações afetam tanto os aspectos unitários (evolução temporal dos estados naturais) quanto os aspectos não unitários (evolução temporal das probabilidades de ocupação) das dinâmicas efetivas dos subsistemas. Por outro lado, os efeitos de campo médio, no sentido da eq. (2.2.18) não afetam as probabilidades de ocupação, que dessa forma evoluem exclusivamente devido à dinâmica das correlações.

Como último desenvolvimento formal, é possível reescrever a equação (2.2.21), para as probabilidades de ocupação p_i , sob a forma de uma equação de balanço (master equation), embora não linear e incluindo efeitos de memória. A não linearidade resulta basicamente de que o lado direito dessa equação contém o produto $\hat{R}(t)\hat{p}(t)$ e é portanto não linear nas probabilidades de ocupação $p_i(t')$. O objeto essencial que figura no integrando do último termo de (2.2.21)

$$\begin{aligned}
 &\text{Tr}_2 \left[\hat{L} \hat{G}(t, t') \hat{Q}(t') \hat{L} \hat{R}(t') \right] \equiv \\
 &\equiv \sum_{j' l'} \langle u_j(t) | u_{j'}(t) \rangle \sum_{i i'} \Gamma_{j' l'; j' l'}^{i i'}(t, t') p_i(t') \langle u_j(t') | u_{j'}(t') \rangle \\
 &\quad (2.2.22)
 \end{aligned}$$

onde foi usada a notação $\| \rangle$ para vetores no espaço de Liouville (densidades). Dessa forma, por exemplo

$$\| u_j(t) | u_l(t) \rangle \equiv | u_j(t) \rangle \langle u_l(t) | \quad (2.2.23)$$

$$\begin{aligned}
 &\langle u_i | u_j \| u_k | u_l \rangle \equiv (| u_i \rangle \langle u_j |, | u_k \rangle \langle u_l |) = \\
 &= \text{Tr}_1 | u_j \rangle \langle u_i | u_k \rangle \langle u_l | = \delta_{ik} \delta_{jl}
 \end{aligned}$$

(compare com a equação (2.2.10)!). Os coeficientes Γ que aparecem na (2.2.22) são definidos por

$$\begin{aligned}
 &\Gamma_{j' l'; j' l'}^{i i'}(t, t') \equiv \\
 &\equiv \langle u_j(t) | u_{j'}(t) \| \langle u_i(t) | u_{i'}(t) \| \hat{L} \hat{G}(t, t') \hat{Q}(t') \hat{L} | u_{j'}(t') \rangle | u_{i'}(t') \rangle
 \end{aligned}$$

Nessa representação está sendo usada a completeza das densidades (2.2.23) e das correspondentes, escritas em termos dos $|v_i\rangle$, nos espaços de Liouville associados a cada um dos sistemas, tanto no tempo t quanto no tempo t' . Inserindo a (2.2.22) na (2.2.21), com $\hat{F}^{(0)} = 0$, resulta

$$\dot{p}_l = - \int_0^t dt' \sum_{i j k} \Gamma_{l l'; j j'}^{i k}(t, t') p_j(t') p_k(t').$$

A conservação da probabilidade total, $\sum_l \dot{p}_l = 0$, permite ainda reescrever esta última equação de balanço na forma padrão

$$\dot{p}_l = \sum_{k \neq l} \int_0^t dt' M_{lk}(t, t') p_k(t') - \sum_{k \neq l} \int_0^t dt' M_{kl}(t, t') p_l(t') \quad (2.2.24)$$

com as "probabilidades de transição" (de fato, núcleos de transição incluindo efeitos de memória)

$$M_{lk}(t, t') = - \sum_{ij} \Gamma_{ll; ij}^{ik}(t, t') p_j(t'). \quad (2.2.25)$$

A não linearidade referida acima aparece manifestamente através da presença das probabilidades de ocupação também na definição (2.2.25). O primeiro termo da (2.2.24) pode, como é usual, ser visto como um "térmo de ganho" (aumento de p_l devido a transições que partem de estados $k \neq l$) ao passo que o segundo termo é o "térmo de perda" (diminuição de p_l devida a transições para estados $k \neq l$).

Alternativamente, e independentemente da separação explícita de efeitos unitários e não unitários, as equações (2.2.16) e (2.2.17), com $\hat{F}'(0) = 0$, são na realidade equações do tipo de equações cinéticas acopladas para as densidades reduzidas $\hat{\rho}(t)$ e $\hat{R}(t)$. Elas diferem de equações cinéticas fenomenológicas usuais pela presença de efeitos de memória (integrals sobre $t' < t$) e é por isso conveniente chama-las equações pré-cinéticas. São precisamente esses efeitos que não permitem, em geral, concluir pela irreversibilidade da evolução temporal das densidades reduzidas. A forma dessas equações, no entanto, sugere eventualmente uma "propensão" à irreversibilidade nêsse nível. De fato, dentro dos limites de validade de aproximação que ignorem tais efeitos de memória é possível instalar comportamentos irreversíveis na evolução temporal de $\hat{\rho}(t)$ e $\hat{R}(t)$ (34).

Talvez seja útil, a esta altura, repensar brevemente a

discussão anterior do modelo de Jaynes-Cummings coerente (secção 2.1) nos termos das equações (2.2.10) e (2.2.21). Em primeiro lugar, a condição inicial (2.1.2) implica $\hat{F}'(0) = 0$ (a ausência de correlações iniciais). A aproximação de campo médio ali calculada corresponde a substituir a equação (2.2.21) inicialmente por $\dot{p}_l = 0$ e usar a equação (2.2.20) juntamente com a sua correspondente para $\hat{a}_2(t)$, ignorando as respectivas integrais de memória que contém os efeitos de correlação sobre a evolução temporal dos estados naturais. O cálculo "perturbativo" dos efeitos de correlação sobre as probabilidades de ocupação é então equivalente à integração da (2.2.21) utilizando as soluções obtidas na aproximação de campo médio para $\hat{R}(t')$ e $\hat{\rho}(t')$ na integral de memória. Nessas condições $\hat{a}(t) \hat{L} \hat{R}(t') \hat{\rho}(t')$ é essencialmente uma densidade fatorada envolvendo o "doorway" (2.1.8) e o propagador $\hat{G}_T(t, t')$ envolve evoluções temporais na aproximação de campo médio. Vale a pena notar que, por ser formulado em termos de amplitudes, o cálculo descrito na secção 2.1 evita a consideração explícita de efeitos de memória.

As equações pré-cinéticas são equações exatas que descrevem de forma fechada a dinâmica efetiva dos subsistemas. Além do interesse que tem por exhibir a estrutura geral dessa dinâmica efetiva, e apesar de sua complexidade, elas de prestam a aproximações trabalháveis. Um exemplo disso pode ser encontrado nas refs. (4), onde uma aproximação simples das equações pré-cinéticas é utilizada para estudar a forma de linha resultante do acoplamento de um modo nuclear coletivo (tratado como um dos subsistemas) a outros modos do sistema (que constituem o segundo subsistema). Esses modos são aí descritos em termos de um modelo esquematizado que não envolve qualquer referência explícita à estrutura microscópica do sistema nuclear. A possibilidade de tratar modelos desse tipo é uma consequência direta da generalidade da definição de

subsistema no estabelecimento das equações pré-cinéticas.

Nos capítulos seguintes discutiremos uma adaptação desses métodos e idéias para tratar a dinâmica efetiva da densidade de um corpo em um sistema de partículas idênticas. Uma modificação importante será distinguir no tratamento as cor relações associadas à estatística das partículas, afim de não comprometê-las com as aproximações que se façam necessárias para o tratamento da dinâmica.

3.1 - Subsistemas de muitos fermions idênticos. Densidade de um corpo, dinâmica e hierarquias^(2a)

Um "subsistema" óbvio a ser considerado num sistema de muitas partículas idênticas é o subsistema de uma partícula. A identidade das partículas dispensa que se especifique qual partícula, todos os subsistemas de uma partícula sendo necessária e rigorosamente equivalentes. Analogamente ao que foi feito no capítulo 1, o estado do subsistema de uma única partícula de um sistema de A partículas idênticas, cujo estado é descrito pela função de onda

$$\phi(r_1, r_2, \dots, r_A) = \langle r_1 r_2 \dots r_A | \phi \rangle \quad (3.1.1)$$

é descrito por uma densidade de um corpo, escrito como um traço parcial sobre a densidade completa associada ao estado de muitos corpos (3.1.1.):

$$\rho(r, r') \equiv \langle r | \hat{\rho} | r' \rangle = \int dr_2 \dots \int dr_A \langle r_1 r_2 \dots r_A | \phi \rangle \langle \phi | r'_1 r_2 \dots r_A \rangle \quad (3.1.2)$$

A identidade das partículas implica que a densidade completa seja simétrica por uma permutação dos rótulos das partículas, o que garante que o traço (3.1.2) seja invariante por uma tal permutação. O programa a ser desenvolvido nêsse contexto consiste então em obter uma equação pré-cinética para a densidade de (3.1.2). Vamos fazer isso para o caso, tecnicamente um pouco mais simples, de fermions idênticos, isto é, para o caso em que o estado (3.1.1) é completamente antissimétrico nos rótulos das partículas. Êsses rótulos serão sempre escritos, por simplicidade, como r_i , entendendo que os graus de liberdade internos das partículas (spin, eventualmente isospin ou outros graus de liberdade internos) estão incluídos (implicitamente) nêsse símbolo. Isto é, por extenso, de ve-se ler $(\vec{r}_i, s_i, t_i, \dots)$ no lugar de r_i .

A forma mais conveniente de tratar sistemas de partícu

las idênticas é através das técnicas chamadas de segunda quantização, que será suposta conhecida. Dessa forma, o estado $|\Phi\rangle$ é um vetor pertencente ao setor de A partículas do espaço de Fock e a densidade de um corpo (3.1.2) pode ser escrita simplesmente, em termos dos operadores de campo de criação $\psi^\dagger(r)$ e de aniquilação $\psi(r)$ sob a forma do valor esperado

$$\langle r|\hat{\rho}|r'\rangle = \langle \Phi|\psi^\dagger(r)\psi(r')|\Phi\rangle \quad (3.1.3)$$

No caso de fermions, êsses operadores satisfazem às regras de anticomutação

$$\begin{aligned} \{\psi(r), \psi^\dagger(r')\} &\equiv \psi(r)\psi^\dagger(r') + \psi^\dagger(r')\psi(r) = \delta(r-r') \\ \{\psi(r), \psi(r')\} &= \{\psi^\dagger(r), \psi^\dagger(r')\} = 0. \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

(No caso de bosons basta substituir os anticomutadores por comutadores). Os operadores de campo podem ser expandidos num conjunto ortonormal completo $\{u_\alpha(r)\}$ de estados de uma partícula

$$\psi^\dagger(r) = \sum_\alpha u_\alpha^*(r) a_\alpha^\dagger \quad (3.1.5)$$

sendo imediato verificar, da ortonormalidade dos $u_\alpha(r)$ e das regras de (anti)-comutação dos operadores de campo, que os operadores a_α^\dagger , coeficientes da expansão (3.1.5), satisfazem

$$\begin{aligned} \{a_\alpha, a_\beta^\dagger\} &= \delta_{\alpha\beta} \\ \{a_\alpha, a_\beta\} &= \{a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger\} = 0 \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

É possível também verificar que

$$u_\alpha(r) = \langle \psi(r) a_\alpha^\dagger | \rangle$$

onde $| \rangle$ (o "vácuo") é ket normalizado, $\langle | \rangle = 1$, e suposto único do espaço de Fock com a propriedade de ser aniquilado por todos os a_α (ou, equivalentemente, por todos os $\psi(r)$):

$$a_\alpha | \rangle = \psi(r) | \rangle = 0$$

A densidade de um corpo $\hat{\rho}$ pode também ser representada na base dos $\{u_\alpha(r)\}$:

$$\begin{aligned} \langle u_\alpha | \hat{\rho} | u_\beta \rangle &\equiv \rho_{\alpha\beta} = \int dr \int dr' u_\alpha^*(r) \langle r | \hat{\rho} | r' \rangle u_\beta(r') \\ &= \langle \Phi | a_\beta^\dagger a_\alpha | \Phi \rangle = \text{Tr} a_\beta^\dagger a_\alpha \hat{F} \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

onde, em analogia com a eq. (2.2.3), $\hat{F} = |\Phi\rangle\langle\Phi|$. É claro também que

$$\rho_{\alpha\beta}^* = \langle u_\beta | \hat{\rho} | u_\alpha \rangle = \langle \Phi | a_\alpha^\dagger a_\beta | \Phi \rangle = \rho_{\beta\alpha} \quad (3.1.8)$$

isto é, $\hat{\rho}$ é hermiteano. Por outro lado,

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_\alpha \rho_{\alpha\alpha} = \langle \Phi | \sum_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha | \Phi \rangle = A, \quad (3.1.9)$$

dado que $\hat{N} = \sum_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha = \sum_\alpha \hat{n}_\alpha$ é o operador número de partículas (no espaço de Fock), e que $|\Phi\rangle$ pertence ao setor de A partículas desse espaço. Os operadores \hat{n}_α correspondem ao número de partículas no estado de partícula independente $u_\alpha(r)$. Devido às regras de anticomutação (3.1.6), no caso de fermions, êsses operadores hermiteanos são idempotentes $\hat{n}_\alpha^2 = \hat{n}_\alpha$ isto é, êles são operadores de projeção or

togonais.

