

Tesis de Posgrado

Tratamiento térmico de sistemas finitos

Fortunato, Horacio Enrique

1990

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Fortunato, Horacio Enrique. (1990). Tratamiento térmico de sistemas finitos. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2286_Fortunato.pdf

Cita tipo Chicago:

Fortunato, Horacio Enrique. "Tratamiento térmico de sistemas finitos". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1990.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2286_Fortunato.pdf

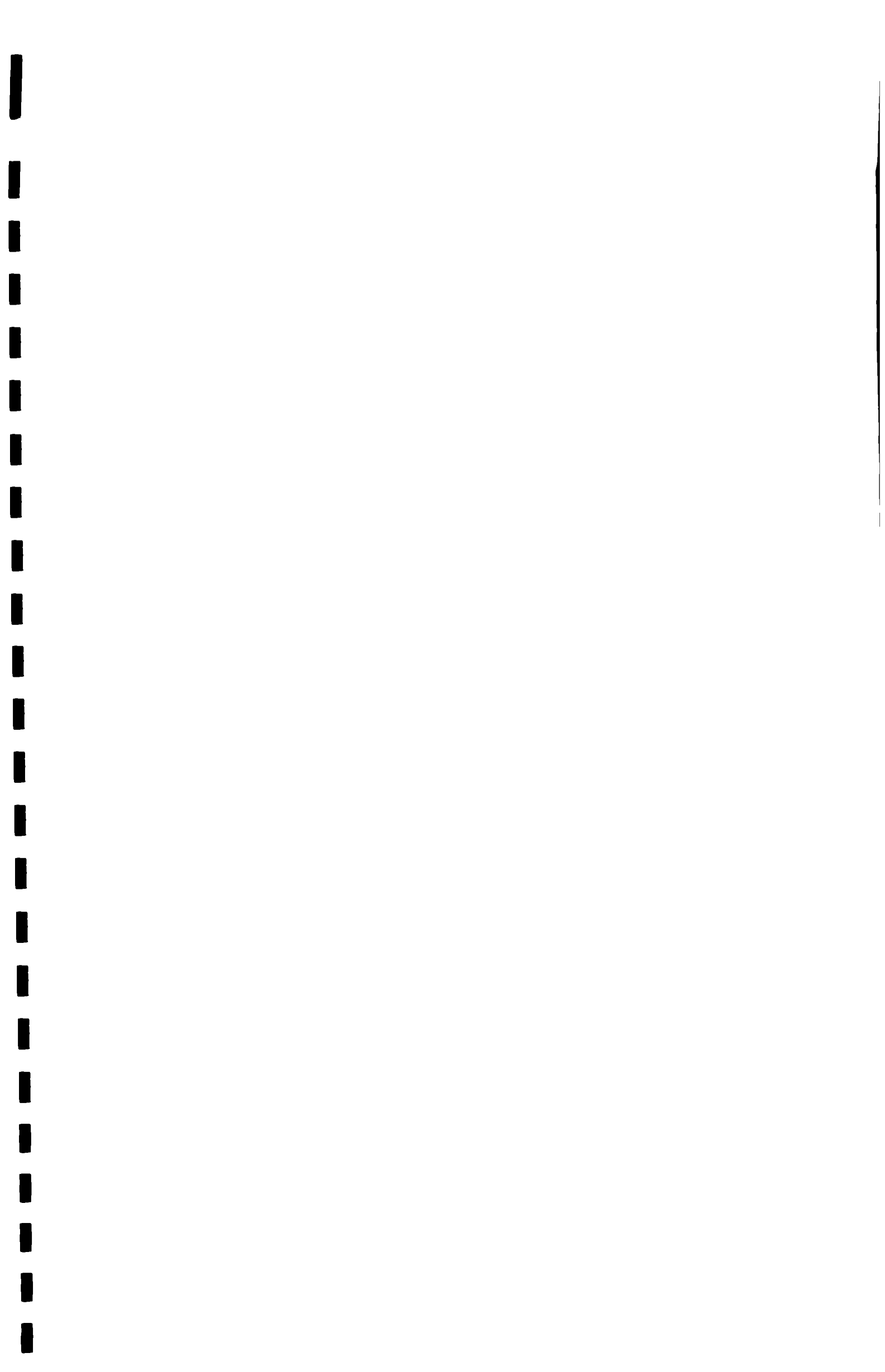
EXACTAS UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



UBA

Universidad de Buenos Aires



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Tema de tesis

Tratamiento térmico
de sistemas finitos

Autor

Horacio Enrique Fortunato

Director de tesis

Dr. Guillermo G. Dussel

Lugar de trabajo

Comisión Nacional de Energía Atómica
Departamento de Física (Laboratorio TANDAR)

- 2286 -
ej 2

Tesis presentada para optar al título de Doctor en Ciencias Físicas

1990

Resumen.

En los últimos tiempos ha cobrado gran interés la inclusión de efectos térmicos en la descripción de sistemas nucleares. Este interés está relacionado con actividades experimentales en tópicos como colisiones de iones pesados altamente inelásticas¹⁾⁻³⁾, dispersión de partículas de alta energía y resonancias gigantes⁴⁾ construídas sobre estados nucleares altamente excitados⁵⁾⁻⁷⁾. Estos experimentos han dado información interesante^{8),9)} relacionada con el ensanchamiento de las resonancias al incrementar la temperatura.

Se han desarrollado varias aproximaciones para el tratamiento térmico de sistemas finitos basadas en métodos variacionales. La idea central consiste en minimizar el potencial termodinámico adecuado al problema dentro de cierta familia de operadores densidad estadísticos. Cuando el operador densidad estadístico se aproxima por el de un sistema de "cuasipartículas" independientes se obtienen aproximaciones de campo medio, (Hartree-Fock-Bogoliuvov¹⁰⁾⁻¹³⁾ en el caso fermiónico y Hartree-Bose en el caso bosónico^{14),13)}). Al introducir correlaciones se obtienen las ecuaciones de la aproximación de fases al azar térmicas (TRPA)^{15) -19)}.

Otro modo de abordar el problema consiste en la utilización de funciones de Green térmicas, que generalizan a las de $T = 0$, reemplazando el valor medio en el estado fundamental por el promedio en el ensemble. Existe un formalismo, introducido por Matsubara²⁰⁾, que reemplaza el tiempo por un parámetro imaginario puro. Este formalismo simplifica mucho los cálculos y está relacionado en forma sencilla con el de tiempo real que posee una interpretación física más directa.

La ventaja de utilizar funciones de Green es que uno conoce desde un punto de vista microscópico los procesos tenidos en cuenta en las distintas aproximaciones. Además dicho formalismo es aplicable no sólo al estudio de las propiedades de equilibrio del sistema sino que también proporciona una herramienta para realizar cálculos fuera de él²¹⁾.

El presente trabajo trata sobre los dos tipos de aproximaciones mencionados. Tras resumirse algunos conceptos elementales de mecánica estadística, métodos variacionales y del formalismo de las funciones de Green térmicas, se derivan perturbativamente las ecuaciones de la aproximación de fases al azar térmicas¹⁹⁾ mediante la extensión a temperatura finita del formalismo de la aproximación de la serie principal (PSA)^{22),23)}.

La PSA está basada en el formalismo de la Teoría de Campos Nucleares (NFT)²⁴. En la NFT se construyen los estados del sistema como superposición de excitaciones fermiónicas y bosónicas. Los diagramas incluyen ambos tipos de excitaciones y la NFT provee reglas bien definidas para trabajar con ellos. La PSA utiliza como parámetro perturbativo a la inversa del tamaño del espacio de estados de partícula independiente del sistema (Ω) manteniendo finito el cociente entre el número de partículas y Ω .

Las ecuaciones de la TRPA se derivan para una interacción separable y para una interacción no separable general.

Como aplicación de los formalismos expuestos se describen los estados excitados 2^+ del ^{114}Sn utilizando una interacción separable que incluye términos mono y cuadrupolares en el canal partícula-partícula y cuadrupolares en el canal partícula-agujero. Se estudia el comportamiento de las raíces de la TRPA y el de las reglas de suma relevantes como función de la temperatura.

Finalmente, se estudia un modelo de apareamiento bosónico cuyo interés radica en dos razones: por un lado por ser resoluble en forma exacta permite evaluar la calidad de la aproximación de Hartree-Bose para sistemas con bajo número de partículas, por otro lado, se propone que dicho modelo está estrechamente relacionado con el fenómeno de la superconductividad de alta temperatura crítica²⁶).

Sugiere esta relación la correspondencia, tanto cualitativa como cuantitativa, de las curvas de calor específico correspondientes al modelo bosónico con las medidas en los nuevos materiales²⁷⁾⁻³²⁾. Además, el modelo bosónico, posee una relación entre la temperatura crítica y la energía de ligadura de un par 4 veces superior a la del modelo fermiónico.

Agradecimientos

Quiero agradecer muy especialmente al Dr. Guillermo Dussel y al Dr. Hugo Sofia por haberme brindado a lo largo de estos años su más amplia colaboración y guía, mostrando en todo momento una destacable predisposición y espíritu docente. Les agradezco también por sus innumerables e importantes aportes a la realización del presente trabajo.

Deseo también agradecer al personal del TANDAR, particularmente al grupo de becarios, por haberme brindado la calidez de su amistad y la satisfacción de trabajar en un ambiente de excepcional cordialidad.

Por último deseo dejar constancia de mi reconocimiento al Depto. de Física de la CNEA por el apoyo material que me brindó a través de su plan de becas de doctorado.

A Myriam y a mis padres.

Índice

Introducción.	1
1. Tratamiento térmico de sistemas finitos.	5
1.1 Repaso de definiciones.	5
1.1.1 Conjunto gran canónico.	6
1.1.2 Conjunto canónico.	7
1.1.3 Conjunto microcanónico.	7
2. Métodos variacionales.	8
2.1 Hartree-Fock-Bogoliuov térmico (THFB).	10
2.1.1 Límite $T \rightarrow 0$	14
2.2 Hartree-Bose térmico (THB).	16
2.2.1 Límite $T \rightarrow 0$	21
2.3 Aproximación de fases al azar térmica (TRPA).	24
3. Métodos perturbativos.	28
3.1 Funciones de Green térmicas (método de Matsubara).	29
3.1.1 Representación de Lehmann.	30
3.1.2 Sistema de partículas sin interacción.	30
3.2 Expansiones diagramáticas.	32
3.2.1 Teorema de Wick generalizado.	33
3.3 Funciones de Green térmicas de tiempo real.	35
3.4 Relación entre las funciones de Green de Matsubara y las de tiempo real.	36
3.5 Relación con los observables físicos.	37
3.5.1 Teoría de respuesta lineal.	37

4. Derivación perturbativa de las ecuaciones de la aproximación de fases al azar térmicas.	40
4.1 Introducción.	40
4.2 Aproximación de la serie principal (PSA).	42
4.2.1 Identificación de los diagramas de la PSA.	42
4.2.2 Evaluación de la PSA para sistemas pares e impares.	43
4.3 Estados excitados para una interacción separable.	47
4.4 Aplicación a los isótopos del estaño.	54
4.5 Interacciones no separables.	59
4.6 Conclusiones.	63
5. Modelo de apareamiento de bosones.	65
5.1 Introducción.	65
5.2 Descripción del modelo.	66
5.3 Aproximación de Hartree-Bose térmica.	68
5.4 Comparación con resultados experimentales.	70
Conclusiones generales.	71
Apéndices.	74
Figuras.	83
Bibliografía.	108

Introducción.

En los últimos tiempos gran cantidad de trabajos fueron realizados en relación con el tratamiento térmico de sistemas finitos. Varios relacionados con la derivación formal de la ampliación a temperatura finita de técnicas ampliamente utilizadas a temperatura cero: Hartre-Fock- Bogoliuvov (HFB)¹⁰⁾⁻¹³⁾ para la descripción de estados nucleares sobre la banda Yrast y aproximación de fases al azar (RPA)¹⁵⁾⁻¹⁹⁾ para estados colectivos montados sobre el fundamental.

Estos trabajos tienen su motivación en la posibilidad actual de producir “núcleos calientes”⁵⁾ mediante la utilización de aceleradores de iones pesados. Las reacciones de iones pesados tienen la propiedad de distribuir la energía de un modo uniforme entre los nucleones. Esto contrasta con la utilización de protones, electrones y otro tipo de proyectiles elementales que, cuando transfieren gran cantidad de energía, la entregan a una porción reducida del núcleo blanco.

El núcleo excitado producido en reacciones de iones pesados puede conservar la energía el tiempo suficiente para alcanzar el equilibrio termodinámico. Las escalas de tiempo involucradas son: 10^{-22} segundos (tiempo que tarda un nucleón en recorrer un diámetro nuclear) y $10^{-21} - 10^{-19}$ segundos (tiempo de vida media para el decaimiento por emisión de nucleones).

Las ampliaciones térmicas mencionadas son derivadas usualmente mediante la utilización de técnicas variacionales basadas en la minimización del potencial termodinámico adecuado. Para la descripción del núcleo se emplea, en general, el conjunto gran canónico y el potencial que se minimiza es en consecuencia el gran potencial.

Otra posible forma de abordar el problema es mediante la utilización de funciones de Green térmicas. Dichas funciones generalizan a las normalmente empleadas a $T = 0$ reemplazando el valor medio en el estado fundamental por el promedio en el ensemble. De este modo el formalismo a $T = 0$ se recupera en forma natural del correspondiente a temperatura finita. La ventaja de utilizar funciones de Green es que uno conoce desde un punto de vista microscópico los procesos tenidos en cuenta en las distintas aproximaciones. Además dicho formalismo es aplicable no sólo al estudio de las propiedades de equilibrio del sistema sino que también proporciona una herramienta para realizar cálculos fuera de él²¹⁾.

Además de las funciones de Green usuales que dependen del tiempo (funciones de Green de tiempo real) se pueden definir funciones de Green dependientes de un parámetro imaginario puro (formalismo de Matsubara)²⁰⁾. El formalismo de Matsubara simplifica mucho los desarrollos y puede relacionarse con el de tiempo real, que posee una interpretación física más directa, de un modo sencillo: Las partes avanzadas y retardadas de las funciones de Green de tiempo real y las funciones de Matsubara se obtienen mediante la evaluación de una misma función de variable compleja en los ejes real e imaginario respectivamente.

En este trabajo se derivan las ecuaciones de la aproximación de fases al azar térmicas (TRPA) generalizando el método de la aproximación de la serie principal (PSA)^{22),23)} al caso de temperatura finita. Este método está basado en la Teoría de Campos Nucleares (NFT)²⁴⁾.

La NFT hace uso del concepto de modos elementales de excitación³⁵⁾ de un sistema fermiónico de muchos cuerpos. Dichas excitaciones pueden tener carácter fermiónico o bosónico según correspondan a los polos de las funciones de Green de uno o dos cuerpos respectivamente. En la NFT el conjunto básico de estados está formado por el producto de ambos tipos de excitaciones y se proveen reglas bien definidas para la construcción del hamiltoniano y de los otros operadores físicos en este espacio producto. Los procesos considerados en la definición de las excitaciones elementales (usualmente Hartree-Fock para las excitaciones fermiónicas y burbujas de dos fermiones para los bosones de la RPA) no deben ser tenidos en cuenta nuevamente en la interacción entre los distintos modos. Para clasificar los diagramas se utiliza un modelo de dos niveles con degeneración 2Ω separados por una diferencia de energías ζ y con 2Ω partículas que interactúan entre sí mediante un hamiltoniano de dos cuerpos monopolar. Los diagramas se clasifican de acuerdo a la potencia de Ω^{-1} con la que contribuyen.

La PSA usa el mismo procedimiento de superponer excitaciones elementales pero emplea para clasificar los diagramas un modelo de una capa con degeneración 2Ω , $2M$ partículas y una interacción de apareamiento monopolar. Se supone que todas las magnitudes físicas de interés son analíticas en los dos parámetros adimensionales del modelo: $(1/\Omega)$ y (M/Ω) . La PSA da la suma de todos los procesos que sobreviven cuando se hace tender la degeneración a infinito conservando finito el parámetro (M/Ω) . Para aislar estos diagramas es necesario considerar que el estado fundamental del sistema es un condensado de bosones. Los diagramas de la PSA que contribuyen a las funciones de Green de uno y dos cuerpos resultan estar acopladas, obteniéndose las ecuaciones de

Hartree-Fock-Bogoliuvov cuando ambas series son sumadas simultáneamente.

Otro tópico que ha merecido gran atención en los últimos tiempos es el fenómeno de la superconductividad de alta temperatura crítica. En relación con esto se analiza un modelo de apareamiento de bosones. El modelo es similar al de apareamiento de fermiones utilizado usualmente en física nuclear para modelar la parte de corto rango de la interacción en sistemas de capa abierta y en física del sólido para la descripción de la superconductividad tradicional. Este modelo resulta interesante por dos razones: Por un lado permite estudiar la bondad de la aproximación de Hartree-Bose en sistemas bosónicos con bajo número de grados de libertad debido a que puede ser resuelto exactamente, por otro, se propone que tiene relación con la superconductividad de alta temperatura crítica²⁶⁾.

Esta relación es sugerida por la correspondencia, tanto cualitativa como cuantitativa, de las curvas de calor específico correspondientes al modelo bosónico con las medidas en los nuevos materiales²⁷⁾⁻³²⁾. Además, el modelo bosónico posee una relación entre la temperatura crítica y la energía de ligadura de un par 4 veces superior a la del modelo fermiónico.

El trabajo está dividido en 5 capítulos del siguiente modo:

- En el primero se resumen algunos conceptos elementales de mecánica estadística.
- El segundo capítulo trata sobre métodos variacionales, se incluye una justificación de los mismos y derivaciones de las aproximaciones de Hartree-Fock-Bogoliuvov térmica para sistemas fermiónicos, Hartree-Bose térmica para sistemas bosónicos y de las ecuaciones de la aproximación de fases al azar térmicas para sistemas fermiónicos.
- En el capítulo 3 se describe el formalismo de las funciones de Green térmicas, se discute la relación entre las funciones de Matsubara y las de tiempo real y la generalización de las técnicas diagramáticas a temperatura finita mediante el empleo del teorema de Wick generalizado.
- En el capítulo 4 se presenta una derivación perturbativa de las ecuaciones de la aproximación de fases al azar térmicas para una interacción separable y para una interacción no separable general. Como aplicación, se describen los estados excita-

dos 2^+ del ^{114}Sn utilizando una interacción separable que incluye términos mono y cuadrupolares en el canal de partícula-partícula y cuadrupolares en el canal de partícula-agujero. Se estudia el comportamiento de las raíces de la RPA y el de las reglas de suma relevantes como función de la temperatura.

- Por último, en el capítulo 5, se estudia el modelo de apareamiento bosónico mencionado, se compara la solución exacta con la aproximación de Hartree-Bose, y se discute su relación con el fenómeno de la superconductividad de alta temperatura crítica.

1. Tratamiento Térmico de sistemas finitos.

1.1 Repaso de definiciones.

A temperatura finita, el estado de un sistema cuántico está determinado por el operador densidad estadístico D . Dicho operador actúa sobre el espacio de Fock asociado al sistema y tiene las propiedades de ser hermitico, definido positivo y de traza unitaria. En función de sus autovalores y autovectores se escribe

$$D = \sum_{\nu} P_{\nu} |\nu\rangle\langle\nu|$$

con

$$P_{\nu} \geq 0 \quad y \quad Tr(D) = \sum_{\nu} P_{\nu} = 1 \quad (1.1)$$

El autovalor P_{ν} es la probabilidad de hallar el sistema en el estado $|\nu\rangle$. El valor medio de un operador A en el estado descrito por el operador densidad estadístico D es

$$\langle A \rangle = Tr(D.A) = \sum_{\nu} P_{\nu} \langle \nu | A | \nu \rangle \quad (1.2)$$

El operador D se determina maximizando la entropía. Ésta se define en términos del operador densidad estadístico en la forma

$$S = -k_B Tr(D \ln D) \quad (1.3)$$

La maximización se realiza sujeta a condiciones de vínculo que se expresan fijando el valor medio de ciertas variables extensivas $\langle \hat{f}_{\alpha} \rangle$. A estas condiciones de vínculo hay que agregarles la normalización de la traza de D . El problema se resuelve utilizando multiplicadores de Lagrange, lo que conduce a minimizar la función

$$F = Tr \left[D (\ln D + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \hat{f}_{\alpha}) \right] \quad (1.4)$$

con la condición adicional $Tr D = 1$. Para ello, debe anularse la variación

$$\delta F = Tr \left[\delta D (\ln D + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \hat{f}_{\alpha} + \eta + I) \right] \quad (1.5)$$

En (1.5) se ha introducido el multiplicador de Lagrange η para asegurar la normalización de D . Ésto conduce a la condición

$$\ln D + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \hat{f}_{\alpha} + \eta + 1 = 0 \quad (1.6)$$

De donde se deduce

$$D = \frac{e^{-\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \hat{f}_{\alpha}}}{Z} \quad \text{con} \quad Z = \text{Tr} e^{-\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \hat{f}_{\alpha}} \quad (1.7)$$

Definiendo la función de Massieu: $\Psi = \ln Z$

se obtienen las siguientes relaciones útiles:

$$S = \Psi + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \langle \hat{f}_{\alpha} \rangle \quad (1.8)$$

$$\langle \hat{f}_{\alpha} \rangle = - \left. \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda_{\alpha}} \right|_{\lambda_{\alpha'}} \quad \lambda_{\alpha} = \left. \frac{\partial S}{\partial \langle \hat{f}_{\alpha} \rangle} \right|_{\langle \hat{f}_{\alpha'} \rangle} \quad (1.9)$$

$$\sigma_{\alpha}^2 = \langle \hat{f}_{\alpha}^2 \rangle - \langle \hat{f}_{\alpha} \rangle^2 = \left. \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \lambda_{\alpha}^2} \right|_{\lambda_{\alpha'}} \quad (1.10)$$

Usualmente, los vínculos empleados son el número de partículas y la energía media con la inversa de la temperatura y el potencial químico como multiplicadores de Lagrange asociados. Los casos más comunes son:

1.1.1 Conjunto Gran Canónico:

En este conjunto se considera que el sistema intercambia energía y partículas con el medio externo, por lo que se fijan en promedio, esto da las condiciones de vínculo

$$\langle E \rangle = \text{Tr}(D.H) \quad \langle N \rangle = \text{Tr}(D.N) \quad 1 = \text{Tr} D \quad (1.11)$$

La función a minimizar resulta ser el gran potencial termodinámico

$$\Omega = \langle E \rangle - \mu \langle N \rangle - T S \quad (1.12)$$

Lo que conduce al operador densidad estadístico

$$D = \frac{e^{-\beta(H - \mu N)}}{Z} \quad \text{con} \quad Z = \text{Tr} e^{-\beta(H - \mu N)} \quad (1.13)$$

1.1.2 Conjunto Canónico:

En este caso se considera que el sistema intercambia energía con el medio externo la que, al ser fijada en promedio, conduce a las condiciones de vínculo

$$\langle E \rangle = \text{Tr}(D.H) \quad 1 = \text{Tr} D \quad (1.14)$$

La función a minimizar es la función de Helmholtz

$$A = \langle E \rangle - TS \quad (1.15)$$

Y el operador densidad estadístico resulta

$$D = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad \text{con} \quad Z = \text{Tr} e^{-\beta H} \quad (1.16)$$

1.1.3 Conjunto Microcanónico:

El sistema se considera totalmente aislado del medio externo por lo que la única condición de vínculo es la normalización de la traza de D. La energía se conoce con una incerteza $\Delta E \ll E$ y todos los microestados del sistema cuya energía cae dentro del intervalo de incerteza tienen la misma probabilidad por lo que la función de partición resulta

$$Z(E, N, \Delta E) = \sum_{\nu / (E \leq E_{\nu} \leq E + \Delta E)} 1 \simeq \Delta E \rho(E, N) \quad (1.17)$$

donde $\rho(E, N)$ es la densidad de estados del sistema para la energía E y el número de partículas N .

2. Métodos variacionales.

A temperatura cero, el teorema de Ritz establece que la energía del estado fundamental $|\psi_0\rangle$ de un sistema es siempre menor que el valor medio de la energía en cualquier estado $|\psi\rangle$ distinto de $|\psi_0\rangle$.

$$\frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} > \frac{\langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} \quad (2.1)$$

Para buscar aproximaciones del estado fundamental se hace variar $|\psi\rangle$ dentro de cierta familia de funciones de onda y se elige aquella que minimiza el valor medio de H .

A temperatura finita, el estado del sistema está definido por el operador densidad estadístico. Como función de éste puede definirse el potencial termodinámico $\Phi(D)$

$$\Phi(D) = -\frac{1}{\beta} \Psi \quad (2.2)$$

donde $\Psi = \ln Z$ es la función de Massieu.

Haciendo uso de la expresión (1.8) el potencial termodinámico (2.2) se puede poner como

$$\Phi(D) = -\frac{1}{\beta} S + \frac{1}{\beta} \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \langle \hat{f}_{\alpha} \rangle \quad (2.3)$$

El principio variacional a aplicar se basa en que es posible demostrar que el potencial termodinámico calculado en forma exacta es siempre menor que aquél calculado empleando una aproximación D' de D

$$\Phi(D') \geq \Phi(D) \quad (2.4)$$

que haciendo uso de (1.2), (1.3) y (2.3) equivale a

$$\frac{1}{\beta} \text{Tr}(D' \ln D') + \frac{1}{\beta} \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \text{Tr}(D' \hat{f}_{\alpha}) \geq \frac{1}{\beta} \text{Tr}(D \ln D) + \frac{1}{\beta} \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \text{Tr}(D \hat{f}_{\alpha}) \quad (2.5)$$

Para demostrarlo se probará primero la siguiente desigualdad

$$\text{Tr}(D' \ln D') \geq \text{Tr}(D \ln D) \quad (2.6)$$

Como tanto D como D' son operadores densidad estadísticos deben tener traza unitaria por lo que usando la propiedad del logaritmo

$$\ln x \leq (x - 1) \quad \text{con} \quad \ln x = (x - 1) \quad \Leftrightarrow \quad x = 1 \quad (2.7)$$

se tiene

$$\begin{aligned} 0 = 1 - 1 &= \text{Tr} D - \text{Tr} D' = \sum_{\alpha} (D_{\alpha\alpha} - D'_{\alpha\alpha}) \\ &= \sum_{\alpha} D'_{\alpha\alpha} \left(\frac{D_{\alpha\alpha}}{D'_{\alpha\alpha}} - 1 \right) \geq \sum_{\alpha} D'_{\alpha\alpha} \ln \left(\frac{D_{\alpha\alpha}}{D'_{\alpha\alpha}} \right) \\ &= \text{Tr}(D' \ln D) - \text{Tr}(D' \ln D') \end{aligned} \quad (2.8)$$

lo que demuestra (2.6). Volviendo a (2.4) y haciendo uso de la expresión (1.7) del operador densidad estadístico exacto se tiene

$$\begin{aligned} \text{Tr}(D' \ln D) &= \text{Tr}(D' (-\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \hat{f}_{\alpha})) - \text{Tr}(D' \ln Z) \\ &= -\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \text{Tr}(D' \hat{f}_{\alpha}) - \ln Z \leq \text{Tr}(D' \ln D') \end{aligned} \quad (2.9)$$

y por consiguiente

$$\Phi(D) = -\frac{1}{\beta} \ln Z \leq \frac{1}{\beta} \text{Tr}(D' \ln D') + \frac{1}{\beta} \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \text{Tr}(D' \hat{f}_{\alpha}) = \Phi(D') \quad (2.10)$$

que es lo que se quería demostrar.

Esto permite buscar aproximaciones del operador densidad estadístico de un sistema, dentro de cierta familia de operadores, eligiendo aquel que minimice el potencial termodinámico.

2.1. Hartree-Fock-Bogoliuvov térmico.

En la presente sección se presentará una generalización de las ecuaciones de HFB al caso de temperatura finita siguiendo las líneas generales de la ref. (13). La idea es buscar el operador densidad estadístico que minimice el gran potencial empleando como espacio variacional al formado por los operadores que corresponden a sistemas de cuasipartículas independientes.

Se partirá de un hamiltoniano fermiónico con una interacción de dos cuerpos genérica

$$H = \sum_{ij} (\epsilon_{ij} - \mu) a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} v_{ijkl}^s a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (2.11)$$

Donde se ha introducido el potencial químico μ porque se trabajará en el conjunto gran canónico y el elemento de matriz de la interacción de dos cuerpos v_{ijkl}^s está antisimetrizado

$$v_{ijkl}^s = v_{ijkl} - v_{ijlk} \quad (2.12)$$

Como familia de operadores densidad estadísticos se utilizará a la formada por los del tipo

$$D = \frac{e^{-\beta K_0}}{Z_0} \quad (2.13)$$

Donde K_0 es un operador cuadrático en los operadores de creación y destrucción fermiónicos

$$K_0 = \frac{1}{2} \sum_{ij} [h_{ij} (a_i^\dagger a_j + a_j a_i^\dagger) + \Delta_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger + \Delta_{ij}^* a_j a_i] \quad (2.14)$$

K_0 se puede expresar sintéticamente en la forma

$$K_0 = \frac{1}{2} \gamma^\dagger M \gamma \quad (2.15)$$

con

$$M = M^\dagger = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \quad y \quad \gamma = \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

Como es usual, la función de partición se define de modo de asegurar que la traza del operador densidad estadístico sea igual a 1

$$Z_0 = Tr (e^{-\beta K_0}) \quad (2.17)$$

El hamiltoniano cuadrático (2.14) puede ser llevado a la forma diagonal por medio de una transformación canónica cuyos detalles se discuten en los apéndices B y C. Dicha transformación canónica reemplaza a los operadores a^\dagger y a por un nuevo juego de operadores fermiónicos b^\dagger y b que son combinación lineal de los primeros

$$\begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^* & Y^* \\ Y & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

La condición de que sea canónica introduce los vínculos

$$\begin{aligned} X X^\dagger + Y Y^\dagger &= 1 & X Y^\dagger + Y X^\dagger &= 0 \\ X^\dagger X + Y^\dagger Y^* &= 1 & X^\dagger Y^* + Y^\dagger X &= 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

los que aseguran que los operadores b^\dagger y b tengan las relaciones de anticonmutación adecuadas.

$$\{ b_i, b_j^\dagger \}_+ = \delta_{ij} \quad \{ b_i, b_j \}_+ = 0 \quad \{ b_i^\dagger, b_j^\dagger \}_+ = 0 \quad (2.20)$$

La matriz de la transformación es unitaria y su inversa es

$$\begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^\dagger & Y^\dagger \\ Y^\dagger & X^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

La diagonalización de K_0 se realiza resolviendo la ecuación de autovalores

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

Donde los autovectores forman las columnas de la transformación inversa (2.21)

La matriz a diagonalizar es hermítica, por lo que el problema de su diagonalización es el usual. Esta matriz tiene asociado con cada autovector V^n de autovalor positivo E_n un autovector W^n con autovalor negativo $-E_n$ relacionado con V^n en la forma

$$V^n = \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} \longleftrightarrow W^n = \begin{pmatrix} Y^{n*} \\ X^{n*} \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

En función de los nuevos operadores b^\dagger y b el hamiltoniano cuadrático se reduce a la forma diagonal

$$K_0 = \sum_{E_n > 0} E_n b_n^\dagger b_n - \frac{1}{2} \sum_{E_n > 0} E_n \quad (2.24)$$

Se define ahora la matriz densidad generalizada R en función de las contracciones de los operadores a^\dagger y a en la forma

$$R = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

con

$$\rho_{ij} = \langle a_j^\dagger a_i \rangle \quad \kappa_{ij} = \langle a_j a_i \rangle \quad (2.26)$$

La misma transformación canónica que diagonaliza al hamiltoniano cuadrático (2.14) lleva a la forma diagonal a la matriz densidad generalizada ya que las contracciones de los operadores b^\dagger y b resultan

$$\begin{aligned} \langle b_i^\dagger b_j \rangle &= \delta_{ij} \frac{1}{e^{\beta E_i} + 1} = \delta_{ij} f_i \\ \langle b_i b_j \rangle &= 0 \quad \langle b_i^\dagger b_j^\dagger \rangle = 0 \end{aligned} \quad (2.27)$$

Si se escriben los operadores a^\dagger y a en función de los b^\dagger y b se puede expresar la matriz densidad generalizada en función de los coeficientes de la transformación canónica (2.18) y de las contracciones (2.27) obteniéndose

$$\rho_{ij} = \langle a_j^\dagger a_i \rangle = [Y^\dagger(1-f)Y + X^\dagger f X']_{ij} \quad (2.28.a)$$

$$\kappa_{ij} = \langle a_j a_i \rangle = [Y^\dagger(1-f)X + X^\dagger f Y']_{ij} \quad (2.28.b)$$

La aproximación de Hartree-Fock-Bogoliuvov consiste en buscar el hamiltoniano cuadrático (2.14) que minimice el gran potencial termodinámico

$$\Omega = \langle H \rangle - T S \quad (2.29)$$

Para ello debe pedirse que se anule su variación

$$\delta \Omega = \delta \langle H \rangle - \delta(T S) \quad (2.30)$$

La entropía depende solamente del operador densidad estadístico empleado

$$T S = -\frac{1}{\beta} \text{Tr} (D \ln D) = -\text{Tr} (D K_0) - \frac{1}{\beta} \ln Z_0 \quad (2.31)$$

Es inmediato verificar que

$$\text{Tr} (DK_0) = \frac{1}{2} \text{Tr} (MR) \quad (2.32)$$

y por otro lado

$$\begin{aligned} \delta(\ln Z_0) &= \frac{1}{Z_0} \delta Z_0 \\ &= -\beta \text{Tr} (D\delta K_0) \\ &= -\frac{1}{2} \beta \text{Tr} (R\delta M) \end{aligned} \quad (2.33)$$

Por lo que (2.30) se reduce a

$$\delta\Omega = \delta \langle H \rangle - \frac{1}{2} \text{Tr} (M\delta R) \quad (2.34)$$

Para calcular el valor medio de la energía $\langle H \rangle$ se hace uso del teorema de Wick generalizado (apéndice A) y entonces $\langle H \rangle$ se puede expresar en función de la matriz densidad generalizada

$$\begin{aligned} \langle H \rangle (\rho, \kappa) &= \sum_{ij} (\varepsilon_{ij} - \mu) \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ijkl}^{\circ} \rho_{ki} \rho_{lj} \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{ijkl} v_{ijkl}^{\circ} \kappa_{ij}^{\dagger} \kappa_{kl} \end{aligned} \quad (2.35)$$

En consecuencia su variación ante un cambio infinitesimal en R será

$$\delta \langle H \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} (W\delta R) \quad (2.36)$$

donde

$$W = \begin{pmatrix} h^w & \Delta^w \\ -\Delta^{w*} & -h^{w*} \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

y

$$\begin{aligned}h_{ij}^w &= \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \rho_{ji}} = (\epsilon_{ij} - \mu) + \sum_{kl} v_{ikjl}^{\rho} \rho_{lk} \\ \Delta_{ij}^w &= \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \kappa_{ij}^*} = \frac{1}{2} \sum_{kl} v_{ijkl}^{\rho} \kappa_{kl}\end{aligned}\tag{2.38}$$

Por lo que la condición de minimización del gran potencial es equivalente a pedir

$$M = W\tag{2.39}$$

junto con la condición sobre el número de partículas

$$\langle N \rangle = \langle \sum_i a_i^\dagger a_i \rangle = \text{Tr } \rho\tag{2.40}$$

La ecuación (2.39) junto con la del número de partículas (2.40) constituye la aproximación de Hartree-Fock-Bogoliubov para un sistema fermiónico y puede ser resuelta en forma iterativa. Para ello pueden seguirse los siguientes pasos:

- a) Proponer un ρ , κ y μ iniciales y construir el hamiltoniano cuadrático (2.37).
- b) Diagonalizar el hamiltoniano cuadrático (2.37), cuyos autovalores y autovectores dan un valor para la matriz densidad generalizada (2.28).
- c) Con la matriz densidad evaluar el número de partículas (2.40), y variando μ diagonalizar el hamiltoniano hasta obtener el número de partículas adecuado.
- d) Con los valores de ρ y κ obtenidos en el punto anterior calcular h^w y Δ^w empleando la ec. (2.38).
- e) Volver al punto b.

