

Tesis de Posgrado

Dinámica variacional en el problema de muchos cuerpos : El tratamiento de las simetrías

Solari, Hernán Gustavo

1984

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:

Solari, Hernán Gustavo. (1984). Dinámica variacional en el problema de muchos cuerpos : El tratamiento de las simetrías. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_1841_Solari.pdf

Cita tipo Chicago:

Solari, Hernán Gustavo. "Dinámica variacional en el problema de muchos cuerpos : El tratamiento de las simetrías". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1984. http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_1841_Solari.pdf

EXACTAS UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



UBA

Universidad de Buenos Aires

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO DE FISICA

DINAMICA VARIACIONAL EN EL PROBLEMA DE MUCHOS CUERPOS:
EL TRATAMIENTO DE LAS SIMETRIAS.

por

HERNAN GUSTAVO SOLARI

- 1841
Ej. 2

Trabajo de Tesis presentado para optar al Título de
Doctor en Ciencias Físicas

Director de Tesis: Dra. Ester Susana Hernández

1984
====

A MI PADRE.

AGRADECIMIENTOS.

Quiero expresar mi agradecimiento a la Dra. E. Susana Hernández por las largas horas dedicadas a la discusión de este trabajo y muy especialmente por haberme guiado a lo largo de nuestras investigaciones por el camino de mis propias inquietudes.

Deseo manifestar mi reconocimiento a los Dres. G. Dussel y N. Saraceno por las fructíferas conversaciones mantenidas.

Al Institute de Cálculo (FCEyN - UBA), al Laboratorio de Física del Plasma (Dto. de Física, FCEyN - UBA) y al Departamento de Física de la CNEA quienes nos han facilitado en distintas oportunidades sus elementos de cómputo, como así también a Ernesto Romanelli por su apoyo y colaboración en la operación del equipo VAX.

A todos quienes me brindaron aliento y entusiasmo, muy especialmente a mi madre y a mi hermano que han sido un continuo sosten para la realización de esta tesis; a Bárbara y a Cristal por su comprensión y estímulo.

INDICE.

1. INTRODUCCION.....	pag. 1
2. PRINCIPIO VARIACIONAL Y DINAMICA SOBRE VARIEDADES.....	5
2.1 El principio variacional.....	5
2.1.1 Ecuaciones canónicas.....	5
2.1.2 Las constantes de movimiento.....	6
2.2 Dinámica simpléctica.....	9
2.2.1 Dinámica hamiltoniana y geometría simpléctica...	9
2.2.2 Estados coherentes.....	12
2.2.3 Deducción del principio variacional a partir de la integral de camino.....	14
3. HARTREE-FOCK DEPENDIENTE DEL TIEMPO (HFDT).....	18
3.1 Fundamentos y aproximaciones.....	18
3.1.1 Fundamentos y aplicación en física nuclear.....	18
3.1.2 Los determinantes de Slater y HFDT.....	19
3.2 Jerarquía BBGKY y HFDT	21
3.3 HFDT como aproximación de orden cero	23
3.4 Aplicaciones y otros estudios	25
4. CONSERVACION DE LA SIMETRIA Y METODO DVCS.....	27
4.1 El problema de las simetrías.....	27
4.2 Las ecuaciones DVCS.....	28
4.2.1 Formulación con operadores de proyección	28
4.2.2 Formulación con coordenada generatriz	30
4.3 Características del método.....	32
5. COMPARACION DE LOS METODOS HFDT Y DVCS EN UN MODELO RESOLUBLE	34
5.1 El modelo de Lipkin-Meshkov-Glick	34
5.2 Soluciones aproximadas	36
5.2.1 Las ecuaciones HFDT	36
5.2.2 Comparación de HFDT con la resolución exacta....	39
5.2.3 Las ecuaciones DVCS	47

5.2.4 Comparación del resultado DVCS con la resolución exacta	pag. 49
5.3 Conclusiones.....	56
6. COLISIONES DE IONES LIVIANOS - HFDT	58
6.1 Potenciales de Skyrme	58
6.2 Modelos bi y tridimensionales	61
6.3 Aspectos cualitativos de las colisiones de iones livianos	62
6.4 Ruptura de simetrías en colisiones alfa-alfa	64
6.5 Conclusiones	74
7. COLISIONES DE IONES LIVIANOS - DVCS	78
7.1 Simetría rotacional	78
7.2 Recubrimiento gaussiano	82
7.3 Las ecuaciones DVCS en la aproximación de recubrimiento gaussiano	86
7.4 Cálculos numéricos	92
7.5 Conclusiones	94
8. RESUMEN	98
Apendice A: PROYECTORES	102
Apéndice B: VALORES MEDIOS Y ECUACIONES VARIACIONALES	107
B.1 Valores medios	107
B.2 Ecuaciones variacionales	110
REFERENCIAS	114

1. INTRODUCCION

La dinámica de muchos cuerpos en interacción está presente en numerosos dominios de la física, tanto clásicos como cuánticos, desde la fisión nuclear y las colisiones de iones pesados, pasando por la física molecular y la física del estado sólido hasta la física del plasma; haciendo abstracción de sus diferencias específicas (muy importantes por cierto) existen características del problema que son comunes a todos estos campos y que encuentran a su vez respuestas comunes.

La dificultad básica del problema de muchos cuerpos podría expresarse diciendo que : "estos son muchos para ser tratados individualmente y muchas veces demasiado pocos para hacerlo estadísticamente". Más allá de los impedimentos de orden práctico para realizar una descripción exacta, los cuales día a día son superados por el avance de los computadores, el esfuerzo que esta tarea implica puede no verse compensado en una descripción proporcionalmente superior a las resoluciones aproximadas que demandan mucho menores recursos técnicos.

El punto crucial de toda aproximación resulta, huelga decirlo, la distinción de los grados de libertad relevantes de aquellos que permanecen inactivos o que no influyen en las propiedades en estudio. Esta reducción del espacio de fases del problema completo, o equivalentemente del espacio de Hilbert, a una variedad diferencial, lineal o no, que contenga lo esencial de la descripción y paralelamente la reducción de la dinámica con el fin de que ésta dependa solamente de los elementos de la variedad, resulta el punto de partida esencial de toda aproximación y puede ser expresado simplemente como la extracción de la subdinámica de interés.

Esta extracción puede realizarse en forma sistemática al menos por dos medios, en ciertos aspectos coincidentes y complementarios en los restantes; el primero de ellos desarrollado por la escuela de Bruselas (Pri 72a,72b,77; Bal 75) utilizando técnicas de proyección, y por lo tanto especialmente adaptado a variedades lineales en cierto espacio -no necesariamente el espacio "natural" para la descripción del problema- tiene como

resultado ecuaciones de evolución irreversible de tipo cinético, con la participación de operadores de colisiones no hermiticos, que dan cuenta de la influencia de la subdinámica complementaria en la subdinámica en estudio.

El segundo modo de extracción de una subdinámica consiste en proveer a la variedad seleccionada para la descripción, de una dinámica por medio de la aplicación del principio variacional de mínima acción (Dir 30; Lich 79a; Ros 80 ; Ker 76; Kra 81) . El método resulta apropiado tanto para ser utilizado con variedades diferenciales lineales como no-lineales. Las ecuaciones así obtenidas resultan del tipo hamiltoniano y no contienen por lo tanto términos de disipación superiores.

La extracción de la subdinámica en un problema concreto conlleva un cierto número de suposiciones, basadas en argumentos heurísticos, de difícil evaluación a priori, surgiendo de esta suerte de descontrol de las aproximaciones la necesidad de estudiar los límites de validez de las mismas tanto en cuanto a su fidelidad en la descripción del problema original como a su consistencia y la relación consistencia-fidelidad.

En la aplicación a procesos de naturaleza cuántica el método más utilizado resulta el de Hartree Fock dependiente del tiempo (Ker 76; Lich 79a; Neg 82) que utiliza la variedad de Grassmann (Row 80a) como el conjunto de funciones que contienen la dinámica colectiva del sistema. El estudio del método HFDT ha sido realizado en distintos contextos y está lejos aún de ser agotado el tema.

Un punto de particular importancia resulta el tratamiento que las distintas aproximaciones dan a las simetrías, en especial el método de Hartree Fock dependiente del tiempo (HFDT), dado que las constantes de movimiento asociadas a tales simetrías constituyen un punto de comparación para establecer la consistencia del método de aproximación, e incluso guiar los desarrollos hacia la incorporación de algunos efectos importantes en la subdinámica de muchos cuerpos.

La necesidad de argumentar sobre la fidelidad de las aproximaciones lleva a estudiar la aplicación de éstas a modelos sencillos que

conservan los aspectos esenciales del tipo de sistemas que representan y a la vez pueden ser resueltos exactamente. La comparación de los resultados exactos con los aproximados en esta suerte de laboratorios de ensayos de teorías es uno de los pasos ineludibles para una mayor comprensión de los distintos métodos.