As propriedades (3.1.8) e (3.1.9) (hermiticidade e traço finito) garantem, através do teorema de Hilbert-Schmidt⁽¹⁵⁾, que: a) $\hat{\rho}$ pode ser diagonalizado, isto é, existem estados de partícula independente $u_\lambda(r)$ normalizáveis e satisfazendo a equação de autovalores

$$\int dr' \langle r | \hat{\rho} | r' \rangle u_\lambda(r') = p_\lambda u_\lambda(r) \quad (3.1.10)$$

ou, na representação dos $\{u_\alpha(r)\}$,

$$\sum_\beta \rho_{\alpha\beta} u_{\lambda\beta} = p_\lambda u_{\lambda\alpha} \quad (3.1.11)$$

com

$$u_\lambda(r) = \sum_\alpha u_{\lambda\alpha} u_\alpha(r);$$

e que b) os autovalores p_λ formam um conjunto discreto, possivelmente infinito, sendo neste caso o único ponto de acumulação possível $p_\lambda = 0$. Além disso, definindo (cf. equação (3.1.5))

$$a_\lambda^+ = \int dr u_\lambda^*(r) \psi^+(r), \quad (3.1.12)$$

e notando que

$$p_\lambda = \langle \phi | a_\lambda^+ a_\lambda | \phi \rangle \quad (3.1.13)$$

é a norma do vetor $a_\lambda | \phi \rangle$ (no setor de A-1 partículas do espaço de Fock), segue que os autovalores p_λ são positivos ou nulos:

$$p_\lambda \geq 0. \quad (3.1.14)$$

A densidade de um corpo pode então ser escrita como

$$\langle r | \hat{\rho} | r' \rangle = \sum_\lambda u_\lambda(r) p_\lambda u_\lambda^*(r') \quad (3.1.15)$$

e, pela conservação do traço,

$$\text{Tr } \hat{\rho} = \sum_\lambda p_\lambda = A. \quad (3.1.16)$$

Existe então um paralelismo óbvio entre as equações (3.1.10) ou (3.1.11) e (3.1.15), por um lado, e as equações (1.2.8) e (1.2.9) do capítulo 1, por outro. As autofunções $u_\lambda(r)$ são portanto, enquanto representativas de estados de uma partícula, os estados naturais associados à densidade de um corpo $\hat{\rho}$. Tais estados naturais são usualmente chamados, por isso, de orbitais naturais do sistema de muitos fermions. Os autovalores p_λ são as probabilidades de ocupação desses orbitais naturais no estado de A corpos, $|\phi\rangle$.

A dinâmica da densidade de um corpo $\hat{\rho}$ pode ser analisada tomando o traço da equação de Liouville-von Neumann (2.2.4) com o operador $a_\beta^+ a_\alpha$ e usando a (3.1.7):

$$\begin{aligned} i \text{Tr } a_\beta^+ a_\alpha \hat{F} &= i \frac{d}{dt} \rho_{\alpha\beta} = \text{Tr } a_\beta^+ a_\alpha [\hat{H}, \hat{F}] = \\ &= \text{Tr } [a_\beta^+ a_\alpha, \hat{H}] \hat{F} = \langle \phi | [a_\beta^+ a_\alpha, \hat{H}] | \phi \rangle \end{aligned} \quad (3.1.17)$$

onde o lado direito foi reescrito usando a propriedade cíclica do traço. Essa equação não é, em geral, uma equação fechada para $\hat{\rho}$. De fato, no caso de uma Hamiltoniana que contenha, além de operadores de um corpo (e.g. energia cinética das partículas) uma interação de dois corpos, isto é

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | t | \beta \rangle a_\alpha^+ a_\beta + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | \tilde{v} | \gamma\delta \rangle a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\gamma a_\delta \quad (3.1.18)$$

onde $\langle \alpha\beta | \tilde{v} | \gamma\delta \rangle$ denota um elemento de matriz antissimétrico de dois corpos, o comutador, cujo valor esperado aparece do lado direito da (3.1.17), envolverá também operadores de dois corpos, isto é, essa equação envolverá, além da densidade de um corpo, quantidades do tipo

$$\langle \phi | a^\dagger a^\dagger a a | \phi \rangle$$

que estão associadas a uma densidade de dois corpos, a qual depende de correlações entre pares de partículas não contidas, de forma imediata, em $\hat{\rho}$. Uma tentativa de obter uma equação para a densidade de dois corpos, tomando o traço da (2.24) com operadores do tipo $a^\dagger a^\dagger a a$ conduz, do lado direito, a valores esperados em $|\phi\rangle$ de operadores de três corpos, exprimíveis em termos de uma densidade de três corpos, e assim por diante. O que se obtém ao longo dessa linha de procedimento, portanto, é uma hierarquia de equações acopladas, conhecida como hierarquia BBGKYR (Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood, Yvon, Rodriguez). Um caminho muitas vezes seguido no tratamento dessa hierarquia no sentido de obter equações cinéticas fechadas para a densidade de um corpo envolve o estudo de hipóteses ou condições que permitem, de alguma forma, truncá-la⁽²⁰⁾. Alternativamente, e usando um método de projeção análogo ao do capítulo anterior, é possível chegar a uma equação pré-cinética formal em que as contribuições dos vários níveis da hierarquia são condensados numa integral de memória.

3.2 - Truncamento por fatorização: a aproximação de Hartree-Fock-Dirac (Hartree-Fock dependente do tempo).

Um estado puro de um sistema de muitos fermions independentes é descrito por um determinante de Slater (normalizado)

$$\phi(r_1, \dots, r_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \text{Det} \{ u_{\alpha_i}(r_j) \} \quad i, j = 1, \dots, A$$

que corresponde, no espaço de Fock, ao estado (também normalizado)

$$|\phi\rangle = \prod_{i=1}^A a_{\alpha_i}^\dagger | \rangle \quad (3.2.1)$$

Note que, devido às regras de anticomutação dos a_α^\dagger (e à propriedade antissimétrica do determinante em relação à troca de linhas ou colunas) uma alteração da ordem dos $a_{\alpha_i}^\dagger$ no produto em (3.2.1) (bem como uma alteração da ordem das linhas do determinante de Slater) pode levar a uma alteração da fase do estado ϕ .

Na representação definida por uma base ortonormal que inclua os orbitais $u_{\alpha_i}(r)$ entre os seus elementos é imediato verificar que

$$\rho_{\alpha\beta} = \langle \phi | a_\beta^\dagger a_\alpha | \phi \rangle = \delta_{\alpha\beta} \chi_{\alpha_i} \quad (3.2.2)$$

onde a função $\chi_{\alpha_i}(\alpha)$ é definida como sendo 1 nos casos em que α é um dos estados incluídos em (3.2.1) e 0 em caso contrário. Os estados $u_\alpha(r)$ são portanto os orbitais naturais da densidade de um corpo determinantal, e esta tem autovalores 1 e 0 apenas. Por isso é claro que

$$\sum_\beta \rho_{\alpha\beta} \rho_{\beta\gamma} = \rho_{\alpha\gamma}$$

ou seja, como essa relação é invariante por uma transformação unitária qualquer da base ortonormal,

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \quad (3.2.3)$$

isto é, uma densidade de um corpo determinantal é um operador de projeção. Combinando a (3.2.2) com a (3.1.15) resulta, para a representação de $\hat{\rho}$ no espaço de configurações

$$\langle r | \hat{\rho} | r' \rangle = \sum_{i=1}^A u_{\alpha_i}(r) u_{\alpha_i}^*(r'), \quad (3.2.4)$$

Além de todas essas (bem conhecidas) propriedades dos determinantes de Slater e das densidades de um corpo associadas a eles, é fácil ainda verificar diretamente, a partir de (3.2.1), que a densidade de dois corpos pode ser escrita (para operadores a^+ , a relativos a uma base ortonormal qualquer) como

$$\langle \phi | a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\delta a_\gamma | \phi \rangle = \rho_{\gamma\alpha} \rho_{\delta\beta} - \rho_{\delta\alpha} \rho_{\gamma\beta} \quad (3.2.5)$$

isto é, ela pode ser expressa completamente em termos da densidade de um corpo. Note que ela não é simplesmente um produto de densidades de um corpo, mas uma combinação de produtos com uma estrutura determinantal. De fato

$$\rho_{\gamma\alpha} \rho_{\delta\beta} - \rho_{\delta\alpha} \rho_{\gamma\beta} = \text{Det} \begin{pmatrix} \rho_{\gamma\alpha} & \rho_{\gamma\beta} \\ \rho_{\delta\alpha} & \rho_{\delta\beta} \end{pmatrix}. \quad (3.2.6)$$

É possível verificar (por indução) que, no caso de um estado determinantal ϕ , a densidade de n corpos se reduz a um determinante de ordem n (o qual generaliza a 3.2.6) de densidades de um corpo. As estruturas determinantis do tipo da que aparece em (3.2.6) refletem o fato de que os fermions independentes são sujeitos sempre e de fato às correlações de Pauli, ligadas à antisimetria completa da função de onda $\phi(r_1, \dots, r_A)$.

As expansões (3.2.5) e (3.2.6) (ou suas generalizações para n corpos) são usualmente referidas como a "fatorização de Hartree-Fock" da densidade de dois corpos (de n corpos). Como visto, ela a rigor não é uma fatorização no sentido estrito, mas uma "fatorização antissimetrizada" que tem em conta as correlações de Pauli.

Com base na relação (3.2.5) Dirac propôs, em 1930⁽²¹⁾, um truncamento particulamente simples e imediato da hierarquia BBGKY, e que consiste simplesmente em usar essa relação para exprimir a densidade de dois corpos que aparece do lado

direito da equação (3.1.17) em termos da densidade de um corpo. Embora ela seja exata para um estado determinantal, essa fatorização envolve uma restrição à dinâmica, no sentido de que, ao contrário do que ocorre na dinâmica exata, a densidade de um corpo permanece uma densidade determinantal (isto é, satisfazendo à relação (3.2.3)) para todos os tempos. Em outras palavras, ao contrário do que ocorre com a dinâmica exata, a dinâmica truncada conserva a relação (3.2.3). Isso pode ser verificado calculando explicitamente o lado direito da (3.1.17), usando a (3.2.5) e a hamiltoniana (3.1.18). O que se obtém é

$$i \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{h}_{HF}[\hat{\rho}], \hat{\rho}] \quad (3.2.7)$$

onde a hamiltoniana de Hartree-Fock $\hat{h}_{HF}[\hat{\rho}]$, que é um operador de um corpo dado como um funcional da densidade de um corpo, tem a forma

$$\hat{h}_{HF}[\hat{\rho}] = \sum_{\alpha\gamma} t_{\alpha\gamma} a_\alpha^+ a_\gamma + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | \tilde{v} | \gamma\delta \rangle \rho_{\delta\beta} a_\alpha^+ a_\gamma. \quad (3.2.8)$$

Embora dependente da densidade de um corpo (e portanto do tempo), \hat{h}_{HF} é hermiteano, o que caracteriza a evolução temporal (3.2.7) como uma evolução temporal unitária da densidade de um corpo. Isso garante a conservação dos seus autovalores (1 ou 0) e portanto também da relação determinantal (3.2.3). A equação não linear (3.2.7), com a hamiltoniana (3.2.8), de finem a chamada aproximação de Hartree-Fock-Dirac, também chamada aproximação de Hartree-Fock dependente do tempo. A aproximação de Hartree-Fock estática usual resulta da (3.2.7) quando $\dot{\hat{\rho}} = 0$:

$$[\hat{h}_{HF}[\hat{\rho}_0], \hat{\rho}_0] = 0. \quad (3.2.9)$$

É útil comparar a aproximação de Hartree-Fock-Dirac

com a evolução temporal mais geral que se pode esperar da expressão (3.1.15). Neste caso, tanto as orbitais naturais $u_\lambda(r)$ como as probabilidades de ocupação p_λ poderão depender do tempo. Então

$$\frac{id\hat{p}}{dt} = \sum_\lambda \left[\frac{id\langle u_\lambda |}{dt} p_\lambda \langle u_\lambda | + |u_\lambda\rangle p_\lambda \frac{id\langle u_\lambda |}{dt} + |u_\lambda\rangle \frac{idp_\lambda}{dt} \langle u_\lambda | \right]. \quad (3.2.10)$$