El proceso iterativo se debe continuar hasta obtener en forma consecutiva iguales valores para ρ , κ y μ con la precisión deseada.

2.1.1 Límite $T \rightarrow 0$.

Para entender mejor la aproximación hecha, es conveniente analizar el límite $T \rightarrow 0$ de la teoría.

Para ello es interesante notar que a temperatura cero el valor medio en el ensemble de cualquier operador es igual al valor medio en el estado fundamental del hamiltoniano que figura en el exponente de la función de partición. El hecho de utilizar como familia de operadores densidad estadísticos a exponenciales de hamiltonianos cuadráticos hace que en el límite de temperatura cero se esté minimizando la energía media del sistema con una familia de funciones de onda $|\psi_0\rangle$ que están caracterizadas por ser el vacío de los operadores de aniquilación fermiónicos.

$$b_i|\psi_0\rangle = 0 \quad \forall i \quad (2.41)$$

Como se ha partido de un juego de operadores a^\dagger y a con un vacío $|0\rangle$, y se han obtenido los operadores b^\dagger y b por medio de la transformación canónica (2.18), el vacío de los nuevos operadores $|\psi_0\rangle$ estará relacionado con el vacío inicial $|0\rangle$ en la forma (apéndice B)

$$|\psi_0\rangle = \det(X^\dagger X)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}a^\dagger X^{\ast-1} Y^\dagger a^\dagger\right\} |0\rangle \quad (2.42)$$

Esta expresión sirve para mejorar la comprensión del espacio variacional utilizado en la aproximación de Hartree-Fock-Bogoliubov térmica.

La transformación canónica (2.18) incluye a la transformación especial de Bogoliubov, esta transformación aparea fermiones y tiene la forma general

$$\begin{aligned} b_i^\dagger &= a_i^\dagger \cos\omega_i + a_i \operatorname{sen}\omega_i \\ b_i &= -a_i^\dagger \operatorname{sen}\omega_i + a_i \cos\omega_i \\ b_i^\dagger &= a_i^\dagger \cos\omega_i - a_i \operatorname{sen}\omega_i \\ b_i &= a_i^\dagger \operatorname{sen}\omega_i + a_i \cos\omega_i \end{aligned} \quad (2.43)$$

lo que equivale a tomar en la transformación canónica (2.18)

$$\begin{aligned} X_{ij} = X_{ji} &= \delta_{ij} \cos\omega_i & X_{ij} = X_{ji} &= 0 \\ Y_{ij} = -Y_{ji} &= \delta_{ij} \operatorname{sen}\omega_i & Y_{ij} = Y_{ji} &= 0 \end{aligned} \quad (2.44)$$

En este caso los operadores b tienen como vacío al estado

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= \prod_{i>0} \cos\omega_i \exp\left\{-\sum_{i>0} a_i^\dagger a_i^\dagger \tan\omega_i\right\} |0\rangle \\ &= \prod_{i>0} |\cos\omega_i - a_i^\dagger a_i^\dagger \operatorname{sen}\omega_i| |0\rangle \end{aligned} \quad (2.45)$$

Esta función de onda es un condensado de fermiones apareados y es del tipo de la solución BCS para sistemas superconductores.

2.2. Hartree-Bose térmico.

En la presente sección se presentará una generalización de las ecuaciones de Hartree-Bose al caso de temperatura finita siguiendo las líneas generales de la ref (13). La idea es buscar el operador densidad estadístico que minimice el gran potencial empleando como espacio variacional al formado por los operadores que corresponden a sistemas de cuasipartículas independientes.

Se partirá de un hamiltoniano bosónico con una interacción de dos cuerpos genérica

$$H = \sum_{ij} (\epsilon_{ij} - \mu) a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} v_{ijkl}^s a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (2.46)$$

Donde se ha introducido el potencial químico μ porque se trabajará en el conjunto gran canónico y el elemento de matriz de la interacción de dos cuerpos v_{ijkl}^s está simetrizado

$$v_{ijkl}^s = v_{ijkl} + v_{ijlk} \quad (2.47)$$

La aproximación de Hartree-Bose térmica se puede formular de un modo similar al caso fermiónico utilizando como familia de operadores densidad estadísticos a la formada por los operadores del tipo

$$D = \frac{e^{-\beta K_0}}{Z_0} \quad (2.48)$$

Donde K_0 es un operador cuadrático en los operadores de creación y destrucción bosónicos

$$K_0 = \frac{1}{2} \sum_{ij} [h_{ij} (c_i^\dagger c_j + c_j c_i^\dagger) + \Delta_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger + \Delta_{ij}^* c_j c_i] \quad (2.49)$$

K_0 se puede expresar sintéticamente en la forma

$$K_0 = \frac{1}{2} \gamma^\dagger M \gamma \quad (2.50)$$

con

$$M = M^\dagger = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ \Delta^* & h^* \end{pmatrix} \quad y \quad \gamma = \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

Como es usual la función de partición se define de modo de asegurar que la traza del operador densidad estadístico sea igual a 1

$$Z_0 = Tr (e^{-\beta K_0}) \quad (2.52)$$

Los operadores bosónicos c^\dagger y c están relacionados con los operadores a^\dagger y a por medio de la transformación

$$c_i^\dagger = a_i^\dagger - z_i^* \quad c_i = a_i - z_i \quad (2.53)$$

Más adelante se mostrará que este “desplazamiento” de los operadores está vinculado con la posibilidad de incluir en el espacio variacional a condensados de bosones.

El hamiltoniano cuadrático (2.49) puede ser llevado a la forma diagonal por medio de una transformación canónica unitaria cuyos detalles se discuten en los apéndices B y C. Dicha transformación canónica reemplaza a los operadores c^\dagger y c por un nuevo juego de operadores bosónicos b^\dagger y b que son combinación lineal de los primeros

$$\begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^* & -Y^* \\ -Y & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

La condición de que sea canónica introduce los vínculos

$$\begin{aligned} X X^\dagger - Y Y^\dagger &= 1 & X Y^t - Y X^t &= 0 \\ X^\dagger X - Y^t Y^* &= 1 & X^t Y^* - Y^\dagger X &= 0 \end{aligned} \quad (2.55)$$

los que aseguran que los operadores b^\dagger y b tengan las relaciones de conmutación adecuadas.

$$[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad [b_i, b_j] = 0 \quad [b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0 \quad (2.56)$$

A diferencia del caso fermiónico, la matriz (2.54) de la transformación no es unitaria. La transformación inversa está dada por la relación

$$\begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^t & Y^\dagger \\ Y^t & X^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.57)$$

La diagonalización de K_0 se realiza resolviendo la ecuación de autovalores

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

Donde los autovectores forman las columnas de la transformación inversa (2.57)

Debe notarse que la matriz a diagonalizar difiere de la del hamiltoniano cuadrático (2.51) en el cambio de signo de la fila inferior por lo que no es hermítica. Esta matriz

tiene asociado con cada autovector V^n de autovalor positivo E_n un autovector W^n con autovalor negativo $-E_n$ relacionado con V^n en la forma

$$V^n = \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} \longleftrightarrow W^n = \begin{pmatrix} Y^{n*} \\ X^{n*} \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

En función de los nuevos operadores b^\dagger y b el hamiltoniano cuadrático se reduce a la forma diagonal

$$K_0 = \sum_{E_n > 0} E_n b_n^\dagger b_n + \frac{1}{2} \sum_{E_n > 0} E_n \quad (2.60)$$

donde se ha asumido que no tiene autovalores nulos.

Se define ahora la matriz densidad generalizada R en función de las contracciones de los operadores c^\dagger y c

$$R = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ \kappa^* & 1 + \rho^* \end{pmatrix} \quad (2.61)$$

con

$$\rho_{ij} = \langle c_j^\dagger c_i \rangle \quad \kappa_{ij} = \langle c_j c_i \rangle \quad (2.62)$$

La misma transformación canónica que diagonaliza al hamiltoniano cuadrático (2.49) lleva a la forma diagonal a la matriz densidad generalizada ya que las contracciones de los operadores b^\dagger y b resultan

$$\begin{aligned} \langle b_i^\dagger b_j \rangle &= \delta_{ij} \frac{1}{e^{\beta E_i} - 1} = \delta_{ij} f_i \\ \langle b_i b_j \rangle &= 0 \quad \langle b_i^\dagger b_j^\dagger \rangle = 0 \end{aligned} \quad (2.63)$$

Como en el caso del hamiltoniano cuadrático la ecuación de autovalores a resolver para llevar a R a la forma diagonal involucra a la matriz R con el signo de la fila inferior cambiado.

Si se escriben los operadores c^\dagger y c en función de los b^\dagger y b se puede expresar la matriz densidad generalizada en función de los coeficientes de la transformación canónica (2.54) y de las contracciones (2.63) obteniéndose

$$\rho_{ij} = \langle a_j^\dagger a_i \rangle = [Y^\dagger(1+f)Y + X^\dagger f X^*]_{ij} \quad (2.64.a)$$

$$\kappa_{ij} = \langle a_j a_i \rangle = [Y^\dagger(1+f)X + X^\dagger f Y^*]_{ij} \quad (2.64.b)$$

La aproximación de Hartree-Bose consiste en buscar el hamiltoniano cuadrático (2.49) que minimice el gran potencial termodinámico

$$\Omega = \langle H \rangle - T S \quad (2.65)$$

para ello debe pedirse que se anule su variación

$$\delta\Omega = \delta \langle H \rangle - \delta(T S) \quad (2.66)$$

La entropía depende solamente del operador densidad estadístico empleado

$$T S = -\frac{1}{\beta} \text{Tr} (D \ln D) = -\text{Tr} (D K_0) - \frac{1}{\beta} \ln Z_0 \quad (2.67)$$

Es inmediato verificar que

$$\text{Tr} (D K_0) = \frac{1}{2} \text{Tr} (M R) \quad (2.68)$$

y por otro lado

$$\begin{aligned} \delta(\ln Z_0) &= \frac{1}{Z_0} \delta Z_0 \\ &= -\beta \text{Tr} (D \delta K_0) \\ &= -\frac{1}{2} \beta \text{Tr} (R \delta M) \end{aligned} \quad (2.69)$$

por lo que (2.66) se reduce a

$$\delta\Omega = \delta \langle H \rangle - \frac{1}{2} \text{Tr} (M \delta R) \quad (2.70)$$

Para calcular el valor medio de la energía $\langle H \rangle$ es conveniente expresar el hamiltoniano (2.46) en función de los operadores c^\dagger y c , entonces, haciendo uso de teorema de Wick generalizado (apéndice A) se puede expresar $\langle H \rangle$ en función de la matriz densidad generalizada y los números complejos z_i

$$\langle H \rangle = \langle H \rangle_c (z) + \langle H \rangle_p (\rho, \kappa) + \langle H \rangle_{cp} (\rho, \kappa, z) \quad (2.71)$$

donde

$$\langle H \rangle_c (z) = \sum_{ij} (\epsilon_{ij} - \mu) z_i^\dagger z_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} v_{ijkl}^\dagger z_i^\dagger z_j^\dagger z_l z_k \quad (2.72.a)$$

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_p(\rho, \kappa) = & \sum_{ij} (\epsilon_{ij} - \mu) \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ijkl}^s \rho_{ki} \rho_{lj} \\ & + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} v_{ijkl}^s \kappa_{ij}^* \kappa_{kl} \end{aligned} \quad (2.72.b)$$

$$\langle H \rangle_{cp}(\rho, \kappa, z) = \sum_{ijkl} v_{ijkl}^s [\rho_{ki} z_j^* z_l + \frac{1}{4} \kappa_{kl} z_i^* z_j^* + \frac{1}{4} \kappa_{ij}^* z_k z_l] \quad (2.72.c)$$

En consecuencia su variación ante un cambio infinitesimal en R será

$$\delta \langle H \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr}(W \delta R) \quad (2.73)$$

donde

$$W = \begin{pmatrix} h^w & \Delta^w \\ \Delta^{w*} & h^{w*} \end{pmatrix} \quad (2.74)$$

y

$$\begin{aligned} h_{ij}^w &= \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \rho_{ji}} = (\epsilon_{ij} - \mu) + \sum_{kl} v_{ijkl}^s [\rho_{lk} + z_k^* z_l] \\ \Delta_{ij}^w &= \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \kappa_{ij}^*} = \frac{1}{2} \sum_{kl} v_{ijkl}^s [\kappa_{kl} + z_k z_l] \end{aligned} \quad (2.75)$$

Por lo que la condición de minimización del gran potencial es equivalente a pedir

$$M = W \quad (2.76)$$

más la condición adicional de que se anule la variación del gran potencial al variar los números complejos z . Como el único término en el gran potencial que depende de ellos es el valor medio del hamiltoniano (2.71) se debe pedir

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial z_i} = 0 \quad \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial z_i^*} = 0 \quad (2.77)$$

Estas condiciones pueden expresarse en forma matricial

$$\begin{pmatrix} h^c & \Delta^c \\ \Delta^{c*} & h^{c*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z \\ z^* \end{pmatrix} = 0 \quad (2.78)$$

donde

$$\begin{aligned}
 h_{ij}^c &= (\epsilon_{ij} - \mu) + \sum_{kl} v_{ijkl}^0 [\rho_{lk} + \frac{1}{2} z_k^* z_l] \\
 \Delta_{ij}^c &= \frac{1}{2} \sum_{kl} v_{ijkl}^0 \kappa_{kl}
 \end{aligned}
 \tag{2.79}$$

A estas ecuaciones hay que agregarle la del número de partículas que se fija por medio del potencial químico μ

$$\begin{aligned}
 \langle N \rangle &= \langle \sum_i a_i^\dagger a_i \rangle = \langle \sum_i (c_i^\dagger + z_i^*)(c_i + z_i) \rangle \\
 &= \sum_i |z_i|^2 + \text{Tr } \rho
 \end{aligned}
 \tag{2.80}$$

Las ecuaciones (2.76) y (2.78) junto con la del número de partículas (2.80) constituyen la aproximación de Hartree-Bose para un sistema bosónico y pueden ser resueltas en forma iterativa. Para ello pueden seguirse los siguientes pasos:

- a) Proponer un h^c inicial y fijar $\Delta^c = \rho = \kappa = 0$
- b) Resolver simultáneamente (2.78) y (2.80) lo que proporciona valores para z , z^* y μ
- c) Diagonalizar el hamiltoniano cuadrático (2.58), sus autovalores y autovectores dan un valor para la matriz densidad generalizada (2.64).
- d) Con los valores de ρ y κ obtenidos en el punto anterior, calcular h^w y Δ^w de (2.75) y h^c y Δ^c de (2.79).
- e) Volver al punto b.

El proceso iterativo se debe continuar hasta obtener en forma consecutiva iguales valores para ρ , κ , z y z^* con la precisión deseada.

2.2.1 Límite $T \rightarrow 0$.

Para entender mejor la aproximación hecha, es conveniente analizar el límite $T \rightarrow 0$ de la teoría. En modo similar al caso fermiónico el hecho de utilizar como familia de operadores densidad estadísticos a exponenciales de hamiltonianos cuadráticos hace que en el límite de temperatura cero se esté minimizando la energía media del sistema con

una familia de funciones de onda $|\psi_0\rangle$ caracterizadas por ser el vacío de los operadores de aniquilación bosónicos.

$$b_i|\psi_0\rangle = 0 \quad \forall i \quad (2.81)$$

Como se ha partido de un juego de operadores a^\dagger y a con un vacío $|0\rangle$ y se han obtenido los operadores b^\dagger y b por medio de la transformación canónica

$$\begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^* & -Y^* \\ -Y & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} z \\ z^* \end{pmatrix} \quad (2.82)$$

el vacío de los nuevos operadores $|\psi_0\rangle$ estará relacionado con el vacío inicial $|0\rangle$ en la forma (apéndice B)

$$|\psi_0\rangle = \det(X^\dagger X)^{-\frac{1}{4}} \exp\left\{\frac{1}{2}a^\dagger X^{*-1} Y^* a^\dagger + a^\dagger X^{*-1} z\right\} |0\rangle \quad (2.83)$$

Esta expresión sirve para entender mejor el espacio variacional utilizado en la aproximación de Hartree-Bose térmica y permite inferir que el empleo de los números complejos z incluye dentro del espacio variacional a condensados de bosones. Cuando la transformación canónica consiste sólo en un desplazamiento de los operadores, la función de onda $|\psi_0\rangle$ es una superposición de condensados de bosones donde el número medio de bosones del tipo i -ésimo está dado por el cuadrado del módulo del número complejo z_i

$$\langle a_i^\dagger a_i \rangle = |z_i|^2 \quad (2.84)$$

Por otro lado la transformación canónica incluye a la transformación especial de Bogoliubov que aparea bosones en la forma

$$\begin{aligned} b_i^\dagger &= a_i^\dagger \cosh \omega_i + a_i \sinh \omega_i \\ b_i &= a_i^\dagger \sinh \omega_i + a_i \cosh \omega_i \\ b_i^\dagger &= a_i^\dagger \cosh \omega_i + a_i \sinh \omega_i \\ b_i &= a_i^\dagger \sinh \omega_i + a_i \cosh \omega_i \end{aligned} \quad (2.85)$$

lo que equivale a tomar en la transformación canónica (2.82)

$$\begin{aligned} X_{ij} &= X_{ji} = \delta_{ij} \cosh \omega_i \\ Y_{ij} &= Y_{ji} = \delta_{ij} \sinh \omega_i \end{aligned} \quad (2.86)$$

y los números complejos z iguales a cero.

Para este caso particular los operadores b tienen como vacío al estado

$$|\psi_0\rangle = (\prod_i \cosh \omega_i)^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_i a_i^\dagger a_i^\dagger \tanh \omega_i\right\} |0\rangle \quad (2.87)$$

Esta función de onda es un condensado de pares de bosones. Este formalismo se aplicará en el capítulo 5 a un modelo sencillo de apareamiento de bosones.

2.3 Aproximación de fases al azar térmica.

A continuación se resumirá una derivación variacional de las ecuaciones de la aproximación de fases al azar térmicas debida a K. Tanabe y K. Sugawara-Tanabe⁴⁰).

Se partirá de un hamiltoniano fermiónico con una interacción de dos cuerpos

$$H = \sum_{ij} \epsilon_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} v_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (2.88)$$

y se supondrá que ya fueron resueltas las ecuaciones de Hartree-Fock-Bogoliubov térmicas (2.39), por lo que el operador densidad estadístico del sistema tiene la forma aproximada

$$D = \frac{e^{-\beta K_0}}{\text{Tr}(e^{-\beta K_0})} \quad (2.89)$$

con

$$K_0 = U'_0 + \sum_{\nu} E_{\nu} b_{\nu}^{\dagger} b_{\nu} \quad (2.90)$$

El hamiltoniano (2.88) puede ser reescrito en función de los operadores b^{\dagger} y b (2.18) que llevan a la forma diagonal a la aproximación cuadrática del hamiltoniano (2.90)

$$\begin{aligned} H' = U_0 + \sum_{\eta\nu} (H_{11})_{\eta\nu} b_{\eta}^{\dagger} b_{\nu} + \frac{1}{2} [\sum_{\eta\nu} (H_{20})_{\eta\nu} b_{\eta}^{\dagger} b_{\nu}^{\dagger} + h.c.] \\ + \sum_{\eta\nu\rho\sigma} (H_{22})_{\eta\nu\rho\sigma} b_{\eta}^{\dagger} b_{\nu}^{\dagger} b_{\rho} b_{\sigma} + [\sum_{\eta\nu\rho\sigma} (H_{31})_{\eta\nu\rho\sigma} b_{\eta}^{\dagger} b_{\nu}^{\dagger} b_{\rho}^{\dagger} b_{\sigma} + h.c.] \\ [\sum_{\eta\nu\rho\sigma} (H_{40})_{\eta\nu\rho\sigma} b_{\eta}^{\dagger} b_{\nu}^{\dagger} b_{\rho}^{\dagger} b_{\sigma}^{\dagger} + h.c.] \end{aligned} \quad (2.91)$$

y entonces los coeficientes del desarrollo cumplen las siguientes relaciones

$$\delta_{\eta\nu} E_{\nu} = (H_{11})_{\eta\nu} + 4 \sum_{\rho} (H_{22})_{\eta\rho\nu\rho} f_{\rho} \quad (2.92.a)$$

$$0 = (H_{20})_{\eta\nu} + 6 \sum_{\rho} (H_{31})_{\eta\nu\rho\rho} f_{\rho} \quad (2.92.b)$$

Se trata de minimizar la variación del gran potencial al aplicar al operador densidad que surge de la aproximación de Hartree-Fock-Bogoliubov térmica una transformación unitaria del tipo

$$D \rightarrow \bar{D} = \exp(iR) D \exp(-iR) \quad (2.93)$$

con

$$A_{\eta\nu\rho\sigma} \equiv [(E_\eta + E_\nu)/(1 - f_\rho - f_\sigma)](\delta_{\eta\rho}\delta_{\nu\sigma} - \delta_{\eta\sigma}\delta_{\nu\rho}) + 4(H_{22})_{\eta\sigma\nu\rho} \quad (2.101.a)$$

$$B_{\eta\nu\rho\sigma} \equiv -24(H_{40})_{\eta\nu\rho\sigma} \quad C_{\eta\nu\rho\sigma} \equiv 6(H_{31})_{\eta\nu\rho\sigma} \quad (2.101.b,c)$$

$$D_{\eta\nu\rho\sigma} \equiv [(E_\eta - E_\nu)/(f_\nu - f_\eta)]\delta_{\eta\rho}\delta_{\nu\sigma} + 4(H_{22})_{\eta\sigma\nu\rho} \quad (2.101.d)$$

la matriz de la métrica M

$$M_{\eta\nu} \equiv \begin{bmatrix} 1 - f_\eta - f_\nu & 0 & 0 \\ 0 & -(1 - f_\eta - f_\nu) & 0 \\ 0 & 0 & f_\nu - f_\eta \end{bmatrix} \quad (2.102)$$

y los vectores $\mathbf{X}^{(+)}$ y $\mathbf{X}^{(-)}$

$$\mathbf{X}_{\eta\nu}^{(n)} \equiv \begin{bmatrix} X_{\eta\nu}^{(n)} \\ Y_{\eta\nu}^{(n)} \\ Z_{\eta\nu}^{(n)} \end{bmatrix} \quad \mathbf{X}_{\eta\nu}^{(-n)} \equiv \begin{bmatrix} -Y_{\eta\nu}^{(n)*} \\ -X_{\eta\nu}^{(n)*} \\ Z_{\nu\eta}^{(n)*} \end{bmatrix} \quad (2.103)$$

De (2.102) y (2.103) se obtiene

$$\mathbf{X}^{(+)\dagger} \mathbf{M} \mathbf{X}^{(-)} = \mathbf{X}^{(-)\dagger} \mathbf{M} \mathbf{X}^{(+)} = 0 \quad (2.104)$$

Multiplicando a (2.99.a) por $\mathbf{X}^{(-)\dagger} \mathbf{M}$ y a (2.99.b) por $\mathbf{X}^{(+)\dagger} \mathbf{M}$ se obtiene con la ayuda de (2.104)

$$(1 - a) \langle [Q^\dagger, [H', Q]] \rangle = - \langle [Q^\dagger, [H', Q^\dagger]] \rangle \quad (2.105.a)$$

$$(1 - b) \langle [Q, [H', Q^\dagger]] \rangle = - \langle [Q, [H', Q]] \rangle \quad (2.105.b)$$

Los términos de la derecha de (2.105) se pide que se anulen (2.97) y $\langle [Q, [H', Q^\dagger]] \rangle$ es finito excepto en el caso trivial $\langle [R, [H', R]] \rangle = 0$, por lo que se obtienen las soluciones $a=b=1$. Entonces las ecuaciones (2.99) dan las ecuaciones de la TRPA

$$\Omega \mathbf{M} \mathbf{X}^{(n)} = \hbar \omega_n \mathbf{X}^{(n)} \quad \Omega \mathbf{M} \mathbf{X}^{(-n)} = \hbar \omega_{-n} \mathbf{X}^{(-n)} \quad (2.106)$$

con $\hbar \omega_n = -\hbar \omega_{-n}$. La relación de ortonormalización se prueba a partir de (2.106) mientras que la normalización se requiere en (2.96), en consecuencia

$$\langle [Q_m, Q_n^\dagger] \rangle = \mathbf{X}^{(m)\dagger} \mathbf{M} \mathbf{X}^{(n)} = \delta_{mn} \quad (2.107)$$

y (2.95) se reduce a

$$\Delta\Omega = \frac{1}{2} \langle [R, [H', R]] \rangle = \hbar\omega \quad (2.108)$$

lo cual prueba que el parámetro $\hbar\omega$ obtenido como autovalor de la ecuación (2.106) describe una energía de excitación efectiva sobre el estado de referencia obtenido a partir de las ecuaciones THFB.

3. Métodos perturbativos.

A temperatura finita se pueden utilizar métodos perturbativos en forma muy similar al caso $T = 0$. Las diferencias principales aparecen en la definición de las funciones de Green que en lugar de calcularse tomando valores medios en el estado fundamental se evalúan tomando promedios en el ensemble. Esto hace que el teorema de Wick deba reemplazarse por una versión generalizada del mismo más adecuada al formalismo térmico.

Cuando la temperatura va a cero el valor medio en el ensemble tiende al valor medio en el estado fundamental, en consecuencia, el límite $T = 0$ se recupera en forma natural de la teoría a temperatura finita.

En la sección 3.1 se introducirán las funciones de Green en el formalismo de Matsubara. En este formalismo se reemplaza el tiempo por una variable imaginaria para lo cual simplifica enormemente los desarrollos. Las funciones introducidas de este modo puede demostrarse que están íntimamente relacionadas con las obtenidas con el tiempo real que tienen una interpretación física directa. En la sección 3.4 se mostrará dicha relación y la interpretación física se resumirá en la sección 3.5.

Descripciones exhaustivas de ambos formalismos pueden hallarse en las ref. (33), (34) y (21).

3.1 Funciones de Green térmicas (TDGF) (Método de Matsubara).

En esta sección se resumirá brevemente el método de Matsubara²⁰⁾ que simplifica notablemente el formalismo de las funciones de Green dependientes de la temperatura (TDGF).

De aquí en adelante se tomará a las constantes de Planck y de Boltzman iguales a uno. En el tratamiento de Matsubara las funciones de Green dependen en lugar del tiempo de un parámetro imaginario puro $\tau = it$ definido en el intervalo de $-1/T$ a $1/T$ (donde T es la temperatura del sistema), en lo que sigue se empleará la variable $\beta = 1/T$. La definición de la función de Green térmica de un cuerpo es

$$G_{\alpha,\gamma}(\tau) = -Tr [D \{a_{\alpha}(\tau) a_{\gamma}^{\dagger}(0) \theta(\tau) - \epsilon a_{\gamma}^{\dagger}(0) a_{\alpha}(\tau) \theta(-\tau)\}] \quad (3.1)$$

donde D es el operador densidad estadístico

$$a_{\alpha}(\tau) = e^{\tau K} a_{\alpha} e^{-\tau K} \quad \text{con} \quad K = (H - \mu N) \quad (3.2)$$

$\epsilon = 1$ para fermiones y $\epsilon = -1$ para bosones, la cantidad μ es el potencial químico, N el operador número de partículas y H el hamiltoniano.

La TDGF tiene la propiedad de ser antiperiódica (periódica) en el intervalo $|\tau| \leq \beta$ para fermiones (bosones) con período β .

$$G(\tau < 0) = -\epsilon G(\tau + \beta) \quad (3.3)$$

Dicha propiedad es consecuencia directa de la propiedad cíclica de la traza ya que si $\tau < 0$ entonces $\tau + \beta > 0$ y

$$\begin{aligned} G_{\alpha\gamma}(\tau) &= \epsilon Tr [D a_{\gamma}^{\dagger}(0) a_{\alpha}(\tau)] \\ &= \epsilon Tr [a_{\alpha}(\tau) D a_{\gamma}^{\dagger}(0)] \\ &= \epsilon Tr [D a_{\alpha}(\tau + \beta) a_{\gamma}^{\dagger}(0)] = -\epsilon G_{\alpha\gamma}(\tau + \beta) \end{aligned} \quad (3.4)$$

La periodicidad (3.3) implica que puede ser escrita como una serie de Fourier

$$G_{\alpha\gamma}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n g_{\alpha\gamma}^{(n)} e^{-i\omega_n \tau} \quad \text{con} \quad \omega_n = \frac{n\pi}{\beta} \quad (3.5)$$

Los coeficientes del desarrollo se obtienen calculando

$$g_{\alpha\gamma}^{(n)} = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} G_{\alpha\gamma}(\tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau \quad (3.6)$$

Y haciendo uso de (3.3) se puede escribir (3.6) en la forma

$$g_{\alpha\gamma}^{(n)} = \frac{1}{2} (1 - \epsilon e^{-i\omega_n \beta}) \int_0^{\beta} G_{\alpha\gamma}(\tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau \quad (3.7)$$

Como $\omega_n = \frac{n\pi}{\beta}$ sólo sobreviven los términos con n impar en el caso fermiónico y n par en el caso bosónico.

3.1.1 Representación de Lehmann.

Partiendo de la definición de la función de Green (3.1) se tiene

$$\begin{aligned} G_{\alpha,\gamma}(\tau) &= -Tr \{ D \{ a_{\alpha}(\tau) a_{\gamma}^{\dagger}(0) \theta(\tau) - \epsilon a_{\gamma}^{\dagger}(0) a_{\alpha}(\tau) \theta(-\tau) \} \} \\ &= \frac{1}{Z} [-\theta(\tau) \sum_{\pi\nu} \langle \pi | a_{\alpha} | \nu \rangle \langle \nu | a_{\gamma}^{\dagger} | \pi \rangle e^{-\beta\epsilon_{\pi}} e^{\tau(\epsilon_{\pi} - \epsilon_{\nu})} \\ &\quad + \epsilon \theta(-\tau) \sum_{\pi\nu} \langle \pi | a_{\gamma}^{\dagger} | \nu \rangle \langle \nu | a_{\alpha} | \pi \rangle e^{-\beta\epsilon_{\nu}} e^{\tau(\epsilon_{\pi} - \epsilon_{\nu})}] \end{aligned} \quad (3.8)$$

cuya transformada de Fourier es

$$g_{\alpha\gamma}^{(n)} = \frac{1}{Z} \sum_{\pi\nu} \langle \pi | a_{\alpha} | \nu \rangle \langle \nu | a_{\gamma}^{\dagger} | \pi \rangle \frac{(e^{-\beta\epsilon_{\pi}} + \epsilon e^{-\beta\epsilon_{\nu}})}{(i\omega_n + \epsilon_{\pi} - \epsilon_{\nu})} \quad (3.9)$$

con $\epsilon_{\pi} = E_{\pi} - \mu N_{\pi}$.