Aún cuando desde un punto de vista estrictamente teórico, el análisis en estos modelos-laboratorios puede parecer, y de hecho ser, suficiente para determinar las características de una formulación, no se agotan allí las dificultades para llevar los desarrollos teóricos al punto de ser comparables con los resultados experimentales, meta final de toda teoría.

En este aspecto se ha utilizado en el presente trabajo, como aplicación de los elementos desarrollados, el estudio de las colisiones nucleares entre iones, limitado a partículas alfa por la disponibilidad de facilidades para el cómputo.

De acuerdo con los lineamientos básicos aquí introducidos, en este trabajo de tesis se desarrolla en el capítulo 2 la formulación de la dinámica en un espacio de fases simpléctico partiendo del principio de mínima acción para obtener la subdinámica. En el capítulo 3 se aborda el estudio de HFDT desde las distintas perspectivas para su formulación, introduciéndose en el capítulo 4 el problema de las simetrías, y desarrollándose el método que denominamos Dinámica Variacional que Conserva la Simetría (DVCS) como una alternativa dentro del conjunto de tratamientos variacionales. El capítulo 5 corresponde a la aplicación y comparación de los métodos HFDT y DVCS en el modelo de Lipkin-Meshkov-Glick (LMG) (Lip 65) estudiándose en él la consistencia y fidelidad de ambas aproximaciones para el caso.

En el capítulo 6 se presentan los principales aspectos de la aproximación de HFDT aplicada a las colisiones entre iones, estudiándose en especial la evolución con el tiempo de los valores medios de la dispersión del impulso lineal y de la componente perpendicular al plano de reacción del impulso angular.

Finalmente se presenta en el capítulo 7 la formulación del

método DVCS aplicado a las colisiones de iones poniendo el énfasis en la conservación del impulso angular. Se discute con argumentos analíticos y numéricos, el alcance del método y su viabilidad, estableciéndose recomendaciones para su uso. El capítulo 8 corresponde al resumen y conclusiones de esta tesis.

2. PRINCIPIO VARIACIONAL Y DINAMICA SOBRE VARIEDADES.

2.1 El principio variacional.

2.1.1 Ecuaciones Canónicas.

Las ecuaciones de evolución de un sistema cuántico de N partículas pueden ser obtenidas del principio de mínima acción asociando con cada partícula un campo clásico ^(Ker 76). El lagrangiano del sistema se escribe como:

$$\mathcal{L}(\langle \psi |; | \psi \rangle) = i \langle \psi | \frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (2.1)$$

donde $| \psi \rangle$ es el vector del espacio de Hilbert que representa el estado del sistema.

$(\langle \bar{r}_1 \dots \bar{r}_N | \psi \rangle = \Psi(\bar{r}_1 \dots \bar{r}_N)$ es el campo clásico asociado.)

y H es el hamiltoniano que rige la dinámica.

$\frac{\partial}{\partial t}$ representa la derivada parcial respecto del tiempo, habiéndose tomado $\hbar=1$ (elección que tendrá validez a lo largo de esta tesis a menos que se señale lo contrario.)

El principio de mínima acción resulta entonces

$$\delta \int_0^t \mathcal{L}(\langle \psi |; | \psi \rangle) dt = 0 \quad (2.2)$$

De su expresión se obtiene, en el caso en que se incluyen como posibles variaciones del vector $| \psi \rangle$ a los elementos de un subespacio total del espacio de Hilbert asociado con H ,

$$i \langle \delta \psi | \frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle - \langle \delta \psi | H | \psi \rangle = 0 \quad (2.3a)$$

$$\text{o sea} \quad i \frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle = H | \psi \rangle \quad (2.3b)$$

que no es otra que la ecuación de Schrödinger.

Debe tenerse en cuenta, sin embargo, al utilizar el principio variacional (2.2) con vectores de estado restringidos en su variación, que éste no tiene una interpretación inmediata, ya que de la estacionariedad de

la acción no se extrae una condición de mínimo para el valor medio de un operador (como en el caso estático).

En primera instancia cabe esperar que este principio variacional proporcione aproximaciones de tiempos cortos, que mejoran en la medida en que se amplía el conjunto de estados en consideración y se involucran en la descripción las principales variables del sistema físico. (En el punto 2.2.3 veremos al principio variacional como aproximación semiclásica).

En términos de funciones de onda, la ecuación (2.3) puede ponerse como :

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}) = \int \delta \Psi^* \mathcal{H}(\Psi^*, \Psi) \quad (2.3c)$$

donde

$$\mathcal{H}(\Psi^*, \Psi) = \int d\vec{r} \Psi^*(\vec{r}) H \Psi(\vec{r})$$

La ecuación de Schrödinger, (2.3), puede ser expresada en función de dos campos canónicamente conjugados (Ker 76)

$$\phi = \sqrt{2} \operatorname{Re} \Psi$$

$$\pi = \sqrt{2} \operatorname{Im} \Psi$$

resultando las ecuaciones canónicas

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \pi}$$

$$\frac{\partial \pi}{\partial t} = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi}$$

(2.3d)

Las ecuaciones de campo promedio, en particular las de Hartree Fock dependiente del tiempo (en adelante HFDT) y Hartree dependiente del tiempo (HDT) así como otras aproximaciones, pueden ser interpretadas y deducidas a través de distintas parametrizaciones restringidas de la función de onda exacta de N-cuerpos.

2.1.2 Las constantes de movimiento.

Dependiendo de las simetrías del hamiltoniano y de la para-

metrización de la función de onda e vector de estado, existen en cada aproximación valores medios de observables que permanecen constantes en función del tiempo.

Siendo el hamiltoniano hermitico e independiente del tiempo (sistema aislado) se obtienen en forma inmediata dos integrales de movimiento, con independencia de la parametrización, ellas corresponden a la normalización y a la energía.

La conservación de la norma está relacionada con el hecho de que las representaciones de la mecánica cuántica se realizan por rayos (Row 80b, 82) (más que por vectores) y por consiguiente siempre es posible incluir en la clase de funciones considerada, todas las funciones que constituyen el rayo. (Entendemos aquí por rayo al conjunto de estados pertenecientes a una misma clase según la relación de equivalencia $|\psi\rangle \equiv e^{i\phi}|\psi\rangle$).

Al tomar en cuenta una variación de la fase global, ϕ , se obtiene:

$$|\delta\psi\rangle = i\delta\phi|\psi\rangle \quad (2.5)$$

y por lo tanto, utilizando (2.3a) anotamos

$$i\langle\delta\psi|\dot{\psi}\rangle - i\langle\dot{\psi}|\delta\psi\rangle = \langle\delta\psi|H|\psi\rangle + \langle\psi|H|\delta\psi\rangle$$

(donde $\frac{\partial A}{\partial t} \equiv \dot{A}$)

que implica para la variación considerada

$$\frac{d\langle\psi|\psi\rangle}{dt} = 0 \quad (2.6)$$

La conservación de la energía se asienta en el hecho de que el hamiltoniano es el generador de la evolución, supuesto que no depende del tiempo se tiene:

$$\frac{d\langle\psi|H|\psi\rangle}{dt} = \langle\dot{\psi}|H|\psi\rangle + \langle\psi|H|\dot{\psi}\rangle \quad (2.7)$$

Supongamos que $|\psi\rangle$ depende de un conjunto de parámetros reales $\{x\}$, resulta de (2.2)

$$i \left(\left\langle \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \middle| \dot{\psi} \right\rangle - \left\langle \dot{\psi} \middle| \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \right\rangle \right) = \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \middle| H \middle| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \middle| H \middle| \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \right\rangle \quad (2.8)$$

multiplicando (2.8) por x_j y sumando

$$\begin{aligned} i \sum_j \left(\left\langle \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \middle| \dot{\psi} \right\rangle - \left\langle \dot{\psi} \middle| \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \right\rangle \right) x_j &= \\ &= \sum_j \left(\left\langle \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \middle| H \middle| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \middle| H \middle| \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \right\rangle \right) x_j \end{aligned}$$

que puede expresarse como :

$$i \left(\langle \dot{\psi} | \dot{\psi} \rangle - \langle \dot{\psi} | \dot{\psi} \rangle \right) = 0 = \frac{d}{dt} \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (2.9)$$

donde se ha utilizado que

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \sum_j \left| \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \right\rangle \dot{x}_j \quad (2.10)$$

Las restantes constantes de movimiento dependen de la parametrización utilizada. Supongamos que es posible escribir una dada variación en función de un operador A hermitico ($A=A^\dagger$) e independiente del tiempo explícitamente, como :

$$|\delta_A \psi\rangle = i \delta x A |\psi\rangle \quad (2.11)$$

o lo que es equivalente: si $|\psi\rangle$ pertenece al conjunto de estados utilizados y $e^{ixA} |\psi\rangle$ también pertenece a ese conjunto cualquiera sea el vector $|\psi\rangle$, en un entorno de $x=0$, entonces

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle &= \left(\langle \dot{\psi} | A | \psi \rangle + \langle \psi | A | \dot{\psi} \rangle \right) \\ &= -i \left(\left\langle \dot{\psi} \middle| \frac{\partial \psi}{\partial x} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial x} \middle| \dot{\psi} \right\rangle \right) \end{aligned}$$

y en virtud de (2.8) y (2.11)

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle = i \langle \psi | [A, H] | \psi \rangle \quad (2.12)$$

donde $[A, H] = AH - HA$

Por lo tanto si existe una variación posible del vector de estado asociada según (2.11) con el operador A , $\langle \psi | A | \psi \rangle$ (su valor medio) será una constante de movimiento en la aproximación utilizada si $[A, H] = 0$, es decir si A es un operador constante (en la representación de Heisenberg) del sistema resuelto exactamente.