Da ortogonalidade dos orbitais em todos os tempos (pois eles são autovetores do operador de Hilbert-Schmidt $\hat{\rho}(t)$), resulta que a sua evolução temporal é implementada por uma transformação unitária. Chamando $\hat{h}(t)$ o gerador hermiteano dessa transformação, a (3.2.10) pode ser reescrita como

$$\frac{id\hat{p}}{dt} = [\hat{h}(t), \hat{p}] + \sum_\lambda |u_\lambda(t)\rangle \frac{idp_\lambda}{dt} \langle u_\lambda(t)| \quad (3.2.11)$$

(cf. eqs. (2.2.1) e (2.2.2)). Note que o primeiro termo à direita da (3.2.10) é análogo ao da (3.2.7), embora não seja possível identificar em geral o gerador $\hat{h}(t)$ com a hamiltoniana de Hartree-Fock (3.2.8) (isto é, não é possível garantir, em geral, que $\hat{h}(t)$ tenha a forma particular dada por essa equação). O segundo termo do lado direito da (3.2.10), por outro lado, está ligado à evolução temporal das probabilidades de ocupação p_λ dos orbitais naturais. Como estas são os autovalores de \hat{p} , esse termo representa efeitos não unitários na evolução temporal de \hat{p} . Como vai ser mostrado adiante, de forma semelhante ao que foi visto no capítulo 2, esses efeitos estão ligados à evolução temporal de correlações dinâmicas entre as partículas, produzidas pelo termo de dois corpos da hamiltoniana \hat{H} (eq. (3.1.18)).

Essas considerações mostram ainda que a aproximação de Hartree-Fock-Dirac pode ser vista como uma aproximação de

campo médio, no sentido da secção 1.5, para a evolução temporal de uma densidade inicial determinantal. Os efeitos adicionais presentes na equação (3.2.10), seja na forma do campo médio efetivo $\hat{h}(t)$, seja pela presença de efeitos não unitários, estão ligados a efeitos de correlações dinâmicas de muitos corpos. As correlações de Pauli estão sempre incluídas exatamente, seja através da antissimetriação da função de onda, seja através das regras de anticomutação dos operadores de campo, em termos da linguagem de segunda quantização.

Como observação final, cabe notar que a fatorização de Hartree-Fock, eq. (3.2.5), pode ser utilizada independentemente da condição determinantal (3.2.3). Um caso notável em que isso é feito é chamada aproximação de Hartree-Fock a temperatura finita⁽²²⁾. Nesse caso, a equação estática (3.2.9) é resolvida adotando para as probabilidades de ocupação os fatores de Fermi

$$p_\lambda = \left(1 + e^{\frac{\epsilon_\lambda}{kT}} \right)^{-1} \quad (3.2.12)$$

onde as energias de partícula independente ϵ_λ são autovalores da hamiltoniana de Hartree-Fock (3.2.8). Como essa hamiltoniana depende da densidade, e através dela dos fatores (3.2.12), a solução envolve um problema de autoconsistência mais complexo que o da aproximação de Hartree-Fock determinantal. Esse problema, exceto no caso de modelos muito simples, é tratado através de técnicas numéricas.

4.1 - Projeção da densidade de muitos corpos. Equação pré cinética (2a)

Esta secção trata da questão de obter, através de um procedimento análogo ao usado na secção 2.2, uma equação dinâmica fechada para a densidade de um corpo $\hat{\rho}$ de um sistema de muitos fermions idênticos. O resultado, como no caso da discussão anterior, será uma equação précinética, fechada, para essa densidade. Ela incorpora, em particular, os efeitos de correlações dinâmicas no seu duplo aspecto de contribuir tanto para o campo médio efetivo $\hat{h}(t)$ como para os aspectos especificamente não unitários da dinâmica efetiva, $\dot{\hat{\rho}}$ (v. equação (3.2.11)). Embora isso não seja, a rigor, necessário, é possível através do uso dos orbitais naturais como uma representação dependente do tempo, separar explicitamente as duas classes de efeitos. De fato, representando a equação (3.2.11) na base de orbitais naturais no tempo t , resulta

$$i \langle u_\lambda | \frac{d\hat{\rho}}{dt} | u_\mu \rangle = \hat{h}_{\lambda\mu}(t) (\rho_\mu(t) - \rho_\lambda(t)) + i \dot{\hat{\rho}}_{\lambda\mu}(t) \delta_{\lambda\mu} \quad (4.1.1)$$

Essa equação identifica os aspectos unitários ($\hat{h}_{\lambda\mu}(t)$) e não unitários ($\dot{\hat{\rho}}_{\lambda\mu}(t)$) da dinâmica efetiva respectivamente com os termos não diagonais ($\lambda \neq \mu$) e diagonais ($\lambda = \mu$) de $\frac{d\hat{\rho}}{dt}$ na representação dos orbitais naturais. Comparando a equação (4.1.1.) com a (3.1.17) segue então que

$$\begin{aligned} \hat{h}_{\lambda\mu}(t) (\rho_\mu - \rho_\lambda) &= \langle \phi | [a_\mu^\dagger(t) a_\lambda(t), \hat{H}] | \phi \rangle = \\ &= \text{Tr} [a_\mu^\dagger a_\lambda, \hat{H}] \hat{F}(t), \lambda \neq \mu \quad (4.1.2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\rho}}_{\lambda\lambda}(t) &= -i \langle \phi | [a_\lambda^\dagger(t) a_\lambda(t), \hat{H}] | \phi \rangle = \\ &= \text{Tr} [a_\lambda^\dagger a_\lambda, \hat{H}] \hat{F}(t) \quad (4.1.3) \end{aligned}$$

Aqui os $a_\mu^\dagger(t)$, $a_\mu(t)$ são operadores de criação e de aniquilação definidos como na equação (3.1.5), em termos da base de orbitais naturais. A dependência de t provém da dependência temporal dessa particular base, que satisfaz as equações (3.1.10) ou (3.1.11), com $\hat{\rho}(t)$ obtida a partir do estado de muitos corpos dependente do tempo $|\phi(t)\rangle$.

Essas equações, mais uma vez, exibem explicitamente o caráter não fechado da equação (4.1.1.), pois os ingredientes dinâmicos essenciais são dados através delas, em termos da densidade completa $\hat{F}(t)$. Em particular, para uma hamiltoniana \hat{H} com forças de dois corpos, como é a (3.1.18), os comutadores contêm também termos de dois corpos, cujos traços se exprimem em termos de densidades de dois corpos. Isso representa, é claro, o primeiro degrau da hierarquia de BBGKYR.

Para evitar os acoplamentos recorrentes dessa hierarquia, e em analogia às equações (2.2.5) e (2.2.6), vamos procurar uma decomposição da densidade completa $\hat{F}(t)$ da forma

$$\hat{F}(t) = \hat{F}_0(t) + \hat{F}'(t) \quad (4.1.4)$$

em que $\hat{F}_0(t)$, que é uma densidade hermiteana de muitos corpos, descreve completamente os aspectos de um corpo da densidade completa, sem conter, porém, qualquer informação relativa às correlações dinâmicas (as correlações de Pauli, no entanto, devem ser levadas em conta). As correlações dinâmicas, portanto, serão descritas através do termo adicional $\hat{F}'(t)$.

No sentido de orientar a implementação da decomposição (4.1.4) é útil voltar, por um momento, à densidade de dois corpos. Ela pode ser escrita em geral como (cf. eq. (3.2.5))

$$\langle \phi | a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma | \phi \rangle = \rho_{\delta\alpha} \rho_{\beta\gamma} - \rho_{\delta\alpha} \rho_{\beta\gamma} + C_{\alpha\beta; \delta\gamma} \quad (4.1.5)$$

onde, por exemplo, $\rho_{\beta\alpha} = \langle \phi | a_\alpha^+ a_\beta | \phi \rangle$. No caso em que $|\phi\rangle$ é um determinante de Slater (ausência de correlações dinâmicas) o último termo se anula. Em geral, ele está ligado à estrutura das correlações dinâmicas presentes nesse estado. Dessa forma, a decomposição (4.1.4) deve ser tal que

$$\text{Tr } a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\delta a_\gamma \hat{F}_0(t) = \rho_{\beta\alpha} \rho_{\delta\gamma} - \rho_{\delta\alpha} \rho_{\beta\gamma} \quad (4.1.6)$$

e

$$\text{Tr } a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\delta a_\gamma \hat{F}'(t) = C_{\alpha\beta; \delta\gamma}$$

Em particular, \hat{F}' deve se anular quando $\hat{F}(t)$ está associada a um determinante de Slater. De uma forma mais geral, deve-se esperar que uma densidade de n corpos calculada a partir de $\hat{F}_0(t)$ se exprima como uma determinante de densidades de um corpo (cf. eq. (3.2.6)). A densidade de n corpos calculada a partir de $\hat{F}(t)$ diferirá então dessa através de termos de correlação análogos ao último termo da (4.1.5), provenientes de $\hat{F}'(t)$.

A forma geral de uma densidade de muitos fermions com as propriedades exigidas para $\hat{F}_0(t)$ é conhecida (22). Ela se exprime convenientemente no espaço de Fock, e tem a forma geral da exponencial de um operador hermiteano de um corpo:

$$\hat{F}_0 = \frac{\exp \sum_{\alpha\beta} m_{\alpha\beta} a_\alpha^+ a_\beta}{\text{Tr } \exp \sum_{\alpha\beta} m_{\alpha\beta} a_\alpha^+ a_\beta}, \quad m_{\alpha\beta} = m_{\beta\alpha}^* \quad (4.1.7)$$

de modo que $\text{Tr } \hat{F}_0 = 1 = \text{Tr } \hat{F}$. A matriz $m_{\alpha\beta}$ é determinada pelas condições

$$\text{Tr } a_\delta^+ a_\gamma \hat{F}_0 = \rho_{\delta\gamma} = \text{Tr } a_\delta^+ a_\gamma \hat{F}. \quad (4.1.8)$$

Para esclarecer o sentido das equações (4.1.7) e (4.1.8) é talvez útil lembrar alguns aspectos técnicos do cálculo de traços, no espaço de Fock, de expressões envolvendo objetos do tipo da equação (4.1.7)⁽²³⁾. Em primeiro lugar, é conveniente adotar, na (4.1.7), a representação de partícula independente que diagonaliza a matriz $m_{\alpha\beta}$. Chamando m_λ os autovalores dessa matriz, e a_λ^+ , a_λ os operadores de criação e aniquilação de fermions nessa representação, a (4.1.7) fica

$$\hat{F}_0 = \frac{\exp \sum_\lambda m_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda}{\text{Tr } \exp \sum_\lambda m_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda}, \quad m_\lambda = m_\lambda^*. \quad (4.1.9)$$

Os operadores $\hat{n}_\lambda = a_\lambda^+ a_\lambda$ são então operadores de projeção que comutam entre si. Isso permite reescrever o numerador da (4.1.9) como

$$\exp \sum_\lambda m_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda = \prod_\lambda e^{m_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda} = \prod_\lambda [(e^{m_\lambda} - 1) a_\lambda^+ a_\lambda + 1].$$

Na última passagem foi usado o fato de que $\hat{n}_\lambda^N = \hat{n}_\lambda$ para $N \geq 1$, além de $\hat{n}_\lambda^N = 1$ para $N = 0$. Por outro lado, $1 = a_\lambda^+ a_\lambda + a_\lambda a_\lambda^+$ de modo que, finalmente

$$\exp \sum_\lambda m_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda = \prod_\lambda (e^{m_\lambda} a_\lambda^+ a_\lambda + a_\lambda a_\lambda^+). \quad (4.1.10)$$