Es interesante notar que los polos de la función de Green de Matsubara están sobre el eje imaginario en las diferencias de energías entre los estados de dos sistemas que difieren en una partícula. Estas “energías” imaginarias pueden ser fácilmente relacionadas con las reales de las funciones de Green de tiempo real, esto se mostrará en la sección 3.4

3.1.2 Sistema de partículas sin interacción.

En un sistema de partículas sin interacción el hamiltoniano tiene la forma sencilla

$$H = \sum_{\alpha} E_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \quad (3.10)$$

Si se define

$$\xi_\alpha = E_\alpha - \mu \quad (3.11)$$

se tiene

$$K = \sum_{\alpha} (E_\alpha - \mu) a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \quad (3.12)$$

y por lo tanto

$$a_{\alpha}(\tau) = e^{\tau K} a_{\alpha} e^{-\tau K} = a_{\alpha} e^{-\xi_{\alpha} \tau} \quad (3.13.a)$$

y

$$a_{\alpha}^{\dagger}(\tau) = e^{\tau K} a_{\alpha}^{\dagger} e^{-\tau K} = a_{\alpha}^{\dagger} e^{\xi_{\alpha} \tau} \quad (3.13.b)$$

entonces

$$\begin{aligned} G_{\alpha\gamma}(\tau) &= -Tr [D \{ a_{\alpha}(\tau) a_{\gamma}^{\dagger}(0) \theta(\tau) - \epsilon a_{\gamma}^{\dagger}(0) a_{\alpha}(\tau) \theta(-\tau) \}] \\ &= -\{ Tr [D a_{\alpha} a_{\gamma}^{\dagger}] \theta(\tau) - \epsilon Tr [D a_{\gamma}^{\dagger} a_{\alpha}] \theta(-\tau) \} \cdot e^{-\xi_{\alpha} \tau} \\ &= -\delta_{\alpha\gamma} \{ (1 - \epsilon n_{\alpha}) \theta(\tau) - \epsilon n_{\alpha} \theta(-\tau) \} \cdot e^{-\xi_{\alpha} \tau} \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde

$$n_{\alpha} = \frac{1}{e^{\beta \xi_{\alpha}} + \epsilon} \quad (3.15)$$

Los coeficientes del desarrollo de Fourier se pueden evaluar fácilmente

$$g_{\alpha\gamma}^{(n)} = \delta_{\alpha\gamma} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\alpha}} \quad (3.16)$$

Por lo tanto la función de Green se puede escribir

$$G_{\alpha\gamma}(\tau) = \delta_{\alpha\gamma} \frac{1}{\beta} \sum_{n^*} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\alpha}} e^{-i\omega_n \tau} \quad (3.17)$$

donde n^* significa sumar sobre n impares para fermiones y n pares para bosones.

3.2 Expansiones diagramáticas.

Como se trabajará en el conjunto gran canónico se utilizará en lugar de los hamiltonianos sin perturbar H_0 y perturbado H a los operadores

$$K_0 = H_0 - \mu N \quad y \quad K = H - \mu N \quad (3.18)$$

Para poder obtener una expansión diagramática equivalente a la de $T = 0$ es conveniente definir el operador

$$U(\tau) = e^{K_0\tau} e^{-K\tau} \quad (3.19)$$

que verifica en forma obvia las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} e^{-K\tau} &= e^{-K_0\tau} U(\tau) \\ e^{K\tau} &= U^{-1}(\tau) e^{K_0\tau} \end{aligned} \quad (3.20)$$

Se define para un operador O su representación de interacción

$$O_I(\tau) = e^{K_0\tau} O e^{-K_0\tau} \quad (3.21)$$

Entonces la ecuación de evolución para $U(\tau)$ es

$$\frac{\partial U(\tau)}{\partial \tau} = -H_I^{int}(\tau) U(\tau) \quad (3.22)$$

donde

$$H_I^{int}(\tau) = (H - H_0)_I(\tau) \quad (3.23)$$

Por lo que se obtiene para $U(\tau)$ una ecuación del tipo de la ecuación de Dyson para $T = 0$

$$U(\tau) = T_{\tau} e^{-\int_0^{\tau} H_I^{int}(\tau') d\tau'} \quad (3.24)$$

donde T_{τ} ordena los operadores "temporalmente" con τ decreciendo de izquierda a derecha.

Las expresiones anteriores permiten obtener expansiones diagramáticas de un modo similar al caso $T = 0$. A manera de ejemplo se trabajará con la expansión perturbativa de la función de Green de un cuerpo

$$\begin{aligned} G_{\alpha,\gamma}(\tau_2\tau_1) &= -Tr [D \{ a_{\alpha}(\tau_2) a_{\gamma}^{\dagger}(\tau_1) \theta(\tau_2 - \tau_1) - \epsilon a_{\gamma}^{\dagger}(\tau_1) a_{\alpha}(\tau_2) \theta(\tau_1 - \tau_2) \}] \\ &= \frac{-Tr [e^{-\beta K} T_{\tau} \{ e^{\tau_1 K} a_{\alpha} e^{(\tau_2 - \tau_1) K} a_{\gamma}^{\dagger} e^{-\tau_2 K} \}]}{Tr [e^{-\beta K}]} \end{aligned} \quad (3.25)$$

que haciendo uso de (3.19) equivale a

$$= \frac{-Tr [e^{-\beta K_0} U(\beta) T_\tau \{ U^{-1}(\tau_1) e^{\tau_1 K_0} a_\alpha e^{-\tau_1 K_0} U(\tau_1) U^{-1}(\tau_2) e^{\tau_2 K_0} a_\gamma^\dagger e^{-\tau_2 K_0} U(\tau_2) \}]}{Tr [e^{-\beta K_0} U(\beta)]} \quad (3.26)$$

Teniendo en cuenta las propiedades del operador temporal T_τ esto se reduce a

$$= \frac{-Tr [e^{-\beta K_0} T_\tau \{ a_{I\alpha}(\tau_1) a_{I\gamma}^\dagger(\tau_2) U(\beta) \}]}{Tr [e^{-\beta K_0} U(\beta)]} \quad (3.27)$$

Esta expresión es muy similar a la que se obtiene a temperatura cero pero en lugar de tener que calcularse el valor medio en el vacío sin perturbar debe calcularse el promedio en el "ensemble sin perturbar". Afortunadamente se cuenta con un teorema de Wick generalizado que permite llevar adelante la correlación con el formalismo a temperatura cero. A continuación se expondrá brevemente dicho teorema.

3.2.1 Teorema de Wick generalizado.

Para el caso $T = 0$ el teorema de Wick es de suma utilidad debido a que el valor medio en el vacío del orden normal de un producto de operadores se anula. A temperatura finita dicha cancelación ya no se verifica, sin embargo, existe una generalización del teorema introducida por Matsubara que es de suma utilidad para la realización de expansiones diagramáticas a temperatura finita. Dicha formulación generalizada trata con el promedio en el "ensemble sin perturbar" de los operadores y se basa en la forma detallada del operador densidad estadístico de un sistema de partículas independientes. Concretamente, si

$$H_0 = \sum_\nu \epsilon_\nu a_\nu^\dagger a_\nu \quad (3.28)$$

y

$$K_0 = H_0 - \mu N \quad (3.29)$$

Se trata de calcular el valor medio en el ensemble de un producto de operadores de creación y destrucción ordenados "temporalmente"

$$\langle T_\tau [\alpha_{a_1}(\tau_1) \alpha_{a_2}(\tau_2) \dots \alpha_{a_n}(\tau_n)] \rangle_0 = \frac{Tr [e^{-\beta K_0} T_\tau \{ \alpha_{a_1}(\tau_1) \alpha_{a_2}(\tau_2) \dots \alpha_{a_n}(\tau_n) \}]}{Tr (e^{-\beta K_0})} \quad (3.30)$$

donde los operadores $\alpha_{a_\nu}(\tau_\nu)$ son operadores de creación o destrucción en la representación de interacción (3.21).

Se define la contracción de dos operadores $\alpha_{a_\nu}(\tau_\nu)$ y $\alpha_{a_\sigma}(\tau_\sigma)$ como

$$\{\alpha_{a_\nu}(\tau_\nu)\alpha_{a_\sigma}(\tau_\sigma)\} = \frac{\text{Tr}[e^{-\beta K_0} T_\tau \{\alpha_{a_\nu}(\tau_\nu)\alpha_{a_\sigma}(\tau_\sigma)\}]}{\text{Tr}(e^{-\beta K_0})} = \langle T_\tau[\alpha_{a_\nu}(\tau_\nu)\alpha_{a_\sigma}(\tau_\sigma)] \rangle_0 \quad (3.31)$$

El teorema de Wick generalizado establece que el promedio (3.30) es igual a la suma de todos los posibles términos totalmente contraídos.

$$\langle T_\tau[\alpha_{a_1}(\tau_1)\dots\alpha_{a_n}(\tau_n)] \rangle_0 = \sum_{\text{contr.tot.}} \text{Sig.} \times \{[\alpha_{a_\nu}(\tau_\nu)\alpha_{a_\sigma}(\tau_\sigma)]\dots[\alpha_{a_\rho}(\tau_\rho)\alpha_{a_\gamma}(\tau_\gamma)]\} \quad (3.32)$$

donde *Sig.* es el signo correspondiente al sistema de contracciones de cada término que resulta de llevar los operadores a contraer uno al lado del otro. En el Apéndice A se incluye una demostración del teorema.

3.3 funciones de Green térmicas de tiempo real.

A temperatura cero, los polos de la función de Green de un cuerpo dan la energía y la vida media de los estados excitados de un sistema referidos al estado fundamental con una partícula más o una partícula menos.

A temperatura finita puede hacerse algo similar introduciendo las funciones de Green térmicas de tiempo real.

$$i \bar{G}_{\alpha\nu}(t, t') = Tr [D T \{ a_{\alpha}(t) a_{\nu}^{\dagger}(t') \}] \quad (3.33.a)$$

También son de utilidad sus partes retardada

$$i \bar{G}_{\alpha\nu}^R(t, t') = \theta(t - t') Tr [D \{ a_{\alpha}(t) a_{\nu}^{\dagger}(t') \}_\epsilon] \quad (3.33.b)$$

y avanzada

$$i \bar{G}_{\alpha\nu}^A(t, t') = -\theta(t' - t) Tr [D \{ a_{\alpha}(t) a_{\nu}^{\dagger}(t') \}_\epsilon] \quad (3.33.c)$$

donde como es usual

$$D = \frac{e^{-\beta K}}{Z} = \frac{e^{-\beta(H - \mu N)}}{Z} \quad (3.34)$$

T es el operador de ordenación temporal y los operadores $a_{\nu}(t)$ están en la representación de Heisenberg. En general K es independiente del tiempo y en consecuencia las funciones de Green sólo dependen de la diferencia $(t - t')$, lo que permite obtener la transformada de Fourier de (3.3.a) como

$$\begin{aligned} \bar{G}_{\alpha\nu}(\omega) &= \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\pi\gamma} \langle \pi | a_{\alpha} | \gamma \rangle \langle \gamma | a_{\nu}^{\dagger} | \pi \rangle \left(\frac{e^{-\beta \epsilon_{\pi}}}{(\omega + \epsilon_{\pi} - \epsilon_{\gamma} + i\eta)} + \epsilon \frac{e^{-\beta \epsilon_{\gamma}}}{(\omega + \epsilon_{\pi} - \epsilon_{\gamma} - i\eta)} \right) \end{aligned} \quad (3.35)$$

donde $\epsilon_{\pi} = E_{\pi} - \mu N_{\pi}$

La ecuación anterior muestra que $\bar{G}_{\alpha\nu}(\omega)$ es una función meromorfa de ω con polos simples en las diferencias de energía entre estados del sistema con una partícula de diferencia. Cuando $\alpha = \nu$ sus residuos son proporcionales a los comunmente llamados factores espectroscópicos $|\langle \pi | a_{\alpha} | \gamma \rangle|^2$ que pueden ser medidos en reacciones de striping y pick-up. El promedio en el ensemble generaliza la expresión de la función de Green a $T = 0$ ya que aquí tanto π como γ pueden ser estados excitados.

3.4 Relación entre las funciones de Green de Matsubara y las de tiempo real.

Si se comparan las transformadas de Fourier de la función de Green de Matsubara (3.9) y la función de Green térmica de tiempo real (3.35) se observa que ambas pueden ser escritas en forma similar. Definiendo la función de peso

$$\rho_{\alpha\nu}(\omega) = \frac{2\pi}{Z} \sum_{\pi\gamma} \langle \pi | a_\alpha | \gamma \rangle \langle \gamma | a_\nu^\dagger | \pi \rangle \delta(\omega - \epsilon_\pi + \epsilon_\gamma) (e^{-\beta\epsilon_\pi} + \epsilon e^{-\beta\epsilon_\gamma}) \quad (3.36)$$

se obtiene para la función de Green de Matsubara

$$g_{\alpha\nu}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{\rho_{\alpha\nu}(\omega')}{(i\omega - \omega')} d\omega' \quad (3.37)$$

y para la función de Green térmica de tiempo real

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\alpha\gamma}(\omega) = & \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} [1 + \epsilon e^{-\beta\omega'}]^{-1} \frac{\rho_{\alpha\gamma}(\omega')}{(\omega - \omega' + i\eta)} \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} [1 + \epsilon e^{\beta\omega'}]^{-1} \frac{\rho_{\alpha\gamma}(\omega')}{(\omega - \omega' - i\eta)} \end{aligned} \quad (3.38)$$

Si se define la función de variable compleja z

$$\Gamma_{\alpha\nu}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho_{\alpha\nu}(\omega')}{z - \omega'} \quad (3.39)$$

Las partes retardada y avanzada de la función de Green térmica de tiempo real se obtienen como los valores límites de esta función al aproximarse al eje real por arriba o debajo, por otro lado, la función de Green de Matsubara provee los valores de dicha función sobre un conjunto discreto de puntos en el eje imaginario.

En la práctica resulta usualmente más simple calcular $\rho_{\alpha\nu}(\omega)$ directamente de la función de Green de Matsubara considerando a ω como una variable continua. La función de peso se obtiene entonces como el valor límite

$$\rho_{\alpha\nu}(x) = i^{-1} [g_{\alpha\nu}(\omega_n)|_{i\omega_n = x - i\eta} - g_{\alpha\nu}(\omega_n)|_{i\omega_n = x + i\eta}] \quad (3.40)$$

por lo que cualquier aproximación de la función de Green de Matsubara provee una correspondiente para la función de Green térmica de tiempo real.

3.5 Relación con los observables físicos

Las funciones de Green térmicas son de suma utilidad ya que permiten evaluar el comportamiento termodinámico de un sistema.

A partir de la función de Green de un cuerpo es posible evaluar la energía media del sistema mediante la expresión

$$\langle E \rangle (\beta) = -\frac{1}{2} \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \sum_{\pi} \left(\epsilon_{\pi} - \frac{\partial}{\partial \tau} + \lambda \right) G_{\pi\pi}^{\beta}(\tau, 0) \quad (3.41)$$

Mientras que la densidad de un cuerpo se puede obtener como

$$\rho_{\mu\nu} = Tr [D a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu}] = \lim_{\tau \rightarrow 0^-} G_{\mu\nu}^{\beta}(\tau, 0) \quad (3.42)$$

En la sección anterior se mostró que los polos de la función de Green de un cuerpo están relacionados con las diferencias de energías entre dos sistemas que difieren en una partícula mientras que los residuos están relacionados con los elementos de matriz de los operadores de creación y destrucción entre dichos estados.

A continuación se mostrará una relación de suma importancia entre los polos de las funciones de Green de dos cuerpos y las energías de excitación de un sistema referida a sistemas con igual número de partículas o que difieren en dos partículas. Dicha relación se obtiene haciendo uso de la teoría de respuesta lineal. Esta teoría consiste en buscar las energías de excitación de un sistema perturbándolo con un campo externo que varía en el tiempo en el límite en que dicha perturbación tiende a cero.

3.5.1 Teoría de respuesta lineal.

Se supone que a tiempo cero el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico determinado por el operador densidad estadístico D y que entonces se enciende una perturbación externa representada por un operador cuadrático en los operadores de creación y destrucción. El hamiltoniano del sistema se escribe

$$H'(t) = H - \lambda N + F(t)\theta(t) \quad (3.43)$$

con

$$F(t) = \frac{1}{2} \sum_{ij} [f_{ij} (a_i^{\dagger} a_j - a_j a_i^{\dagger}) + g_{ij} a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} + g_{ij}^* a_j a_i] \quad (3.44)$$

A primer orden en la interacción, el cambio en el valor medio de un operador O estará dado por el promedio en el ensemble sin perturbar de la variación de sus elementos de matriz diagonales. Por lo tanto su evolución a primer orden en la interacción estará dada por

$$O(t) = Tr (D i \int_{t_0}^t dt' [F_I(t'); O_I(t)]) \quad (3.45)$$

Si el operador O es la matriz densidad de un cuerpo se obtiene

$$\rho_{ij}(t) = \rho_{ij}^0(t) + i \int_0^t dt' Tr (D [F_I(t'); (a_j^\dagger)_I(t)(a_i)_I(t)]) \quad (3.46)$$

En forma similar la variación del tensor de pairing se expresa en la forma

$$\kappa_{ij}(t) = i \int_0^t dt' Tr (D [F_I(t'); (a_j)_I(t)(a_i)_I(t)]) \quad (3.47)$$

donde el término $\kappa_{ij}^0(t)$ no aparece porque vale cero.

Si se introducen las funciones de respuesta

$$R_{ij;kl}(t) = -i \theta(t) Tr (D [(a_j^\dagger)_I(t)(a_i)_I(t); a_k^\dagger a_l]) \quad (3.48)$$

y

$$S_{ij;kl}(t) = -i \theta(t) Tr (D [(a_j)_I(t)(a_i)_I(t); a_k^\dagger a_l^\dagger]) \quad (3.49)$$

Las expresiones (3.46) y (3.47) resultan

$$\rho_{ij} = \rho_{ij}^0 + \sum_{kl} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' R_{ij;kl}(t-t') f_{kl}(t') \quad (3.50)$$

$$\kappa_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{kl} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' S_{ij;kl}(t-t') g_{kl}(t') \quad (3.51)$$

Estas expresiones son convoluciones por lo que sus transformadas de Fourier toman la forma

$$\delta \rho_{ij}(\omega) = \sum_{kl} R_{ij;kl}(\omega) f_{kl}(\omega) \quad (3.52)$$

y

$$\kappa_{ij}(\omega) = \sum_{kl} S_{ij;kl}(\omega) g_{kl}(\omega) \quad (3.53)$$

Los polos de las funciones de respuesta darán las energías de excitación del sistema. Estas funciones de respuesta son las partes avanzadas de las funciones de Green de dos cuerpos. Lamentablemente no pueden ser calculadas perturbativamente en forma directa ya que el teorema de Wick da una forma de obtener expansiones diagramáticas de operadores ordenados temporalmente por lo que primero se debe evaluar la función de Green total y después obtener su parte avanzada haciendo uso de la función de peso introducida en (3.36).

4. Derivación perturbativa de las ecuaciones de la aproximación de fases al azar térmicas.

4.1 Introducción.

En este capítulo se generalizará el método de la aproximación de la serie principal (PSA)^{22),23)} al caso de temperaturas finitas. Este método está basado en la Teoría de Campos Nucleares (NFT)²⁴⁾ y ha sido demostrado que describe la superconductividad conservando el número de partículas a un orden superior que la teoría BCS.

La NFT está basada en el concepto de modos elementales de excitación³⁵⁾ de un sistema fermiónico de muchos cuerpos. Dichas excitaciones pueden tener un carácter fermiónico (si están asociadas con los polos de la función de Green de un cuerpo) o bosónico (si corresponden a los polos de las funciones de Green de dos cuerpos). En la NFT el conjunto básico de estados está formado por el producto de ambos tipos de excitaciones y se proveen reglas bien definidas para la construcción del hamiltoniano y de los otros operadores físicos en este espacio producto. Los procesos considerados en la definición de las excitaciones elementales (usualmente Hartree-Fock para las excitaciones fermiónicas y burbujas de dos fermiones para los bosones de la RPA) no deben ser tenidos en cuenta nuevamente en la interacción entre los distintos modos. Un modelo de dos capas de degeneración 2Ω separadas por una energía ζ , con 2Ω partículas y un hamiltoniano de dos cuerpos monopolar se utiliza para la clasificación de los diagramas según la potencia de Ω^{-1} con la que contribuyen.

La PSA usa el mismo procedimiento de superponer excitaciones elementales pero emplea para clasificar los diagramas un modelo de una capa de degeneración 2Ω con $2M$ partículas y una interacción de apareamiento monopolar. Se supone que todas las magnitudes físicas de interés son analíticas en los dos parámetros adimensionales del modelo: $(1/\Omega)$ y (M/Ω) . La PSA da la suma de todos los procesos que sobreviven cuando se hace tender la degeneración a infinito conservando finito el parámetro (M/Ω) . Para aislar estos diagramas es necesario considerar que el estado fundamental del sistema es un condensado de bosones. Los diagramas de la PSA que contribuyen a las funciones de Green de uno y dos cuerpos resultan estar acopladas, obteniéndose las ecuaciones de Hartree-Fock-Bogliuov cuando ambas series son sumadas simultáneamente.

Las excitaciones de dos cuasipartículas a temperatura cero fueron estudiadas en la ref.²³⁾. En la PSA se debe distinguir entre agregar y remover dos cuasipartículas a sistemas con $2M + 1$ y $2M - 1$ partículas. En consecuencia hay tres tipos de estados

de dos cuasipartículas en un sistema con M pares: Uno corresponde a la excitación de partícula-agujero, los otros corresponden al agregado (remoción) de dos cuasipartículas a los sistemas con $M - 1(M + 1)$ pares de partículas. La distinción entre estos tipos de excitaciones en núcleos de capa cerrada a temperatura cero es clara, ya que en ese caso el concepto de partículas y de agujeros está bien definido. Además el acoplamiento entre distintos tipos de excitaciones es del orden de $(1/\Omega)$ y puede en consecuencia ser calculado perturbativamente.

La situación es completamente diferente en sistemas superconductores para $T \neq 0$, ya que en estos casos las funciones de Green de partícula-partícula y de partícula-agujero están acopladas al orden más bajo y deben ser tratadas en forma simultánea. Hay dos cuestiones importantes que surgen al hacer el tratamiento de este modo: La primera es que el número de estados obtenidos es el correcto, mientras que el número de estados obtenido al tratar en forma separada las funciones de Green es por lo menos el doble; y la segunda es que los elementos de matriz de los operadores de partícula-partícula y de partícula-agujero cambian drásticamente debido al acoplamiento entre los distintos modos. La introducción de los efectos térmicos ocasiona la aparición de términos adicionales que dependen de los factores de ocupación térmicos.

4.2 Aproximación de la serie principal.

A continuación se repasarán las propiedades principales de la PSA de sistemas superconductores. La PSA involucra los siguientes pasos:

- identificación de los diagramas que contribuyen a la serie principal de sistemas con número par e impar de partículas, y
- suma de los conjuntos de diagramas correspondientes.

4.2.1 Identificación de los diagramas de la PSA.

El sistema usado para clasificar los diagramas involucrados en la PSA es un modelo de una capa de degeneración 2Ω con M pares de partículas que interactúan por medio de una interacción de apareamiento monopolar. Para estudiar la dependencia de los diagramas en M y Ω es conveniente subdividirlos en bloques y estudiar la dependencia de éstos con los parámetros mencionados.

En general se tendrá interés en los diagramas que comienzan y terminan en estados con M pares de partículas (donde cada par puede ser descripto, por conveniencia, en la aproximación de Tamm-Dancoff (TDA)). Para un sistema par se tendrán en cuenta los diagramas del tipo de la fig. 1(a). En dicho diagrama se tienen M pares externos (que forman los estados iniciales y finales) de los cuales hay r conectados entre sí. También se tienen s burbujas fermiónicas, m bosones internos, n vértices fermiónicos y $M - r$ pares que pasan sin interactuar.

Los factores que contribuyen a los diagramas son:

- Cada vez que hay una interacción se debe incluir un denominador de energía ΔE . Como la energía de los bosones de la TDA es $\omega = -G\Omega$, ΔE será proporcional a $G\Omega$.
- Cada bosón externo conectado contribuye con factores $\Lambda/\Delta E$ al entrar y al salir, para una capa se tiene $\Lambda = -G\Omega^{\frac{1}{2}}$ y en consecuencia $(\Lambda/\Delta E)^2$ es proporcional a $1/\Omega$, además hay un factor global $(M!/(M-r)!)^2$ que puede ser aproximado por M^r si $M \gg r$, todo esto proporciona un factor M/Ω por cada bosón externo conectado.
- Cada una de las n interacciones fermiónicas introduce un factor Ω^{-1} (sus contribuciones son proporcionales a $G/\Delta E$)

- Cada bosón interno introduce un factor Ω^{-1} , ya que contribuye con $(\Lambda/\Delta E)^2$.
- Cada burbuja fermiónica introduce un factor Ω pues se debe sumar sobre Ω estados intermedios con idéntica contribución.

Teniendo en cuenta todas las contribuciones se obtiene un factor

$$\left(\frac{M}{\Omega}\right)^r \Omega^{s-m-n} \quad (4.1)$$

Finalmente se puede concluir que los diagramas de la PSA serán aquellos que minimicen la diferencia entre el número de burbujas y las conexiones entre ellas (que son iguales a $n + m$).

Para sistemas impares los diagramas de la PSA deben tener igual número de conexiones y burbujas, y en consecuencia deben incluir contribuciones como las mostradas en la fig. 1(b).

4.2.2 Evaluación de la PSA para sistemas pares e impares.

Para evaluar la energía de las excitaciones, es usual estudiar los polos de las funciones de Green de un cuerpo (OPGF) y de dos cuerpos (TBGF) en lugar de sumar la correspondiente serie de Rayleigh-Schrödinger. La ecuación que describe a la OPGF en la PSA es del tipo de una ecuación de Dyson (fig. 2). En esta figura una línea con dos flechas representa una excitación fermiónica vestida (La cuasipartícula normal en la fig. 2(a) o la anormal en la fig 2.(b), dependiendo de la dirección de las flechas), mientras que dos líneas con dos flechas representan una excitación bosónica vestida. La estructura microscópica de esta excitación bosónica puede ser obtenida teniendo en cuenta las distintas contribuciones para su creación. Cuando se crean dos partículas y el estado final tiene M bosones del tipo que forma el condensado, es siempre posible elegir el "nuevo" bosón de forma tal que todas las conexiones entre la creación de las partículas y el bosón pueda reemplazarse por una partícula y una cuasipartícula, de este modo se obtiene un conjunto de ecuaciones acopladas que definen al bosón en función de las cuasipartículas y viceversa. La estructura microscópica de la excitación bosónica se muestra en la fig. 3.

Por tratarse de un tratamiento a temperatura finita se hará uso en lo que sigue del formalismo de Matsubara.

La propagación de los bosones desconexos que no están incluidos, por comodidad,

en la fig. 2(a) deben ser tenidos en cuenta en forma explícita en la evaluación de la ecuación de Dyson que define la cuasipartícula.

$$[G_b(T' - T)]^M G_\alpha(\tau) = [G_b(T' - T)]^M G_\alpha^{(0)}(\tau) + \Delta_\alpha^2 [G_b(T' - T)]^{M-1} \int \int d\tau' d\tau'' G_\alpha^{(0)}(\tau'') G_b(\tau' - T) G_{\bar{\alpha}}(\tau'' - \tau') G_b(T' - \tau'') G_\alpha(\tau - \tau'') \quad (4.2)$$

expandiendo esto en una serie de Fourier se obtienen los coeficientes:

$$g(\omega_n) = g^{(0)}(\omega_n) - \Delta^2 g^{(0)}(\omega_n) g^{(0)}(-\omega_n) g^{(0)}(\omega_n) + \Delta^4 g^{(0)}(\omega_n) g^{(0)}(-\omega_n) g^{(0)}(\omega_n) g^{(0)}(-\omega_n) g^{(0)}(\omega_n) + \dots = g^{(0)}(\omega_n) \frac{1}{1 + Z} \quad (4.3)$$

donde

$$Z = -\Delta^2 g^{(0)}(\omega_n) g^{(0)}(-\omega_n) = \frac{\Delta^2}{\omega_n^2 + \epsilon_\alpha^2} \quad (4.4)$$

y en consecuencia

$$g(\omega_n) = \frac{(i\omega_n + \epsilon_\alpha)}{(\epsilon_\alpha^2 + \Delta^2 + \omega_n^2)} \quad (4.5)$$

Introduciendo los coeficientes de ocupación U y V se obtiene

$$\begin{aligned} U_\alpha^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_\alpha}{E_\alpha} \right); \\ V_\alpha^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_\alpha}{E_\alpha} \right); \\ E_\alpha &= \sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta^2} \end{aligned} \quad (4.6)$$

los coeficientes de Fourier de la función de Green se pueden escribir como

$$g(\omega_n) = \frac{V_\alpha^2}{i\omega_n + E_\alpha} + \frac{U_\alpha^2}{i\omega_n - E_\alpha} \quad (4.7)$$

Para evaluar $G(\tau)$ se necesitará usar las relaciones

$$\begin{aligned} \tanh \frac{z}{2} &= 4z \sum_{n=\text{impar}} \frac{1}{z^2 + (n\pi)^2} \\ \coth \frac{z}{2} &= 2z \sum_{n=\text{par}} \frac{1}{z^2 + (n\pi)^2} \end{aligned} \quad (4.8)$$

que permiten escribir

$$G_{\alpha}(\tau) = [-N_{\alpha}V_{\alpha}^2 e^{E_{\alpha}\tau} - (1 - N_{\alpha})U_{\alpha}^2 e^{-E_{\alpha}\tau}] \theta(\tau) + [(1 - N_{\alpha})V_{\alpha}^2 e^{E_{\alpha}\tau} - N_{\alpha}U_{\alpha}^2 e^{-E_{\alpha}\tau}] \theta(-\tau) \quad (4.9)$$

donde

$$N_{\alpha} = \frac{1}{e^{E_{\alpha}\beta} + 1} \quad (4.10)$$

En forma similar se obtiene para el propagador anormal

$$F_{\alpha}(\tau) = U_{\alpha}V_{\alpha} \{ [N_{\alpha}e^{E_{\alpha}\tau} - (1 - N_{\alpha})e^{-E_{\alpha}\tau}] \theta(\tau) - [(1 - N_{\alpha})e^{E_{\alpha}\tau} - N_{\alpha}e^{-E_{\alpha}\tau}] \theta(-\tau) \} \quad (4.11)$$

Para sumar los diagramas de la fig. 3 se necesita el propagador de partícula-cuasipartícula

$$K_{\alpha}^{(0)}(\tau) = G_{\alpha}^{(0)}(\tau)G_{\alpha}(\tau) \\ K_{\alpha}^{(0)}(\omega_n) = \frac{(n_{\alpha} - N_{\alpha})V_{\alpha}^2}{i\omega_n + E_{\alpha} - \epsilon_{\alpha}} + \frac{(N_{\alpha} + n_{\alpha} - 1)U_{\alpha}^2}{i\omega_n - E_{\alpha} - \epsilon_{\alpha}} \quad (4.12)$$

que siguiendo la ec. (4.8) se definen sólo para $n = \text{par}$, y por cada burbuja extra que se agrega se obtiene un factor adicional

$$\sum_{\gamma} \mathbf{G} K_{\gamma}^{(0)}(\omega_n) \quad (4.13)$$

obteniéndose la función de Green de dos cuerpos que corresponde a la suma de todos los diagramas de la fig. 3:

$$K_{\alpha,\beta}(\omega_n) = K_{\alpha}^{(0)}(\omega_n) \left[\delta_{\alpha,\beta} - \frac{1}{1 - \sum_{\gamma} \mathbf{G} K_{\gamma}^{(0)}(\omega_n)} \mathbf{G} K_{\beta}^{(0)}(\omega_n) \right] \quad (4.14)$$

donde el potencial químico se determina por la condición de que K tenga un polo para $\omega_n = 0$; esto es

$$\sum_{\gamma} \mathbf{G} \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_{\gamma}^2 + \Delta^2}} \tanh \frac{\sqrt{\epsilon_{\gamma}^2 + \Delta^2}}{2k_B T} = 1 \quad (4.15)$$

que es la ecuación del gap térmica. Los residuos tienen la forma sencilla

$$\langle 0 | c_{\alpha} c_{\bar{\alpha}} | a \rangle = \frac{K_{\alpha}^{(0)}(0)}{\left[\sum_{\gamma > 0} \left(\frac{U_{\gamma}^2 (1 - N_{\gamma} - n_{\gamma})}{(E_{\gamma} + \epsilon_{\gamma})^2} + \frac{V_{\gamma}^2 (N_{\gamma} - n_{\gamma})}{(E_{\gamma} - \epsilon_{\gamma})^2} \right) \right]^{1/2}} \quad (4.16)$$

Introduciendo (4.16) en la expresión autoconsistente para como fué hecho para $T=0$ en la ref. (23) se obtiene una especie de ecuación del número de partículas:

$$M = \sum_{\alpha>0} V_{\alpha}^2(1 - N_{\alpha}) + U_{\alpha}^2 N_{\alpha} = n_{\alpha} \quad (4.17)$$

donde $2M$ es el número de partículas "activas" y la $\sum_{\alpha} n_{\alpha}$ es igual al número de partículas en el carozo inerte. Para simplificar el cálculo no se consideraron los niveles en el "carozo" y se reemplazó (4.17) por la ecuación del número de partículas usual

$$M = \sum_{\alpha>0} V_{\alpha}^2(1 - N_{\alpha}) + U_{\alpha}^2 N_{\alpha} \quad (4.18)$$

considerando en la suma sólo niveles "activos". Las ecuaciones (4.18) y (4.15) son las ecuaciones térmicas del gap y del número de partículas usuales que deben ser resueltas autoconsistentemente.

4.3 Estados excitados para una interacción separable.

Se ha descrito el estado fundamental del sistema como un condensado de bosones. Se estudiarán ahora las excitaciones elementales de dicho estado.

En principio, en un sistema par hay dos ramas de excitaciones: Una asociada con los polos de las funciones de Green de dos partículas y otra asociada con los polos de las funciones de Green de partícula-agujero.