La norma, la energía y los observables que conmutan con el hamiltoniano y que a la vez están asociados con variaciones posibles de los vectores de estado restringidos utilizados, son las únicas constantes de movimiento que el método variacional garantiza.

No obstante esto, cabe esperar que si en la parametrización de las funciones de onda del sistema se han tenido en cuenta los principales grados de libertad, los restantes observables que conmuten con el hamiltoniano presentarán variaciones a lo largo del tiempo de poca significación.

2.2 Dinámica simpléctica.

2.2.1 Dinámica hamiltoniana y geometría simpléctica.

La dinámica simpléctica en un espacio de fases caracteriza a las ecuaciones de Hamilton de la mecánica clásica (Arn 78; Abr 78). Las ecuaciones equivalentes a las leyes de Newton en la formulación de Hamilton son (Gol 72),

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial q} \end{aligned} \quad (2.13a)$$

éstas pueden expresarse en términos de la métrica que caracteriza a una forma diferencial bilineal antisimétrica, es decir simpléctica, J ,

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

(expresada en término de las coordenadas locales)

Las ecuaciones (2.13) resultan

$$\frac{d}{dt} (q, p)^T = J \cdot \nabla f(q, p) \quad (2.13b)$$

donde

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial q_n}, \frac{\partial}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial p_m} \right)$$

Un cambio de coordenadas resulta canónico si deja invariante la métrica J .

La dinámica obtenida del principio variacional (2.2) puede ser interpretada como una dinámica hamiltoniana sobre un espacio de fases de métrica simpléctica (Row 80a). Para justificar esta afirmación supongamos que hemos restringido el espacio de Hilbert en que se desarrolla el problema a una variedad, M , que contiene un conjunto de funciones de ondas parametrizadas por un número par de coordenadas $\{x\}$.

En este punto es conveniente recordar que si la variedad diferencial no es lineal (no es un subespacio del espacio de Hilbert) se pierde en la aproximación el principio de superposición, si bien puede redundar en una mejor descripción del problema.

Sea entonces $|\psi(x)\rangle$ el vector de estado, a partir de la ecuación (2.8) puede expresarse :

$$\sum_{\mu} \sigma_{\nu\mu} \dot{x}_{\mu} = \frac{\partial f(x)}{\partial x_{\nu}} \quad (2.15)$$

donde

$$\sigma_{\nu\mu} = i \left(\left\langle \frac{\partial \psi}{\partial x_{\nu}} \left| \frac{\partial \psi}{\partial x_{\mu}} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial x_{\mu}} \left| \frac{\partial \psi}{\partial x_{\nu}} \right\rangle \right) \quad (2.16)$$

es la métrica simpléctica.

La ecuación (2.15) resulta resoluble sólo si $\sigma_{\nu\mu}$ tiene inversa ($\sigma^{\nu\mu}$), entonces

$$\dot{x}_{\mu} = \sum_{\nu} \sigma^{\mu\nu} \frac{\partial f}{\partial x_{\nu}} \quad (2.17)$$

La condición de que el número de parámetros (coordenadas) sea par puede comprenderse inmediatamente al considerar a σ una matriz antisimétrica de dimensión $n \times n$, con n impar; entonces $\text{Det}(\sigma) = \text{Det}(\sigma^T) =$

= $(-)^n \text{Det}(\sigma) = 0$, es decir que en ese caso existe al menos un autovalor 0 (cero) y σ no es invertible.

Puede enunciarse entonces ^(Row 80a) que el principio variacional tiene caminos extremos solamente sobre variedades diferenciales simplécticas.

La métrica σ (2.16) permite definir un corchete de Poisson de la siguiente forma :

$$\{F, G\} = \frac{\partial F}{\partial x_\nu} \sigma^{\nu\mu} \frac{\partial G}{\partial x_\mu} \quad (2.18)$$

(notación de sumas de Einstein)

El corchete $\{, \}$ es una forma bilineal antisimétrica que cumple con la identidad de Jacobi

$$\begin{aligned} & \{ \{F, G\}, K \} + \{ \{G, K\}, F \} + \{ \{K, F\}, G \} = \\ & = F^\mu G^\lambda K^\nu \left(\frac{\partial \sigma_{\lambda\nu}}{\partial x_\mu} + \frac{\partial \sigma_{\nu\mu}}{\partial x_\lambda} + \frac{\partial \sigma_{\mu\lambda}}{\partial x_\nu} \right) \end{aligned} \quad (2.19)$$

donde

$$F^\mu = \frac{\partial F}{\partial x_\nu} \sigma^{\nu\mu}$$

En efecto, de la ecuación (2.16) que define a σ se sigue inmediatamente que

$$\frac{\partial \sigma_{\lambda\nu}}{\partial x_\mu} + \frac{\partial \sigma_{\nu\mu}}{\partial x_\lambda} + \frac{\partial \sigma_{\mu\lambda}}{\partial x_\nu} = 0 \quad (2.20)$$

que prueba la identidad de Jacobi

$$\{ \{F, G\}, K \} + \{ \{K, F\}, G \} + \{ \{G, K\}, F \} = 0 \quad (2.21)$$

Finalmente la ecuación de movimiento de un observable F vendrá dada por

$$\dot{F} = \{H, F\} \quad , \quad \langle \psi(x) | F | \psi(x) \rangle \quad (2.22)$$

y en el caso particular en que la variedad M sea el espacio de Hilbert la ecuación (2.22) resulta el Teorema de Ehrenfest.

2.2.2 Estados coherentes .

Existen varias formas de asociar coordenadas locales a un sistema. Estas pueden ser introducidas por ejemplo, a través de un conjunto de observables $\{A^j\}$, cuyos valores medios $\{\langle \psi | A^j | \psi \rangle\}$, sirven para determinar unívocamente los estados de la variedad M en un entorno del punto considerado (el dominio de la carta de coordenadas).

Otra forma de introducir coordenadas es por medio de la acción de los operadores de un grupo de Lie, G (Gil 74a; Ham 64).

Las propiedades de la descripción serán en este caso reflejo de las correspondientes al grupo; esta virtud ha hecho de las parametrizaciones mediante la acción de grupos de Lie la forma más utilizada (Gil 72, 74b 79a, 79b; Kra 81; Kur 80, 81a, 81b, 82a, 82b; Row 80b, 82) y fructífera de extraer subdinámicas de sistemas de muchos cuerpos.

Sea G un grupo de Lie que actúa unitariamente sobre los vectores del espacio de Hilbert considerado y $|\psi(0)\rangle$ un vector de dicho espacio, consideremos la clase de funciones que se obtienen por la acción de G sobre $|\psi(0)\rangle$;

$$M = \{ |\psi(g)\rangle = g |\psi(0)\rangle ; g \in G \} \quad (2.23)$$

la variedad M depende de $|\psi(0)\rangle$ y de G , y está constituida por los estados coherentes generalizados (Gil 72, 74a; Per 72, 75).

Existen en M (en principio) varios estados $|\psi(g)\rangle$ que difieren a lo sumo en una fase, dado que si existe L , $L \subset G$, que es un subgrupo de G , todo elemento $g \in G$ puede expresarse como

$$g = k \circ l \quad (2.24)$$

donde $l \in L$ y $k \in G/L$.

En particular si consideramos el grupo de estabilidad de $|\psi(0)\rangle$, es decir el conjunto de elementos de G que dejan invariante a $|\psi(0)\rangle$ expto una fase ($L = \{ g \in G / g |\psi(0)\rangle = e^{i\alpha(g)} |\psi(0)\rangle \}$) obtenemos que los estados que resultan físicamente de interés están en correspondencia biunívoca con

los elementos k , (2.24), es decir los elementos del grupo cociente $K=G/L$. Recordemos aquí que el grupo cociente (Gil 74a; Ham 64) tiene como elementos a las coclases de L en G , siendo el conjunto L la identidad.