Para obter, agora, \hat{F}_0 é preciso dividir essa expressão pelo seu traço. Esse traço consiste na soma de todos os elementos de matriz diagonais numa base no espaço de Fock. A base conveniente é a dos autoestados dos \hat{n}_λ , rotulados pelos respectivos autovalores (números de ocupação dos estados λ), que são 0 ou 1 (fermions) para cada um dos estados λ . Dessa forma o traço é obtido somando as contribuições correspondentes a todas as combinações possíveis de números de ocupação. Isso dá

$$\text{Tr} \prod_{\lambda} (e^{m_{\lambda}} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + a_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger}) = \prod_{\lambda} (e^{m_{\lambda} + 1})$$

o que dá, para \hat{F}_0 ,

$$\begin{aligned} \hat{F}_0 &= \prod_{\lambda} \left[\frac{e^{m_{\lambda}}}{e^{m_{\lambda} + 1}} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + \frac{1}{e^{m_{\lambda} + 1}} a_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} \right] \\ &\equiv \prod_{\lambda} \left[p_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + (1 - p_{\lambda}) a_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} \right] \quad (4.1.11) \end{aligned}$$

com a definição

$$p_{\lambda} = \frac{e^{m_{\lambda}}}{e^{m_{\lambda} + 1}} \quad (4.1.12)$$

A notação utilizada nas equações (4.1.11) e (4.1.12) coincide com a utilizada até aqui para indicar orbitais naturais de \hat{p} e as respectivas probabilidades de ocupação. Essa identificação é na realidade o conteúdo da condição (4.1.7). No caso em que os autovetores de $m_{\alpha\beta}$ correspondem aos orbitais naturais, de fato

$$p_{\lambda\lambda} = \text{Tr} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{F}_0 \quad (4.1.13)$$

Calculando explicitamente esse traço resulta

$$\begin{aligned} \text{Tr} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{F}_0 &= \text{Tr} p_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \prod_{\mu \neq \lambda} [p_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} + (1 - p_{\mu}) a_{\mu} a_{\mu}^{\dagger}] \\ &= p_{\lambda} \quad (4.1.14) \end{aligned}$$

onde foi usado o fato, decorrente das regras de anticomutação para os a_{λ} , de que $a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} a_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} = 0$. A condição (4.1.7) corresponde portanto à seguinte prescrição para a construção de \hat{F}_0 : essa densidade tem a forma (4.1.11),

onde os p_{λ} são as probabilidades de ocupação dos orbitais naturais, e os a_{λ}^{\dagger} , a_{λ} são os operadores de criação e aniquilação de fermions associados à base de orbitais naturais. Como foi exigido, a densidade \hat{F}_0 fica completamente determinada unicamente a partir da densidade de um corpo \hat{p} . Propriedades do tipo da equação (4.1.6) por outro lado, podem também ser facilmente verificadas para densidades de muitos corpos escritas em termos de orbitais naturais. Assim, por exemplo,

$$\text{Tr} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} a_{\lambda} \hat{F}_0 = p_{\lambda} p_{\mu} = p_{\lambda\lambda} p_{\mu\mu} \quad (\lambda \neq \mu)$$

e

$$\text{Tr} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\lambda} a_{\mu} \hat{F}_0 = -p_{\lambda} p_{\mu} = -p_{\lambda\lambda} p_{\mu\mu} \quad (\lambda \neq \mu).$$

Por fim, vale a pena apontar a propriedade que determina a conveniência de escrever \hat{F}_0 como um operador no espaço de Fock. Como estamos supondo que a densidade completa $\hat{F}(t)$ descreve o estado de um sistema de A partículas

$$\text{Tr} \hat{N} \hat{F} = \langle \Phi | \hat{N} | \Phi \rangle = A$$

e também

$$\text{Tr} \hat{N}^2 \hat{F} = \langle \Phi | \hat{N}^2 | \Phi \rangle = A^2$$

pois $\hat{N} | \Phi \rangle = A | \Phi \rangle$. Essa propriedade se traduz, como é usual, na dispersão nula do operador número \hat{N} :

$$\langle \hat{N}^2 \rangle_{\hat{F}} - \langle \hat{N} \rangle_{\hat{F}}^2 = 0.$$

Repetindo o cálculo com \hat{F}_0 , o que se obtém é

$$\text{Tr } \hat{N} \hat{F}_0 = \sum_{\lambda} p_{\lambda} = A$$

e, como $\hat{n}_{\lambda}^2 = \hat{n}_{\lambda}$,

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{N}^2 \hat{F}_0 &= \text{Tr} \left(\sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + \sum_{\lambda \neq \mu} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} \right) \hat{F}_0 = \\ &= \sum_{\lambda} p_{\lambda} + \sum_{\lambda \neq \mu} p_{\lambda} p_{\mu} = \\ &= \sum_{\lambda} (p_{\lambda} - p_{\lambda}^2) + \sum_{\lambda \neq \mu} p_{\lambda} p_{\mu} = \\ &= \sum_{\lambda} p_{\lambda} (1 - p_{\lambda}) + A^2 \end{aligned}$$

A dispersão do operador número é então agora

$$\langle \hat{N}^2 \rangle_{\hat{F}_0} - \langle \hat{N} \rangle_{\hat{F}_0}^2 = \sum_{\lambda} p_{\lambda} (1 - p_{\lambda}) \quad (4.1.15)$$

que é em geral diferente de zero. De fato, o lado direito da (4.1.15) se anula somente quando os p_{λ} são 1 ou 0, ou se ja, no caso em que $|\phi\rangle$ é um determinante de Slater. A exigência de descrever corretamente as correlações de Pauli (embutidas nas relações do tipo (4.1.6)) e apenas as propriedades da densidade de um corpo só pode ser atendida, no caso geral de um estado não determinantal, por uma densidade que contenha uma flutuação não nula no número de partículas.

O resultado dessa discussão é portanto a possibilidade de implementar uma decomposição do tipo (4.1.4), análoga à (2.2.6). Explicitamente

$$\hat{F}(t) = \prod_{\lambda} [p_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + (1 - p_{\lambda}) a_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger}] + \hat{F}'(t). \quad (4.1.16)$$

Como $\text{Tr } \hat{F}(t) = 1 = \text{Tr } \hat{F}_0(t)$ segue ainda que $\text{Tr } \hat{F}'(t) = 0$. Para levar adiante o fechamento da equação de movimento efe-

tiva para a densidade de um corpo em analogia ao capítulo 2, é necessário ainda mostrar a existência de um operador de projeção $\hat{P}(t)$ tal que

$$\hat{P}(t) \hat{F}(t) = \hat{F}_0(t) \quad (4.1.17)$$

e

$$\frac{d\hat{P}}{dt} \hat{F}(t) = 0 \quad (4.1.18)$$

(cf. equações (2.2.8) e (2.2.11)). Um tal operador permitiria também escrever $\hat{F}'(t)$ como

$$\hat{F}'(t) = (\hat{I} - \hat{P}(t)) \hat{F}(t) \equiv \hat{Q}(t) \hat{F}(t). \quad (4.1.19)$$

A existência desse operador pode ser demonstrada construindo-o explicitamente, o que envolve um trabalho algébrico intrincado, extenso e não terrivelmente iluminante nos seus detalhes. O esquema geral da construção é o seguinte^(2a): como ponto de partida é fácil produzir um operador que, agindo sobre \hat{F} , produza N fatores da produtória que aparece em \hat{F}_0 , eq. (4.1.11). Esse operador é

$$\begin{aligned} \hat{P}_0^{(N)} &= \sum_{\lambda=1}^N \left[\prod_{\substack{\mu=1 \\ \mu \neq \lambda}}^N \left\{ p_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} + (1 - p_{\mu}) a_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} \right\} \left\{ a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \text{Tr}(a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda}) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + a_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} \text{Tr}(a_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger}) \right\} \right] - \\ &\quad - (N-1) \prod_{\mu=1}^N \left\{ p_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} + (1 - p_{\mu}) a_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} \right\} \text{Tr}(\cdot) \quad (4.1.20) \end{aligned}$$

onde o ponto (.) representa o operador do espaço de Fock sobre o qual age $\hat{P}_0^{(N)}$. De fato, é imediato verificar que

$$\hat{P}_0^{(N)} \hat{F} = \prod_{\mu=1}^N [p_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} + (1 - p_{\mu}) a_{\mu} a_{\mu}^{\dagger}].$$

Isso sugere que $\hat{\hat{P}}$ seja simplesmente o limite da (4.1.20) para $N \rightarrow \infty$. No entanto, o operador assim obtido não satisfaz à equação (4.1.18). O que é possível mostrar que

$$\frac{d\hat{P}_0}{dt} \hat{F} = -\hat{P}_1 \frac{d\hat{F}}{dt}$$

onde \hat{P}_1 é tal que $\hat{P}_1 \hat{F} = 0$:

$$\hat{P}_1 = \sum_{\mu} \sum_{\nu > \mu} \prod_{\lambda \neq \mu, \nu} \{ p_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + (1-p_{\lambda}) a_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} \} \times [c_{\mu}^{\dagger} c_{\nu} \text{Tr}(c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \cdot) + c_{\nu}^{\dagger} c_{\mu} \text{Tr}(c_{\mu}^{\dagger} c_{\nu} \cdot)] \quad (4.1.21)$$

Esse problema pode ser superado, no entanto, definindo $\hat{\hat{P}}$ como (o limite $N \rightarrow \infty$ de)

$$\hat{\hat{P}} = \hat{P}_0 + \hat{P}_1 \quad (4.1.22)$$

que, como pode ser verificado com um trabalho algébrico apreciável, tem todas as propriedades desejadas. A expressão resultante de (4.1.22), usando (4.1.20) e (4.1.21), pode também ser algébricamente simplificada dando finalmente

$$\hat{\hat{P}} = \left\{ \left[1 - \sum_{\mu} \frac{a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} - p_{\mu}}{1-p_{\mu}} \right] \text{Tr}(\cdot) + \sum_{\mu\nu} \frac{a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu} - p_{\mu} \delta_{\mu\nu}}{p_{\nu}(1-p_{\mu})} \text{Tr}(a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu} \cdot) \right\} \hat{F}_0 \quad (4.1.23)$$

Embora a verificação da propriedade (4.1.18) para esse operador exija um cálculo extenso, é fácil verificar a (4.1.17). A hermiticidade de $\hat{\hat{P}}$ é explícita, e a propriedade idempotente $\hat{\hat{P}}^2 = \hat{\hat{P}}$ também pode ser verificada com relativa simplicidade.

Convém enfatizar que os ingredientes envolvidos na (4.1.23) são os orbitais naturais e as probabilidades de ocupação, quantidades em geral dependentes do tempo. É a derivação dessa dependência temporal que dá origem ao operador \hat{P}_1 , eq. (4.1.21).

Dada a existência de $\hat{P}(t)$ é possível agora projetar a equação de Liouville-von Neumann (2.2.4) usando o operador $\hat{Q}(t) = \hat{1} - \hat{P}(t)$. Issodá

$$i\hat{Q}(t) \frac{d\hat{F}}{dt} = i \frac{d\hat{F}}{dt} = \hat{Q}(t) \hat{L} \hat{F}_0(t) + \hat{Q}(t) \hat{L} \hat{F}'(t)$$

ou seja

$$\left[i \frac{d}{dt} - \hat{Q}(t) \hat{L} \right] \hat{F}(t) = \hat{Q}(t) \hat{L} \hat{F}_0(t) \quad (4.1.24)$$

Essa equação pode ser resolvida formalmente como no caso do capítulo 2, usando o propagador (2.2.14) para obter novamente

$$\hat{F}'(t) = \hat{G}(t,0) \hat{F}'(0) - i \int_0^t \hat{G}(t,t') \hat{Q}(t') \hat{L} \hat{F}_0(t') \quad (4.1.25)$$

(cf. equação (2.2.15)!). Da mesma forma que antes, as correlações dinâmicas aparecem expressas em termos de uma integral sobre o passado de $\hat{F}_0(t)$, a menos do termo proveniente das correlações iniciais $\hat{F}'(0)$ (que é obviamente "irredutível ao passado"). Usando a eq. (4.1.25) na equação de movimento (3.1.17) se obtém então a equação pré-cinética (2a)

$$i \frac{dp_{\lambda\mu}}{dt} = \text{Tr} a_{\mu}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{L} \hat{F}_0(t) + \text{Tr} a_{\mu}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{L} \hat{G}(t,0) \hat{F}'(0) - i \text{Tr} a_{\mu}^{\dagger} a_{\lambda} \int_0^t \hat{L} \hat{G}(t,t') \hat{Q}(t') \hat{L} \hat{F}_0(t') \quad (4.1.26)$$

Pelo fato de que $\hat{F}_0(t)$ se exprime completamente em termos da densidade de um corpo, essa é uma equação fechada para essa densidade, a menos das correlações ligadas às condições iniciais. Comparando-a com a eq. (4.1.1.) é imediato identificar os geradores dos aspectos unitários e não

unitários (variação temporal das probabilidades de ocupação) da dinâmica efetiva de um corpo como sendo

$$h_{\lambda\mu}(t) [p_{\mu}(t) - p_{\lambda}(t)] = i \frac{dp_{\lambda\mu}}{dt}, \quad \lambda \neq \mu \quad (4.1.27)$$

e

$$\dot{p}_{\lambda}(t) = \frac{dp_{\lambda\lambda}}{dt} = -i \text{Tr} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{L} \hat{G}(t,0) \hat{F}'(0) - \text{Tr} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \int_0^t dt' \hat{L} \hat{G}(t,t') \hat{a}(t') \hat{L} \hat{F}_0(t') \quad (4.1.28)$$

O primeiro termo do lado direito da eq. (4.1.26) não aparece nesta última expressão porque ele se anula para $\lambda = \mu$. Isso pode ser visto usando a propriedade cíclica do traço:

$$\text{Tr} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} [\hat{H}, \hat{F}_0(t)] = \text{Tr} \hat{H} [\hat{F}_0(t), a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda}] = 0$$

pois, dada a forma (4.1.11) de $\hat{F}_0(t)$, o último comutador se anula.