Dichas funciones de Green en un sistema de capa cerrada están prácticamente desacopladas (el acoplamiento es del orden de Ω^{-1}). En cambio, en un sistema superconductor están acopladas a orden 1 y ambos tipos de funciones de Green deben ser tratados simultáneamente.

En el caso particular de una interacción separable es mucho más claro desde un punto de vista físico cuáles son los procesos relevantes que contribuyen a las TPGF, a las PHGF ó a su acoplamiento.

En esta sección se estudiará el acoplamiento entre las distintas excitaciones elementales en un sistema con M pares de partículas. En estos sistemas hay dos tipos de excitaciones fermiónicas, uno corresponde a estados con $2M + 1$ partículas (que se llamarán excitaciones de tipo partícula) y otro a estados con $2M - 1$ partículas (excitaciones de tipo agujero). En consecuencia se pueden construir tres tipos de excitaciones de dos fermiones: una de tipo "partícula-agujero" que actúa sobre el estado fundamental del sistema con M pares, otra de tipo "dos partículas" actuando sobre el fundamental con $M - 1$ pares y finalmente una de tipo "dos agujeros" que actúa sobre el fundamental del sistema con $M + 1$ pares.

El uso de interacciones separables simplifica notablemente el tratamiento que sigue, éstas se eligen en general de modo tal que sus elementos de matriz estén relacionados con los de una interacción realista. Las interacciones separables usuales se pueden escribir en un desarrollo multipolar en el canal de partícula-agujero ó en el canal de dos partículas.

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} C_{\alpha}^{\dagger} C_{\alpha} - 4\pi \sum_{\lambda\mu} G_{\lambda}(2\lambda + 1) P_{\lambda\mu}^{\dagger} P_{\lambda\mu} \\
 &= \sum_{\alpha} \epsilon'_{\alpha} C_{\alpha}^{\dagger} C_{\alpha} - \sum_{\lambda\mu} \frac{\chi_{\lambda}}{2} Q_{\lambda\mu}^{\dagger} Q_{\lambda\mu}
 \end{aligned}
 \tag{4.19}$$

donde

$$\begin{aligned}
P_{\lambda\mu}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\lambda+1}} \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha || Y_\lambda K(r) || \beta \rangle [C_\alpha^\dagger C_\beta^\dagger]_\mu^\lambda \\
Q_{\lambda\mu}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\lambda+1}} \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha || Y_\lambda \kappa(r) || \beta \rangle [C_\alpha^\dagger C_\beta]_\mu^\lambda
\end{aligned} \tag{4.20}$$

La dependencia detallada de las funciones radiales es poco importante suponiendo que dichas funciones se comportan razonablemente en la superficie nuclear. Independientemente de la forma en que se escriba el hamiltoniano (4.20), ambas partes de la interacción, apareamiento y dispersión de partículas-agujeros, serán relevantes para distintos diagramas y los dos tipos de vértices deben tenerse en cuenta ³⁵).

El empleo de una interacción separable permite dividir a los diagramas que contribuyen a la TPGF y a la PHGF en partes elementales. Por empezar pueden separarse las “patas externas” que se encuentran graficadas en la fig. 4 para la TPGF y en la fig. 5 para la PHGF. El hecho de que existan diversas patas externas para la misma función se debe a la existencia de los propagadores “anómalos” (fig. 2(b)). El resto del diagrama, que contiene todos los procesos que conectan a las patas externas y representa la interacción vestida entre ambas, es común para los dos tipos de funciones de Green y puede ser descompuesto en siete burbujas elementales (fig. 6). En la fig. 7 se representa en forma esquemática la separación en bloques elementales de la TPGF y se introduce la notación $L_{\mu\nu}$ donde $\mu = 1$ corresponde a la adición de dos partículas, $\mu = \bar{1}$ a su remoción y $\mu = 0$ a la parte de partícula agujero.

Como todas las integrales “temporales” que aparecen son convoluciones, es más sencillo trabajar con las transformadas de Fourier de los bloques elementales y obtener la transformada de Fourier de la función total como el producto de sus transformadas.

Haciendo uso del formalismo de Matsubara, las burbujas elementales de la fig. 6 resultan

$$\begin{aligned}
x &= 2\pi G_\lambda \sum_{\alpha\beta} |M_1(\alpha, \beta, \lambda)|^2 \left\{ (1 - N_\alpha - N_\beta) \left[\frac{V_\alpha^2 V_\beta^2}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} - \frac{U_\alpha^2 U_\beta^2}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} \right] \right. \\
&\quad \left. + (N_\beta - N_\alpha) \left[\frac{V_\alpha^2 U_\beta^2}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} - \frac{U_\alpha^2 V_\beta^2}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} \right] \right\}
\end{aligned} \tag{4.21.a}$$

$$\begin{aligned}
y = 2\pi G_\lambda \sum_{\alpha\beta} |M_1(\alpha, \beta, \lambda)|^2 & \left\{ (1 - N_\alpha - N_\beta) \left[\frac{U_\alpha^2 U_\beta^2}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} - \frac{V_\alpha^2 V_\beta^2}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} \right] \right. \\
& \left. + (N_\beta - N_\alpha) \left[\frac{U_\alpha^2 V_\beta^2}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} - \frac{V_\alpha^2 U_\beta^2}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} \right] \right\} \quad (4.21.b)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
z = 2\pi G_\lambda \sum_{\alpha\beta} |M_1(\alpha, \beta, \lambda)|^2 U_\alpha U_\beta V_\alpha V_\beta & \\
& \left\{ (1 - N_\alpha - N_\beta) \left[\frac{1}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} - \frac{1}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} \right] \right. \\
& \left. - (N_\beta - N_\alpha) \left[\frac{1}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} - \frac{1}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} \right] \right\} \quad (4.21.c)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u = - \sqrt{\frac{4\pi G_\lambda \chi_\lambda}{(2\lambda + 1)}} \sum_{\alpha\beta} M_0(\alpha, \beta, \lambda) M_1(\alpha, \beta, \lambda) & \\
& \left\{ \frac{(1 - N_\alpha - N_\beta)}{2} (U_\alpha V_\beta + V_\alpha U_\beta) \left[\frac{V_\alpha V_\beta}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} + \frac{U_\alpha U_\beta}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} \right] \right. \\
& \left. + \frac{(N_\beta - N_\alpha)}{2} (U_\alpha U_\beta - V_\alpha V_\beta) \left[\frac{V_\alpha U_\beta}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} - \frac{U_\alpha V_\beta}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} \right] \right\} \quad (4.21.d)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
v = - \sqrt{\frac{4\pi G_\lambda \chi_\lambda}{(2\lambda + 1)}} \sum_{\alpha\beta} M_0(\alpha, \beta, \lambda) M_1(\alpha, \beta, \lambda) & \\
& \left\{ \frac{(1 - N_\alpha - N_\beta)}{2} (U_\alpha V_\beta + V_\alpha U_\beta) \left[\frac{U_\alpha U_\beta}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} + \frac{V_\alpha V_\beta}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} \right] \right. \\
& \left. + \frac{(N_\beta - N_\alpha)}{2} (U_\alpha U_\beta - V_\alpha V_\beta) \left[\frac{U_\alpha V_\beta}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} - \frac{V_\alpha U_\beta}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} \right] \right\} \quad (4.21.e)
\end{aligned}$$

$$s = \frac{\chi_\lambda}{(2\lambda + 1)} \sum_{\alpha\beta} \frac{M_0^2(\alpha, \beta, \lambda)}{2} \left\{ (1 - N_\alpha - N_\beta)(U_\alpha^2 V_\beta^2 + V_\alpha^2 U_\beta^2) \left[\frac{1}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} - \frac{1}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} \right] \right. \\ \left. + (N_\beta - N_\alpha)(U_\alpha^2 U_\beta^2 + V_\alpha^2 V_\beta^2) \left[\frac{1}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} - \frac{1}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} \right] \right\} \quad (4.21.f)$$

$$t = \frac{\chi_\lambda}{(2\lambda + 1)} \sum_{\alpha\beta} M_0^2(\alpha, \beta, \lambda) U_\alpha U_\beta V_\alpha V_\beta \left\{ (1 - N_\alpha - N_\beta) \left[\frac{1}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} - \frac{1}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} \right] \right. \\ \left. - (N_\beta - N_\alpha) \left[\frac{1}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} - \frac{1}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} \right] \right\} \quad (4.21.g)$$

donde

$$M_1(\alpha, \beta, \lambda) = \langle \alpha || Y_\lambda K(r) || \beta \rangle \\ M_0(\alpha, \beta, \lambda) = \langle \alpha || Y_\lambda \kappa(r) || \beta \rangle \quad (4.22)$$

Para obtener el corrimiento de los polos se deben sumar las contribuciones de las siete burbujas de un modo particular. Se hará una evaluación detallada de la componente L_{11} de la interacción vestida (fig. 7), y se darán a continuación las expresiones de las otras cinco componentes.

El conjunto total de procesos de L_{11} se puede clasificar en las cuatro sumas parciales de las figuras 8, 9, 10 y 11.

Si se define

$$\rho = t + s \quad (4.23)$$

las sumas de las tres primeras series dan

$$L_{11}^{(0)} = \frac{1 - \rho}{(1 - x)(1 - \rho) - u^2} \quad (4.24)$$

$$L_{11}^{(0)} = \frac{1 - \rho}{(1 - y)(1 - \rho) - v^2} \quad (4.25)$$

$$L_{11}^{(0)} = L_{11}^{(0)} = \frac{z(1 - \rho) + uv}{(1 - \rho)} \quad (4.26)$$

En término de estas tres sumas parciales, la suma total de la fig. 11 es

$$L_{11} = L_{11}^{(0)} + L_{11}^{(0)} L_{11}^{(0)} L_{11}^{(0)} L_{11}^{(0)} L_{11}^{(0)} + \dots$$

$$= \frac{L_{11}^{(0)}}{1 - L_{11}^{(0)} L_{11}^{(0)} L_{11}^{(0)} L_{11}^{(0)}} \quad (4.27)$$

y reemplazando (4.24), (4.25) y (4.26) en (4.27) se obtiene

$$L_{11} = \frac{(1-y)(1-\rho) - v^2}{\Delta} = \frac{\Delta_{11}}{\Delta} \quad (4.28)$$

donde

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1-x & z & u \\ z & 1-y & -v \\ u & -v & 1-\rho \end{vmatrix} \quad (4.29)$$

y Δ_{11} es el menor 11 del determinante Δ

En forma similar se pueden sumar las otras cinco componentes de la interacción vestida L y resultan

$$L_{\mu\nu} = \frac{\Delta_{\mu\nu}}{\Delta} \quad (4.30)$$

Se estudiará a continuación la parte de las funciones de Green asociadas a las patas externas. En la fig. 4 se muestran los diagramas que forman las líneas externas $K_{\alpha\beta}^{(\mu\nu)}$ de la TPGF. El valor de sus transformadas de Fourier para el caso térmico es

$$K_{\alpha\beta}^{(11)}(\omega_n) = -(1 - N_\alpha - N_\beta) \left[\frac{U_\alpha^2 U_\beta^2}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} - \frac{V_\alpha^2 V_\beta^2}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} \right]$$

$$- (N_\beta - N_\alpha) \left[\frac{U_\alpha^2 V_\beta^2}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} - \frac{U_\beta^2 V_\alpha^2}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} \right] \quad (4.31.a)$$

$$K_{\alpha\beta}^{(1\bar{1})}(\omega_n) = -(1 - N_\alpha - N_\beta) \left[\frac{V_\alpha^2 V_\beta^2}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} - \frac{U_\alpha^2 U_\beta^2}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} \right]$$

$$- (N_\beta - N_\alpha) \left[\frac{U_\beta^2 V_\alpha^2}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} - \frac{U_\alpha^2 V_\beta^2}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} \right] \quad (4.31.b)$$

$$K_{\alpha\beta}^{(1i)}(\omega_n) = -U_\alpha U_\beta V_\alpha V_\beta \left\{ (1 - N_\alpha - N_\beta) \left[\frac{1}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} - \frac{1}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} \right] \right. \\ \left. - (N_\beta - N_\alpha) \left[\frac{1}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} - \frac{1}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} \right] \right\} \quad (4.31.c)$$

En la fig. 5 se muestran los diagramas que forman las líneas externas $K_{\alpha\beta}^{(\mu 0)}$ de la PHGF. El valor de sus transformadas de Fourier es

$$K_{\alpha\beta}^{(10)}(\omega_n) = - (1 - N_\alpha - N_\beta) U_\beta V_\beta \left[\frac{U_\alpha^2}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} + \frac{V_\alpha^2}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} \right] \\ + (N_\beta - N_\alpha) U_\beta V_\beta \left[\frac{U_\alpha^2}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} - \frac{V_\alpha^2}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} \right] \quad (4.32.a)$$

$$K_{\alpha\beta}^{(i0)}(\omega_n) = - (1 - N_\alpha - N_\beta) U_\beta V_\beta \left[\frac{V_\alpha^2}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} + \frac{U_\alpha^2}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} \right] \\ - (N_\beta - N_\alpha) U_\beta V_\beta \left[\frac{V_\alpha^2}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} + \frac{U_\alpha^2}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} \right] \quad (4.32.b)$$

$$K_{\alpha\beta}^{(00)}(\omega_n) = - (1 - N_\alpha - N_\beta) \left[\frac{U_\alpha^2 V_\beta^2}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} - \frac{V_\alpha^2 U_\beta^2}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} \right] \\ - (N_\beta - N_\alpha) \left[\frac{U_\alpha^2 U_\beta^2}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} - \frac{V_\alpha^2 V_\beta^2}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} \right] \quad (4.32.c)$$

$$K_{\alpha\beta}^{(0i)}(\omega_n) = -U_\alpha U_\beta V_\alpha V_\beta \left\{ (1 - N_\alpha - N_\beta) \left[\frac{1}{i\omega_n - E_\alpha - E_\beta} - \frac{1}{i\omega_n + E_\alpha + E_\beta} \right] \right. \\ \left. + (N_\beta - N_\alpha) \left[\frac{1}{i\omega_n - E_\alpha + E_\beta} - \frac{1}{i\omega_n + E_\alpha - E_\beta} \right] \right\} \quad (4.32.d)$$

Una vez evaluadas las patas externas y las interacciones vestidas la TPGF completa se puede escribir

$$K_{\alpha\beta,\gamma\delta}^{(11)}(\omega_n) = K_{\alpha\beta}^{(11)}(\omega_n) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \sum_{\mu\nu} K_{\alpha\beta}^{(1\mu)} M_\mu(\alpha\beta\lambda) L_{\mu\nu} M_\nu(\alpha\beta\lambda) K_{\alpha\beta}^{(\nu 1)}(\omega_n) \quad (4.33)$$

De ésto se deduce que los polos de la TPGF están en los ceros del determinante Δ . Haciendo uso de la representación de Lehmann

$$K_{\alpha\beta,\gamma\delta}^{(11)}(\omega_n) = \sum_a \frac{\langle 0|c_\gamma c_\delta|a \rangle \langle a|c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger|0 \rangle}{i\omega_n - \omega_a} - \sum_r \frac{\langle 0|c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger|r \rangle \langle r|c_\gamma c_\delta|0 \rangle}{i\omega_n + \omega_r} \quad (4.34)$$

se obtiene para los residuos

$$\langle a|c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger|0 \rangle = \frac{1}{\left[-\Delta_{\eta\eta} \frac{\partial \Delta}{\partial i\omega_n}\right]^{\frac{1}{2}}} \sum_\mu \Delta_{\eta\mu} K_{\alpha\beta}^{(1\mu)} M_\mu(\alpha\beta\lambda) \quad (4.35)$$

En forma similar se obtiene para la PHGF

$$K_{\alpha\beta,\gamma\delta}^{(00)}(\omega_n) = K_{\alpha\beta}^{(00)}(\omega_n) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \sum_{\mu\nu} K_{\alpha\beta}^{(0\mu)} M_\mu(\alpha\beta\lambda) L_{\mu\nu} M_\nu(\alpha\beta\lambda) K_{\alpha\beta}^{(\nu 0)}(\omega_n) \quad (4.36)$$

La PHGF tiene los mismos polos que la TPGF (en los ceros del determinante Δ). Los residuos de partícula-agujero obtenidos de la representación de Lehmann, son

$$\langle a|c_\alpha^\dagger c_\beta|0 \rangle = \frac{1}{\left[-\Delta_{\eta\eta} \frac{\partial \Delta}{\partial i\omega_n}\right]^{\frac{1}{2}}} \sum_\mu \Delta_{\eta\mu} K_{\alpha\beta}^{(0\mu)} M_\mu(\alpha\beta\lambda) \quad (4.37)$$

En forma similar al caso $T = 0$, ambos residuos están relacionados con el mismo estado excitado $|a \rangle$, pero el estado fundamental $|0 \rangle$ es diferente. Mientras que para el caso partícula-agujero los dos estados tienen el mismo número de partículas, en el caso partícula-partícula difieren en dos partículas. Ambos residuos contienen información necesaria para la evaluación de diferentes operadores físicos. Aquellos correspondientes a la TPGF se utilizarán para calcular elementos de matriz de operadores de transferencia de dos partículas, mientras que los relacionados a la PHGF determinan los elementos de matriz de operadores de partícula-agujero.

Es importante ser cautos al estudiar estados con la misma simetría que el estado fundamental, es posible confundir los "bosones" construidos en la RPA con aquellos involucrados en la construcción del "vacío". En este caso uno de los polos de la TPGF (y por supuesto de la PHGF) corresponde a un estado que tiene una estructura similar al correspondiente al condensado.

4.4 Aplicación a los isótopos del estaño.

En esta sección se aplicará el formalismo desarrollado en la sección 4.3 a la descripción de los estados 2^+ de los isótopos del estaño, donde hay un solo tipo de partícula activa (neutrones). Se utilizará por simplicidad una interacción de apareamiento separable (con $J = 0$ y 2) en el canal de partícula-partícula y una interacción cuadrupolo-cuadrupolo separable en el canal de partícula-agujero. Como se discutió previamente ambas componentes cuadrupolares deben tenerse en cuenta simultáneamente³⁵).

Como en el caso con $T = 0$ los resultados obtenidos pueden relacionarse con los del tratamiento BCS+RPA térmicos aplicados al hamiltoniano^{23),36)}:

$$H = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} - 4\pi \sum_{\lambda=0,2;\mu} G_{\lambda}(2\lambda+1) P_{\lambda\mu}^{\dagger} P_{\lambda\mu} - \sum_{\lambda=2;\mu} \frac{\chi_{\lambda}}{2} Q_{\lambda\mu}^{\dagger} Q_{\lambda\mu} \quad (4.38)$$

donde $P_{\lambda\mu}^{\dagger}$ y $Q_{\lambda\mu}$ se definen en la ec. (4.20). En este caso los bosones de la TRPA tienen la forma

$$\Gamma_{n\lambda\mu}^{\dagger} = \sum_{\alpha\beta} \frac{1}{2} X_{n\lambda\mu}^{(1)}(\alpha\beta) [b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger}]_{\mu}^{\lambda} - \frac{1}{2} X_{n\lambda\mu}^{(i)}(\alpha\beta) [b_{\alpha} b_{\beta}]_{\mu}^{\lambda} + X_{n\lambda\mu}^{(0)}(\alpha\beta) [b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}]_{\mu}^{\lambda} \quad (4.39)$$

donde b_{α}^{\dagger} crea una cuasipartícula de Bogoliubov-Valatin y las amplitudes $X_{n\lambda\mu}^{(1)}(\alpha\beta)$, $X_{n\lambda\mu}^{(i)}(\alpha\beta)$ y $X_{n\lambda\mu}^{(0)}(\alpha\beta)$ se obtienen de las ecuaciones TRPA

$$\begin{aligned} \langle [\Gamma_{n\lambda\mu} [H, \Gamma_{n\lambda\mu}^{\dagger}]] \rangle &= \omega_{n\lambda} \\ \langle [\Gamma_{n'\lambda'\mu'}, \Gamma_{n\lambda\mu}^{\dagger}] \rangle &= \delta_{n,n'} \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{\mu,\mu'} \end{aligned} \quad (4.40)$$

Para escribir explícitamente la condición de normalización conviene recordar que

$$\langle [(-)^{\lambda-\mu+1} [b_{\alpha} b_{\beta}]_{-\mu}^{\lambda}, [b_{\gamma}^{\dagger} b_{\delta}^{\dagger}]_{\mu}^{\lambda}] \rangle = [\delta_{\alpha,\gamma} \delta_{\beta,\delta} - (-)^{j_{\alpha} - j_{\beta} - \lambda} \delta_{\alpha,\delta} \delta_{\beta,\gamma}] (1 - N_{\alpha} - N_{\beta}) \quad (4.41.a)$$

$$\langle [(-)^{j_{\alpha} + j_{\beta} + \mu} [b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}]_{-\mu}^{\lambda}, [b_{\gamma}^{\dagger} b_{\delta}^{\dagger}]_{\mu}^{\lambda}] \rangle = \delta_{\alpha,\delta} \delta_{\beta,\gamma} (N_{\beta} - N_{\alpha}) \quad (4.41.b)$$

El uso de estas relaciones de conmutación cambia la estructura de la métrica en la RPA a factores del tipo $(1 - N_{\alpha} - N_{\beta})$; $-(1 - N_{\alpha} - N_{\beta})$ y $(N_{\beta} - N_{\alpha})$ en lugar de los $+1$ y -1 usuales. Si los estados de dos cuasipartículas se normalizan en forma apropiada es posible reconocer que la estructura de las excitaciones bosónicas dada por la ec. (4.39) es esencialmente la misma que la obtenida en el caso $T = 0$.

Por supuesto, existe una relación sencilla entre estas amplitudes y los residuos de las TPGF y PHGF (obtenidos en (4.35),(4.37)). Dicha relación es

$$\begin{pmatrix} \langle n|A_{\lambda\mu}^\dagger(\alpha\beta)|0\rangle \\ \langle n|A_{\lambda\mu}(\alpha\beta)|0\rangle \\ \langle n|B_{\lambda\mu}^\dagger(\alpha\beta)|0\rangle \\ \langle n|B_{\lambda\mu}(\alpha\beta)|0\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_\alpha U_\beta & -V_\alpha V_\beta & U_\alpha V_\beta & V_\alpha U_\beta \\ -V_\alpha V_\beta & U_\alpha U_\beta & U_\beta V_\alpha & U_\alpha V_\beta \\ -U_\alpha V_\beta & -V_\alpha U_\beta & U_\alpha U_\beta & -V_\alpha V_\beta \\ -U_\beta V_\alpha & -U_\alpha V_\beta & -V_\alpha V_\beta & U_\alpha U_\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{n\lambda\mu}^{(1)}(\alpha\beta) \\ X_{n\lambda\mu}^{(i)}(\alpha\beta) \\ X_{n\lambda\mu}^{(0)}(\alpha\beta) \\ X_{n\lambda\mu}^{(\bar{0})}(\alpha\beta) \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

donde

$$\begin{aligned} A_{\lambda\mu}^\dagger(\alpha\beta) &= [c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger]_\mu^\lambda; & B_{\lambda\mu}^\dagger(\alpha\beta) &= [c_\alpha^\dagger c_\beta]_\mu^\lambda \\ X_{n\lambda\mu}^{(\bar{0})}(\alpha\beta) &= -(-1)^{j_\alpha + j_\beta - \lambda} X_{n\lambda\mu}^{(0)}(\beta\alpha) \end{aligned} \quad (4.43)$$

y las energías de la TRPA $\omega_{n\lambda}$ corresponden a los ceros de Δ (ec. (4.29)).

Una vez que los residuos son conocidos es posible evaluar los elementos de matriz del operador $P_{\lambda\mu}^\dagger$ (ó $P_{\lambda\mu}$) que están relacionados con las reacciones de stripping (pick-up).

$$\langle n||P_\lambda^\dagger||0\rangle = \sum_{\alpha,\beta} \langle n||[c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger]^\lambda||0\rangle \times M_1(\alpha,\beta,\lambda) \quad (4.44.a)$$

$$\langle n||P_\lambda||0\rangle = \sum_{\alpha,\beta} \langle n||[c_\alpha c_\beta]^\lambda||0\rangle \times M_1(\alpha,\beta,\lambda) \quad (4.44.b)$$

donde se usa $M_1(\alpha,\beta,\lambda) = M_{-1}(\alpha,\beta,\lambda)$. De un modo similar se obtiene para el operador de partícula-agujero

$$B(E\lambda) = |\langle n||Q_\lambda||0\rangle|^2 = \left| \sum_{\alpha,\beta} \langle n||[c_\alpha^\dagger c_\beta]^\lambda||0\rangle \times M_0(\alpha,\beta,\lambda) \right|^2 \quad (4.44.c)$$

Los cálculos numéricos fueron hechos utilizando las mismas energías de partícula independiente que en^{37),23)} y G_0 se fijó en 19/A. Este valor de G_0 reproduce razonablemente la diferencia de masas entre núcleos pares e impares en la zona de los estaños. Para comparar los resultados con los obtenidos para $T = 0$ los cálculos fueron realizados con y sin interacción de apareamiento cuadrupolar. La intensidad G_2 fué fijada en igual valor que la monopolar. En todos los casos considerados la intensidad cuadrupolar χ_2 fué elegida de modo tal de reproducir la energía del primer estado 2^+ a $T = 0$.

El primer resultado que se obtiene de los cálculos es la débil dependencia de los resultados con el isótopo del Sn estudiado.

En las figuras 12 y 13 se muestran las energías de las raíces de la TRPA para $G_2 = 0$ y $G_2 \neq 0$ respectivamente. Estas figuras muestran que la influencia de G_2 en las energías es difícil de apreciar. La razón, en forma similar al caso $T = 0$ es que la energía del primer estado 2^+ , que puede ser considerada como una escala natural para las variaciones de energías introducidas por la interacción está fijada por el valor de χ_2 . Una característica notable de las raíces de la TRPA es el modo en que muestran la desaparición de la superconductividad a la temperatura crítica T_c (que está dada en forma aproximada por $T_c = \Delta_0/2$, siendo Δ_0 el valor del gap para $T = 0$). Para temperaturas mayores que T_c los factores U y V valen 1 y 0, dependiendo de la relación entre el potencial químico y las energías de partícula independiente. Para $\zeta_\alpha < \mu$ se tiene $U_\alpha = 0$ y $V_\alpha = 1$, mientras que para $\zeta_\alpha > \mu$ se intercambian los valores ($U_\alpha = 1$ y $V_\alpha = 0$). Esta característica es la misma para un núcleo como el ^{114}Sn , (especie de núcleo semi-mágico) que para el ^{110}Sn (que corresponde a capa abierta). Se mostrarán solamente los resultados para el ^{114}Sn .

Cuando la superconductividad desaparece, las raíces correspondientes a excitaciones de partícula-agujero se desacoplan completamente de las correspondientes a excitaciones de dos partículas o dos agujeros (situación similar a capa cerrada). Es fácil reconocerlas en las figuras 12 y 13 debido a que el nivel de Fermi es función de la temperatura y al subir ésta disminuye. En consecuencia, la energía de las raíces correspondientes a excitaciones de dos partículas suben con la temperatura, las correspondientes a dos agujeros bajan y las de partícula-agujero quedan invariantes.

Debe notarse que algunos estados pasan de ser polos de la PIGF a ser polos de la TPGF al subir la temperatura. La razón de este comportamiento extraño es que el nivel de Fermi cruza niveles de partícula independiente, como sucede por ejemplo con el nivel $0g7/2$ en el ^{114}Sn a $T = 2.9\text{MeV}$. Cada vez que un cruce así sucede el nivel cambia de ser un nivel de agujero a ser un nivel de partícula.

Una diferencia significativa que aparece al introducir la interacción de apareamiento cuadrupolar es la desaparición de las correlaciones del estado fundamental. En la fig. 14 se muestra la suma de los cuadrados de las amplitudes backward (no sólo $X_{n\lambda\mu}^{(i)}(\alpha\beta)$ sino que también $X_{n\lambda\mu}^{(0)}(\alpha\beta)$ cuando $(N_\alpha - N_\beta)$ es negativo) para el estado 2^+ colectivo como función de la temperatura. Como se discute en la ref.²³⁾ las correlaciones del estado fundamental están relacionadas con esta suma. En línea llena se muestran los resultados para $G_2 \neq 0$ mientras que en línea de trazos se muestran los correspondientes a $G_2 = 0$. Para el ^{114}Sn el reconocimiento de la raíz colectiva es sencillo para

temperaturas menores que la crítica debido a que en este caso el elemento de matriz del operador cuadrupolar correspondiente a dicha raíz es muy superior al de las demás. Para temperaturas superiores a la crítica la intensidad cuadrupolar se divide entre varios estados, pero de todos modos se puede reconocer a la raíz colectiva para $G_2 \neq 0$ como aquella que tiene un elemento de matriz superior al de las demás. En este caso las amplitudes backward son menores a aquellas correspondientes a temperaturas menores. Para $G_2 = 0$ ya no es posible reconocer el estado colectivo, por lo que las amplitudes no se grafican.

Una característica interesante que aparece para $T \neq 0$ es la existencia de estados con energías menores que el estado colectivo a $T = 0$. Estos estados están relacionados con la difusión térmica del nivel de Fermi que permite la existencia de excitaciones de "cuasipartícula-cuasiagujero". Para comprender mejor la aparición de estos estados se graficaron en la fig. 15 los cuadrados de los elementos de matriz del operador cuadrupolar entre el estado fundamental y los primeros seis estados como función de la temperatura (estos estados son todos anómalos). Uno de los estados no se puebla para nada por lo que no aparece en el gráfico. Esta figura muestra claramente que a medida que la temperatura tiende a cero los nuevos estados se tornan más y más inalcanzables. Los elementos de matriz de los operadores P_2^\dagger y P_2 tienen un comportamiento similar al tender la temperatura a cero, dando una idea sobre el límite de temperatura nula de la teoría.

Los elementos de matriz de estos tres operadores entre el estado fundamental y los estados excitados, que están obviamente relacionados con la interacción que se ha empleado, pueden ser evaluados como función de la temperatura. En las fig. 16 a 18 se muestran los resultados obtenidos en los casos (a) $G_2 = 0$ y (b) $G_2 \neq 0$. Estas figuras muestran que con excepción de la raíz colectiva, todos los estados pueden ser poblados preferentemente con uno de los tres operadores cuadrupolares que se han estudiado. Es también evidente que, con excepción de la raíz colectiva, los elementos de matriz de estos operadores no dependen fuertemente de la interacción de apareamiento cuadrupolar.

Uno puede adivinar que los cambios introducidos por la descripción térmica aparecerán también en las características globales del sistema. Por ello se han estudiado también las reglas de suma para estos tres operadores. Se define

$$SQ(m) = \sum_n \omega_n^m | \langle n || Q_2 || 0 \rangle |^2 \quad (4.45.a)$$

$$SP^\dagger(m) = \sum_n \omega_n^m | \langle n || P_2^\dagger || 0 \rangle |^2 \quad (4.45.b)$$

$$SP(m) = \sum_n \omega_n^m | \langle n || P_2 || 0 \rangle |^2 \quad (4.45.c)$$

Elas están graficadas en las figuras 19 a 21 para $m = 0, 1$ y 2 . Estos resultados muestran claramente que la influencia de G_2 desaparece casi completamente después de la transición de fase. Fue mencionado anteriormente que cuando los factores U y V son 1 y 0 el acoplamiento entre la TPGF y la PHGF es del orden de $1/\Omega$ en lugar de ser del orden de 1 (el determinante Δ factoriza en tres determinantes más pequeños de orden 1 , dos relacionados con la TPGF y uno relacionado con la PHGF).

Otra característica interesante mostrada en estas figuras es que la transición de fase afecta más a las reglas de suma de los operadores de partícula-agujero que a las de los operadores de transferencia de dos partículas. Esto puede ser entendido mirando el número de estados que se suman "coherentemente" para formar la excitación colectiva que es mucho mayor en la fase superconductora que en la normal, incrementando de esta forma los elementos de matriz correspondientes.

4.5 Interacciones no separables.

En esta sección se extiende el formalismo descrito en la sección 4.3 al caso de una interacción no separable. El hamiltoniano de dos cuerpos más general puede escribirse:

$$H = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V(\alpha\beta\gamma\delta) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \quad (4.46)$$

El objetivo es obtener las energías y funciones de onda de los estados colectivos como función de la temperatura. Esto se obtiene calculando las TPGF y PHGF vestidas por la interacción, comenzando con las funciones de Green desnudas.

En la sección 4.3 se mencionó que los dos tipos de funciones de Green están acopladas para núcleos de capa abierta y para sistemas a $T \neq 0$. Para interacciones no separables ya no es posible sumar la serie infinita de diagramas correspondientes de la forma hecha en la sección 4.3. En su lugar, se puede definir un conjunto de ecuaciones acopladas para los distintos tipos de funciones de Green del tipo de las ecuaciones de Dyson.

$$K_{\alpha\beta\alpha'\beta'}^{(\mu\nu)}(\omega) = K_{\alpha\beta}^{(\mu\nu)}(\omega) \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} + \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\eta} K_{\alpha\beta}^{(\mu\eta)}(\omega) V(\alpha\beta\gamma\delta) K_{\gamma\delta\alpha'\beta'}^{(\eta\nu)}(\omega) \quad (4.47)$$

donde μ, ν y η toman los valores $1, \bar{1}, 0$ y $\bar{0}$ y definen el tipo de estados inicial y final de las funciones de Green (ec. (4.31) y (4.32), fig. 4 y 5).