Esta relación introduce naturalmente las coordenadas en la variedad M en razón de su difeomorfismo con G/L (Row 80a; Gil 74a) de la siguiente manera. Observemos que en términos de álgebras de Lie podemos escribir

$$\mathfrak{g} = \mathfrak{l} \oplus \mathfrak{k} \quad (2.25)$$

donde \mathfrak{g} es el álgebra correspondiente a G , \mathfrak{l} la subálgebra correspondiente a L y \mathfrak{k} el complemento de \mathfrak{l} en \mathfrak{g} . Luego en un entorno de la identidad resulta

$$|\psi(x)\rangle = \exp\{x_\nu X_\nu\} |\psi(0)\rangle \quad (2.26)$$

donde $X_\nu \in \mathfrak{k}$, proveyendo las $\{x_\nu\}$ el conjunto de coordenadas locales. Dada la hipótesis de que G actúa unitariamente, resulta X_ν antihermitico.

La métrica simpléctica que se obtiene en este caso es ;

$$\sigma_{\mu\nu} = -i \langle \psi(0) | [X_\mu, X_\nu] | \psi(0) \rangle \quad (2.27)$$

y

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_\mu} = \langle \psi(0) | [H, X_\mu] | \psi(0) \rangle \quad (2.28)$$

El ejemplo clásico de este tipo de parametrización lo constituye el conjunto de los determinantes de Slater que se identifica con la variedad de Grassmann y con el grupo cociente $U(m)/(U(N) \otimes U(m-N))$ donde m es el número de estados considerados, N el número de estados ocupados y $(m-N)$ el número de vacantes.

En este caso, los términos estado ocupado y vacante están referidos a las partículas individuales del sistema, con cuyos vectores de estado de partícula independiente se construye el determinante de Slater que representa el estado de N cuerpos sin más correlaciones que las inducidas por la simetría de intercambio. Este punto será tratado con mayor detalle

en el capítulo 3.

2.2.3 Deducción del principio variacional a partir de la integral de camino.

Como se ha señalado en 2.1.1 el principio variacional (2.2) tiene una interpretación en términos de aproximación semiclásica; antes de llegar a ella debemos profundizar en las propiedades de los estados coherentes.

Estos estados fueron primeramente introducidos por Glauber (Gla 63) en relación con el grupo N_4 (asociado con los operadores a^+ , a , H , I del oscilador armónico), posteriormente Arachi y colaboradores (Are 72) estudiaron los estados coherentes atómicos en relación con el grupo $SU(2)$, siendo Perelomov (Per 72,75) quien los extendió a grupos de Lie arbitrarios. Más adelante Gilmore (Gil 74b) generalizó el tratamiento de Perelomov demostrando la existencia de conjuntos de estados coherentes generalizados asociados con grupos dinámicos de transformaciones cualesquiera, no necesariamente de Lie.

Para nuestros fines actuales, siguiendo a Perelomov (Per 72) podemos formar el siguiente operador

$$A = \int d\mu(g) \quad g |\psi(0)\rangle \langle \psi(0)| g^{-1} \quad (2.29)$$

donde $g \in G/L$ y μ es la medida invariante del grupo cociente (generalmente extraída de la correspondiente para el grupo G) y $|\psi(0)\rangle$ un vector asociado con una representación irreducible de G .

Observamos que si $h \in G/L$

$$h A h^{-1} = \int d\mu(g) \quad hg |\psi(0)\rangle \langle \psi(0)| (hg)^{-1}$$

y utilizando la invariancia de μ

$$h A h^{-1} = \int d\mu(k) \quad k |\psi(0)\rangle \langle \psi(0)| k^{-1} = A \quad (2.30)$$

donde $k = h \circ g$.

Si la representación en la que se está operando es irreducible se obtiene, por el lema de Schur (Gil 74a, Ham 64) (ver apéndice A)

$$A = d I \quad (2.31)$$

donde I es la identidad

$$y \quad d = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \int |\langle \Psi(0) | \Psi(g) \rangle|^2 d\mu(g) .$$

Utilizando esta última relación se puede expandir cualquier estado de la representación en la base continua $\{|k\rangle | \Psi(0)\rangle = |\Psi(k)\rangle\}$ que tiene como elementos a los estados coherentes generalizados.

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{d} \int d\mu(k) |\Psi(k)\rangle C(k) \quad (2.32)$$

$$\text{donde } C(k) = \langle \Psi(k) | \Phi \rangle, \quad \langle \Phi | \Phi \rangle = \frac{1}{d} \int d\mu(k) |C(k)|^2$$

la función $C(k)$ debe satisfacer

$$C(k) = \int d\mu(k') K(k, k') C(k') \quad (2.33)$$

$$\text{con } K(k, k') = \frac{1}{d} \langle \Psi(k) | \Psi(k') \rangle \quad (2.34)$$

$K(k, k')$ se denomina el "núcleo reproductor" ya que

$$K(x, z) = \int d\mu(y) K(x, y) K(y, z) \quad (2.35)$$

Surge inmediatamente de (2.32) que el conjunto de estados coherentes constituyen una base sobrecompleta.

Con ayuda de la relación (2.31) y tomando pasos de tiempo discretos (a posteriori infinitesimales) puede resolverse formalmente la ecuación de evolución de Schrödinger

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle \quad (2.3b)$$

La solución formal de (2.3b) puede expresarse a través de la fórmula del producto de Trotter ^(Schu 81 ; Ree 80)

$$|\Psi(t')\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - i \frac{H}{N} (t'-t) \right)^N |\Psi(t)\rangle \quad (2.36)$$

llamando $\Delta = (t'-t)$ e insertando la identidad (2.31) N veces antes de pasar al

límite se obtiene

$$|\phi(t+\Delta)\rangle = \prod_{j=1}^{N+1} \int \frac{d\mu(k_j)}{d} |k_1\rangle \langle k_1| \left(1 - \frac{iH\Delta}{N}\right) |k_2\rangle \langle k_2| \dots \dots$$

$$\dots \dots |k_N\rangle \langle k_N| \left(1 - \frac{iH\Delta}{N}\right) |k_{N+1}\rangle \langle k_{N+1}| \phi\rangle$$

utilizando que $\langle k_j | k_j \rangle = 1$ puede transformarse en

$$|\psi(t+\Delta)\rangle = \prod_{j=1}^{N+1} \int \frac{d\mu(k_j)}{d} |k_1\rangle \left\{ \langle k_1 | k_2 \rangle - \langle k_2 | k_2 \rangle + \right.$$

$$\left. + 1 - i \frac{\Delta}{N} \langle k_1 | H | k_2 \rangle \right\} \dots \dots \left(\langle k_j | k_{j+1} \rangle - \langle k_j | k_j \rangle + \right.$$

$$\left. + 1 - i \frac{\Delta}{N} \langle k_j | H | k_{j+1} \rangle \right) \dots \dots \langle k_{N+1} | \phi \rangle \}$$

aproximando

$$1 - i \frac{\Delta}{N} \langle k_j | H | k_{j+1} \rangle \simeq e^{i \frac{\Delta}{N} \langle k_j | H | k_{j+1} \rangle}$$

y definiendo

$$\langle k_j | k_{j+1} \rangle - \langle k_j | k_j \rangle \equiv \frac{\Delta}{N} \langle k_j | \dot{k}_j \rangle$$

$$y \quad t \equiv (N-j+1) \frac{\Delta}{N},$$

se obtiene en el límite $N \rightarrow \infty$ la integral de camino (Kur 80 ; Rei 79 ; Schu 81)

$$\int \mathcal{D}(\mu) e^{i S(t, t')} |k(\Delta)\rangle \langle k(0)| \quad |\phi\rangle = |\phi(t+\Delta)\rangle \quad (2.37)$$

donde

$$S = \int_{t'}^t d\tau (i \langle k | \dot{k}(\tau) \rangle - \langle k | H | k \rangle) \quad (2.38)$$

La aproximación semiclassical resulta de considerar estacionaria la fase

$$\delta \int_{t'}^{t'+\Delta} (i \langle k | \dot{k} \rangle - \langle k | H | k \rangle) = 0 \quad (2.39)$$

que no es otra condición que el principio variacional (2.2).

La expresión (2.39) implica por su deducción que las solucio-

nes que de ella se obtienen son válidas para tiempos cortos.

Debemos señalar, sin embargo que ese tiempo corto puede ser el necesario (y suficiente) para la descripción del fenómeno de interés y lo que es aún más importante, que está ampliamente justificado cuando la concepción física del problema establece separaciones entre escalas macroscópicas y microscópicas pudiendo hablarse de subdinámicas casi-independientes (Row 80a ; Ros 80).