4.2 - Correlações e termos de colisão. Aproximações simples.

Na realidade, o primeiro termo da (4.1.26) pode ser calculado explicitamente usando a (4.1.11) para \hat{F}_0 . O resultado é

$$\text{Tr} a_{\mu}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{L} \hat{F}_0(t) = (\hat{h}_{HF})_{\lambda\mu} (p_{\mu} - p_{\lambda}) \quad (4.2.1)$$

onde \hat{h}_{HF} é a hamiltoniana de Hartree-Fock, eq. (3.2.8), calculada com a densidade $p_{\lambda\mu} = p_{\lambda} \delta_{\lambda\mu}$. Isso mostra que a equação pré-cinética se reduz a equação de Hartree-Fock-Dirac quando todos os efeitos ligados a $\hat{F}'(t)$ são ignorados. Como mostram as eqs. (4.1.27) e (4.1.28), esses efeitos

de correlação contribuem tanto para o campo médio efetivo como para a dependência temporal das probabilidades de ocupação. Neste último caso, não há contribuições independentes de $\hat{F}'(t)$.

Deixando por um momento de lado o termo ligado a correlações iniciais (que, em particular, se anula para um estado inicial determinantal), as contribuições de correlação são exprimíveis em termos da densidade não correlacionada como

$$\text{Tr} a_{\mu}^{\dagger} a_{\lambda} \int_0^t dt' [\hat{H}, \hat{G}(t,t') \hat{a}(t') [\hat{H}, \hat{F}_0(t')]]. \quad (4.2.2)$$

Embora essa expressão não seja, em geral, imediatamente calculável devido à complexidade do propagador $\hat{G}(t,t')$, não é difícil interpretar a sua estrutura, o que serve também para sugerir aproximações trabalháveis. Em primeiro lugar, a densidade

$$\hat{a}(t') [\hat{H}, \hat{F}_0(t')] \quad (4.2.3)$$

representa as correlações dinâmicas (filtradas pelo projetor $\hat{a}(t) = \hat{1} - \hat{P}(t)$) presentes na derivada temporal da densidade de não correlacionada. Essas correlações são produzidas pela ação "perturbativa" do termo de dois corpos de \hat{H} (eq. 3.1.18) sobre $\hat{F}_0(t')$. A expressão (4.2.3) pode, de fato, ser explicitamente calculada^(2a), mostrando que não há contribuições provenientes do termo de um corpo (energia cinética) de \hat{H} .

Essas correlações dinâmicas são, em seguida, propagadas do tempo t' (no qual elas são produzidas) até o tempo t por meio de $\hat{G}(t,t')$. Como se pode ver da forma desse propagador (eq. (2.2.14)), a propagação das correlações (4.2.3) envolve a ação múltipla de $\hat{a}(t) \hat{L}$ que pode gerar correlações adicionais de ordem arbitrariamente elevada, impedindo sempre (através da ação de \hat{a}) que o sistema reverta a

uma densidade não correlacionada do tipo \hat{F}_0 . Finalmente, o último comutador com \hat{H} na (4.4.2) e o traço final definem as contribuições das correlações assim produzidas para a dinâmica efetiva de $\hat{\rho}$. O fato de que o traço envolve apenas o operador de um corpo $a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu}$, de fato restringe fortemente o nível de complexidade das correlações que podem contribuir, no tempo t , para a (4.2.2).

Essa análise mostra que a complexidade gerada através dos acoplamentos recorrentes da hierarquia BBGKYR se encontra agora encapsulada na complexidade do propagador $\hat{G}(t, t')$. Aproximações calculáveis à expressão (4.2.2) estão portanto ligadas a aproximações para esse particular objeto, que podem corresponder, ou não, a esquemas mais ou menos elaborados de truncamento da hierarquia. Um ponto que vale a pena enfatizar é que a adoção de uma dada aproximação para $\hat{G}(t, t')$ não compromete a estrutura geral da equação pré-cinética exata. As vantagens decorrentes do uso de expressões com a estrutura de expressões exatas em tratamentos fenomenológicos podem ser ilustradas, por exemplo, pelo poder, nesse tipo de análise, da chamada "regra áurea" de Fermi, obtida elementariamente em teoria de perturbações dependente do tempo de primeira ordem. Apesar disso, essa expressão para probabilidades de transição por unidade de tempo tem uma estrutura igual à de expressões formais exatas (nas quais, porém, os estados e/ou interações envolvidas têm expressões em geral não calculáveis). Outro exemplo, mais próximo ao contexto da presente discussão, são as expressões formais para observáveis associados a reações nucleares obtidas a partir das técnicas de projeção de Feshbach⁽²⁴⁾.

A equação (4.1.26) se apresenta, portanto, como uma extensão, formalmente exata, para a dinâmica efetiva da densidade de um corpo, cujo primeiro termo reproduz a aproximação mais simples de um campo médio dependente do tempo (Hartree-Fock-Dirac). Ao nível desse termo, as interações entre as partículas é tratada apenas através da intera-

ção de cada uma delas com o campo médio associado à própria densidade de partículas. Os termos adicionais, por outro lado, têm em conta as interações entre partículas ("colisões") que dão origem a correlações dinâmicas entre elas. Nesse sentido eles se ligam aos termos de colisão de equações cinéticas do tipo da equação de Boltzmann. Os termos associados às correlações dinâmicas são portanto termos de colisão quânticos que devem ser acrescentados à aproximação de Hartree-Fock-Dirac⁽⁵⁾. Sendo exatos, eles são em particular consistentes com as propriedades de inversão temporal da dinâmica quântica de muitos corpos, eq. (2.2.4).

Uma aproximação particularmente simples e transparente à equação pré-cinética (4.1.26) pode ser obtida no caso de sistemas de muitos fermions fracamente colisionais, embora possivelmente com efeitos fortes de campo médio. Os "líquidos de Fermi", estudados por Landau em 1956⁽²⁵⁾ são sistemas deste tipo, e a matéria nuclear em condições normais se enquadra nele (v. e.g. ref. ⁽²⁶⁾). Essa aproximação consiste em substituir o propagador $\hat{G}(t, t')$ por um propagador de campo médio na expressão (4.2.2)

$$\hat{G}(t, t') \rightarrow \hat{g}(t, t') = T \exp \int_{t'}^t dz \hat{l}(z) \quad (4.2.4)$$

onde $\hat{l}(z)$ corresponde ao superoperador $[\hat{Q}(z), \cdot]$. Aplicado à (4.2.3) esse propagador de fato agirá sobre as correlações "perturbativas" criadas por \hat{H} em t' sem possibilidade de reversão ao nível não correlacionado (o que torna desnecessária a inclusão do projetor $\hat{Q}(z)$ na (4.2.3)), e também sem a possibilidade de criação de correlações mais complexas. O efeito do propagador (4.2.4) é então transformar os orbitais do tempo t' (envolvidos nas correlações) em orbitais naturais do tempo t . Um cálculo algébrico longo mas direto dá então ^(2b,6)

$$\begin{aligned}
 \frac{d\rho_{\lambda\mu}(t)}{dt} &= \left(\hat{Q}_{HF} \hat{C} \hat{D}(t) \right)_{\lambda\mu} (\rho_{\mu} - \rho_{\lambda})_t + \quad (4.2.5) \\
 &+ \frac{i}{2} \sum_{\beta\gamma\delta} \int_0^t dt' \left[\langle \gamma\delta | \tilde{V} | \mu\beta \rangle \langle \lambda\beta | \tilde{V} | \gamma\delta \rangle_{t'} (\rho_{\lambda}\rho_{\beta}\rho_{\gamma}\rho_{\delta} - p \leftrightarrow q)_{t'} \right. \\
 &\left. + \langle \lambda\beta | \tilde{V} | \gamma\delta \rangle \langle \gamma\delta | \tilde{V} | \mu\beta \rangle_{t'} (\rho_{\mu}\rho_{\beta}\rho_{\gamma}\rho_{\delta} - p \leftrightarrow q)_{t'} \right]
 \end{aligned}$$

onde o termo envolvendo $\hat{F}'(0)$ foi ignorado. Nessa expressão, os elementos de matriz antissimetrizados de dois corpos são calculados com os orbitais naturais correspondentes ao tempo indicado sob a forma de índice (t, t') . As probabilidades de ocupação $p, q \equiv 1-p$ são também calculadas nos tempos indicados, e a notação $p \leftrightarrow q$ indica um termo análogo ao anterior onde p's são substituídos por q's e vice versa. O último termo da (4.2.5), a menos dos efeitos de memória ainda presentes, já adquire uma forma análoga à do termo de colisão de Uehling-Uhlembeck, para fermions⁽²⁷⁾.

Em particular, a presença dos chamados "fatores de Fermi" (p's e q's) indica a natureza não linear desse termo.

Finalmente, vale a pena notar que a eq.(4.2.5) é na realidade uma equação diferencial com memória e não, a rigor, uma equação integro-diferencial. De fato, a integral se anula para $t=0$ e, para $t>0$, pode ser calculada com a densidade $\hat{\rho}(t)$ já obtida para os tempos anteriores, $t' < t$. Isso torna mais simples o tratamento da (4.2.5) por métodos numéricos. Um exemplo de tal tratamento será apresentado no capítulo 5.

5 - Aplicações: efeitos colisionais em sistemas de muitos fermions.

Este último capítulo descreve algumas aplicações dos resultados gerais obtidos a alguns modelos de tratamento mais simples. Esses modelos vão desde um modelo unidimensional, esquemático até um modelo mais realístico para a matéria infinita. De passagem, é discutido o problema de interações nucleares efetivas e sua relação com os efeitos de correlação. Além dessas aplicações, uma discussão, ao nível formal, da resposta linear de sistemas finitos com a inclusão de efeitos colisionais pode ser encontrada nas referências (2b) a (2d). Por outro lado, a referência (28) mostra como reobter os resultados dos capítulos 3 e 4 a partir das expansões de campo médio para sistemas de muitos corpos baseados em técnicas de integração funcional⁽²⁹⁾. Isso, em particular, permite relacionar as aproximações discutidas com a expansão em "loops"⁽³⁰⁾, usada nos domínios da teoria de campos.

5.1 - Colisões num gás de Fermi em uma dimensão. Energia de correlação e relaxação⁽⁸⁾

O sistema mais simples em que é possível resolver (numericamente) a equação (4.2.5) é um gás de Fermi não ideal, translacionalmente invariante, a partir de um estado inicial determinantal. Embora um tal estado possa ser construído de forma a ser estável na aproximação de campo médio (estado estacionário de Hartree-Fock), os efeitos colisionais contidos no segundo termo do lado direito da (4.2.5) dão lugar a um processo de evolução temporal associado ao estabelecimento de correlações entre os Fermions. Isso leva à ocupação parcial de estados acima do nível de Fermi e ao concomitante esvaziamento parcial de estados abaixo do nível de Fermi, com um aumento da energia calculada na aproximação de campo médio. Esse aumento é todavia compensado por uma energia de correlação, garantindo, como seria de esperar, a conservação

da energia total.