La representación de Lehmann de las funciones de Green se define en términos de los residuos divididos por los denominadores de energía para las partes avanzadas y retardadas.

$$K_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(\mu\nu)}(\omega) = \sum_a \frac{A_{\alpha\beta}^{(\mu)}(\omega_a) A_{\gamma\delta}^{(\nu)}(\omega_a)}{i\omega - \omega_a} - \sum_r \frac{B_{\alpha\beta}^{(\mu)}(\omega_r) B_{\gamma\delta}^{(\nu)}(\omega_r)}{i\omega + \omega_r} \quad (4.48)$$

donde los residuos son:

$$\begin{aligned} A_{\gamma\delta}^{(1)}(\omega_a) &= \langle a | c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta}^{\dagger} | 0 \rangle; & B_{\gamma\delta}^{(1)}(\omega_r) &= \langle r | c_{\gamma} c_{\delta} | 0 \rangle \\ A_{\gamma\delta}^{(\bar{1})}(\omega_a) &= \langle a | c_{\gamma} c_{\delta} | 0 \rangle; & B_{\gamma\delta}^{(\bar{1})}(\omega_r) &= \langle r | c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta}^{\dagger} | 0 \rangle \\ A_{\gamma\delta}^{(0)}(\omega_a) &= \langle a | c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} | 0 \rangle; & B_{\gamma\delta}^{(0)}(\omega_r) &= \langle r | c_{\gamma} c_{\delta}^{\dagger} | 0 \rangle \\ A_{\gamma\delta}^{(\bar{0})}(\omega_a) &= \langle a | c_{\delta}^{\dagger} c_{\gamma} | 0 \rangle; & B_{\gamma\delta}^{(\bar{0})}(\omega_r) &= \langle r | c_{\delta} c_{\gamma}^{\dagger} | 0 \rangle \end{aligned} \quad (4.49)$$

y $\omega_a(\omega_r)$ son las energías de los estados de adición (remoción) de los distintos tipos de excitaciones.

El comportamiento de las funciones de Green cerca de los polos, permite obtener un conjunto de ecuaciones para los residuos. Sólo se analizarán los residuos de adición pues los de remoción son iguales a éstos para valores negativos de ω_a .

$$A_{\alpha\beta}^{(\mu)}(\omega_a) = \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\nu} K_{\alpha\beta}^{(\mu\nu)}(\omega_a) V(\alpha\beta\gamma\delta) A_{\gamma\delta}^{(\nu)}(\omega_a) \quad (4.50)$$

Para resolver el conjunto de ec. (4.50) es conveniente definir una interacción promedio en el modo siguiente

$$\Lambda_{\alpha\beta}^{(\mu)}(\omega_a) = -\frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta} V(\alpha\beta\gamma\delta) A_{\gamma\delta}^{(\mu)}(\omega_a) \quad (4.51)$$

que conduce al conjunto de ecuaciones

$$A_{\alpha\beta}^{(\mu)}(\omega_a) = \sum_{\nu} K_{\alpha\beta}^{(\mu\nu)}(\omega_a) \Lambda_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\omega_a) \quad (4.52)$$

En modo similar a lo hecho en la ec. (4.29) para interacciones separables, los polos de las funciones de Green se ajustan de modo tal de obtener soluciones simultáneas para (4.50) y (4.52) lo que fija las energías de los estados excitados.

Puede preferirse obtener una matriz del tipo RPA que relacione los coeficientes de la ec. (4.39). En este caso es conveniente definir las matrices siguientes:

$$E_{\alpha\beta}^{(\mu\nu)}(\omega_a) = \begin{pmatrix} \omega_a - E_{\alpha} - E_{\beta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_a + E_{\alpha} + E_{\beta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_a - E_{\alpha} + E_{\beta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_a + E_{\alpha} - E_{\beta} \end{pmatrix} \quad (4.53)$$

$$Z_{\alpha\beta}^{(\mu\nu)}(\omega_a) = \begin{pmatrix} U_{\alpha}U_{\beta} & -V_{\alpha}V_{\beta} & U_{\alpha}V_{\beta} & U_{\beta}V_{\alpha} \\ -V_{\alpha}V_{\beta} & U_{\alpha}U_{\beta} & U_{\beta}V_{\alpha} & U_{\alpha}V_{\beta} \\ -U_{\alpha}V_{\beta} & -U_{\beta}V_{\alpha} & U_{\alpha}U_{\beta} & -V_{\alpha}V_{\beta} \\ -U_{\beta}V_{\alpha} & -U_{\alpha}V_{\beta} & -V_{\alpha}V_{\beta} & U_{\alpha}U_{\beta} \end{pmatrix} \quad (4.54)$$

$$R_{\alpha\beta}^{(\mu\nu)}(\omega_a) = \begin{pmatrix} 1 - N_\alpha - N_\beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(1 - N_\alpha - N_\beta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & N_\alpha - N_\beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(N_\alpha - N_\beta) \end{pmatrix} \quad (4.55)$$

Utilizando ahora la ec. (4.42), que relaciona los residuos de partículas con aquellos de cuasipartículas, junto con la ec. (4.52) se obtiene una ecuación matricial de la forma:

$$E_{\alpha\beta}^{(\mu\mu)}(\omega_a) X_{\alpha\beta}^{(\mu)}(\omega_a) = \sum_{\nu} R_{\alpha\beta}^{(\mu\nu)}(\omega_a) Z_{\alpha\beta}^{(\mu\nu)}(\omega_a) \Lambda_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\omega_a) \quad (4.56)$$

donde los $X_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\omega_a)$ están relacionados con aquellos de la ec. (4.39) por los coeficientes de Clebsch-Gordan

$$X_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\omega_a) = \sum_{\lambda\mu} \langle j_\alpha j_\beta m_\alpha m_\beta | \lambda \mu \rangle X_{n\lambda\mu}^{(\nu)}(\alpha\beta) \quad (4.57)$$

Por otro lado los $\Lambda_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\omega_a)$ están definidos en la ec. (4.51) como función de los residuos de partícula $A_{\alpha\beta}^{(\nu)}(\omega_a)$ que están relacionados con los residuos de cuasipartícula por la ec. (4.42). En consecuencia, se puede deducir de aquí la matriz de la TRPA.

$$\begin{aligned} E_{\alpha\beta}^{\mu\mu}(\omega_a) X_{\alpha\beta}^{(\mu)}(\omega_a) &= \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\eta\nu} R_{\alpha\beta}^{\mu\mu}(\omega_a) Z_{\alpha\beta}^{\mu\eta}(\omega_a) V(\alpha\beta\gamma\delta) Z_{\gamma\delta}^{(\eta\nu)}(\omega_a) X_{\gamma\delta}^{\nu}(\omega_a) \\ &= \sum_{\gamma\delta\nu} W_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(\mu\nu)}(\omega_a) X_{\gamma\delta}^{(\nu)}(\omega_a) \end{aligned} \quad (4.58)$$

La matriz $W_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(\mu\eta)}$ es una matriz 4×4 en los supraíndices, donde cada elemento es a su vez una matriz $n \times n$ en los subíndices, siendo n el número de estados formados por excitaciones de pares de fermiones.

Esta ecuación es muy similar a la RPA usual pero se diferencia en la mezcla de diferentes tipos de excitaciones (p-p, h-h y p-h). Además cada estado fermiónico tiene una cierta probabilidad de ocupación debido a la interacción de apareamiento y a la dependencia térmica.

En el caso de una interacción separable, la ec. (4.29) es la equivalente en tres dimensiones de la ecuación de dispersión y produce las mismas raíces que los autovalores

de la ec. (4.58) de un modo más sencillo. Por otro lado, es interesante notar que dicha relación de dispersión no se puede obtener para interacciones no separables.

Los autovectores de la ec. (4.58) son los coeficientes desacoplados de la ec. (4.39) y se pueden relacionar con los residuos fermiónicos por medio de la ec. (4.42).

4.6 Conclusiones.

Se ha desarrollado una extensión térmica de la aproximación de la serie principal apropiada para la obtención de estados excitados correlacionados de dos cuasi-partículas. Este tratamiento es “esencialmente” a número de partículas fijo, y en consecuencia, desde el punto de vista físico, es distinto del tratamiento usual con funciones de Green térmicas, el método de las ecuaciones de movimiento^{38),18),39),17),40)}, los métodos variacionales⁴⁰⁾, etc.

De todos modos los resultados obtenidos pueden ser relacionados de un modo muy sencillo con las excitaciones que tienen la estructura dada por la ec. (4.39), obtenida por el método usual de las ecuaciones de movimiento. La aparición del último tipo de término en la ec. (4.39) es una de las más grandes diferencias entre la TRPA y el caso $T = 0$, lo que da lugar a la existencia de estados formados por dos excitaciones fermiónicas conteniendo “partículas” debajo del nivel de Fermi y “agujeros” sobre el mismo.

La PSA tiene en cuenta el acoplamiento entre la PHGF y la TPGF que es importante para núcleos de capa abierta. Se ha mostrado que este acoplamiento desaparece para temperaturas superiores a la crítica, donde el sistema pasa de superconductor a normal y los términos u y v del determinante Δ (dados por las ec. (4.21d) y (4.21e)) se anulan, desacoplándose ambos tipos de grados de libertad. De todos modos el número de estados excitados se obtiene en forma correcta de la relación de dispersión $\Delta = 0$.

Para temperaturas superiores a T_c los únicos cambios significativos se deben al corrimiento del nivel de Fermi como función de la temperatura. Dicho movimiento produce cambios en la caracterización de los estados. En el caso analizado, debido a la elección hecha del espacio de estados de partícula independiente, la energía del nivel de Fermi decrece al subir la temperatura (este comportamiento depende del espacio utilizado). En las fig. 12 y 13 se observa que los niveles varían al subir la temperatura de tres modos bien definidos: hay niveles que aumentan su energía y que corresponden a excitaciones de dos partículas (donde las dos partículas están por arriba del nivel de Fermi o una está arriba y la otra debajo); niveles que disminuyen su energía y que corresponden a excitaciones de dos agujeros (ambos debajo del nivel de Fermi o uno debajo y otro arriba) y por último niveles cuya energía permanece invariable y que corresponden a excitaciones de partícula agujero (con el nivel de partícula por arriba del nivel de agujero y ambos en cualquier posición con respecto al nivel de Fermi).

No se ha discutido la solución de energía nula de la función de Green de dos partículas ya que no presenta ninguna diferencia con lo analizado en la ref. (23) para el caso $T = 0$. La fig. 3 es la responsable del comportamiento a $\omega = 0$ de la TPGF mientras que debe ser descartada la parte de $\omega = 0$ obtenida en la ec. (4.33).

La utilización de la interacción de apareamiento cuadrupolar sobre la interacción cuadrupolar usual en el canal partícula-agujero introduce algunos cambios, siendo el más importante la desaparición casi completa de las correlaciones del estado fundamental. En lo que concierne a las reglas de suma la diferencia más significativa se observa en aquellas correspondientes al operador cuadrupolar de partícula-agujero para temperaturas inferiores a la crítica, esto es claramente atribuible a la citada aniquilación de las correlaciones del estado de referencia.

5. Modelo de apareamiento de bosones.

5.1 Introducción.

En la presente sección se estudiará un sistema bosónico sencillo con una interacción de apareamiento. El modelo es similar al empleado en el caso fermiónico⁵⁵⁾ para modelar los efectos de la parte de corto rango de la interacción nuclear en sistemas de capa abierta y para la descripción de la superconductividad tradicional. Dicho modelo ha sido utilizado en otro contexto en las ref. (56) y (57).

El interés en este modelo se basa en dos razones: La primera es que, al ser exactamente soluble, permite estudiar la bondad de la aproximación de Hartree-Bose descrita en la sección 2.2, por otro lado, el modelo tiene interés físico ya que se propone que tiene estrecha relación con la superconductividad de alta temperatura crítica.

Esta relación es sugerida por la correspondencia, tanto cualitativa como cuantitativa, de las curvas de calor específico correspondientes al modelo bosónico con las medidas en los nuevos materiales²⁷⁾⁻³²⁾. Además, el modelo bosónico, posee una relación entre la temperatura crítica y la energía de ligadura de un par 4 veces superior a la del modelo fermiónico.

El fenómeno de la superconductividad de alta temperatura crítica ha sido estudiado extensamente en los últimos tiempos⁴¹⁾⁻⁵⁴⁾ y las explicaciones más promisorias se basan en modelos bidimensionales⁵⁴⁾.

El capítulo está organizado del modo siguiente: En la sección 5.2 se introduce el modelo de apareamiento de bosones y se discute la resolución exacta del mismo, en la sección 5.3 se lo resuelve en forma aproximada empleando el formalismo de Hartree-Bose térmico, por último en la sección 5.4 se comparan los resultados con los datos experimentales del calor específico de superconductores de alta temperatura crítica.

El modelo consiste en 2Ω estados de partícula independiente degenerados donde hay M bosones. La interacción aparea bosones haciendo corresponder a cada estado de partícula independiente m un estado \bar{m} (reverso temporal en apareamiento tradicional).

El hamiltoniano es

$$H = -G P^\dagger P \quad (5.1)$$

con

$$P^\dagger = \sum_{m>0} b_m^\dagger b_{\bar{m}}^\dagger \quad (5.2)$$

donde b_m^\dagger crea un bosón en el estado de partícula independiente m y $b_{\bar{m}}^\dagger$ crea un bosón en el estado de partícula independiente asociado al m .

Si se introduce además el operador número de partículas

$$N = \sum_{m>0} (b_m^\dagger b_m + b_{\bar{m}}^\dagger b_{\bar{m}}) \quad (5.3)$$

Los operadores N , P y P^\dagger cierran un álgebra de $SO(1,1)$ en lugar del álgebra de $SU(2)$ para el modelo fermiónico.

Los conmutadores correspondientes valen.

$$\begin{aligned} [P, P^\dagger] &= N + \Omega \\ [N, P^\dagger] &= -2P^\dagger \\ [N, P] &= 2P \end{aligned} \quad (5.4)$$

Esto permite resolver analíticamente el hamiltoniano, las representaciones irreducibles del grupo de simetría estarán caracterizadas por dos números cuánticos, si se toman el número de bosones y la seniority (que en forma similar al caso fermiónico corresponde al número de bosones no apareados) se obtiene para las energías

$$E(2\Omega, M, \nu) = -\frac{G}{4} (M - \nu) (\Omega + M + \nu + 1) \quad (5.5)$$

Para calcular la función de partición, y con ella evaluar las variables termodinámicas de interés se debe conocer la degeneración asociada a dichas energías. En forma similar al caso fermiónico, la degeneración de un nivel de seniority ν en un sistema con 2Ω estados

de partícula independiente y m bosones es igual al número de formas de disponer ν bosones en estos 2Ω lugares menos el número de formas de disponer $\nu - 2$ bosones en igual cantidad de lugares, (esto resta todos los estados de seniority $\nu - 2, \nu - 4, \dots$).

$$D(2\Omega, M, \nu) = \binom{2\Omega + \nu - 1}{\nu} - \binom{2\Omega + \nu - 3}{\nu - 2} \quad (5.6)$$

La función de partición se puede evaluar exactamente como

$$Z(2\Omega, M, \beta) = \sum_{\nu=0}^M D(2\Omega, M, \nu) \times e^{-\beta E(2\Omega, M, \nu)} \quad (5.7)$$

con lo que se puede calcular la energía media y el calor específico como función de la temperatura en la forma usual.

$$\langle E \rangle = - \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right|_{M, \Omega} \quad C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \quad (5.8)$$

Estos cálculos pueden realizarse numéricamente para valores de Ω no muy grandes, ($\Omega < 1000$). Para degeneraciones mayores es conveniente utilizar la aproximación de Hartree-Bose térmica según se describe en la sección siguiente.

5.3 Aproximación de Hartree-Bose térmica.

En esta sección se aplicará el formalismo de Hartree-Bose (cap. 2) al modelo de apareamiento de bosones.

Empleando la notación de la sección 2.2 los elementos de matriz del hamiltoniano (5.1) son

$$\epsilon_{ij} = 0 \quad y \quad v_{ijkl}^* = -G \delta_{ij} \delta_{kl} \quad (5.9)$$

y en consecuencia

$$h_{ij} = -\mu \delta_{ij} \quad (5.10)$$

$$\Delta_{ij} = -\frac{G}{2} \sum_k \kappa_{kk} \quad (5.11)$$

y la expresión del valor medio de la energía toma la forma

$$\langle H \rangle = -\frac{\Delta^2}{G} \quad (5.12)$$

Como es usual se ha despreciado la contribución de la interacción al potencial h y a la energía media, esto hace desaparecer de las ecuaciones a los números complejos z .

En modo similar al caso fermiónico la matriz de Hartree-Bose (2.74) a diagonalizar autoconsistentemente se separa en las matrices 2×2 lo que conduce a las ecuaciones BCS a temperatura finita (FTBCS)

$$\begin{pmatrix} -\mu & \Delta \\ -\Delta^* & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_i \\ Y_i \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} X_i \\ Y_i \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

con autovalor

$$E^2 = \mu^2 - \Delta^2 \quad (5.14)$$

y autovectores normalizados

$$Y_i^2 = -\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\mu}{E}\right) \quad y \quad X_i^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\mu}{E}\right) \quad (5.15)$$

Haciendo uso de las ecuaciones (2.64) y (5.15) se puede evaluar la matriz densidad de un cuerpo ρ y la matriz de pares κ

$$\begin{aligned} \rho_{ii} &= Y_i^2 + \frac{1}{(e^{\beta E} - 1)} (X_i^2 + Y_i^2) \\ &= -\frac{1}{2} - \frac{\mu}{2E} \coth\left(\frac{\beta E}{2}\right) \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned}\kappa_{ii} &= X_i Y_i + \frac{2}{(e^{\beta E} - 1)} X_i Y_i \\ &= \frac{\Delta}{2E} \coth\left(\frac{\beta E}{2}\right)\end{aligned}\quad (5.17)$$

Las ecuaciones de Hartree-Bose toman la forma:

Energía de las cuasipartículas:

$$E^2 = \mu^2 + \Delta^2 \quad (5.18.a)$$

Ecuación del gap:

$$1 = \frac{G\Omega}{2E} \coth\left(\frac{\beta E}{2}\right) \quad (5.18.b)$$

Ecuación del número de partículas:

$$\langle N \rangle = 2\Omega \left[-\frac{1}{2} - \frac{\mu}{2E} \coth\left(\frac{\beta E}{2}\right) \right] \quad (5.18.c)$$

Para cada temperatura se evalúa la energía de las excitaciones de cuasipartículas E de la ecuación del gap y el potencial químico μ se deduce de la ecuación del número de partículas obteniéndose por último el gap de la ecuación (5.18.a). La energía media se calcula con la expresión (5.12) y el calor específico se obtiene derivando (5.12) respecto de la temperatura

$$C_v = \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial T} \quad (5.19)$$

En la fig. 22 se grafica el calor específico (escaleado) para una densidad de bosones igual a .5 ($M = \Omega$), en línea de trazos se tiene el resultado de la aproximación de Hartree-Bose. Puede apreciarse que el ajuste es muy bueno fuera de la zona de la transición de fase. La aproximación resulta ser la solución exacta en el límite de $\Omega \rightarrow \infty$. También se puede observar como la transición de fase de superconductor a normal se va suavizando al decrecer Ω debido a la importancia que cobran las fluctuaciones.

5.4 Comparación con resultados experimentales.

Con el fin de comparar el modelo con su equivalente fermiónico⁵⁸⁾ se grafica en la figura 23 el calor específico que resulta de este último. En línea de trazos se tienen los resultados para valores de Ω de 100 y 1000 y en línea llena el límite de $\Omega \rightarrow \infty$ que provee la aproximación BCS para temperaturas finitas. La temperatura está en unidades del gap $\Delta_0 = \frac{G\Omega}{2}$. Las mediciones experimentales del calor específico para superconductores tradicionales se corresponden con esta curva y después de la transición de fase se continúan con el calor específico debido al gas de electrones y las contribuciones de la red que, a la temperatura de la transición de fase, son pequeñas.

La fig. 24 es un esquema del calor específico medido para el $Y.Ba_2.Cu_2.O_y$ con las contribuciones de la red removidas. Los saltos en el calor específico medidos en el $YBa_2Cu_3O_y$ ^{27),28),30)} y $GdBa_2Cu_3O_y$ ²⁹⁾ tienen los valores .49 R y .47 R respectivamente, donde R es la constante de los gases, para el $(La\ 0.925\ Sr\ 0.075)_2\ Cu\ O_4$ ^{31),32)} el valor del salto es de .07 R.

Estos datos deben ser comparados con los obtenidos en el modelo bosónico (fig. 22). Es interesante notar algunas características introducidas por el carácter bosónico de las partículas involucradas: a diferencia del caso fermiónico el pico del calor específico tiene una forma de meseta y alcanza un valor de saturación ($C_v \leq 2\Omega k_B$). Si se utiliza para 2Ω un valor del orden del número de Avogadro, entonces el salto del calor específico resulta igual a .5 R.

Por otro lado, la temperatura crítica en unidades del gap resulta del orden de $T_c = 1.82\Delta_0$. Este valor es casi 4 veces superior al del modelo fermiónico.

Es notable también, que el calor específico debidamente escaleado no depende de la densidad de bosones. Ésta introduce solamente un corrimiento de la temperatura crítica. En la fig. 25 se grafica la altura del salto del calor específico como función de la densidad de bosones. En esta figura se ve que el salto permanece casi invariable y del orden de $\frac{\Delta}{2\Omega} = k_B$ hasta valores de la densidad bajos: ($\rho \sim 10^{-1}$).

Se concluye que si el fenómeno de la superconducción de alta temperatura crítica está relacionado con el apareamiento de bosones, varias características se pueden entender en términos sencillos. El modelo explica la forma del calor específico, el aumento de la temperatura crítica comparada con el modelo fermiónico para la misma energía de ligadura del par y el valor del salto del calor específico hallado experimentalmente.

Conclusiones generales.

En la presente tesis se ha analizado el tratamiento térmico de sistemas finitos mediante la prolongación a temperatura finita de técnicas ampliamente utilizadas a temperatura cero.

En el primer capítulo se repasaron algunos conceptos elementales de mecánica estadística cuántica, en el segundo se presentaron derivaciones variacionales de ampliaciones a temperatura finita de teorías de campo medio, Hartree-Fock-Bogoliuvov para sistemas fermiónicos y Hartree-Bose para sistemas bosónicos, se analizó el límite $T \rightarrow 0$ de ambas teorías y se presentó una derivación variacional debida a K.Tanabe y K.Sugawara-Tanabe¹⁵⁾ de las ecuaciones de la aproximación de fases al azar térmicas (TRPA).

En el capítulo 3 se presentaron las funciones de Green térmicas en las versiones de Matsubara y de tiempo real, se analizó la conexión entre ellas y con las funciones de Green a temperatura cero, también se mostró la ampliación de las técnicas diagramáticas a temperatura cero al caso de temperatura finita mediante la utilización del teorema de Wick generalizado.

En el capítulo 4 se derivaron las ecuaciones de la aproximación de fases al azar térmicas utilizando funciones de Green para una interacción separable general (sección 4.2) y para una interacción no separable (sección 4.4). Esto se hizo extendiendo a temperatura finita el formalismo de la Aproximación de la Serie Principal (PSA)^{22),23)} que está basado en la Teoría de Campos Nucleares (NFT)²⁴⁾. Por medio de dicha extensión térmica se obtuvieron los estados excitados correlacionados de dos cuasipartículas para un núcleo de capa abierta.

El tratamiento realizado es “esencialmente” a número de partículas fijo, y en consecuencia, desde el punto de vista físico, es distinto del tratamiento usual con funciones de Green térmicas, el método de las ecuaciones de movimiento^{38),18),39),17),40)}, los métodos variacionales⁴⁰⁾, etc.

De todos modos los resultados obtenidos pueden ser relacionados de un modo muy sencillo con las excitaciones obtenidas por el método usual de las ecuaciones de movimiento. La aparición de un término adicional en la expresión del operador de creación de la excitación es una de las más grandes diferencias entre la TRPA y el caso $T = 0$. Dicho término da lugar a la existencia de estados formados por dos excitaciones fermiónicas conteniendo “partículas” debajo del nivel de Fermi y “agujeros” sobre el

mismo.

En la sección 4.3 se aplicó el formalismo derivado a la descripción de los estados 2^+ de los isótopos del estaño. Para ello se utilizó una interacción separable con términos mono y cuadrupolares en el canal partícula-partícula y cuadrupolares en canal partícula-agujero. Se evaluaron las raíces y las reglas de suma relevantes como función de la temperatura y se observó una transición de fase del sistema de superconductor a normal marcada por la anulación del gap de apareamiento.

La PSA tiene en cuenta el acoplamiento entre las funciones de Green de dos partículas y la función de Green de partícula-agujero que es importante para núcleos de capa abierta. Se mostró que este acoplamiento desaparece para temperaturas superiores a la crítica, donde el sistema pasa de superconductor a normal. De todos modos el número de estados excitados se obtiene en forma correcta de la relación de dispersión hallada. Para temperaturas superiores a T_c los únicos cambios significativos se deben al corrimiento del nivel de Fermi como función de la temperatura. Dicho movimiento produce cambios en la caracterización de los estados. En el caso analizado, debido a la elección hecha del espacio de estados de partícula independiente, la energía del nivel de Fermi decrece al subir la temperatura (este comportamiento depende del espacio utilizado). En la sección 4.5 se analizó el efecto de esto sobre las raíces de la TRPA. Esencialmente provoca, después de la transición de fase, un comportamiento diferenciado para las raíces, ya desacopladas, de las funciones de Green de dos partículas y las funciones de Green de partícula-agujero.

La utilización de la interacción de apareamiento cuadrupolar sobre la interacción cuadrupolar usual en el canal partícula-agujero introduce algunos cambios, siendo el más importante la desaparición casi completa de las correlaciones del estado fundamental. En lo que concierne a las reglas de suma la diferencia más significativa se observa en aquellas correspondientes al operador cuadrupolar de partícula-agujero para temperaturas inferiores a la crítica. Esto es claramente atribuible a la citada aniquilación de las correlaciones del estado de referencia.

En el capítulo 5 se analizó un modelo de apareamiento de bosones. Dicho modelo es similar al modelo de apareamiento de fermiones utilizado ampliamente para la descripción de la parte de corto rango de la interacción nuclear en sistemas de capa abierta y en la descripción del fenómeno de la superconductividad tradicional (teoría BCS). Este modelo fue resuelto en forma exacta, para valores del número de sitios menores que 1000 y en forma aproximada utilizando el formalismo de Hartree-Bose

expuesto en el capítulo 2, se compararon los resultados debidamente escaleados y se verificó que la solución aproximada aparece como exacta en el límite de gran número de sitios.

Es interesante notar que el calor específico obtenido tiene forma de meseta, alcanzando un valor aproximadamente constante de $C_v = 2\Omega k_B$, donde 2Ω es el número de estados de partícula independiente del modelo. Es notable también, que el calor específico debidamente escaleado no depende de la densidad de bosones, observándose solamente un corrimiento de la temperatura crítica.

Las curvas de calor específico obtenidas se compararon con las medidas en los superconductores de alta temperatura crítica. Se observó que el modelo, con razonables asignaciones de valores para los parámetros: 2Ω igual al número de Avogadro, reproduce el valor observado del salto del calor específico para los compuestos $YBa_2Cu_3O_y$ y $GdBa_2Cu_3O_y$ (.49 R y .47 R respectivamente, donde R es la constante de los gases), además posee una relación entre la temperatura crítica y la energía de ligadura del par 4 veces superior al modelo de apareamiento de fermiones.

Se concluyó que si el fenómeno de la superconducción de alta temperatura crítica está relacionado con el apareamiento de bosones, varias características se pueden entender en términos sencillos. El modelo explica la forma del calor específico, el aumento de la temperatura crítica comparada con el modelo fermiónico para la misma energía de ligadura del par y el valor del salto del calor específico hallado experimentalmente.

Apéndice A.

Teorema de Wick generalizado.

El teorema de Wick generalizado trata con el promedio en el “ensemble sin perturbar” de operadores de creación y destrucción y se basa en la forma detallada del operador densidad estadístico de un sistema de partículas independientes. Concretamente si

$$D_0 = \frac{e^{-\beta K_0}}{Tr(e^{-\beta K_0})} \quad (A.1)$$

con

$$K_0 = \sum_{\nu} (\epsilon_{\nu} - \lambda) a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} = \sum_{\nu} \xi_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} \quad (A.2)$$

Se trata de calcular el valor medio en el ensemble de un producto de operadores de creación y destrucción ordenados “temporalmente”

$$\langle T_{\tau} [\alpha_{a_1}(\tau_1) \alpha_{a_2}(\tau_2) \dots \alpha_{a_n}(\tau_n)] \rangle_0 = Tr \{ D_0 T_{\tau} (\alpha_{a_1}(\tau_1) \alpha_{a_2}(\tau_2) \dots \alpha_{a_n}(\tau_n)) \} \quad (A.3)$$

donde los operadores $\alpha_{a_{\nu}}(\tau_{\nu})$ son operadores de creación o destrucción en la representación de interacción.

$$\alpha_{\mu}(\tau) = e^{\tau K_0} \alpha_{\mu} e^{-\tau K_0} \quad (A.4)$$

Se define la contracción de dos operadores $\alpha_{a_{\nu}}(\tau_{\nu})$ y $\alpha_{a_{\sigma}}(\tau_{\sigma})$ como

$$\{ \alpha_{a_{\nu}}(\tau_{\nu}) \alpha_{a_{\sigma}}(\tau_{\sigma}) \} = Tr \{ D_0 T_{\tau} (\alpha_{a_{\nu}}(\tau_{\nu}) \alpha_{a_{\sigma}}(\tau_{\sigma})) \} = \langle T_{\tau} [\alpha_{a_{\nu}}(\tau_{\nu}) \alpha_{a_{\sigma}}(\tau_{\sigma})] \rangle_0 \quad (A.5)$$

El teorema de Wick generalizado establece que el promedio (A.3) es igual a la suma de todos los posibles términos totalmente contraídos.

$$\langle T_{\tau} [\alpha_{a_1}(\tau_1) \dots \alpha_{a_n}(\tau_n)] \rangle_0 = \sum_{\text{contr. tot.}} Sig. \times \{ \{ \alpha_{a_{\nu}}(\tau_{\nu}) \alpha_{a_{\sigma}}(\tau_{\sigma}) \} \dots \{ \alpha_{a_{\rho}}(\tau_{\rho}) \alpha_{a_{\gamma}}(\tau_{\gamma}) \} \} \quad (A.6)$$

donde *Sig.* es el signo correspondiente al sistema de contracciones de cada término que resulta de llevar los operadores a contraer uno al lado del otro.

El teorema puede demostrarse suponiendo que los operadores en (A.6) se encuentran ordenados temporalmente, ya que de no estarlo se los puede ordenar a ambos lados de la expresión sin introducir signos adicionales.

Para comenzar conviene notar que para que el promedio no se anule debe haber igual número de operadores de creación y destrucción ya que el operador densidad estadístico (A.1) conserva el número de cuasipartículas, en consecuencia el promedio se anulará si hay un número impar de operadores.

Debido a la forma diagonal de K_0 los operadores α en la representación de interacción (A.4) cumplen la relación

$$\alpha_a(\beta) = e^{\beta K_0} \alpha_a e^{-\beta K_0} = \alpha_a e^{\sigma_a \beta \xi_a} \quad \text{con} \quad \sigma_a = \pm 1 \quad (\text{A.7})$$

donde el signo más corresponde a operadores de creación y el menos a operadores de destrucción.

En lo sucesivo se adoptará la convención $\epsilon = -1$ para bosones y $\epsilon = 1$ para fermiones.

Como consecuencia de (A.7) la dependencia temporal de los operadores puede sacarse fuera de la traza a ambos lados de (A.6), por lo que se puede trabajar en adelante con los operadores en la representación de Schrödinger e introducir nuevamente la dependencia temporal al final.

El operador α_{a_1} en (A.6) puede llevarse a la derecha por medio de sucesivas conmutaciones con los restantes operadores

$$\begin{aligned} \text{Tr} (D_0 \alpha_{a_1} \alpha_{a_2} \dots \alpha_{a_n}) = \\ \text{Tr} (D_0 [\alpha_{a_1} \alpha_{a_2}]_{\epsilon} \dots \alpha_{a_n}) - \epsilon \text{Tr} (D_0 \alpha_{a_1} [\alpha_{a_2} \alpha_{a_3}]_{\epsilon} \dots \alpha_{a_n}) \dots \\ \dots \epsilon \text{Tr} (D_0 \alpha_{a_2} \alpha_{a_3} \alpha_{a_4} \dots \alpha_{a_1}) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Los conmutadores (anticommutadores) valen cero o uno por lo que pueden salir fuera de la traza.

Usando la relación (A.7) se tiene

$$\alpha_a D_0 = D_0 \alpha_a e^{\sigma_a \beta \xi_a} \quad (\text{A.9})$$

y el último término de (A.8) puede escribirse usando la propiedad cíclica de la traza

$$\dots \epsilon \text{Tr} (\alpha_{a_1} D_0 \alpha_{a_2} \dots \alpha_{a_n}) = \dots \epsilon e^{\sigma_a \beta \xi_a} \text{Tr} (D_0 \alpha_{a_1} \alpha_{a_2} \dots \alpha_{a_n}) \quad (\text{A.10})$$

en consecuencia

$$(1 + \epsilon e^{\sigma_{a_1} \beta \xi_{a_1}}) Tr (D_0 \alpha_{a_1} \dots \alpha_{a_n}) = Tr (D_0 [\alpha_{a_1} \alpha_{a_2}]_{\epsilon} \alpha_{a_3} \dots \alpha_{a_n}) - \epsilon Tr (D_0 \alpha_{a_1} [\alpha_{a_2} \alpha_{a_3}]_{\epsilon} \dots \alpha_{a_n}) \dots \quad (A.11)$$

y

$$Tr (D_0 \alpha_{a_1} \dots \alpha_{a_n}) = \frac{1}{(1 + \epsilon e^{\sigma_{a_1} \beta \xi_{a_1}})} \{ Tr (D_0 [\alpha_{a_1} \alpha_{a_2}]_{\epsilon} \alpha_{a_3} \dots \alpha_{a_n}) - \epsilon Tr (D_0 \alpha_{a_1} [\alpha_{a_2} \alpha_{a_3}]_{\epsilon} \dots \alpha_{a_n}) \dots \} \quad (A.12)$$

si se define

$$\langle \alpha_{a_i} \alpha_{a_j} \rangle = \frac{[\alpha_{a_i} \alpha_{a_j}]_{\epsilon}}{1 + \epsilon e^{\sigma_{a_i} \beta \xi_{a_i}}} \quad (A.13)$$

se tiene

$$Tr (D_0 \alpha_{a_1} \alpha_{a_2} \dots \alpha_{a_n}) = \sum_i \langle \alpha_{a_1} \alpha_{a_i} \rangle (-\epsilon)^i Tr (D_0 \alpha_{a_2} \dots \alpha_{a_n})_i \quad (A.14)$$

donde el subíndice i en el promedio significa que no figura el operador α_{a_i} .