3. HARTREE FOCK DEPENDIENTE DEL TIEMPO (HFDT)

3.1 Fundamentos y aproximaciones.

3.1.1 Fundamentos y aplicación en física nuclear.

La aproximación de Hartree-Fock dependiente del tiempo consiste, básicamente, en considerar que cada partícula está sometida al potencial promedio que las restantes generan sobre ella y despreciar otros tipos de interacciones (dos o más partículas en colisión debido a la interacción residual).

Siendo una teoría de formulación microscópica proporciona, en principio, toda la dinámica colectiva, dado que cada partícula sólo es afectada por las restantes en promedio. De lo cual resulta que todas sufren la influencia de un potencial semejante reforzándose el comportamiento colectivo (Neg 82).

En el caso de la dinámica nuclear, HFDT contiene, además de la información relativa a la translación de partes macroscópicas del sistema, la descripción de los grados de libertad asociados con la forma y las deformaciones de la superficie de los núcleos.

La propuesta de que el campo promedio es el principal responsable de la dinámica nuclear está fundamentada en la vigencia del principio de exclusión de Pauli (Neg 82; Dav 82).

A pesar de que la interacción nucleón-nucleón pertenece al dominio de las interacciones fuertes su efecto se ve reducido en la dinámica de baja energía ($E_{\text{cinética}} / A < 10 \text{ MeV}$) debido a la saturación del sistema, que tiene lugar por tratarse de fermiones y que bloquea las colisiones (Boh 69).

Los caminos libres medios para nucleones incidentes en materia nuclear con energías, ϵ , cercanas al nivel de Fermi pueden estimarse (Neg 82 y referencias en él) como:

$$\lambda = \frac{4}{3} \frac{1}{\langle \sigma \rangle} \left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon} \right)^2 \quad (3.1)$$

donde σ = sección eficaz por nucleón

ρ = densidad
 ϵ_F = energía de Fermi

Valores calculados en materia nuclear utilizando potenciales de interacción fenomenológicos (Her 83) (ver sección 6.1) estiman estos caminos libres medios en :

$$\begin{aligned} \lambda > 60 \text{ fm} & \quad (\epsilon < \epsilon_F + 10 \text{ MeV}, \text{ Temp. gas} \sim 1 \text{ MeV}) \\ \lambda > 15 \text{ fm} & \quad (\epsilon < \epsilon_F + 10 \text{ MeV}, \text{ Temp. gas} \sim 4 \text{ MeV}) \end{aligned}$$

Estos valores son comparables (y en muchos casos mayores) que los diámetros de los núcleos, por lo que corresponde esperar que las colisiones de a pares sean despreciables, quedando como responsable de la dinámica nuclear el campo medio.

3.1.2 Los determinantes de Slater y HFDT.

Desde el punto de vista de la dinámica variacional, introducido en el capítulo 2, la aproximación de HFDT corresponde a utilizar como variedad diferencial al conjunto de los determinantes de Slater (Lich 79a), o dicho de otra forma los puntos de una variedad de Grassmann (Row 80a).

Considerando el espacio de Hilbert completo al generado por el producto tensorial de N estados de una partícula completamente antisimetrizado, siendo estos N estados elegidos de un espacio de dimensión n , puede decirse que el espacio de Hilbert del problema de N -fermiones está constituido por los vectores de la N -ésima representación fundamental del grupo $SU(n)$ (Lich 78).

La variedad del espacio de Hilbert utilizada como conjunto de funciones de onda en el principio variacional es la que se obtiene mediante la acción del grupo unitario $SU(n)$ sobre un vector de estado de referencia.

Recurriendo al lenguaje de segunda cuantificación, a fin de ser más explícito, el estado de referencia se expresa como:

$$|\Psi(0)\rangle \equiv \prod_{i=1}^N a_i^\dagger |0\rangle \quad (3.2)$$

con a_i^\dagger operadores de creación del estado i -ésimo de

partícula independiente, fermión en este caso.

La acción de los operadores del álgebra $SU(m)$ sobre este estado se resume en :

$$\begin{aligned} a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma'} | \Psi(0) \rangle &= \delta_{\sigma\sigma'} | \Psi(0) \rangle \\ a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} | \Psi(0) \rangle &= 0. \\ a_{\nu}^{\dagger} a_{\sigma} | \Psi(0) \rangle &\neq 0. \\ a_{\sigma}^{\dagger} a_{\nu} | \Psi(0) \rangle &\neq 0. \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde a_{σ}^{\dagger} crea en un estado ocupado y
 a_{ν}^{\dagger} crea en un estado vacante.

Puesto que $| \Psi(0) \rangle$ es autoestado de todos los operadores $a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma'}$ y $a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}$ que generan el grupo $U(N) \times U(n-N)$ es éste el grupo de estabilidad (Row 80a ; Kur 80 ; Gil 74a). Los estados de la variedad de Grassmann se identifican con los elementos del grupo cociente

$$U(n) / (U(N) \times U(n-N))$$

De este razonamiento surge que serán constantes de movimiento en la aproximación de HFDT los observables de un cuerpo que conmuten con el hamiltoniano exacto (y por lo expuesto en el capítulo 2, la energía y la norma).

Las ecuaciones HFDT se expresan con facilidad a partir de las fórmulas (2.27) y (2.28) que relacionan la métrica simpléctica y el gradiente de la energía con los conmutadores de los operadores del álgebra. Si se considera los operadores hermiticos

$$X_{\nu\sigma} = (a_{\nu}^{\dagger} a_{\sigma} + a_{\sigma}^{\dagger} a_{\nu}) \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (3.4a)$$

$$P_{\nu\sigma} = i(a_{\nu}^{\dagger} a_{\sigma} - a_{\sigma}^{\dagger} a_{\nu}) \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (3.4b)$$

y sus conmutadores

$$[X_{\sigma\nu}, X_{\sigma'\nu'}] = \frac{\delta_{\nu\nu'}}{\sqrt{2}} (a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma'} - a_{\sigma'}^{\dagger} a_{\sigma}) + \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{\sqrt{2}} (a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} - a_{\nu'}^{\dagger} a_{\nu}) \quad (3.5a)$$

$$[P_{\sigma\nu}, P_{\sigma'\nu'}] = -\frac{1}{2} (\delta_{\sigma\sigma'} (a_{\nu}^+ a_{\nu'} - a_{\nu'}^+ a_{\nu}) + \delta_{\nu\nu'} (a_{\sigma}^+ a_{\sigma'} - a_{\sigma'}^+ a_{\sigma})) \quad (3.5b)$$

$$[X_{\sigma\nu}, P_{\sigma'\nu'}] = \frac{i}{2} (\delta_{\sigma\sigma'} (a_{\nu}^+ a_{\nu'} - a_{\nu'}^+ a_{\nu}) + \delta_{\nu\nu'} (a_{\sigma}^+ a_{\sigma'} + a_{\sigma'}^+ a_{\sigma})) \quad (3.5c)$$

teniendo en cuenta las expresiones (2.27) y (3.3) puede obtenerse la métrica correspondiente a los pares coordenada-impulso, $(q_{\sigma\nu}, p_{\sigma\nu})$, asociados con los operadores $X_{\sigma\nu}$ y $P_{\sigma\nu}$ respectivamente, como :

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{q_{\sigma\nu}, q_{\sigma'\nu'}} = 0 & \sigma_{q_{\sigma\nu}, p_{\sigma'\nu'}} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\nu\nu'} \\ \sigma_{p_{\sigma\nu}, q_{\sigma'\nu'}} = -\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\nu\nu'} & \sigma_{p_{\sigma\nu}, p_{\sigma'\nu'}} = 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

Es importante observar que la métrica resulta constante, en particular que los pares de coordenadas locales $(q_{\sigma\nu}, p_{\sigma\nu})$ resultan canónicos. El gradiente de la energía se expresa formalmente como:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_{\sigma\nu}} = \langle \psi(0) | [H, X_{\sigma\nu}] | \psi(0) \rangle \quad (3.7a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_{\sigma\nu}} = \langle \psi(0) | [H, P_{\sigma\nu}] | \psi(0) \rangle \quad (3.7b)$$

quedando así planteado el sistema de ecuaciones HFDT en la forma hamiltoniana

$$\dot{q}_{\sigma\nu} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_{\sigma\nu}} \quad (3.8a)$$

$$\dot{p}_{\sigma\nu} = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_{\sigma\nu}} \quad (3.8b)$$

3.2 Jerarquía BEGKY y HFDT.

El método de HFDT ha sido deducido desde muy distintos puntos de partida, entre ellos varios principios variacionales (Kav 68; Lan 72; McL 64) además del estudiado en el capítulo anterior (2.2) propuesto originalmente por Dirac^(Dir 30), existen asimismo presentaciones a partir de la función de Green del sistema^(Mar 59) y otras^(Neg 82). Sin embargo el enfoque más frecuentemente utilizado en la literatura es el que se obtiene a partir de

la jerarquía BEGKY (Bal 75; Neg 82).