A simplificação essencial para o tratamento numérico provém da invariança translacional do sistema. Isso, de fato, faz com que a densidade de um corpo $\langle x | \hat{\rho} | x' \rangle$ seja uma função apenas da quantidade translacionalmente invariante $x-x'$. Os orbitais naturais são portanto ondas planas sempre, o que torna desnecessário o cálculo laborioso de orbitais naturais dependentes do tempo. Essa mesma simplificação, que permite identificar "a priori" os orbitais naturais, torna trivial também a solução do problema (não linear) de Hartree-Fock estático para sistemas desse tipo. (31)

A hamiltoniana do modelo é então

$$\hat{H} = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_k^\dagger a_k + \frac{1}{4} \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k_3, k_4}} \langle k_1 k_2 | \tilde{v} | k_3 k_4 \rangle a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_4} a_{k_3} \quad (5.1.1)$$

em termos de uma base de ondas planas com condições periódicas de contorno, $L^{-1/2} \exp i k x$. Os elementos de matriz de dois corpos, são antissimetrizados na (5.1.1). A interação usada consiste de um potencial central gaussiano, independente de spin,

$$v(x-x') = V_0 \exp -\frac{1}{b^2} (x-x')^2$$

para o qual os elementos de matriz antissimetrizados são explicitamente

$$\langle k_1 \lambda_1, k_2 \lambda_2 | \tilde{v} | k_3 \lambda_3, k_4 \lambda_4 \rangle = \frac{\sqrt{\pi} b}{L} V_0 \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \times \left[\delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} e^{-\frac{b^2}{4} (k_1-k_3)^2} - \delta_{\lambda_1 \lambda_4} \delta_{\lambda_2 \lambda_3} e^{-\frac{b^2}{4} (k_1-k_4)^2} \right] \quad (5.1.2)$$

onde os rótulos λ_i se referem aos estados de spin das partículas (implícitos na eq. (5.1.1)). Os parâmetros V_0 e b do potencial são fixados de forma que, na aproximação de campo médio, o momento de Fermi corresponda à densidade de satu

ração da matéria nuclear.

Com as simplificações decorrente da invariança translacional, a eq. (4.2.5) se reduz então a

$$\dot{p}_k(t) = - \sum_{k_1 k_2 k_3} \int_0^t dt' \operatorname{Re} \left[\langle k_2 k_3 | \tilde{v} | k k_1 \rangle_t \langle k k_1 | \tilde{v} | k_2 k_3 \rangle_{t'}^* \times (p_k p_{k_1} q_{k_2} q_{k_3} - p_{k \leftrightarrow q})_{t'} \right] \quad (5.1.3)$$

onde, dentro da aproximação utilizada, a evolução temporal dos orbitais é dada pela equação de campo médio (note que $\hat{h}(t)$ é diagonal na representação de momentos)

$$i \frac{\partial |k\rangle_t}{\partial t} = h_k(t) |k\rangle_t \quad (5.1.4)$$

com

$$h_k(t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sum_{k_1} \langle k k_1 | \tilde{v} | k k_1 \rangle p_{k_1}(t). \quad (5.1.5)$$

Dessa forma, a integração temporal na (5.1.3) envolve além das probabilidades de ocupação dependentes do tempo, fatores de fase envolvendo as energias de partícula independente (5.1.5), as quais por sua vez dependem também das probabilidades de ocupação.

Com êsses ingredientes é possível obter numericamente as probabilidades de ocupação $p_k(t)$ a partir dos seus valores iniciais, $p_k(0) = 1$ ou zero para um estado inicial determinantal (para o qual $\hat{F}'(0) = 0$). O resultado de um cálculo desse tipo para o estado fundamental de Hartree-Fock e para um estado excitado determinantal (que inclui uma faixa de estados não ocupados abaixo do momento de Fermi) aparece na fig.4. Note que, na aproximação de campo médio, êsses dois estados são estados estacionários (soluções da equação (3.2.

9)). A evolução temporal calculada se deve então à presença do termo colisional na eq. (4.2.5). As figuras 5 e 6 mostram uma representação alternativa dos mesmos dados, para tempos curtos. As probabilidades de ocupação iniciais estão indicadas nos histogramas inseridos nelas.

Examinando esses resultados com algum cuidado, é possível distinguir a ocorrência de dois tempos característicos no processo geral de relaxação mostrado na figura 4. De fato, num tempo da ordem de $0,4 \text{ MeV}^{-1}$ ocorre, para os dois exemplos mostrados, uma atenuação da discontinuidade nas probabilidades de ocupação que existe no nível de Fermi. No caso do estado determinantal excitado, por outro lado, a atenuação completa da distribuição de ocupações se dá num tempo muito mais longo. Os dois gráficos da figura 7 permitem associar o tempo mais curto ao processo de estabelecimento de correlações sob a ação do potencial de dois corpos. Como é possível ver aí, de fato, a energia de correlação varia rapidamente apenas para $t \lesssim 0,5 \text{ MeV}^{-1}$ nos dois casos. A evolução subsequente do estado excitado envolve uma redistribuição de ocupações em direção a uma aparente distribuição "de equilíbrio", praticamente sem variação da energia de correlação. Essa redistribuição adicional é visível na medida "entrópica" da não-determinantalidade do estado

$$S = - \sum_k (p_k \ln p_k + q_k \ln q_k). \quad (5.1.6)$$

que, no caso da relaxação do estado excitado, continua crescendo mesmo depois da estabilização da energia de correlação.

A energia de correlação, representada na figura 7, é obtida calculando

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \text{Tr} \hat{H} \hat{F} = \text{Tr} \hat{H} \hat{F}_0 + \text{Tr} \hat{H} \hat{F}' \\ &= \langle E \rangle_{PI} + \langle E \rangle_{Cerr} \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

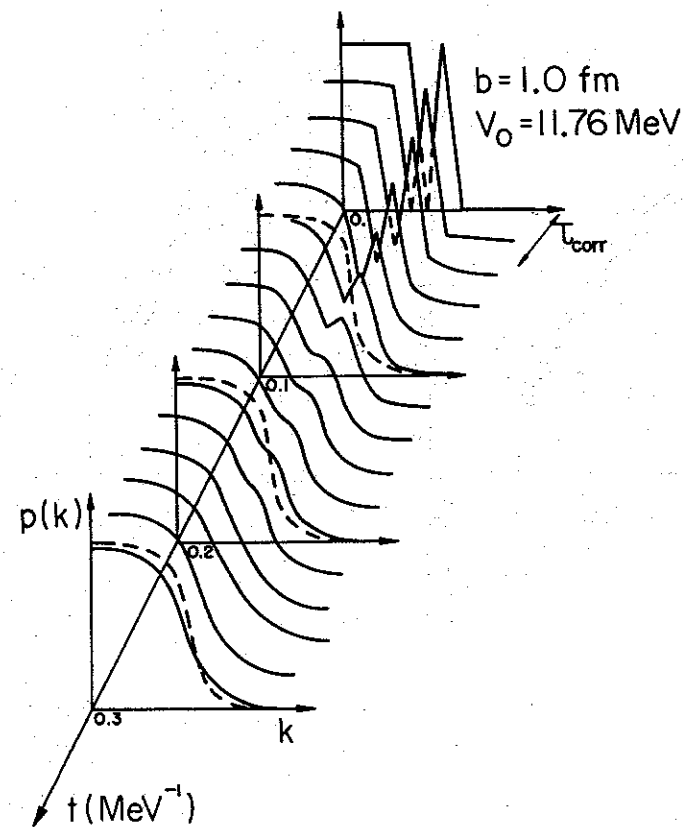


Fig.4 - v. texto às pags. 72 e 73

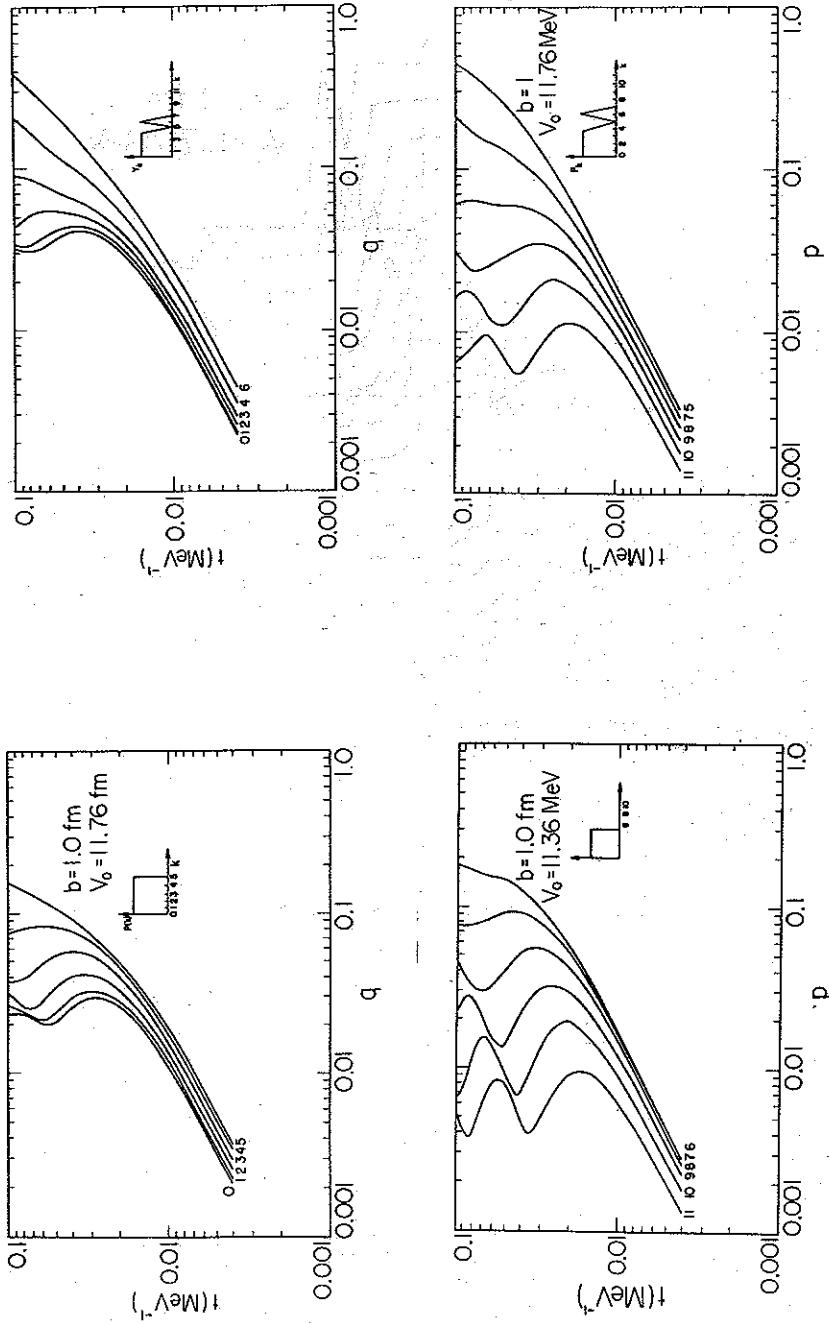


Fig.5

v. texto a pag. 73

Fig.6

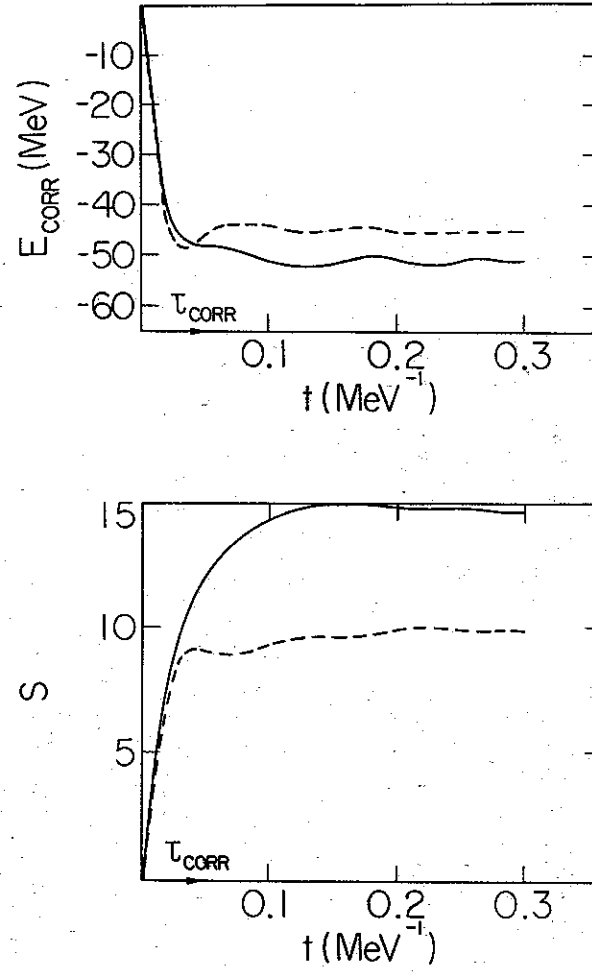


Fig.7 - v. texto à pag. 73

onde, dentro da aproximação usada

$$\langle E \rangle_{\text{corr}} = - \sum_k \sum_{k_1 k_2 k_3} \int_0^t dt' \text{Im} \left[\langle k_2 k_3 | \tilde{v} | k k_1 \rangle_t \langle k k_1 | \tilde{v} | k_2 k_3 \rangle_{t'} \right. \\ \left. \times (p_k p_{k_1} q_{k_2} q_{k_3} - p \leftrightarrow q)_{t'} \right]. \quad (5.1.8)$$

A energia de partícula independente, por outro lado, corresponde à energia de Hartree-Fock, no tempo t , calculada com as energias de partícula independente (5.1.5):

$$\langle E \rangle_{\text{PI}} = \frac{1}{2} \sum_k p_k \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \epsilon_k(t) \right] \quad (5.1.9)$$

Como mencionado anteriormente, é possível mostrar algebricamente⁽⁸⁾ que a energia total $\langle E \rangle$ é conservada dentro da aproximação (4.2.5).