El resto de la demostración se sigue iterando el procedimiento anterior y volviendo a introducir la dependencia temporal de los operadores.

Apéndice B.

Transformaciones canónicas.

En este apéndice se repasarán brevemente algunas propiedades básicas de las transformaciones lineales entre operadores de creación y destrucción que preservan las relaciones de conmutación. Dichas transformaciones se denominan canónicas.

Se supondrá que el espacio de estados de partícula independiente tiene dimensión finita n , y se introducirá la notación

$$\alpha = \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} \quad \alpha_i = a_i \quad \alpha_{i+n} = a_i^\dagger \quad i = 1, \dots, n \quad (B.1)$$

El conjugado hermítico de α será

$$\alpha^\dagger = (a^\dagger \quad a) = \alpha^t \gamma \quad (B.2)$$

con

$$\gamma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (B.3)$$

Con esta notación las relaciones de conmutación para los operadores de creación y destrucción se escriben

$$[\alpha, \alpha^\dagger]_\epsilon = \eta \quad (B.4)$$

donde $\epsilon = 1$ para fermiones, $\epsilon = -1$ para bosones y la matriz η es

$$\eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix} \quad (B.5)$$

A partir de los operadores a^\dagger y a se puede definir un nuevo juego de operadores b^\dagger y b por medio de una transformación lineal

$$\begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & \epsilon V \\ \epsilon Y & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} + \frac{(1-\epsilon)}{2} \times \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \quad (B.6)$$

donde c y d números complejos que pueden introducirse en el caso bosónico ya que conmutan con los operadores y no influyen en las relaciones de conmutación.

Se discutirán solamente las transformaciones que son unitarias. Ellas son las que mantienen la relación de conjugación hermitica entre operadores

$$(b_i^\dagger)^\dagger = b_i \quad \forall i \quad (B.7)$$

Esto hace que las transformaciones a considerar sean del tipo

$$\begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^\dagger & \epsilon Y^\dagger \\ \epsilon Y & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} + \frac{(1-\epsilon)}{2} \times \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \quad (B.8)$$

Esta condición se puede expresar en la forma

$$T^\dagger = \gamma T \gamma \quad (B.9)$$

La condición de preservar las reglas de conmutación es

$$[\beta, \beta^\dagger]_\epsilon = T[\alpha, \alpha^\dagger]_\epsilon \gamma T^\dagger \gamma = T \eta \gamma T^\dagger \gamma \quad (B.10)$$

o en forma sintética

$$T \eta T^\dagger \eta = 1 \quad (B.11)$$

esta condición se puede escribir en función de las matrices X e Y

$$X X^\dagger + \epsilon Y Y^\dagger = 1 \quad X Y^\dagger + \epsilon Y X^\dagger = 0 \quad (B.12.a)$$

$$X^\dagger X + \epsilon Y^\dagger Y = 1 \quad X^\dagger Y + \epsilon Y^\dagger X = 0 \quad (B.12.b)$$

La transformación inversa es según (B.11)

$$T^{-1} = \eta T^\dagger \eta = \begin{pmatrix} X^\dagger & Y^\dagger \\ Y^\dagger & X^\dagger \end{pmatrix} \quad (B.13)$$

Vacío de los operadores de aniquilación.

Con cada transformación canónica del tipo (B.8) se puede asociar un operador S que actúa sobre el espacio de Fock tal que

$$\beta_i = S\alpha_i S^{-1} \quad (B.14)$$

puede demostrarse que en función de los coeficientes X e Y de la transformación canónica y de los operadores a^\dagger y a el operador S es

$$S = \det(X^\dagger X)^{\frac{1}{2}} : \exp\left\{-\frac{\epsilon}{2} a^\dagger X^{*-1} Y^* a^\dagger - \frac{1}{2} a Y X^{*-1} a + a^\dagger (X^{*-1} - 1)a + a Y X^{*-1} c + c^* a - a^\dagger X^{*-1} c\right\} : \quad (B.15)$$

donde los dos puntos a ambos lados de la expresión significan “ordenados normalmente”, es decir con los operadores de destrucción a la derecha de los de creación.

El operador S tiene la importante propiedad de permitir expresar el vacío de los operadores b en función del vacío de los operadores a ya que si $|0\rangle$ es el vacío de los operadores a y se define

$$|\psi_0\rangle = S |0\rangle \quad (B.16)$$

se tiene

$$b_i |\psi_0\rangle = b_i S |0\rangle = S a_i |0\rangle = 0 \quad (B.17)$$

reemplazando la expresión (B.15) del operador S en (B.17) se obtiene

$$|\psi_0\rangle = \det(X^\dagger X)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{\epsilon}{2} a^\dagger X^{*-1} Y^* a^\dagger - a^\dagger X^{*-1} c\right\} |0\rangle \quad (B.18)$$

Expresión que permite obtener el nuevo vacío en función de los coeficientes de la transformación canónica.

Apéndice C.

Diagonalización de Hamiltonianos cuadráticos.

Los hamiltonianos cuadráticos son de gran utilidad pues en general se los puede llevar a la forma diagonal por medio de una transformación canónica.

Estos hamiltonianos tienen la forma

$$H = \sum_{ij} [h_{ij} (a_i^\dagger a_j + a_j a_i^\dagger) + \Delta_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger + \Delta_{ij}^* a_j a_i] \quad (C.1)$$

Si se introduce la notación

$$\alpha = \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} \quad ; \quad \alpha^\dagger = (a^\dagger \quad a) = \alpha^\dagger \gamma \quad (C.2)$$

donde la matriz γ es

$$\gamma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (C.3)$$

el hamiltoniano (C.1) se puede escribir

$$H = \frac{1}{2} \alpha^\dagger M \alpha \quad (C.4)$$

con

$$M = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\epsilon \Delta^* & -\epsilon h^* \end{pmatrix} \quad (C.5)$$

El hecho de pedir que (C.1) sea hermítico hace que

$$h = h^\dagger \quad y \quad \Delta^\dagger = -\epsilon \Delta \quad (C.6)$$

con $\epsilon = 1$ para fermiones y $\epsilon = -1$ para bosones. Como consecuencia de esto la matriz M satisface las relaciones

$$M^\dagger = M \quad y \quad M^* = -\epsilon \gamma M \gamma \quad (C.7)$$

Si se realiza una transformación canónica que lleva los operadores a^\dagger y a a un nuevo juego b^\dagger y b

$$\beta = T\alpha \quad \equiv \quad \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^\dagger & \epsilon Y^\dagger \\ \epsilon Y & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} \quad (C.8)$$

el hamiltoniano toma la forma

$$H = \frac{1}{2} \beta^\dagger \eta T \eta M T^{-1} \beta \quad (C.9)$$

donde se ha usado la propiedad de la transformación canónica (B.11)

$$(T^{-1})^\dagger = \eta T \eta \quad \eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix} \quad (C.10)$$

Si se desea llevar el hamiltoniano a la forma diagonal

$$H = \sum_i \xi_i b_i^\dagger b_i - \frac{\epsilon}{2} \sum_i \xi_i \quad (C.11)$$

la transformación canónica (C.8) debe satisfacer la relación

$$\eta T \eta M T^{-1} = \Xi \quad (C.12)$$

con

$$\Xi = \begin{pmatrix} \xi & 0 \\ 0 & -\epsilon \xi \end{pmatrix} \quad (C.13)$$

lo que equivale a

$$\eta M T^{-1} = T^{-1} \eta \Xi \quad (C.14)$$

Esta es una ecuación de autovalores donde los autovectores son las columnas de la matriz T^{-1} y los autovalores los elementos de la diagonal de $\eta \Xi$.

En el caso fermiónico la matriz η es igual a la identidad por lo que la matriz a diagonalizar es hermítica y la matriz de la transformación canónica es unitaria por lo que el problema a resolver es el usual en mecánica cuántica. En el caso bosónico ($\epsilon = -1$) la matriz ηM ya no es más hermítica y la matriz de la transformación canónica no es unitaria.

En (C.11) se ha pedido que el hamiltoniano sea llevado a la forma diagonal y por ello la matriz $\eta \Xi$ tiene la forma particular

$$\eta \Xi = \begin{pmatrix} \xi & 0 \\ 0 & -\xi \end{pmatrix} \quad (C.15)$$

es fácil ver que esto es compatible con la matriz ηM a diagonalizar ya que conjugando la expresión (C.14)

$$\eta M^*(T^{-1})^* = (T^{-1})^* \eta \Xi \quad \Rightarrow \quad \eta M(\gamma(T^{-1})^*) = -(\gamma(T^{-1})^*) \Xi^* \quad (C.16)$$

donde se ha hecho uso de la relación (C.7)

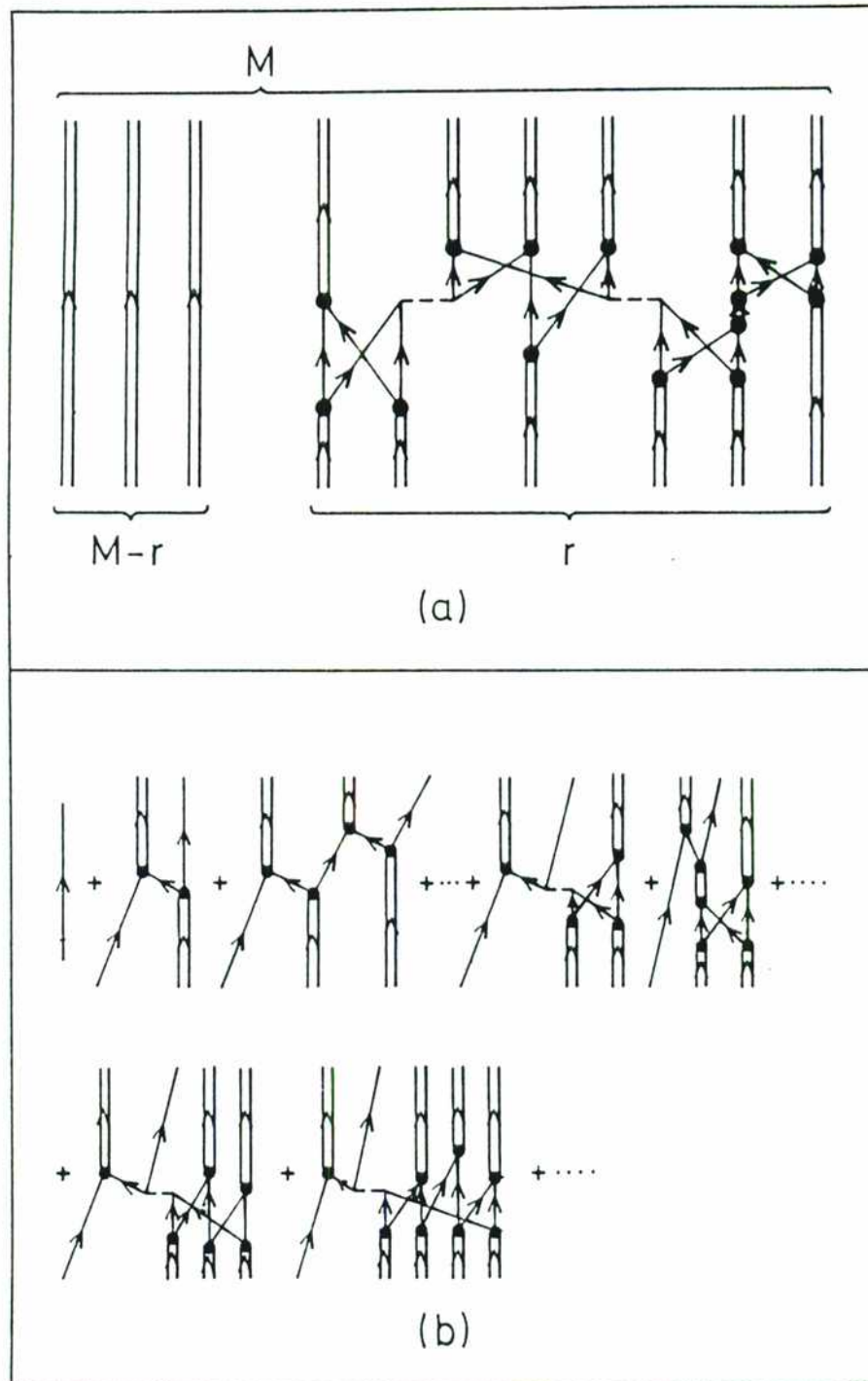
En el caso fermiónico los autovalores de la ecuación (C.14) son obviamente reales por tratarse de una matriz hermítica en el caso bosónico puede demostrarse que el hecho de ser M hermítica hace que los autovalores de ηM sean reales, para verificarlo se puede multiplicar a la expresión (C.14) a izquierda por $(T^{-1})^\dagger \eta$ y evaluar los elementos de la diagonal

$$((T^{-1})^\dagger M T^{-1})_{ii} = ((T^{-1})^\dagger \eta T^{-1} \eta \Xi)_{ii} = (T^{-1})_{ji}^* (T^{-1})_{ji} \eta_{jj} \eta_{ii} \xi_{ii} \quad (C.17)$$

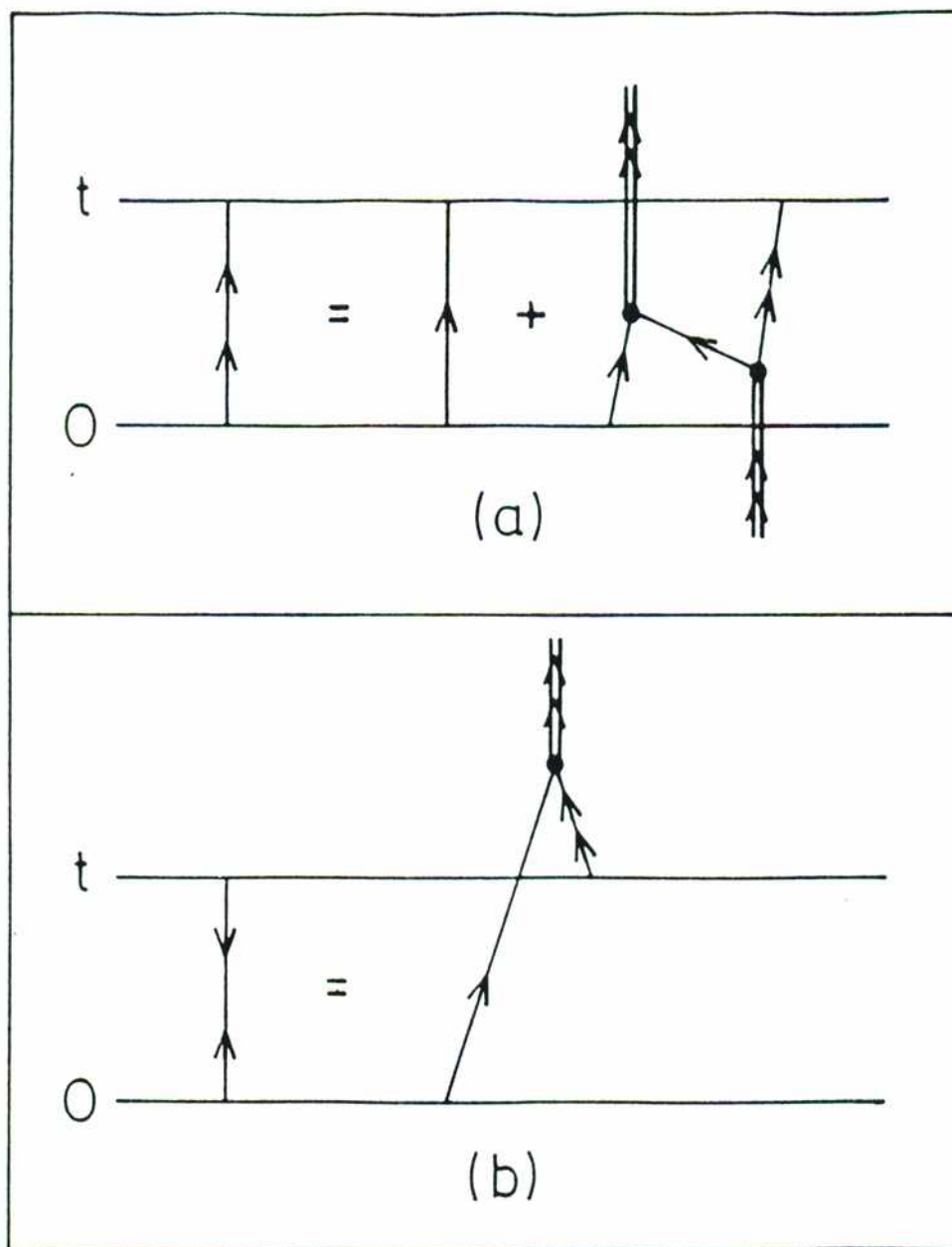
como M es hermítica el término de la izquierda es real y por consiguiente debe serlo ξ_{ii}

Una vez que el hamiltoniano (C.1) ha sido llevado a la forma diagonal (C.11), éste representa un sistema de cuasipartículas sin interacción, que es la aproximación de campo medio del sistema.

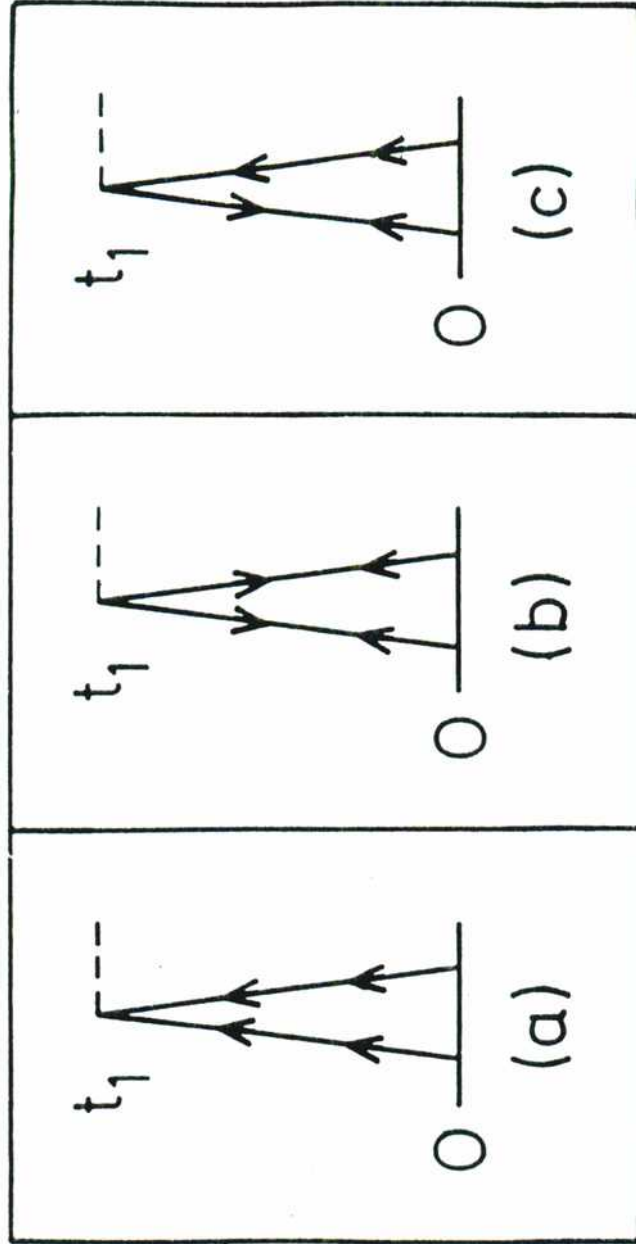
Los autoestados de un hamiltoniano en la forma diagonal (C.11) son determinantes de Slater(permanentes) para sistemas fermiónicos(bosónicos) y el estado fundamental es el vacío de las cuasipartículas. Dicho vacío es expresable en función del vacío original de las partículas y de los coeficientes de la transformación canónica que diagonaliza el hamiltoniano(B.18).



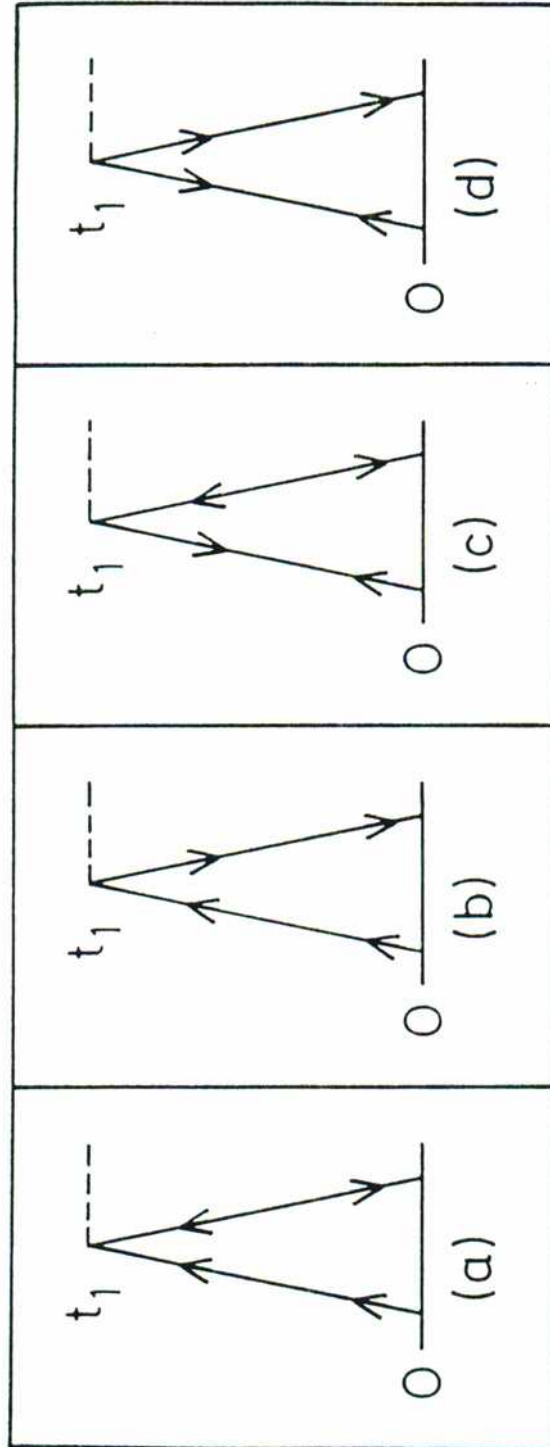
• **Figura 1.** Diagramas pertenecientes a la Serie Principal: (a) Diagrama que contribuye a la energía de un sistema par y (b) diagramas que contribuyen a la energía de un sistema impar.



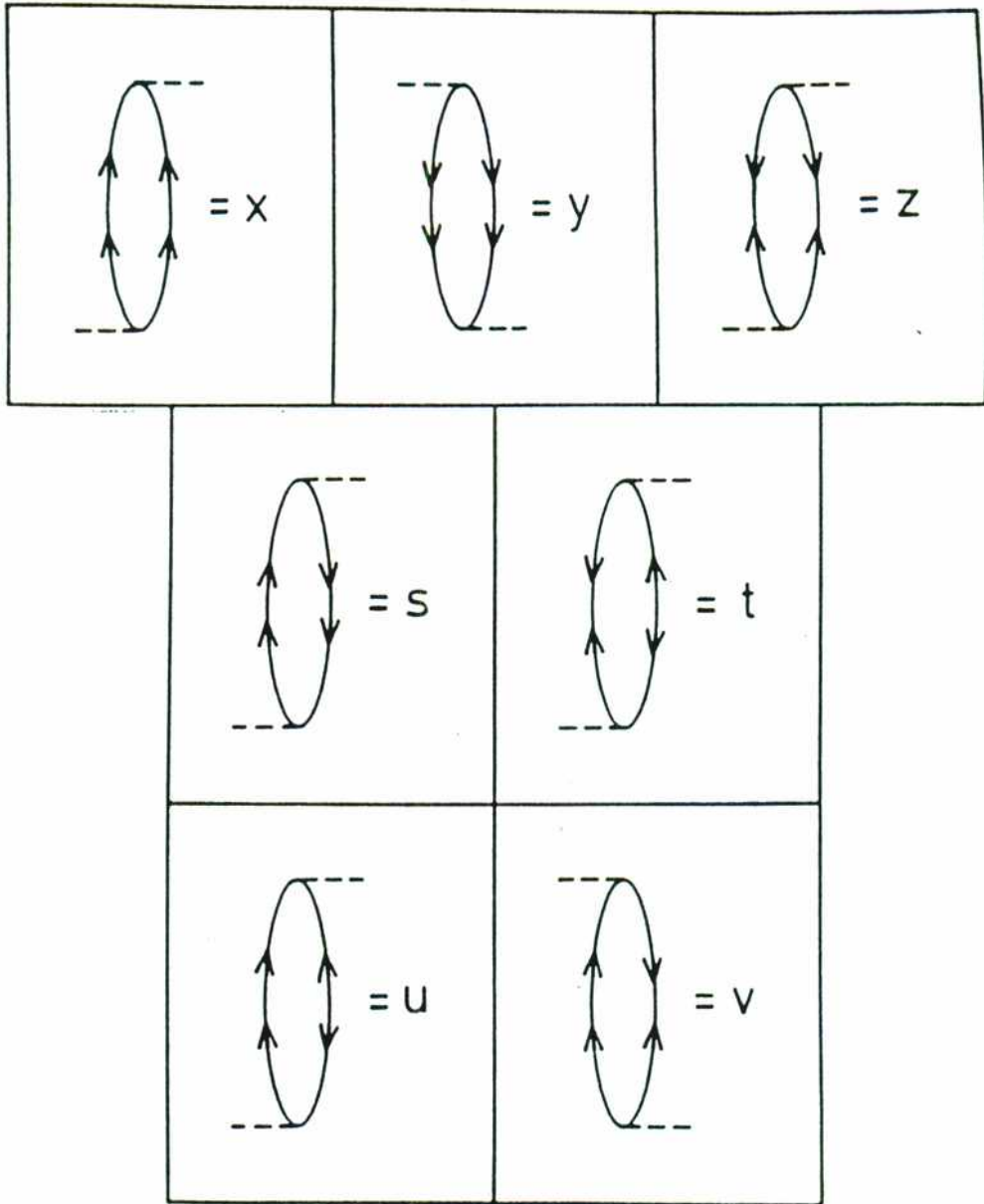
• **Figura 2.** Diagramas que contribuyen a (a) la OPGF normal y (b) a la anormal.



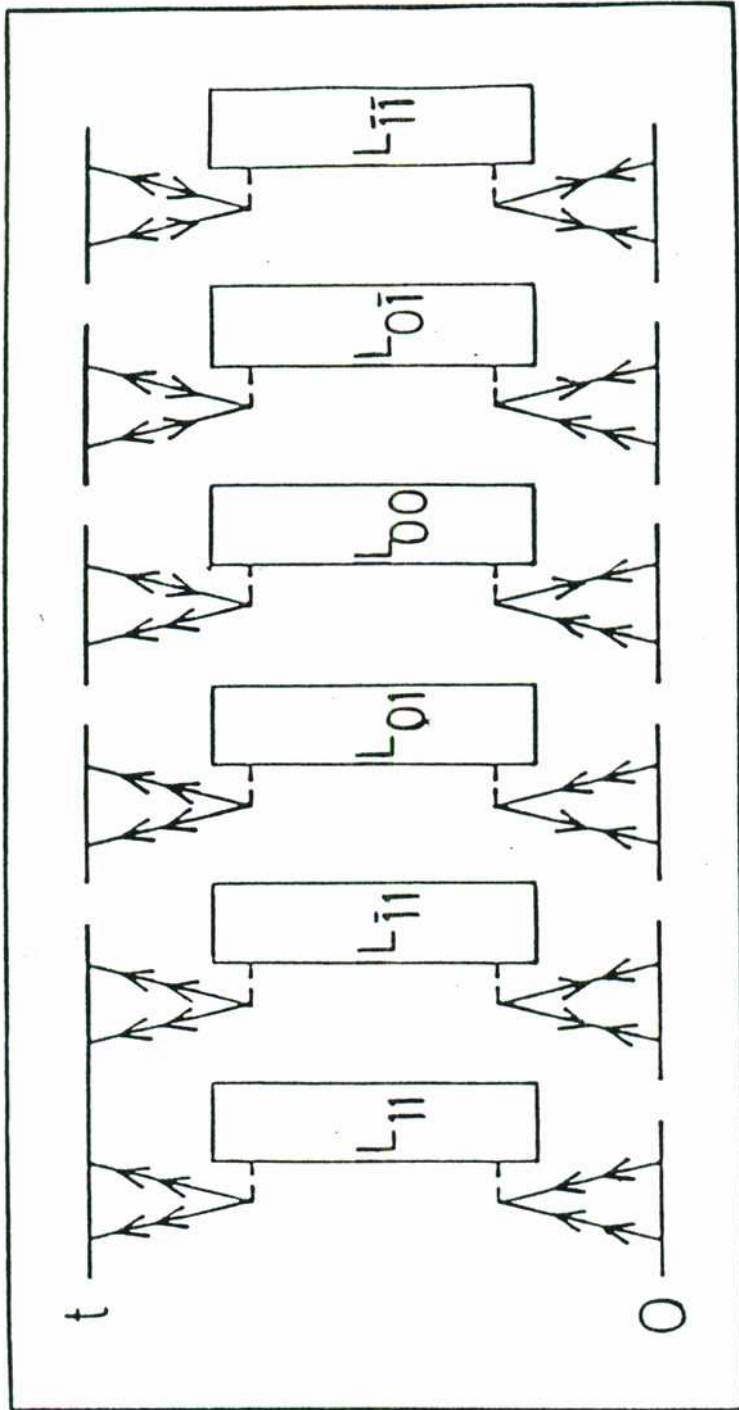
• Figura 4. Líneas externas de la TPGF. (a) Corresponde a $\mu = 1$, (b) a $\mu = \bar{1}$ y (c) a $\mu = 0$.



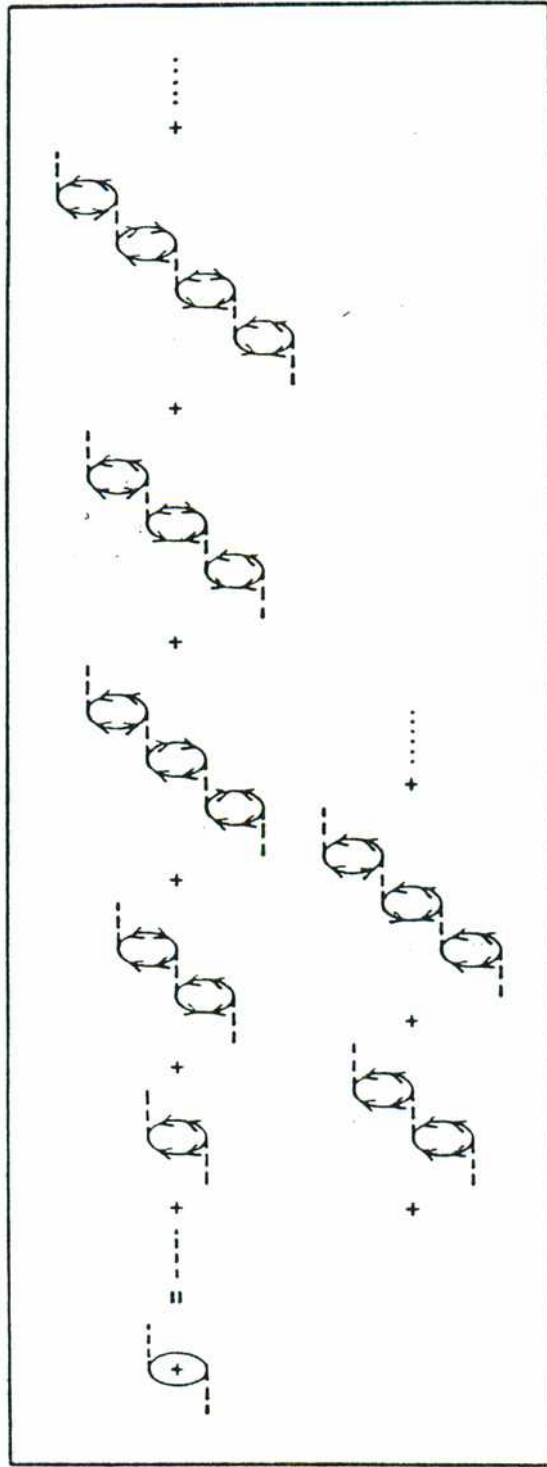
• **Figura 5.** Líneas externas de la PHGF. (a) Corresponde a $\mu = 1$, (b) y (c) a $\mu = 0$ y (d) a $\mu = \bar{1}$.