En efecto, puede decirse que las ecuaciones HFDT son el resultado de truncar la jerarquía de Bohr-Bogoliugov-Green-Kirkwood-Yvon (BEGKY) al orden más bajo.

Utilizando los operadores de densidad reducidos (Bal 75; Dor 82)

$$\rho_s \equiv \frac{N!}{(N-s)!} \text{Tr}_{s+1 \dots N} \rho_N \quad (3.9)$$

($\text{Tr} \equiv$ Traza)

y el operador de Liouville

$$L = [H,] \quad (3.10)$$

$$L_s = \sum_{i=1}^s L_0(i) + \sum_{i < j} L_1(i, j) \quad (3.11)$$

(válido para sistemas con interacciones de no más de dos cuerpos), se obtienen las dos primeras ecuaciones de la jerarquía

$$i \dot{\rho}_1 = L_0(1) \rho_1 + \text{Tr}_2 (L(1,2) \rho_2(1,2)) \quad (3.12a)$$

$$i \dot{\rho}_2(1,2) = (L_0(1) + L_0(2) + L(1,2)) \rho_2(1,2) + \text{Tr}_3 [(L_1(1,3) + L_1(2,3)) \rho_3(1,2,3)] \quad (3.12b)$$

Cuando estas ecuaciones son truncadas proponiendo

$$\rho_2(1,2) = \hat{A} \rho_1(1) \rho_1(2) \quad (3.13)$$

donde \hat{A} es el operador de antisimetrización,

el resultado es la ecuación de HFDT expresada para la matriz densidad reducida de un cuerpo

$$i \dot{\rho}_1 = L_0(1) \rho_1 + \text{Tr}_2 (\hat{A} L(1,2) \rho_1(1) \rho_1(2)) \quad (3.14)$$

Desde este punto de vista la ecuación de HFDT resulta una aproximación de tiempos cortos cuyo período de validez surge de una evaluación del orden de magnitud de los elementos de matriz del hamiltoniano residual.

3.3 HFDT como aproximación de orden cero.

Con el objetivo de estudiar los tiempos característicos de validez de la aproximación HFDT, puede ser ésta considerada como la solución de orden cero para el propagador temporal en un esquema perturbativo dependiente del tiempo (Lich 79a; Sar 83; Sol 82)

El operador de evolución de HFDT cumple la siguiente ecuación:

$$i \dot{U}_{HF} = H_{HF}(t) U_{HF}(t) \quad (3.15)$$

donde H_{HF} es el hamiltoniano autoconsistente de Hartree-Fock.

El hamiltoniano completo del sistema se escribe como:

$$H = H_{HF} + V_{res} \quad (3.16)$$

V_{res} es el hamiltoniano residual.

El operador de evolución en la representación de interacción resulta así

$$\hat{U}(t) = \hat{U}_{HF}^+(t) U(t) \quad (3.17)$$

obteniéndose para él la ecuación de evolución

$$i \dot{\hat{U}}(t) = U_{HF}^+ V_{res}(t) U = \hat{V}_{res}(t) \hat{U}(t) \quad (3.18)$$

donde

$$\hat{V}_{res} = U_{HF}^+ V_{res} U_{HF} \quad (3.19)$$

De (3.18) se sigue inmediatamente que

$$U(t) = U_{HF} - i \int_0^t dt' U_{HF}(t) \hat{V}_{res}(t') \hat{U}(t') \quad (3.20)$$

Si se selecciona una base $\{|\phi_0\rangle \dots |\phi_m\rangle\}$ para el espacio de Hilbert, donde $|\phi_0\rangle$ es el estado de HFDT inicial, se puede realizar con relativa facilidad la descripción del sistema desde la base móvil

$\{|0\rangle, \dots, |m\rangle\}$ relacionada con la anterior por (Sol 82)

$$|i\rangle \equiv U_{HF}(t) |\phi_i\rangle \quad (3.21)$$

En esta base la amplitud correspondiente a la proyección del vector de estado exacto sobre el vector $|0\rangle$ corresponde a la probabilidad de hallar al sistema en el estado predicho por HFDT.

La evolución de las amplitudes correspondientes a la base móvil viene dada por

$$a_j(t) = a_j(0) - i \sum_k \int_0^t \langle j(t') | V_{nes}(t') | k(t') \rangle a_k(t') dt' \quad (3.22)$$

Una estimación del tiempo de validez de TDEF resulta entonces de desarrollar a_0 al orden más bajo

$$a_0(t) = a_0(0) - i t \sum_{k \neq 0} \langle 0 | V_{nes} | k \rangle a_k(0) - \frac{t^2}{2} \langle 0 | V_{nes}^2 | 0 \rangle a_0(0) \quad (3.23)$$

supuesto que a $t=0$ $a_k = \delta_{0k}$, se obtiene como primera aproximación

$$a_0 = 1 - \frac{t^2}{2} \langle 0 | V_{nes}^2 | 0 \rangle = 1 - \frac{t^2}{2} \sum_k |\langle 0 | V_{nes} | k \rangle|^2$$

resultando un tiempo mínimo de validez de (Sol 82)

$$\tau_{min} = \frac{1}{(\langle 0 | V_{nes}^2 | 0 \rangle)^{1/2}} \quad (3.24)$$

Este resultado es similar al hallado por Lichtner y Griffin (Lich 79b).

Otro punto de vista que muestra la equivalencia de los criterios de validez correspondientes a los desarrollos como teoría de perturbaciones y la deducción por medio de la jerarquía BEGKY es considerar la aproximación cinética e incorporar el término de colisión, $K \propto |V|^2$ que implica un tiempo de relajación $\tau_{relajación} \sim |V|^{-2}$, siendo éste el tiempo durante el cual tiene lugar la propagación libre regida por el liouvilliano auto-consistente.

Tanto esta perspectiva como la expresada en la sección 2.2.3 señalan a HFDT como una aproximación de tiempos cortos, sin embargo la determinación de su tiempo de validez difiere al menos conceptualmente.

En efecto, para la determinación de τ_{min} (3.24) se incluyen

todas las frecuencias posibles con independencia de las amplitudes con las que serán excitadas predominando por lo tanto las altas frecuencias. Sin embargo, visto desde la perspectiva de la sección (2.2.3) como una extracción de la subdinámica colectiva, HFDT describe los modos de evolución lenta a los cuales se superpone (con promedio cero y en forma complementaria) los modos intrínsecos que se caracterizan por sus altas frecuencias. De esta forma el tiempo ζ_{min} aquí calculado resulta representativo de los modos intrínsecos y no de los modos colectivos, planteándose la necesidad de hallar estimaciones consistentes con la aproximación.

3.4 Aplicaciones y otros estudios.

Como se señalara en la sección 3.1, uno de los campos (si bien no el único) en que se han realizado las aplicaciones del método de HFDT es el de la física nuclear, en especial el estudio de las colisiones entre iones tanto livianos como pesados (Dav 82; Neg 82 y referencias en ellos).

Desde los primeros programas unidimensionales (Bon 76; K5h 79) se progresó rápidamente, en paralelo con el avance de los equipos de cómputo, hacia los cálculos tridimensionales de colisiones de iones livianos (Bon 78; Flo 78).

Luego de estos primeros cálculos realistas que permitieron una mejor comparación de las predicciones con los resultados experimentales, se ha desarrollado el método en distintas aproximaciones (modelos con simetría axial (Koo 77; Dav 82), modelos bidimensionales con una coordenada congelada (Dev 78a,b; Koo 78; Dav 82), etc.) extendiéndose también su aplicación a todas las regiones de la tabla periódica (Dav 82; Neg 82 y referencias en ellos) y a una variedad de asimetrías de masa en el canal de entrada.

Un segundo tipo de estudios se ha desarrollado recientemente explotando la asociación de la teoría de grupos y HFDT (Gil 83), en particular con relación a hamiltonianos algebraicos, así como también aplicaciones a física molecular (Roo 82).

Se han realizado, asimismo, varios estudios tendientes a establecer la validez y consecuencias de la aproximación TDHF, por lo general

utilizando modelos resolubles exactamente con el fin de referir HFDT a la solución exacta (Gri 76; Lich 79b,72; Sar 83; Ros 82; Sol 82).

Estos estudios han puntualizado, entre otras cosas, el sentido semiclásico de la aproximación (Gil 79b; Kur 80,81a; Rei 79), estudiando la posibilidad de recuantificar las soluciones (Kan 79,80b; Kur 81b,82a), la influencia de los efector colisionales (Dor 82) y ejemplificando su carácter en algunos modelos resolubles (Kri 77; Ros 82; Sol 82).