5.2 - Correlações em estados estacionários e interações nucleares efetivas^(7,6)

Até este ponto o termo de correlações iniciais da (4.1.26) (segundo termo do lado direito dessa equação) foi tomado como nulo. Ele é, no entanto, crucial quando se queira estudar soluções estacionárias dessa equação, além da aproximação de campo médio, que leva simplesmente à eq. (3.2.9). Como observado em relação ao exemplo discutido na seção anterior, as soluções estacionárias obtidas na aproximação de campo médio deixam de ser estacionárias quando se inclui efeitos de correlação. Dêsse modo, a estacionaridade das soluções em presença de efeitos de correlações exige, em geral, um termo de correlações iniciais que compense as contribuições da integral de memória. Isso é o que ocorre, em particular, no caso da equação exata (4.1.26), quando \hat{F} é o operador de projeção sobre um dos estados estacionários (também exato) de \hat{H} .

No entanto não é viável nem interessante discutir estes estacionários que não podem ser obtidos. No quadro mais trabalhável de uma aproximação como a que conduziu à (4.2.5) cabe então perguntar de que forma tratar, consistentemente, o termo de correlações iniciais.

Embora essa questão possa ser tratada de forma mais geral⁽³²⁾, o modo mais simples de completar a aproximação (4.2.5) consiste em notar que o termo colisional dessa equação envolve o potencial de dois corpos em segunda ordem, o mesmo devendo valer portanto também para o termo de correlações iniciais. Por outro lado, o segundo termo do lado direito da (4.1.26), feita a substituição (4.2.4), envolve o potencial de dois corpos em primeira ordem. Portanto, as correlações iniciais $F'(0)$ deverão ser também efeitos de primeira ordem nesse potencial, o que desde logo sugere identificá-las com as correlações perturbativas de primeira ordem do estado determinantal auto-consistente, formadas de excitações de duas partículas desse estado. Esquemáticamente

$$\hat{F}'(0) \rightarrow |\Delta\phi\rangle\langle\phi| + |\phi\rangle\langle\Delta\phi| \\ |\Delta\phi\rangle = \sum_{\substack{\alpha\beta>F \\ \gamma\delta\leq F}} \frac{|\alpha\beta\bar{\gamma}\bar{\delta}\rangle\langle\alpha\beta\bar{\gamma}\bar{\delta}|\hat{H}|\phi\rangle}{\epsilon_\gamma + \epsilon_\delta - \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} \quad (5.2.1)$$

onde $\alpha\beta>F$ e $\gamma\delta\leq F$ significam respectivamente estados de partícula não ocupados e ocupados no estado determinantal autoconsistente $|\phi\rangle$.

Com essa opção, é agora fácil calcular o termo

$$\hat{n}_{\lambda\mu}(t) = \text{Tr} a_{\lambda\mu}^+ a_{\lambda\mu} [H, \hat{g}_{\lambda\mu}(t,0) \hat{F}'(0)] \quad (5.2.2)$$

que deverá ser acrescentado à equação aproximada (4.2.5). Sob a evolução temporal de campo médio envolvida em $\hat{g}_{\lambda\mu}(t,t')$ os estados de partícula da aproximação auto-consistente se comportam como

$$\hat{g}(t, 0) |\alpha\rangle \langle \beta| = e^{-i(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta)t} |\alpha\rangle \langle \beta| \quad (5.2.3)$$

onde $\epsilon_\alpha, \epsilon_\beta$ são energias de partícula independente de Hartree-Fock. Com isso é fácil obter, de (5.2.1) e (5.2.2)

$$\hat{n}_{\lambda\mu}(t) = \frac{1}{2} \sum_{\beta\delta\sigma} \left[\frac{\langle \beta\delta | \tilde{v} | \mu\beta \rangle \langle \lambda\beta | \tilde{v} | \sigma\delta \rangle}{\epsilon_\beta + \epsilon_\delta - \epsilon_\lambda - \epsilon_\beta} (p_\beta p_\delta q_\lambda q_\beta - p_{\beta\sigma} q) + \frac{\langle \lambda\beta | \tilde{v} | \sigma\delta \rangle \langle \beta\delta | \tilde{v} | \mu\beta \rangle}{\epsilon_\mu + \epsilon_\beta - \epsilon_\delta - \epsilon_\sigma} (p_\beta p_\delta q_\lambda q_\beta - p_{\beta\sigma} q) \right] \quad (5.2.4)$$

onde em vista da (5.2.3), o elemento de matriz associado ao tempo t difere do correspondente associado ao tempo zero por um fator de fase dependente de t . A mesma relação (5.2.3) permite integrar explicitamente o termo de memória da (4.2.5). O resultado final a que se chega é que a contribuição (5.2.4) cancela exatamente a contribuição dependente de t do termo de memória, de forma que a condição de estacionariedade da densidade de um corpo se escreve como

$$0 = \left[\hat{h}[\rho], \hat{\rho} \right]_{\lambda\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\beta\delta\sigma} \left[\frac{\langle \beta\delta | \tilde{v} | \mu\beta \rangle \langle \lambda\beta | \tilde{v} | \sigma\delta \rangle}{\epsilon_\beta + \epsilon_\delta - \epsilon_\lambda - \epsilon_\beta} (p_\beta p_\delta q_\lambda q_\beta - p_{\beta\sigma} q) + \frac{\langle \lambda\beta | \tilde{v} | \sigma\delta \rangle \langle \beta\delta | \tilde{v} | \mu\beta \rangle}{\epsilon_\mu + \epsilon_\beta - \epsilon_\delta - \epsilon_\sigma} (p_\mu p_\beta q_\lambda q_\beta - p_{\beta\sigma} q) \right] \quad (5.2.5)$$

A energia total do estado associado a essa densidade, por outro lado, difere da energia de Hartree-Fock essencialmente pela inclusão da energia de correlação de segunda ordem, associada à eq. (5.2.1). (Note ainda que, no caso em que se inclua autoconsistentemente nas eqs. (5.2.1) e (5.2.3) as alterações devidas à (5.2.1) das probabilidades de ocupação p_α ,

em relação ao seu valor numa aproximação determinantal, a energia de campo médio diferirá da energia de Hartree-Fock determinantal).

Esses resultados tem uma importância grande para a física da estrutura nuclear. Isso está ligado ao fato de que, apesar da nitida estrutura de camadas e demais evidências da adequação de uma aproximação de campo médio para descrever propriedades nucleares pelo menos a baixas energias de excitação, é possível demonstrar "experimentalmente" (33) que a aproximação de Hartree-Fock é inadequada. De fato, a energia de Hartree-Fock, para qualquer Hamiltoniana da forma (3.1.18), pode sempre ser expressa em termos da energia cinética e das energias de partícula independente como

$$E_{HF} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} [\langle \alpha | t | \alpha \rangle + \epsilon_{\alpha}]. \quad (5.2.6)$$

No entanto, todas as quantidades que aparecem nessa relação podem ser medidas ou seguramente estimadas: E_{HF} é essencialmente a energia de ligação, as ϵ_{α} são mensuráveis e a energia cinética pode ser estimada a partir do raio nuclear. E o que se constata é que as quantidades medidas não satisfazem a (5.2.6), o lado direito correspondendo a aproximadamente a metade da energia de ligação experimental. Levando em conta que há um forte cancelamento entre os dois termos do lado direito da (5.2.6), resulta que é possível dar conta da discrepância com um efeito corretivo pequeno (da ordem de 10 a 20% da energia cinética) à relação de Hartree-Fock. A energia de correlação associada à (5.2.1) tem a ordem de grandeza correta para isso.

No entanto, é claro que procurar soluções autoconsistentes da aproximação simples de campo médio, eq. (3.2.9), é um problema tecnicamente muito mais simples que o de procurar tais soluções para a (5.2.5). Na realidade, boa parte do progresso conseguido a partir dos anos 70 na descrição micros-

cópica de propriedades de estados nucleares estacionários e também, por extrapolação, de processos dinâmicos ainda fortemente condicionados por efeitos de campo médio, proveio dos sucessos de um programa de reduzir esta última equação à forma da primeira, graças à introdução de interações de dois corpos efetivas. Para ter uma idéia de como surgem essas interações, basta definir uma hamiltoniana efetiva de um corpo reescrevendo a (5.2.5) como

$$[\hat{h}^{ef}, \hat{\rho}] = 0. \quad (5.2.7)$$

Separando explicitamente a parte de energia cinética de \hat{h}^{ef} , idêntica à de $\hat{h}[\hat{\rho}]$, isto é

$$h_{\lambda\mu}^{ef} = t_{\lambda\mu} + U_{\lambda\mu}^{ef}$$

$$h_{\lambda\mu} = t_{\lambda\mu} + U_{\lambda\mu}^{HF}$$

onde \hat{U}^{HF} é um campo médio de Hartree-Fock, resulta da (5.2.5) e da (5.2.6) que

$$U_{\lambda\mu}^{ef} (\rho_\mu - \rho_\lambda) = U_{\lambda\mu}^{HF} (\rho_\mu - \rho_\lambda) + [\text{segundo termo do lado direito da (5.2.5)}]. \quad (5.2.8)$$

O potencial médio de Hartree-Fock \hat{U}^{HF} é dado como uma média da interação antissimetrizada de dois corpos com a densidade de um corpo $\hat{\rho}$:

$$\hat{U}_{\lambda\mu}^{HF} = \sum_{\nu} \langle \nu\lambda | \tilde{v} | \nu\mu \rangle \rho_{\nu}$$

Da mesma forma, é possível propor para \hat{U}^{ef} um ansatz análogo, isto é

$$U_{\lambda\mu}^{ef} = \sum_{\nu} \langle \nu\lambda | \tilde{v}^{ef} | \nu\mu \rangle \rho_{\nu} \quad (5.2.9)$$

que envolve, de fato, uma tentativa de definição de uma fôrça efetiva de dois corpos v^{ef} . A estrutura complicada do último termo de (5.2.8) implica que essa fôrça efetiva deve ser, a rigor, não local e dependente não só da própria densidade de um corpo $\hat{\rho}$ mas também das energias de partícula independente ϵ_{α} . No entanto, ocorre o fato notável de que ela pode ser razoavelmente bem aproximada por uma interação de dois corpos cuja não localidade é restrita a uma dependência quadrática no momento relativo e que é dependente ainda apenas da densidade local

$$\rho(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \hat{\rho} | \vec{r} \rangle$$

Os aspectos menos satisfatórios desse tipo de aproximação se referem à dependência de v^{ef} com as energias de partícula independente, que não é simplesmente redutível, de forma quantitativa, a uma dependência com a densidade local apenas. Apesar desse fato, com forças efetivas desse tipo (parametrizáveis em termos de potenciais de contacto dependentes de momento e da densidade local) é possível reproduzir de forma muito satisfatória energias de ligação, energias de partícula independente e raios nucleares resolvendo o problema simples de campo médio (5.2.7).

É claro, então, que nêsse processo foram necessariamente violadas as hipóteses essenciais para a "demonstração" do "teorema experimental" que afirma a impossibilidade de uma tal empresa. A violação está ligada à dependência com a densidade da interação efetiva, que modifica a relação simples de Hartree-Fock (5.2.6) pela adição de um termo da forma

$$E_R = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \left[\sum_{\alpha\beta} \frac{d\tilde{v}^{ef}}{d\rho_{\alpha\beta}} \rho_{\alpha\beta} \right] \hat{F}_0 \right\}. \quad (5.2.10)$$

Esse termo, chamado energia de rearranjo, é zero para fôrças independentes da densidade, e é o ingrediente que permite dar razoável conta, simultaneamente, das três quantidades experimentais mencionadas.

O programa assim esboçado foi elaborado quantitativamente partindo de uma interação de dois corpos "realística" (especificamente, o potencial de Reid "de carôço mole"⁽³⁵⁾).

O seu resultado emprestou "respeitabilidade microscópica" ao tratamento fenomenológico proposto décadas antes por Skyrme⁽³⁶⁾ e revivido com técnicas computacionais modernas por Vauthérin e Brink em 1972⁽³⁷⁾.