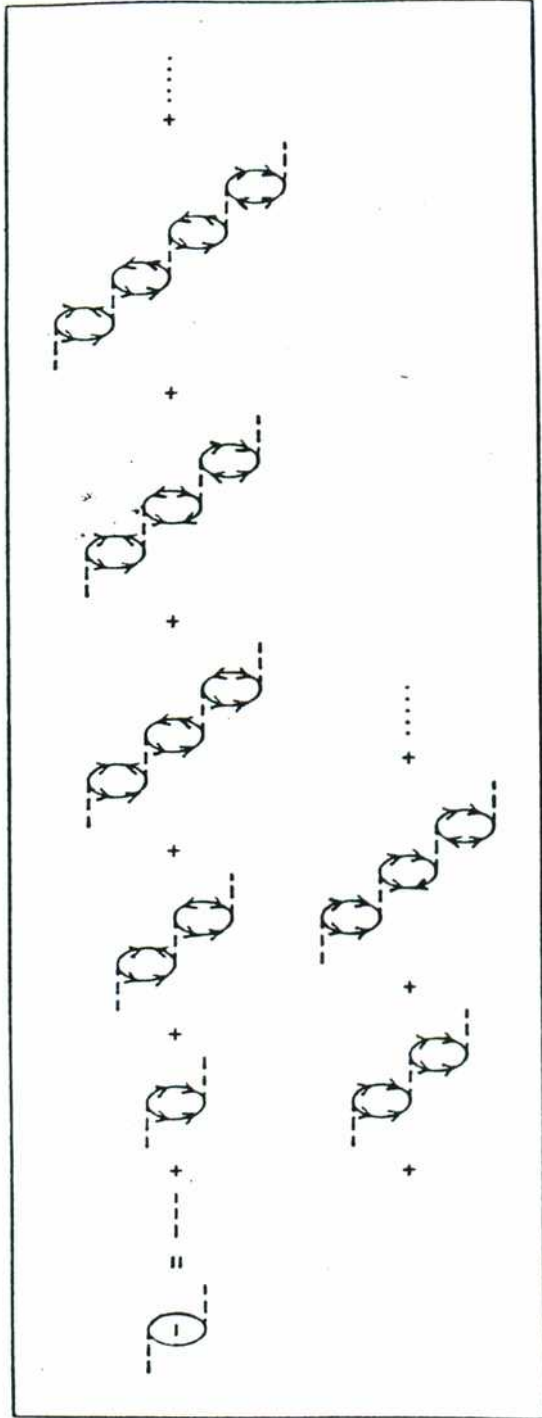
• **Figura 6.** Burbujas elementales necesarias para la construcción de los estados excitados (polos distintos de $k=0$) de la PHGF y TPGF.



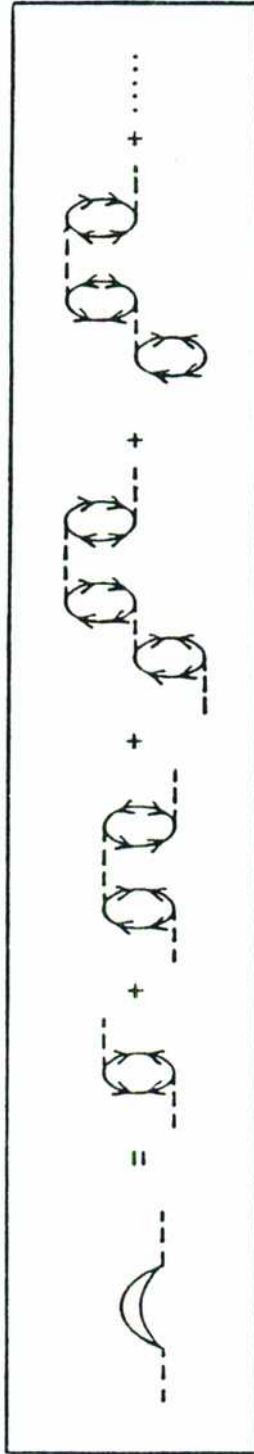
• Figura 7. Representación esquemática de las interacciones vestidas $L_{\mu\nu}$



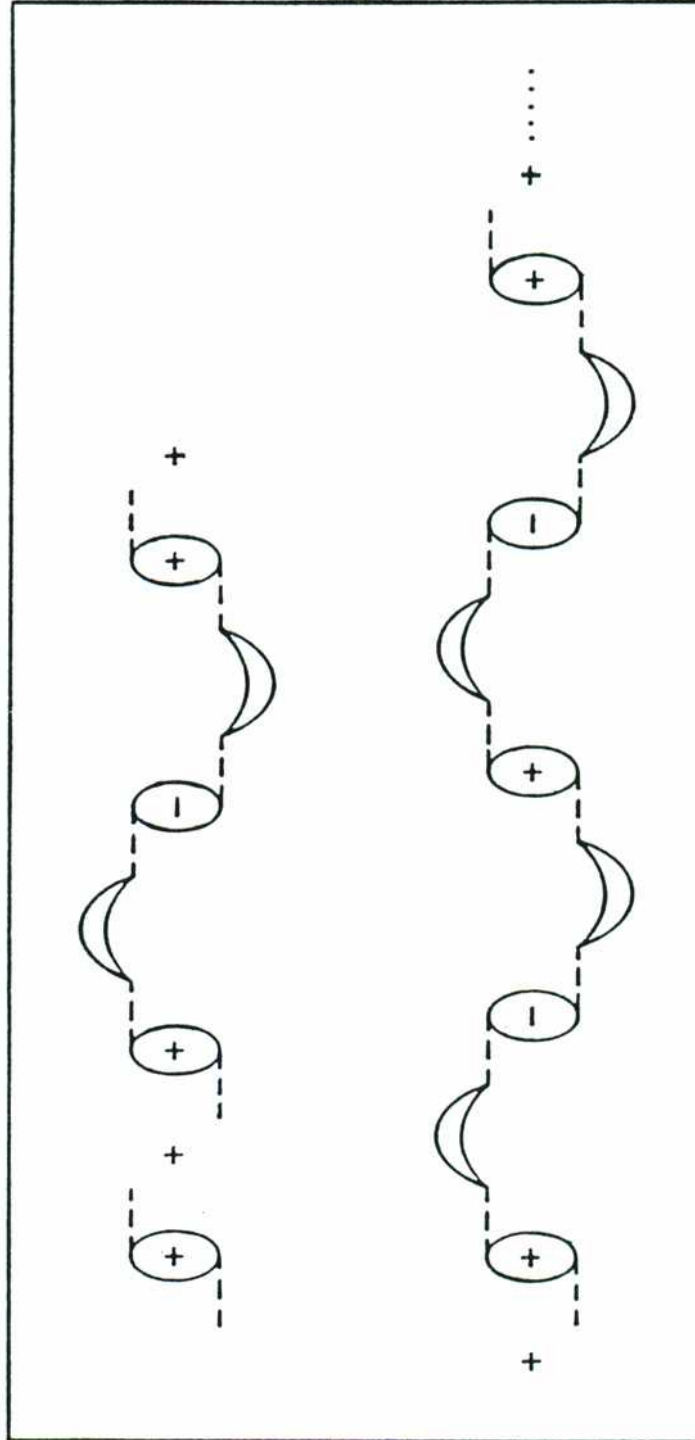
• Figura 8. Representación gráfica de $L_{11}^{(0)}$.



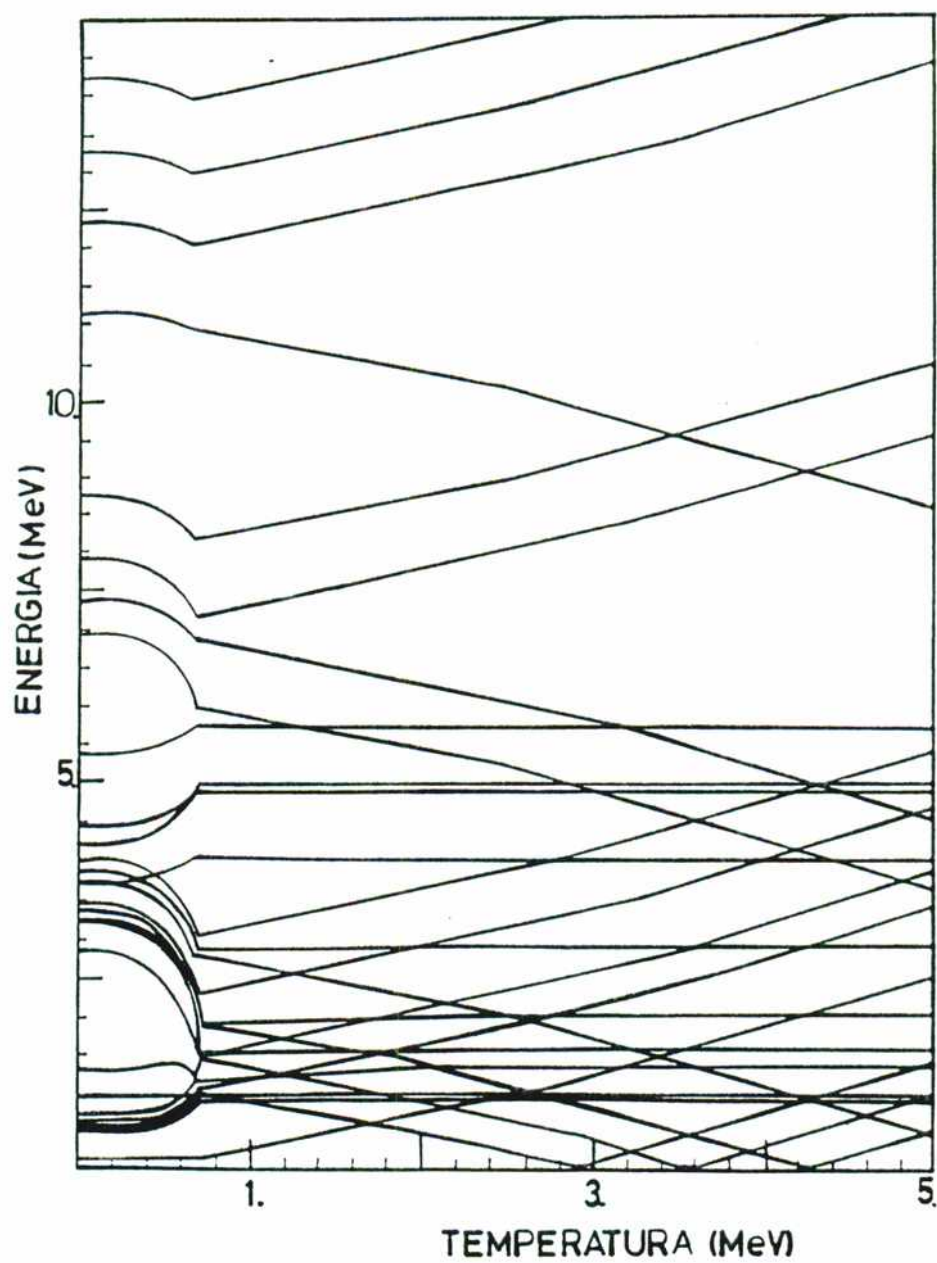
• Figura 9. Representación gráfica de $L_{II}^{(0)}$.



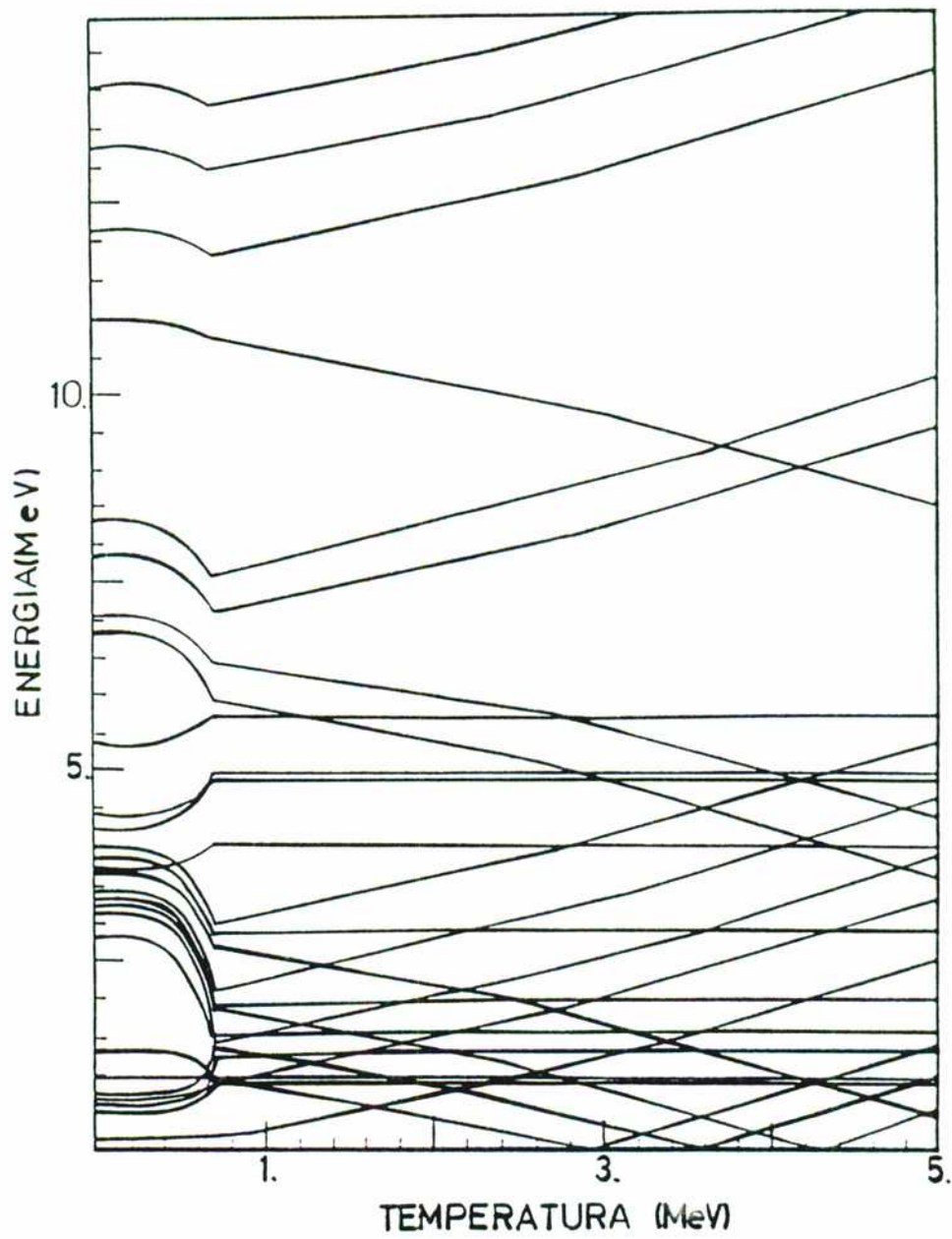
• Figura 10. Representación gráfica de $L_{11}^{(0)}$.



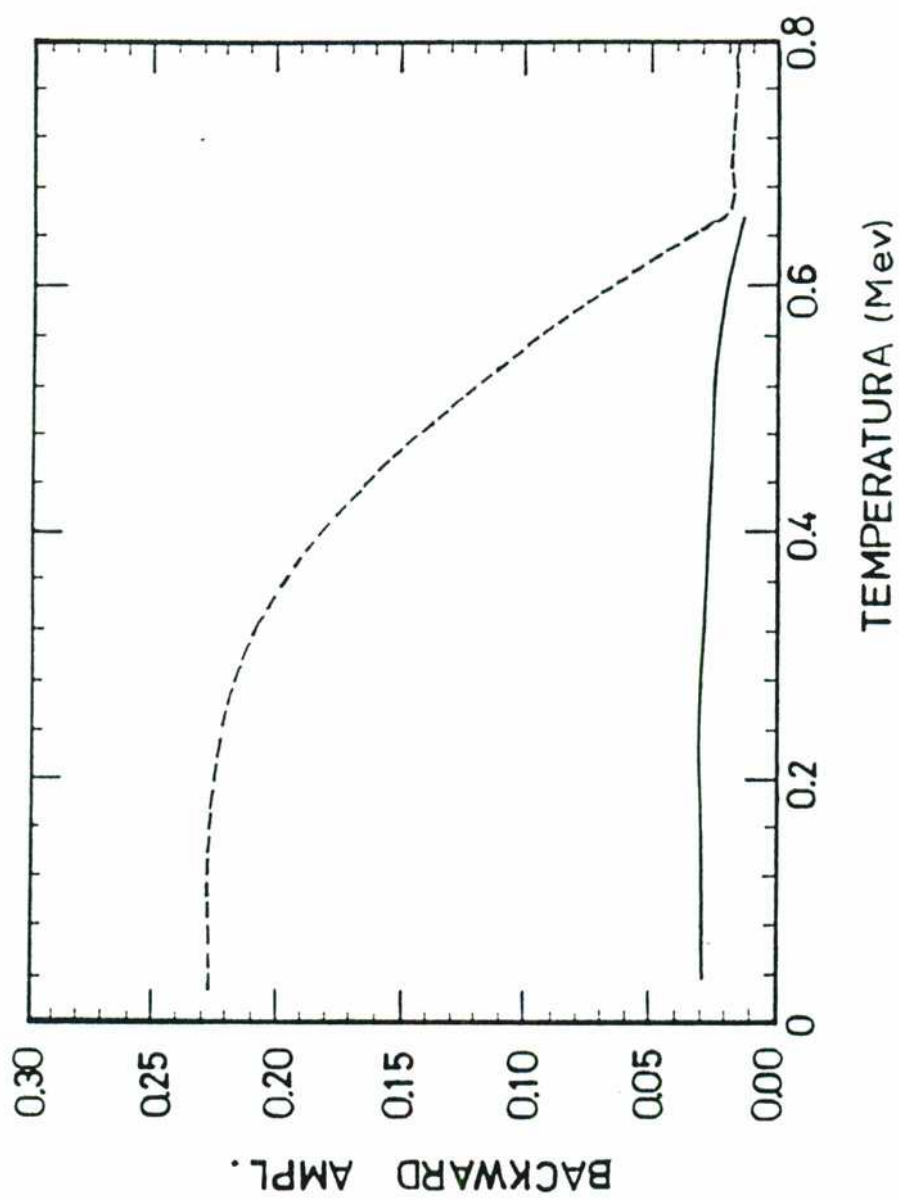
• Figura 11. Representación gráfica de L_{11} .



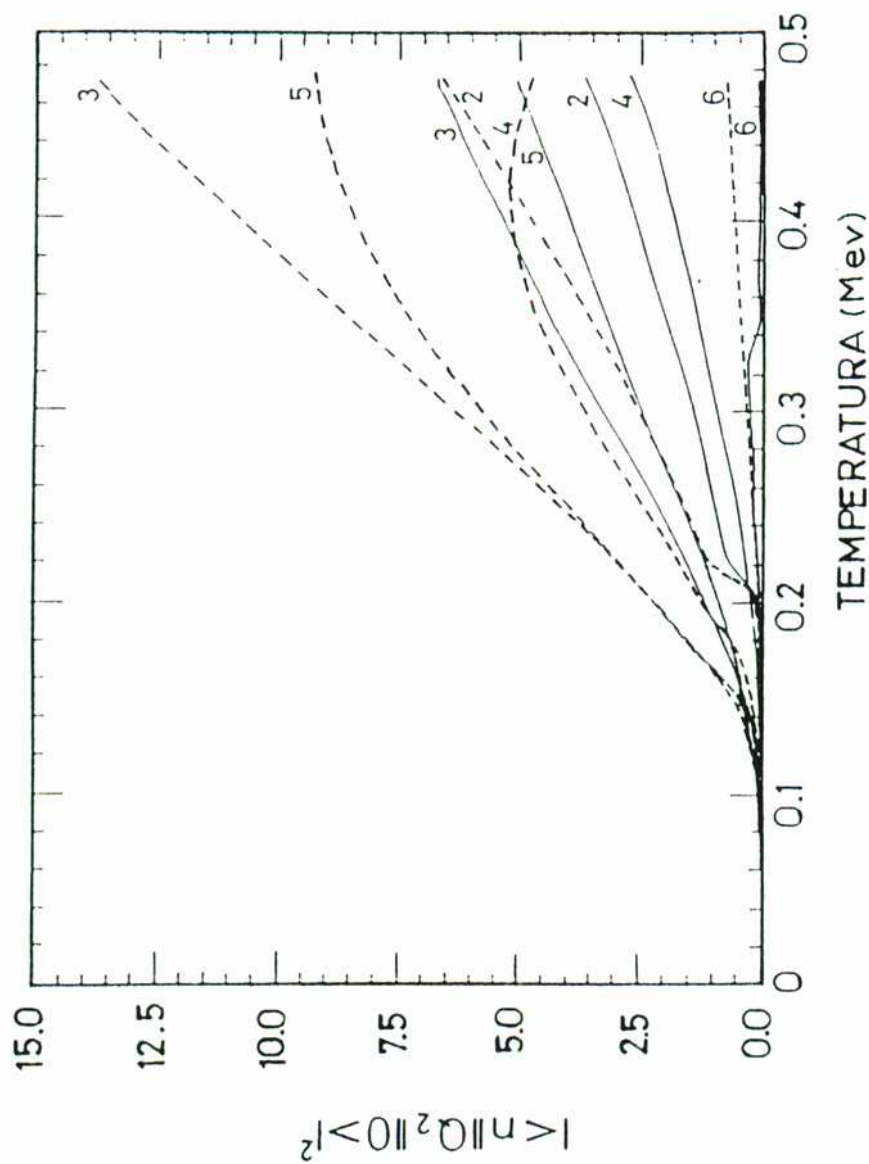
• Figura 12. Energías de las soluciones de la TRPA como función de la temperatura para el ^{114}Sn y $G_2 = 0$.



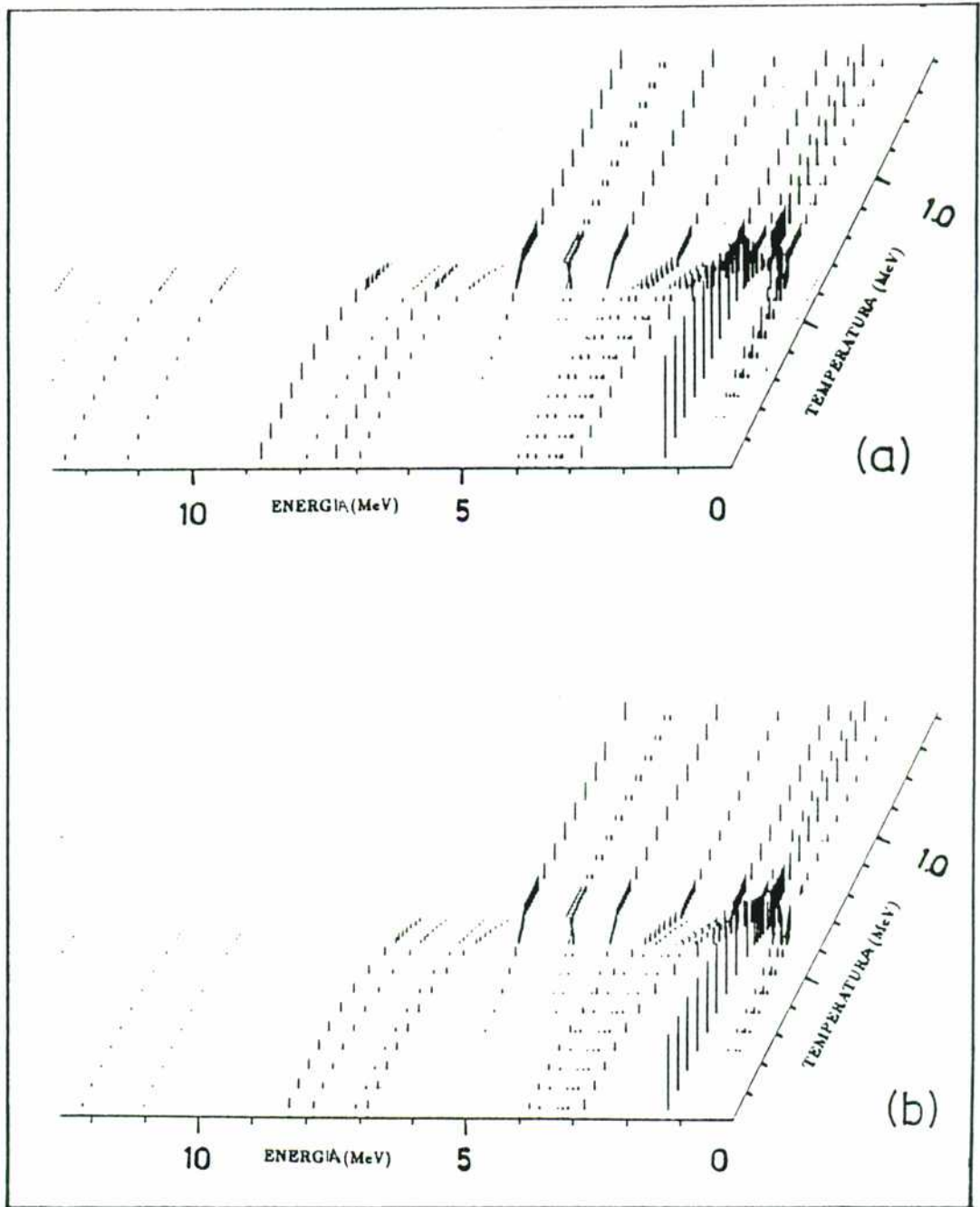
• Figura 13. Energías de las soluciones de la TRPA como función de la temperatura para el ^{114}Sn y $G_2 = G_0$.



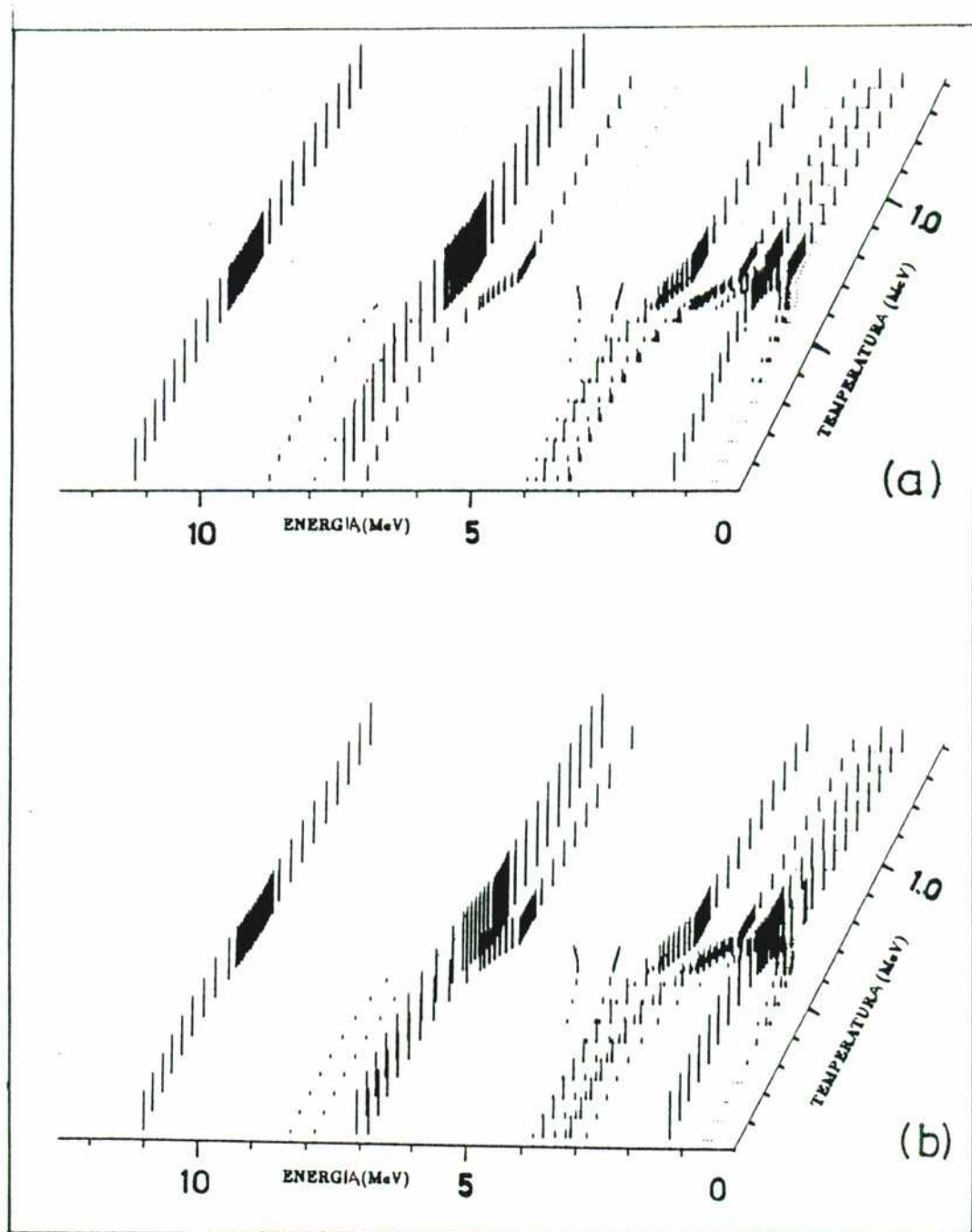
• Figura 14. Suma de los cuadrados de las amplitudes backward del estado 2^+ colectivo como función de la temperatura para el ^{114}Sn . En línea de trazos se muestran los resultados con $G_2 = 0$ mientras que en línea llena se muestran los resultados con $G_2 = G_0$.



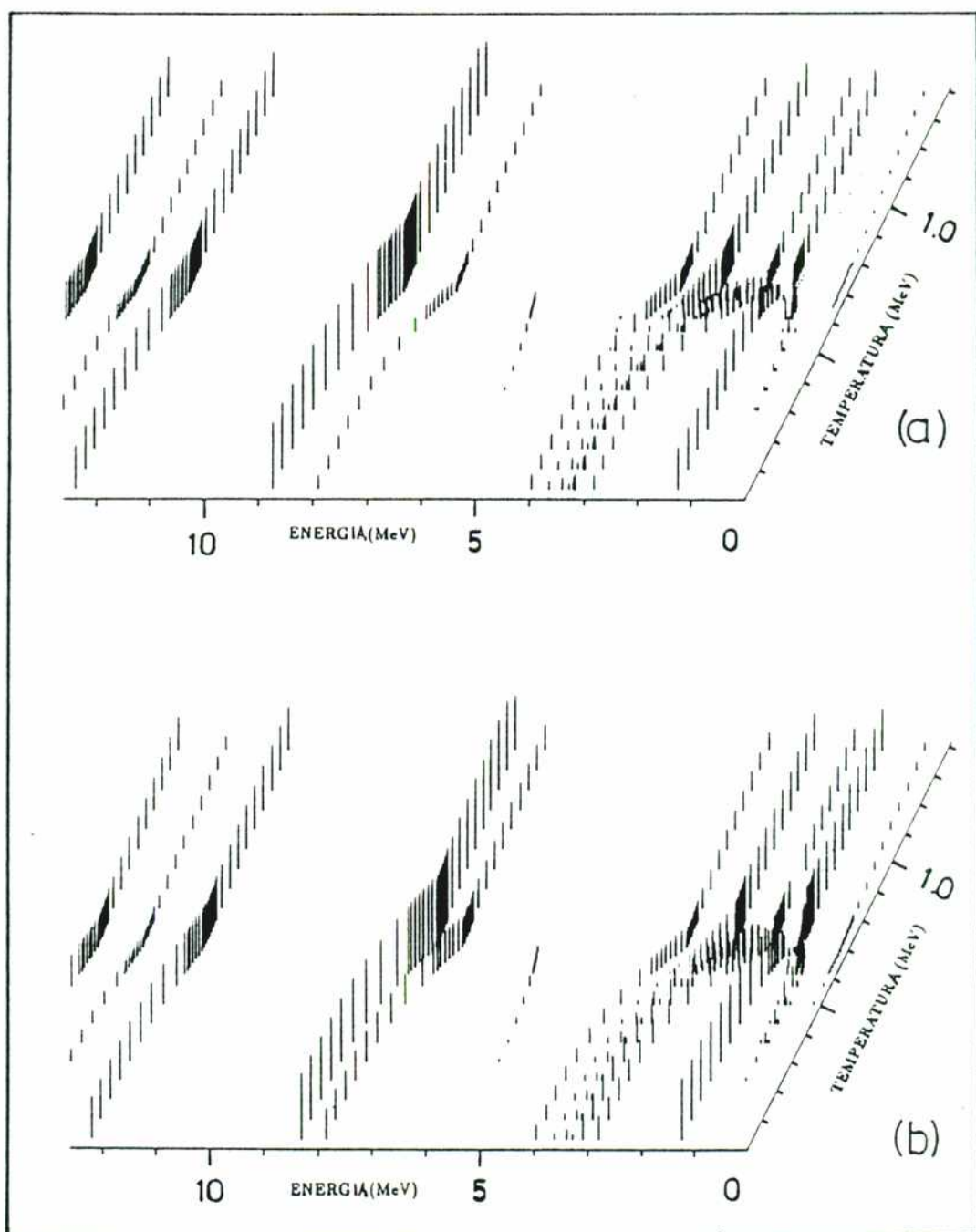
• **Figura 15.** Cuadrado de los elementos de matriz del operador cuadrupolar para las primeras seis raíces de la TRPA como función de la temperatura en el ^{114}Sn . Cada línea está rotulada con el número de orden de la raíz correspondiente. En línea de trazos se muestran los resultados con $G_2 = 0$ mientras que en línea llena se muestran los resultados con $G_2 = G_0$.