Debe señalarse que esta enumeración dista mucho de ser completa.

4. CONSERVACION DE LA SIMETRIA Y METODO DVCS.

4.1 El problema de las simetrías.

Como se afirmara en el capítulo 2, existe un subconjunto limitado de las constantes de movimiento de un sistema que subsisten como tales en una aproximación determinada. El complemento de ese subconjunto debería consistir de cuasi-constantes en una buena aproximación del sistema físico.

De este modo la medida de los apartamientos de los valores iniciales de las constantes de movimiento exactas relacionadas con las simetrías rotas en la aproximación, puede resultar una prueba eficiente de la consistencia del método utilizado.

Cuando alguna simetría, o constante de movimiento que caracteriza a la dinámica es de importancia relevante, se hace necesario efectuar aproximaciones que la contemplen especialmente.

Existen, en principio, varias de ellas basadas en consideraciones de simetría (la mayoría de las cuales no han sido implementadas en la práctica, según la información de que disponemos). Se las puede dividir en dos subgrupos, según se restaure la simetría a priori o a posteriori.

El procedimiento de restaurar la simetría a posteriori consiste básicamente en estudiar la evolución de una función de onda variacional, $\Psi(t)$, proyectándola luego en el subespacio de interés (ver por ejemplo Rei 83). Este procedimiento es aplicable sólo si la violación de la simetría es débil, ya que en él se desprecian las correcciones a la órbita original debidas a dicho apartamiento de las leyes de conservación.

Entre los métodos de proyección a priori, el de Hartree-Fock proyectado dependiente del tiempo, HFPDT, ocupa el lugar más importante. Esencialmente consiste en proponer como función de onda variacional a

$$\sum_{m=1}^N a_m P_m |\psi_m\rangle = |\phi\rangle \quad (4.1)$$

donde los P_m proyectan sobre los subespacios ortogonales invariantes de interés ^(Kan80b) y los $|\psi_m\rangle$ son N-distintos determinantes de Slater.

Una tercera forma de introducir las constantes de movimiento

puede buscarse en la adopción de un esquema dependiente del tiempo similar a la Aproximación de Fases al Azar Autoconsistente (Sou 82). Es decir estudiando la expansión a segundo orden alrededor del camino clásico con el fin de incluir los efectos de dos partículas - dos agujeros en el propagador temporal. Si bien esta propuesta aún no ha sido estudiada en profundidad, presenta en principio la dificultad de tener que manejar matrices del orden de $2n \times 2n$, con n igual al número de estados de la base de una partícula.

El método HFPDT implica la necesidad de resolver una ecuación de complejidad equivalente (o mayor) que la de HFDT para cada subespacio que se encuentre poblado en el momento inicial.

Para sistemas que inicialmente están dispersos en muchos subespacios esta circunstancia puede resultar un inconveniente de orden técnico. Asimismo, la dinámica de la función proyectada, puede en algunos casos, diferir poco de un subespacio a otro.

En el caso de gran dispersión y trayectorias semejantes en el espacio de fases de Hartree Fock, en lugar de considerar todos los determinantes asociados con cada subespacio invariante $(|\Psi_m\rangle)$, resulta conveniente proponer la utilización de un solo determinante de Slater $(|\Psi\rangle)$ idéntico para todos los subespacios. Resulta así el vector de estado

$$|\phi\rangle = \sum_m a_m P_m |\Psi(x)\rangle \quad (4.2)$$

que representa el punto de partida de la aproximación llamada Dinámica Variacional que Conserva la Simetría (DVCS) (Sol 83; Her 83b).

4.2 Las ecuaciones DVCS.

4.2.1 Formulación con operadores de proyección.

Las ecuaciones dinámicas para los parámetros $\{x\}$ y $\{a\}$ del vector de estado en la aproximación DVCS, (4.2), se obtiene mediante la aplicación del principio variacional de mínima acción (2.2).

Teniendo en cuenta que el hamiltoniano, H , del sistema conmuta con los operadores de proyección asociados con sus subespacios invariantes, la integral de acción se expresa como:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt' \langle \phi(t') | (i \frac{\partial}{\partial t'} - H) | \phi(t') \rangle \quad (4.3)$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt' \mathcal{L}(t') \quad (4.4)$$

donde

$$\mathcal{L} = \sum_m \{ i a_m^* \dot{a}_m \langle \psi | P_m | \psi \rangle + i |a_m|^2 \langle \psi | P_m | \dot{\psi} \rangle - |a_m|^2 \langle \psi | P_m H | \psi \rangle \} \quad (4.5)$$

Las ecuaciones para los parámetros $\{a\}$ pueden resolverse en forma inmediata, gracias a estar asociados con las simetrías

$$\delta_{\{a\}} S = 0 \quad (4.6)$$

implica

$$a_m \langle \psi | P_m H | \psi \rangle = i a_m \langle \psi | P_m | \dot{\psi} \rangle + i \dot{a}_m \langle \psi | P_m | \psi \rangle \quad (4.7)$$

que se resuelve en

$$a_m(t) = a_m(0) \exp \left\{ i \int_{t_1}^{t_2} S_m(t') dt' \right\} \quad (4.8)$$

con

$$S_m = \int_{t_1}^{t_2} \left(i \frac{\langle \psi | P_m | \dot{\psi} \rangle}{\langle \psi | P_m | \psi \rangle} - \frac{\langle \psi | P_m H | \psi \rangle}{\langle \psi | P_m | \psi \rangle} \right) dt' \quad (4.9)$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}_m(t') dt' \quad (4.10)$$

resultando, asimismo, de la ecuación (4.7)

$$\alpha_m = |a_m|^2 \langle \psi | P_m | \psi \rangle = \langle \phi | P_m | \phi \rangle = cte_m \quad (4.11)$$

que expresa la conservación de la probabilidad de encontrar al sistema en un dado subespacio.

Las ecuaciones de evolución de los parámetros $\{x\}$ se obtienen, igualmente, de realizar la variación respecto de ellos, resultando

$$\delta_x \int dt' \left(\sum_m \alpha_m \mathcal{L}_m \right) = 0 \quad (4.12)$$

que puede escribirse en términos del tensor simpléctico (ver sección 2.1) como;

$$\sum_k \sigma_{jk} \dot{x}_k = \frac{\partial H(x)}{\partial x_j} \quad (4.13)$$

siendo

$$\sigma_{jk} = i \sum_m \alpha_m \left(\frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x'_k} \langle \psi(x) | P_m | \psi(x') \rangle - \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x'_j} \langle \psi(x) | P_m | \psi(x') \rangle \right) \quad (4.14)$$

$$y \quad H(x) = \sum_m \alpha_m \left(\langle \psi(x) | H P_m | \psi(x) \rangle / \langle \psi | P_m | \psi \rangle \right) \quad (4.15)$$

Teniendo en cuenta que

$$\sigma_{jk}^m \equiv i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x'_k} - \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x'_j} \right) \langle \psi(x) | P_m | \psi(x') \rangle \quad (4.16)$$

representa el tensor simpléctico en el subespacio n -ésimo, ya que $|P_m | \psi \rangle$ no está normalizado (Kra 81; Kur 81b), las ecuaciones (4.12) a (4.15) expresan que la evolución se realiza según una dinámica promedio de la de cada subespacio.

4.2.2 Formulación con coordenada generatriz.

Una formulación alternativa a la presentada en la sección anterior, puede realizarse para el caso de simetrías representadas por grupos continuos de transformaciones con el método de la coordenada generatriz (Bri 68a,b).

Supongamos que la simetría en estudio está asociada con los operadores $g(\Omega)$ de un grupo de Lie G , ($g(\Omega) \in G$), que actúa unitariamente sobre los vectores del espacio de Hilbert que contiene a la variedad M ($M \subset$ Hilbert).

Sea $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ y formemos el estado

$$|\psi_\Omega\rangle = g(\Omega) |\psi\rangle \quad (4.17)$$

y a partir de él

$$|\psi_f\rangle = \int d\mu(\Omega) f(\Omega) |\psi_\Omega\rangle \quad (4.18)$$

donde μ es la medida invariante del grupo.

El estado $|\psi_f\rangle$ resulta similar al utilizado en el método de coordenada generatriz para estudiar descripciones mediante variables colectivas.