A adoção de um potencial como o de Reid como ponto de partida envolve uma dificuldade adicional e um percurso distinto do apresentado aqui para a implementação do programa de interações efetivas dependentes da densidade. A dificuldade de se prende ao fato de que a intensidade do carôço repulsivo desse potencial impede o seu tratamento em termos da aproximação de Hartree-Fock simples. A sua solução envolve recurso preliminar à teoria de Brueckner, que introduz, de forma conveniente, as correlações de curto alcance essenciais para controlar a explosão repulsiva resultante do tratamento sem correlações dos efeitos do carôço. Isso conduz à consideração de uma pré-interação efetiva, dependente do operador densidade, sob a forma da chamada matriz G de Brueckner⁽³⁸⁾. Uma expressão semelhante à (5.2.5), mas contendo essa pré-interação efetiva em lugar do potencial de dois corpos, resulta então da variação de um funcional de energia escrito em termos de G com relação à densidade de um corpo⁽³⁵⁾.

O desenvolvimento apresentado aqui mostra, no entanto, que o programa, a rigor, independe do recurso inicial à teoria de Brueckner, e pode ser considerado igualmente em conexão com potenciais fenomenológicos descrevendo a interação nucleon-nucleon que são mais regulares que o de Reid, no sentido de admitirem um tratamento através da aproximação simples de Hartree-Fock⁽³³⁾. Os programas envolvendo tais potenciais (que são muito mais fortemente não locais que o potencial de Reid) foram a rigor "esvaziados" pelo sucesso do trabalho revisto na referência (35). De uma certa forma, porém, idéias mais recentes acêrca da natureza composta dos nucleons justificam uma reconsideração de modelos para a estrutura nuclear baseados em potenciais não locais de comportamento suave⁽³⁹⁾.

Finalmente, cabe observar (6,7) que o resultado (5.2.5) pode, no contexto aqui exposto, ser modificado de forma a incorporar correlações de curto alcance devidas a um carôço fortemente repulsivo. Isso se faz através de uma modificação da aproximação simplès (4.2.4), em que a aproximação adotada para G contenha processos de interação múltipla de um par de partículas⁽³²⁾. O resultado de um tal tratamento conduz essencialmente à substituição de \tilde{v} pela G de Brueckner.

5.3 - Líquidos de Fermi segundo Landau^(25,40)

A interação efetiva mencionada na secção precedente é, por construção, uma interação quasi-local (isto é, a não localidade se limita a uma dependência de momento), dependente da densidade local. Essas características são particularmente úteis no tratamento de sistemas finitos, e como foi mencionado, só podem ser implementadas no caso nuclear através de aproximações, embora quantitativamente controladas.

A equação (5.2.8), por outro lado, exprime o potencial médio efetivo \hat{U}^{ef} como um funcional complicado da densidade de de um corpo $\hat{\rho}$. A definição (5.2.9) da interação efetiva de dois corpos implica em que ela pode ser obtida tomando derivadas do potencial médio efetivo com relação à densidade de um corpo. Por exemplo, de (5.2.9) resulta diretamente que

$$\langle \nu \lambda | \tilde{v}^{ef} | \nu \mu \rangle = \frac{d}{d\rho_{\nu}} U_{\lambda\mu}^{ef} = \frac{d}{d\rho_{\nu\nu}} U_{\lambda\mu}^{ef} \quad (5.3.1)$$

Em termos de uma base arbitrária essa equação fica

$$\langle \alpha \beta | \tilde{v}^{ef} | \gamma \delta \rangle = \frac{d}{d\rho_{\alpha\alpha}} U_{\beta\delta}^{ef} \quad (5.3.2)$$

Essas derivadas são a realização, numa dada base de estados de partícula independente, das chamadas derivadas funcionais do operador \hat{U}^{ef} em relação a $\hat{\rho}$. Note que elas cor-

respondem a um operador de dois corpos. A expressão que aparece na equação (5.2.10), da mesma forma, é a derivada funcional da força efetiva de dois corpos em relação a $\hat{\rho}$. Esse objeto tem o caráter de uma força de três corpos.

Relações do tipo (5.3.2) foram as utilizadas por Landau para construir a sua teoria de Líquidos de Fermi. Esses sistemas são na realidade tratados como gases de quasipartículas, que são "fermions efetivos" interagindo (fracamente) através de interações efetivas definidas como na (5.3.2). É claro que é possível explorar esse ponto de vista independentemente de uma teoria microscópica completa da interação efetiva, que novamente pode ser parametrizada, sendo os parâmetros fixados de forma a reproduzir quantidades determinadas experimentalmente. Equações como a (5.2.8), por outro lado, permitem ligar as interações efetivas, dentro das aproximações a elas inerentes, à postulada interação "fundamental" entre os fermions.

6 - Fêcho

No estudo de sistemas quânticos complexos são frequentes as situações em que o interesse recai sobre uma classe restrita de variáveis dinâmicas que pode ser vinculada a um subsistema do sistema completo. Nessas situações, que incluem as propriedades de poucos corpos (e.g. os observáveis de um corpo) de sistemas de muitos corpos, uma forma de "contrair a descrição" com o objetivo de chegar a formulações quantitativamente implementáveis consiste em buscar a dinâmica efetiva do subsistema de interesse. Os cinco capítulos deste curso se articulam em torno desse programa. Nos dois primeiros o subsistema de interesse e o seu complementar são definidos genericamente em termos de uma fatorização do espaço de fases do sistema completo. Nos três capítulos subsequentes foi tratada a dinâmica efetiva para a densidade de um corpo em um sistema de muitos fermions idênticos. Nos dois casos, as dinâmicas efetivas resultantes para os subsistemas de interesse envolvem efeitos não unitários, que modificam o grau de coerência do estado quântico dos subsistemas através da dinâmica das correlações existentes entre os subsistemas. Desse modo, as equações que representam tais dinâmicas efetivas assumem estrutura análoga à das equações cinéticas utilizadas para o estudo de processos de equilíbrio e transporte, sem embora deixarem de ser consistentes com a simetria temporal inerente à dinâmica unitária do sistema complexo como um todo.

O tratamento da densidade de um corpo permite, em particular, estabelecer uma conexão com tratamentos fenomenológicos envolvendo potenciais efetivos, um dos quais é a teoria de Landau para líquidos de Fermi.

Ao terminar esta versão escrita, pouco mais de uma semana antes do início efetivo do curso, devo agradecer a seus organizadores a oportunidade de cometê-la. Resta-me a preocupação de adequá-las às condições efetivas de campo, o que po

derá levar a reformulações e alterações de momento. Finalmente, quero agradecer a Janete Vaz de Oliveira pela boa vontade, eficiência e presteza com que datilografou estas absurdidades.

Solo

A - deus! a - deus! A - de-us, que vou me em-bo-ra. Mi-nha

fal - ta nin-guem sen - te, nin-guem sen - te, Nin-guem cho - ra.

Todos

A deus

Dança de Retirada

(Tudo 8ª acima)

Referências

- 1- M.C.Nemes e A.F.R. de Toledo Piza, *Physica* 137A(1986) 367
- 2- M.C.Nemes e A.F.R. de Toledo Piza, *Phys.Rev.* C27(1983) 862 (a)
- M.C.Nemes e A.F.R. de Toledo Piza, *Phys.Rev.* C31(1985) 613 (b)
- M.C.Nemes e A.F.R. de Toledo Piza, *Z.Phys.* A310(1983) 339 (c)
- M.C.Nemes e A.F.R. de Toledo Piza, *Z.Phys.* A319(1984) 323 (d)
- 3- M.L.C.Rabello e A.F.R. de Toledo Piza, *Rev.Bras.Fis.* 14 (1984)353.
- 4- L. Gonzaga Ferreira Filho e M.C. Nemes, *Phys.Rev.* C35 (1987)2341.
- 5- A.F.R. de Toledo Piza, em "Time-Dependent Hartree-Fock and Beyond, K.Goeke e P.G.Reinhard (eds), *Lecture Notes in Physics*, vol. 171(1982)p.163.
- 6- A.F.R. de Toledo Piza, em "Proceedings of the IX Workshop in Nuclear Physics", A.O.Macchiavelli, H.M. Sofia e E.Ventura (eds), *World Scientific Publ. Co.* (1987)p.404.
- 7- M.C.Nemes e A.F.R. de Toledo Piza, *Phys.Lett.* 172B(1986) 119.
- 8- B.V.Carlson, M.C.Nemes e A.F.R. de Toledo Piza, *Nucl. Phys.* A457(1986)261.
- 9- O.Kübler e H.D.Zeh, *Ann.Phys. (N.Y)*76(1973)405.
- 10- C.R.Willis e R.H.Picard, *Phys.Rev.* A9(1974)1343.
- 11- K.Möhring e U.Smilanski, *Nucl.Phys.* A338(1980)227.
- 12- S.Ayk, *Z.Phys.* A298(1980)83.
- 13- R.Balian, Y.Alhassid e H.Reinhard, *Physics Reports* 131 (1986)1.
- 14- P.Buck e H.Feldmeier, *Phys.Lett.* 129B(1983)172.
- 15- M.Reed e B.Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol.I (Academic Press, N.Y. 1972)p.203.

- 16- J. von Neumann, *Mathematical Methods of Quantum Mechanics* (Princeton Univ. Press, Princeton, 1957), Cap. VI.
- 18- David M. Bishop e Lap M. Cheung, *Int. J. Quantum Chem.* XV (1979)517.
- 19- N.B. Narozhny, J.J. Sanchez-Mondragon e J.H. Eberly, *Phys. Rev.* A23(1980)236.
H.I. Yoo, J.J. Sanchez-Mondragon e J.H. Eberly, *J. Phys.* A14 (1981)1383.
- 20- N.N. Bogoliubov, em "Studies in statistical mechanics", de Boer e Uhlenbeck (eds), Math Holland, 1962.
- 21- P.A.M. Dirac, *Proc. Camb. Phil. Soc.* 26(1930)376.
- 22- J. Des Cloiseaux, em "Many-Body Physics", C. de Witt e R. Balian (eds), Gordon & Breach (1968)p.5.
- 23- D.J. Thouless, *The Quantum Mechanics of Many Body Systems*, Academic Press, N.Y. (1961)p.97.
- 24- H. Feshbach, *Ann. Phys. (N.Y.)* 5(1958)357; *ibid.* 19(1962)287.
- 25- L.D. Landau, *Soviet Physics JETP* 3(1957)920, *ibid.* 5(1957)101; *ibid.* 8(1959)70.
- 26- W.D. Myers e W.J. Swiatecki, *Ann. Phys. (N.Y.)* 55(1969)395.
- 27- E.A. Uehling e G.E. Uhlenbeck, *Phys. Rev.* 43(1933)552.
- 28- Sara Cruz Barrios, "Expansão funcional para o operador de evolução de um sistema de muitos fermions com condições iniciais". Tese de Doutorado, IFUSP 1985 (não publicada) e trabalho em preparação.
- 29- A.K. Kerman, S. Levit e T. Troudet, *Ann. Phys. (N.Y.)* 148(1983) 436.
- 30- J.W. Negele, "Introduction to Functional Integral Methods for Nuclear Dynamics", *Int. School Enrico Fermi, Varenna, 1979*, R.A. Boglia et al (eds), North-Holland 1981, p.272.
- 31- A.L. Fetter e J.D. Walecka, "Quantum Theory of Many-Particle Systems", McGraw-Hill 1971, p.121.
- 32- B.V. Carlson, comunicação particular.
- 33- A.K. Kerman, "Nuclear Forces and Hartree-Fock Calculations", *Cargèse Lectures in Physics 1968*, vol3, M. Jean (ed.), Gordon

- and Breach 1969, p.425.
- 34- M.C. Nemes, *Nucl. Phys.* A376(1982)325.
- 35- J.W. Negele, *Revs. Mod. Phys.* 54(1982)913; *Lecture Notes in Physics* 40, B.R. Barret (Ed.), Springer Verlag, p.270.
- 36- T.H.R. Skyrme, *Phil. Mag.* 1(1956)1043, *Proc. Phys. Soc. (London)* A70(1957)433.
T.H.R. Skyrme, *Nucl. Phys.* 9(1959)615.
- 37- D. Vauthérin e D.M. Brink, *Phys. Rev.* C5(1972)626.
- 38- A.F.R. de Toledo Piza, *Notas de Aula para a 1ª Secção de Física Nuclear da Escola de Verão J.A. Swieca, Rio de Janeiro, 1983.*
- 39- A.K. Kerman, comunicação particular (1984).
- 40- A.A. Abrikosov e I.M. Khalatnikov, *Rep. Progr. in Physics* XXII (1959)329.