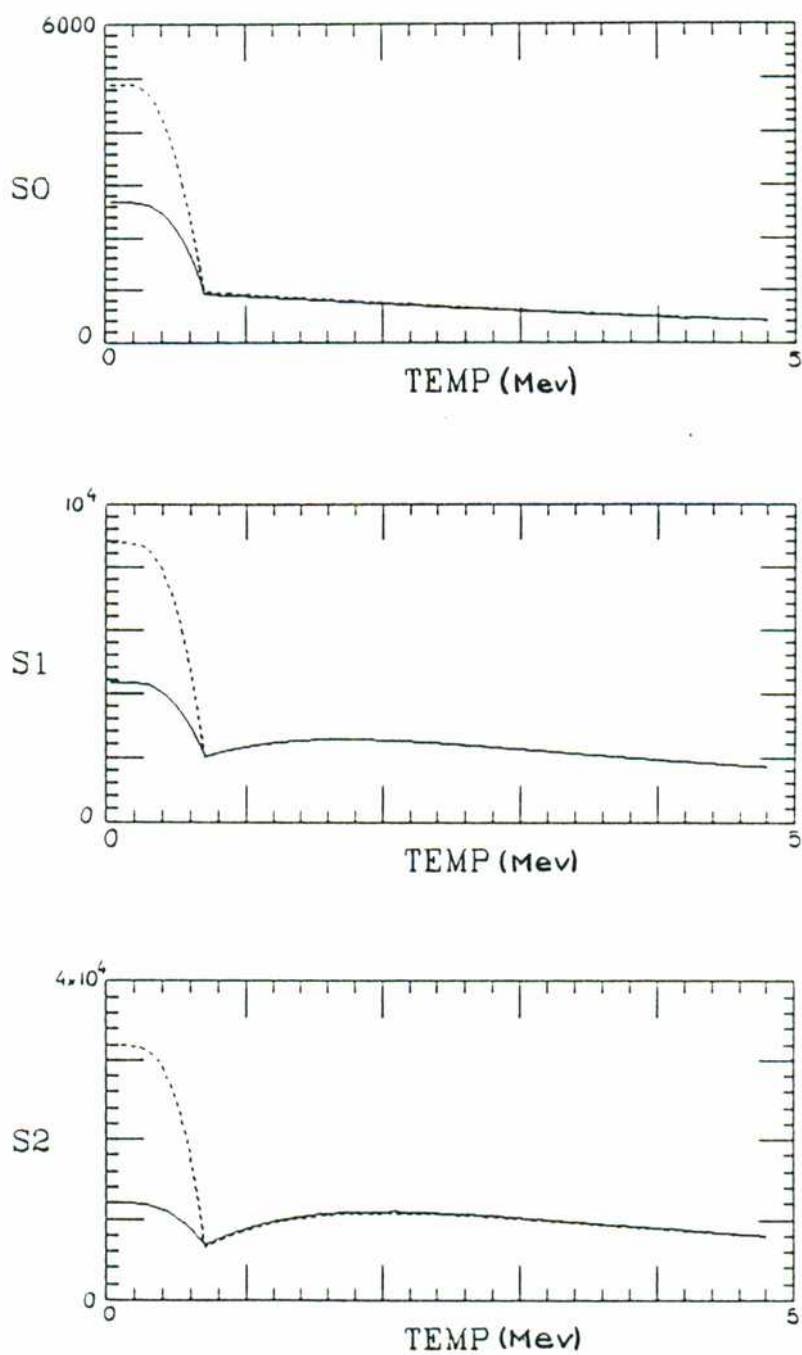
- **Figura 16.** Elementos de matriz del operador Q_2 entre el estado fundamental y las raíces de la TRPA para diferentes temperaturas. En un eje se tiene la energía de la raíz, en otro la temperatura y en el vertical la altura de la línea es proporcional al elemento de matriz. En (a) se muestran los resultados con $G_2 = 0$ mientras que en (b) los correspondientes a $G_2 = G_0$



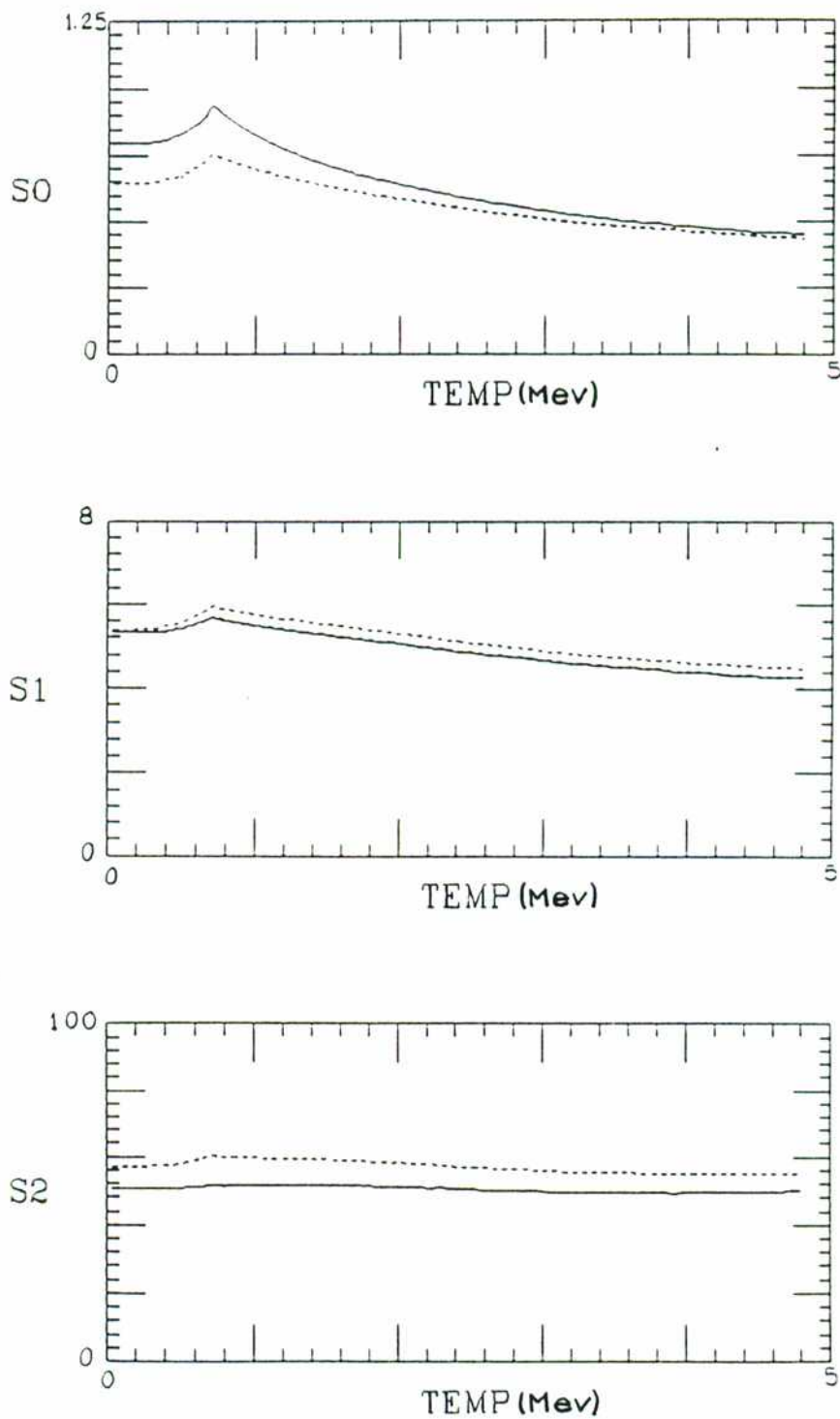
• Figura 17. Elementos de matriz del operador P_2 entre el estado fundamental y las raíces de la TRPA para diferentes temperaturas. En un eje se tiene la energía de la raíz, en otro la temperatura y en el vertical la altura de la línea es proporcional al elemento de matriz. En (a) se muestran los resultados con $G_2 = 0$ mientras que en (b) los correspondientes a $G_2 = G_0$



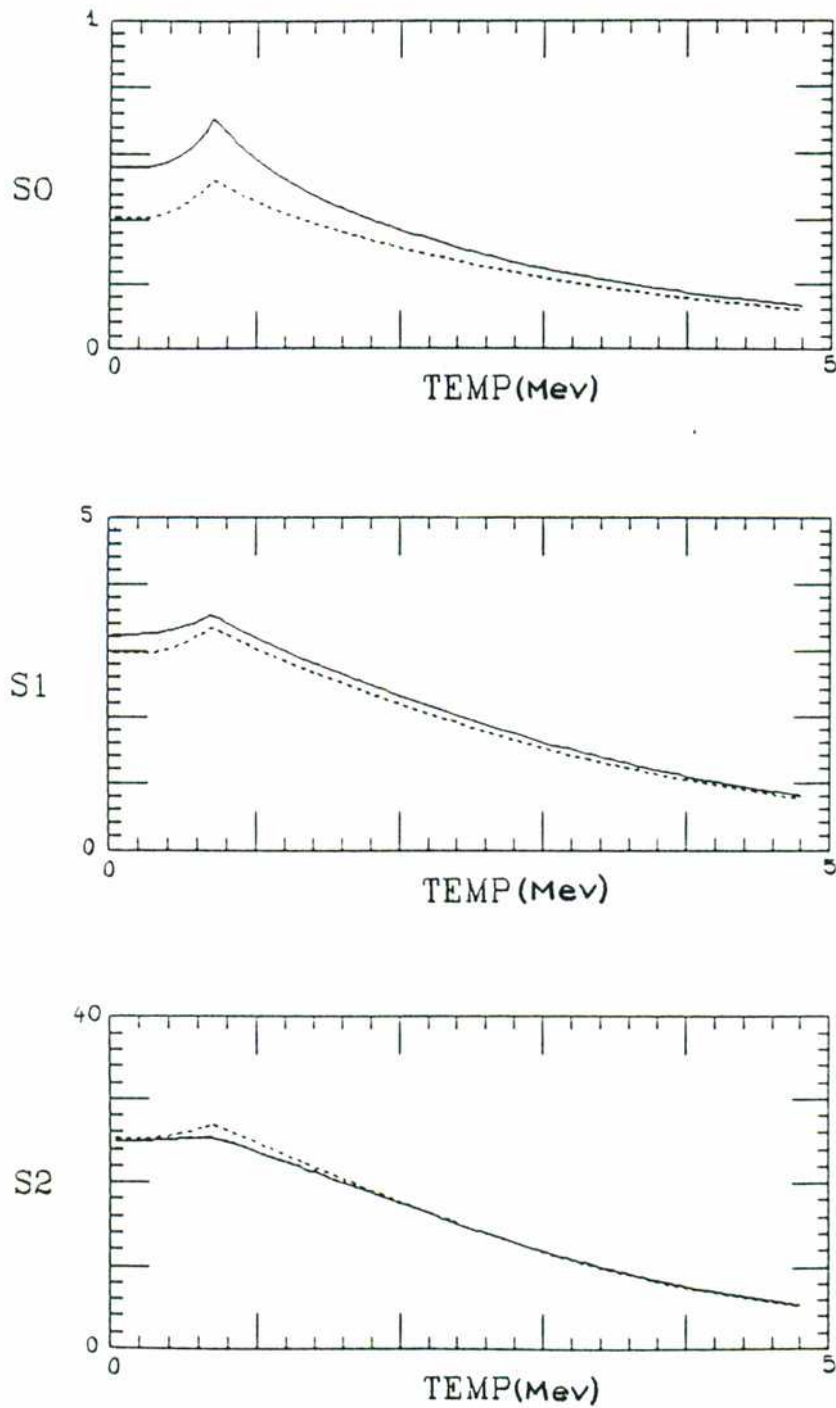
- **Figura 18.** Elementos de matriz del operador P_2^\dagger entre el estado fundamental y las raíces de la TRPA para diferentes temperaturas. En un eje se tiene la energía de la raíz, en otro la temperatura y en el vertical la altura de la línea es proporcional al elemento de matriz. En (a) se muestran los resultados con $G_2 = 0$ mientras que en (b) los correspondientes a $G_2 = G_0$



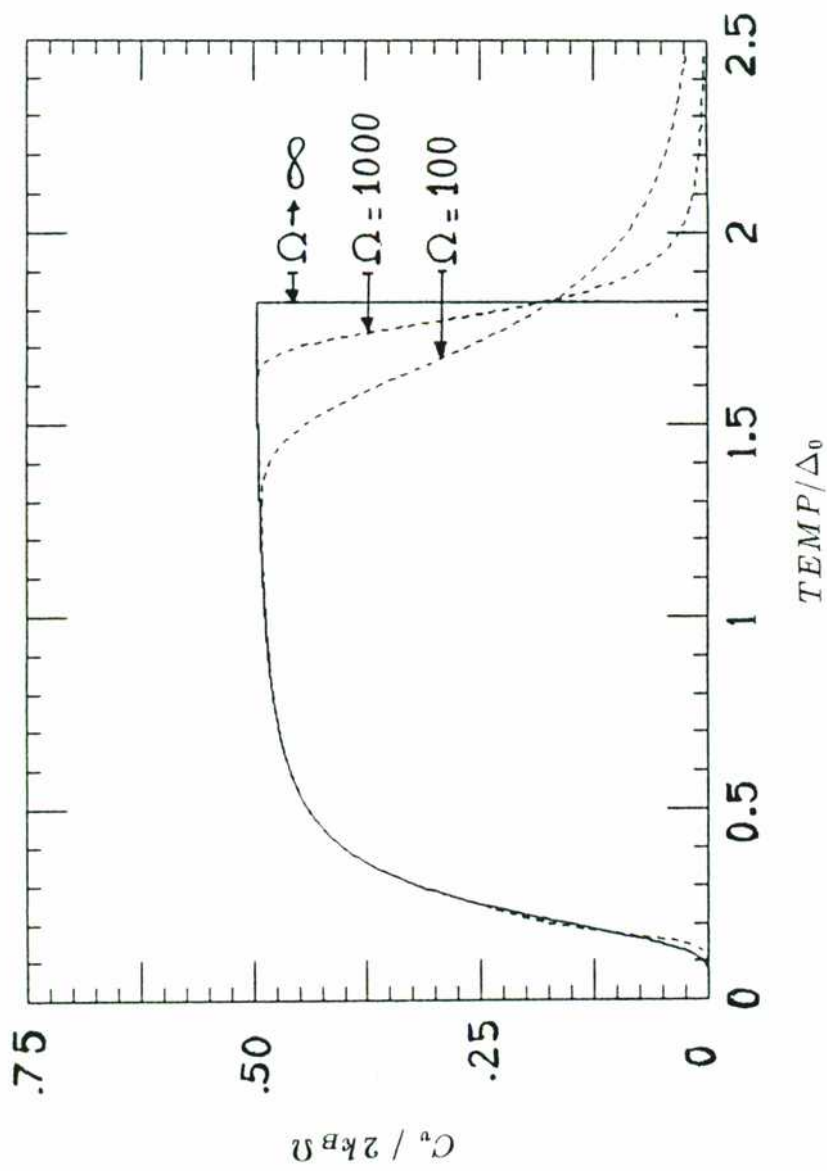
• **Figura 19.** Reglas de suma para el operador Q_2 en el ^{114}Sn . En línea de trazos se muestran los resultados con $G_2 = 0$ mientras que en línea llena se muestran los resultados con $G_2 = G_0$. (a) Corresponde a $m = 0$, (b) a $m = 1$ y (c) a $m = 2$.



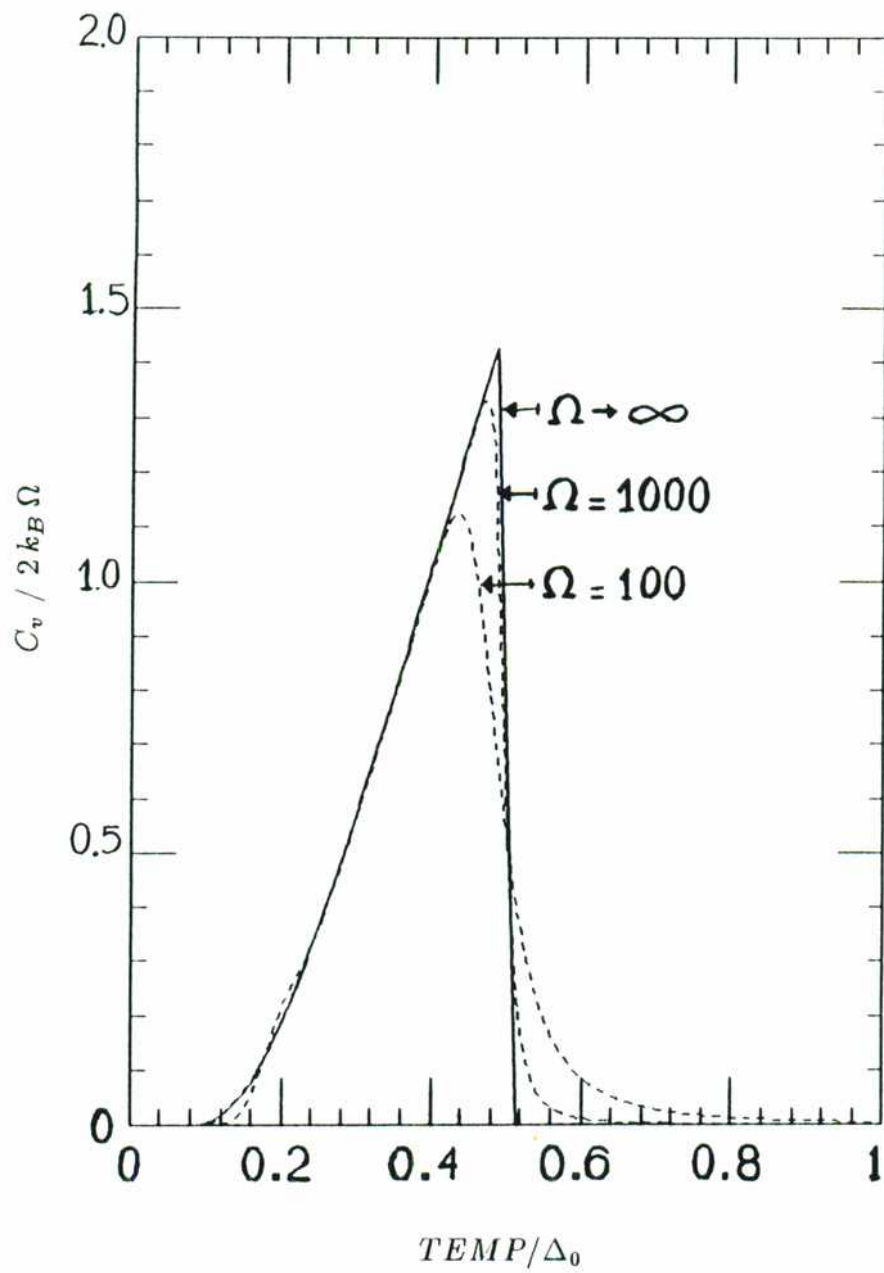
- **Figura 20.** Reglas de suma para el operador P_2^\dagger en el ^{114}Sn . En línea de trazos se muestran los resultados con $G_2 = 0$ mientras que en línea llena se muestran los resultados con $G_2 = G_0$. (a) Corresponde a $m = 0$, (b) a $m = 1$ y (c) a $m = 2$.



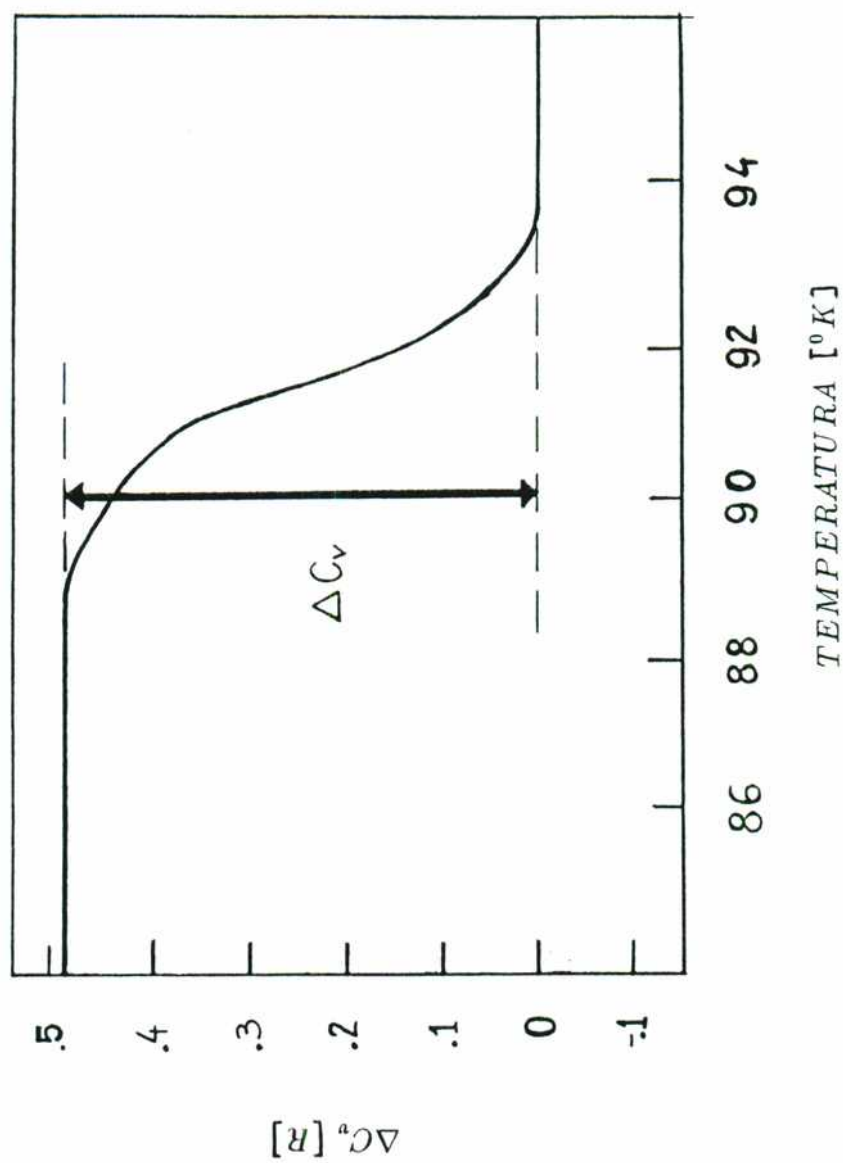
• **Figura 21.** Reglas de suma para el operador P_2 en el ^{114}Sn . En línea de trazos se muestran los resultados con $G_2 = 0$ mientras que en línea llena se muestran los resultados con $G_2 = G_0$. (a) Corresponde a $m = 0$, (b) a $m = 1$ y (c) a $m = 2$.



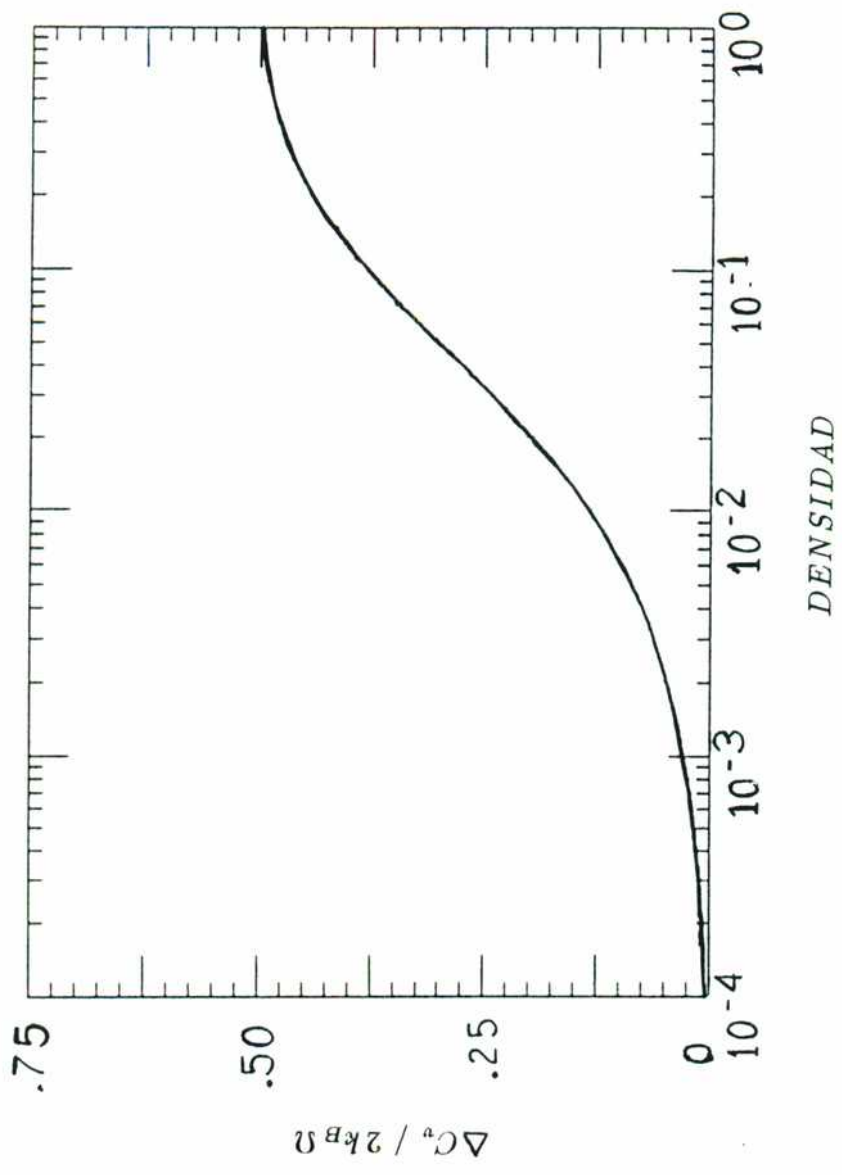
• **Figura 22.** Calor específico correspondiente al modelo de apareamiento de bosones para una densidad de .5. En línea llena la aproximación de Hartree-Bose térmica y en línea de rayas la solución exacta para $\Omega = 100$ y 1000.



- **Figura 23.** Calor específico correspondiente al modelo de apareamiento de fermiones para una densidad de .5. En línea llena la aproximación de Hartree-Fock-Bogoliuvov térmica y en línea de rayas la solución exacta para $\Omega = 100$ y 1000 .



• **Figura 24.** Esquema del calor específico medido para el $YBa_2Cu_2O_y$ sin la contribución de la red.



• **Figura 25.** Valor del salto del calor específico como función de la densidad para el modelo de apareamiento de bosones.

Referencias

- 1.- J.O.Newton, B.Herskind, R.M.Diamond, E.L.Dines, J.E.Draper, K.H.Lindenberger, C.Schück, S.Shih y F.S.Stephens, Phys. Rev. Lett. 46 1383 (1981).
- 2.- J.E.Draper, J.O.Newton, L.G.Sobotka, H.Lindenberger, G.J.Wornik, L.G.Moretto, F.S.Stephens, R.M.Diamond y R.J.McDonald, Phys. Rev. Lett. 49 434 (1982).
- 3.- J.J.Gaardhøje en: Nuclear Structure 1985, editado por R.Brogia, G.Hagemann y B.Herskind (North Holland, Amsterdam, 1985), p.519.
- 4.- F.E.Bertrand, Ann. Rev. of Nucl. Sci. 26 457 (1976) y Nucl. Phys. A354 129 (1981).
- 5.- G.F.Bertsch y R.A.Brogia, Phys. Today 39 44 (1983) y referencias allí citadas.
- 6.- J.Speth y A. van der Woude, Rep. Prog. Phys. 44 719 (1981) y referencias allí citadas.
- 7.- G.F.Bertsch, P.F.Bortignon y R.A.Brogia, Rev. Mod. Phys. 55 287 (1983) y referencias allí citadas.
- 8.- G.G.Dussel, R.P.Perazzo, S.L.Reich y H.M.Sofia, Nucl. Phys. A401 1 (1983).
- 9.- D.Vautherin y N.Vinh Mau, Phys. Lett. B120 261 (1983).
- 10.- A.L.Goodman, Nucl. Phys. A352 30 (1981), A352 45 (1981).
A.L.Goodman, Phys. Rev. C35 2338 (1987).
- 11.- K.Tanabe y K.Sugawara Tanabe, Phys. Lett. B97 337 (1980).
- 12.- K.Tanabe, K.Sugawara Tanabe y H.J.Mang, Nuc. Phys. A357 20 (1980).
- 13.- J.P.Blaizot y G.Ripka, Quantum Theory of finite Systems ,(The MIT Press,1986).
- 14.- W.A.B.Evans y Y.Imry, Il Nuovo Cimento B63 155 (1969).
- 15.- K.Tanabe, Phys. Rev. C37 2802 (1988).
- 16.- K.Tanabe y K.Sugawara Tanabe, Phys. Lett. B135 353 (1984).
- 17.- K.Tanabe y K.Sugawara Tanabe, Phys. Lett. B192 268 (1987).

- 18.- P.Ring, L.M.Robledo, J.L.Egido y M.Faber, Nucl. Phys. A419 261 (1984).
- 19.- G.G.Dussel, H.Fortunato y H.M.Sofia, enviado para su publicación a Phys. Rev. C.
- 20.- T.Matsubara, Prog. Theor. Phys. 14 351 (1955).
- 21.- R.Kubo, M.Toda y N.Hashitsume en: Statistical Physics II, (Springer-Verlag, Berlin, 1985).
- 22.- G.G.Dussel y D.R.Bes, Nucl. Phys. A323, 392 (1979).
- 23.- J.Dukelsky, G.G.Dussel y H.M.Sofia, Phys. Rev. C27, 2954 (1983).
- 24.- D.R.Bes, G.G.Dussel, R.A.Brogliá, R.Liotta y B.R.Mottelson, Phys. Lett. B52 253 (1974).
D.R.Bes, G.G.Dussel, R.A.Brogliá, R.Liotta, R.P.J.Perazzo y H.M.Sofia Nucl. Phys. A260 1, 27, 77 (1976).
- 35.- L.D.Landau, J.Phys. (Moscow) 5, 71 (1941).
- 26.- G.G.Dussel y H.E.Fortunato, enviado para su publicación a Phys. Rev. B.
- 27.- S.E.Inderhees, M.B.Salamon, T.A.Friedmann y D.M.Ginsberg, Phys. Rev. B36 2401 (1987).
- 28.- K.Kitazawa, T.Atake, H.Ishi, H.Sato, H.Takagi, S.Uchida, Y.Saito, H.Fueki y S.Tanaka, Jpn. J. Appl. Phys. 26 L748 (1987).
- 29.- M.E.Reeves, D.S.Citrin, B.G.Pazol, T.A.Friedmann y D.M.Ginsberg, Phys. Rev. B36 6915 (1987).
- 30.- M.V.Nevitt, G.W.Crabtree y T.E.Klippert, Phys. Rev. B36 2398 (1987).
- 31.- K.Kitazawa, T.Atake, M.Sakai, S.Uchida, H.Takagi, K.Kishio, T.Hasegawa, K.Fueki, Y.Saito y S.Tanaka, Jpn. J. Appl. Phys. 26 L751 (1987).
- 32.- G.Nieva, E.N.Martinez, F. de la Cruz, D.A.Esparza y C.A.D'Ovidio, Phys. Rev. B36 8780 (1987).
- 33.- A.A.Abrikosov, L.P.Gorkov y I.E.Dzyaloshinski, Methods of quantum field theory in statistical mechanics,(Prentice Hall, N.Jersey, 1963).
- 34.- A.L.Fetter y J.D.Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, (McGraw-

Hill Inc.,1971).

- 35.- J.Dukelsky, G.G.Dussel y H.M.Sofia, J.Phys. G8, L191 (1982)
- 36.- O.Civitarese, G.G.Dussel y R.P.Perazzo, Nucl. Phys. A404 15 (1983).
- 37.- R.A.Uhrer y R.A.Sorensen, Nucl. Phys. 86 1 (1966).
- 38.- J.L.Egido y P.Ring, Phys. Lett. B127 5 (1983).
- 39.- J. des Cloiseau en: Many body physics, eds. C.de Witt y R. Balian (Gordon y Breach, New York, 1968) p.5.
- 40.- K.Tanabe y K.Sugawara Tanabe, Phys. Lett. B172 129 (1986).
- 41.- P.W.Anderson, Science. 235 1196 (1987).
- 42.- P.W.Anderson, G.Baskaran, Z.Zou y T.Hsu, Phys. Rev. Lett. 58 2790 (1987).
- 43.- S.Kivelson, Phys. Rev. B36 7237 (1987).
- 44.- V.J.Emery, Phys. Rev. Lett. 58 2794 (1987).
- 45.- S.A.Kivelson, D.S.Rokhsar y J.P.Sethna, Phys. Rev. B35 8865 (1987).
- 46.- R.B.Laughlin, Phys. Rev. B27 3383 (1983).
- 47.- R.B.Laughlin, Phys. Rev. Lett. 50 1395 (1983).
- 48.- V.Kalmeyer y R.B.Laughlin, Phys. Rev. Lett. 59 2095 (1987).
- 49.- B.I.Halperin, Phys. Rev. Lett. 52 1583 (1984).
- 50.- J.Ranninger y S.Robaszkiewicz, Physica B135 468 (1985).
- 51.- D.Allender, J.Bray y J.Bardeen, Phys. Rev. B7 1020 (1973).
- 52.- P.A.Lee y N.Read, Phys. Rev. Lett. B58 2691 (1987).
- 53.- J.E.Hirsch, Phys. Rev. B35 8726 (1987).
- 54.- E.R.Gagliano, A.G.Rojo, C.A.Balseiro y B.Alascio, Solid State Comm. 64 901 (1987) y C.A.Balseiro, A.G.Rojo, E.R.Gagliano y B. Alascio,Physica C153 -- 155 1223 (1988).

- 55.- D.J.Thouless, Phys. Rev. 117 1256 (1960).
- 56.- P.Nozieres y D.Saint James, J.Physique 43 1133 (1982).
- 57.- G.G.Dussel, A.Fendrik y C.Pomar, Phys. Rev. C34 1969 (1986).
- 58.- G.G.Dussel, H.E.Fortunato y N.N.Scoccola, Nuc. Phys. A475 311 (1987).

G. Dussel

H. E. Fortunato