Utilizando a $|\psi_f\rangle$ en el principio variacional (2.2) se obtiene para la acción

$$S = \int dt \left\{ \int d\mu(\Omega) d\mu(\omega) \left[i \dot{f}^*(\omega) \langle \psi_\omega | \dot{\psi}_\Omega \rangle \dot{f}(\Omega) + \right. \right. \\ \left. \left. + i \dot{f}^*(\omega) f(\Omega) \langle \psi_\omega | \dot{\psi}_\Omega \rangle - \dot{f}^*(\omega) f(\Omega) \langle \psi_\omega | H | \psi_\Omega \rangle \right] \right\} \quad (4.19)$$

y las ecuaciones variacionales

$$i \int \dot{f}(\Omega) \langle \psi | \dot{\psi}(\omega^{-1}\Omega) \rangle d\mu(\Omega) + i \int f(\Omega) \langle \dot{\psi} | \psi(\omega^{-1}\Omega) \rangle d\mu(\Omega) = \\ = \int f(\Omega) \langle \psi | H | \psi(\omega^{-1}\Omega) \rangle d\mu(\Omega) \quad (4.20)$$

(donde se ha utilizado que $[g(\Omega), H] = 0$ y $g^{-1}(\omega)g(\Omega) = g(\omega^{-1}\Omega)$)

en tanto que las ecuaciones para los restantes parámetros se mantienen en forma implícita ($\delta_{x_j} S = 0$).

La expresión por medio de los proyectores puede recobrase a partir de (4.18) proponiendo

$$f(\Omega) = \sum_{\nu, \kappa} a_{\nu\kappa}^\nu [D_{\kappa\kappa}^\nu(\Omega)]^* \quad (4.21)$$

donde

$D_{\kappa\kappa}^\nu(\Omega) = \langle \nu\kappa | g(\Omega) | \nu\kappa \rangle$ y $|\nu\kappa\rangle$ es el vector κ -ésimo de la representación unitaria irreducible ν .

Teniendo en cuenta que

$$\int d\mu(\Omega) [D_{\kappa\kappa}^\nu(\Omega)]^* g(\Omega) = P_\kappa^\nu \quad (4.22)$$

(expresión que se demuestra en el Apéndice A)

se recupera a partir de (4.18) la fórmula (4.2).

4.3 Características del método.

Es posible imaginar dos situaciones límites para la aproximación. La primera de ellas ocurre cuando el vector de estado inicial se encuentra en un subespacio invariante (digamos el n -ésimo). En este caso la dispersión es nula, y dado que la probabilidad de encontrar al sistema en un subespacio se conserva, resulta

$$\alpha_m = \delta_{nm} \quad (4.23)$$

y por lo tanto se reobtienen las ecuaciones de HFPDT.

Si por el contrario la distribución es muy ancha en los subespacios, los recubrimientos

$$\langle \psi | \psi \rangle, \langle \psi | H | \psi \rangle, \langle \psi | \dot{\psi} \rangle$$

estarán muy concentrados ("picados") alrededor de $\Omega=0$, por lo que se puede aproximar la acción en (4.19) por

$$\int dt \left\{ i \int f^*(\omega) \dot{f}(\omega) d\mu(\omega) \langle \psi | \psi \rangle + i \int |f(\omega)|^2 d\mu(\omega) \langle \psi | \dot{\psi} \rangle - \right. \\ \left. - \int |f(\omega)|^2 d\mu(\omega) \langle \psi | H | \psi \rangle \right\} \simeq S \quad (4.24)$$

de cuya variación se obtienen las ecuaciones HFDT de movimiento

$$i \dot{f}(\omega) = f(\omega) \left(i \frac{\langle \psi | \dot{\psi} \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} - \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \right) \quad (4.25)$$

$$y \quad \delta_{i,j} \int dt \left(i \frac{\langle \psi | \dot{\psi} \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} - \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \right) = 0 \quad (4.26)$$

que corresponden a un estado $|\psi\rangle$ sin normalizar.

Puede afirmarse, entonces, que el método DVCS consiste en proponer como vector de estado una combinación lineal de determinantes de Slater asociada con la simetría que se pretende restaurar.

Todos los vectores superpuestos están degenerados en energía, dado que

$$\langle \psi_\omega | H | \psi_\omega \rangle = \langle \psi | g^{-1}(\omega) H g(\omega) | \psi \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (4.27)$$

La aproximación DVCS se muestra como un método interpolador entre la dinámica HFDT y la dinámica HFPDT.

De acuerdo con lo expuesto en el capítulo 2 y en la sección 4.2.1 serán constantes de movimiento en la formulación DVCS tanto la norma como la energía, como así también cualquier función de los operadores diagonales en los subespacios propios asociados a la simetría en cuestión.

También resultarán constantes de movimiento los valores medios de los observables que conmutan simultáneamente con los proyectores y con el hamiltoniano que a su vez representen una variación posible del vector $|\psi\rangle$.

5. COMPARACION DE LOS METODOS HFDT Y DVCS EN UN MODELO RESOLUBLE.

5.1 El modelo de Lipkin-Meshkov-Glick (Lip 65).

Desde su proposición en la literatura, el modelo de Lipkin-Meshkov y Glick (Lip 65) (LMG) ha servido como laboratorio de ensayo y comparación de distintas aproximaciones, tanto estáticas como dinámicas (Fen 82; Gil 79a; Her 83b; Hol 73; Kan 80a,b; Kra 81; Kri 77; Sol 82,83).

El modelo consiste esencialmente en un sistema de N -fermiones que pueden ubicarse en dos niveles indefinidamente degenerados, $\sigma = \pm 1$, y que interactúan entre sí produciendo un intercambio de partículas de a pares entre los niveles, es decir

$$H = \epsilon \sum_{p\sigma} \sigma a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + \frac{V}{2} \sum_{pp'} \left\{ (a_{p_1}^+ a_{p'_1}^+ a_{p-1} a_{p-1}) + (a_{p-1}^+ a_{p'-1}^+ a_{p'_1} a_{p-1}) \right\} \quad (5.1)$$

donde los operadores $a_{p\sigma}^+$ crean un fermión en el nivel (p, σ) .

El hecho de existir solamente dos niveles de energía, básicamente, permite expresar el hamiltoniano en términos de los operadores de un álgebra $\mathcal{SU}(2)$ (Lip 65) con

$$J_z = \sum_{p\sigma} \sigma a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \quad (5.2a)$$

$$J_+ = \sum_p a_{p,1}^+ a_{p-1} \quad (5.2b)$$

$$J_- = (J_+)^+ \quad (5.2c)$$

Es inmediato verificar que (5.2) son las componentes de un operador vectorial \underline{J} que conmutan entre sí como las componentes normales del impulso angular, generando por lo tanto un álgebra $\mathcal{SU}(2)$.

Utilizando las componentes de \underline{J} el hamiltoniano LMG resulta

$$H = \epsilon J_z + \frac{V}{2} (J_-^2 + J_+^2) \quad (5.3)$$

El modelo es estudiado, por lo general, en la representación

totalmente simétrica, dado que a ésta pertenece el estado fundamental no perturbado $|J, -J\rangle$ ($J = \frac{N}{2}$).

Resulta importante señalar que el hamiltoniano LMG (5.3) no conecta los vectores caracterizados por un número par de partículas en el nivel fundamental ($\sigma = -1$), con los que poseen un número impar de las mismas en ese nivel, dando lugar así a dos subespacios invariantes caracterizados por la paridad, cuyo operador asociado se establecerá más adelante.

Los determinantes de Slater están en correspondencia, en el caso particular del modelo LMG, con los estados coherentes atómicos (Are 72; Gil 72, 79b)

$$|z\rangle = R(z) |J, -J\rangle \quad (5.4)$$

donde

$$J_z |J, -J\rangle = -J |J, -J\rangle \quad (5.5)$$

y

$$R(z) = \exp\left(\frac{tg^{-1}|z|}{|z|} (zJ_+ - z^*J_-)\right) \quad (5.6)$$

es el operador de rotación representante de los elementos del grupo cociente $SU(2)/U(1)$, encontrándose el grupo $U(1)$ formado por las rotaciones alrededor del eje z (Gil 74) $\{\exp(i\alpha J_z)\}$.

El parámetro complejo $z = \frac{tg(\frac{\theta}{2})}{2} e^{-i\varphi}$ puede ser representado por puntos de una variedad diferencial que constituye la esfera de Bloch.

Los estados coherentes se caracterizan por tener un valor medio constante para el módulo del vector de cuasispin

$$|\langle z | J | z \rangle| = J \quad (5.7)$$

asignando este radio a la esfera de Bloch, se puede afirmar que si un estado $|\psi\rangle$ cumple con

$$|\langle \psi | J | \psi \rangle| < J \quad (5.8)$$

éste pertenece al interior de la esfera y no representa a un determinante de Slater.

5.2 Soluciones aproximadas.

5.2.1 Las ecuaciones HFDT.

Las ecuaciones que se obtienen para los parámetros Θ y φ , $\zeta = \frac{N}{2} e^{-i\varphi}$, por el método HFDT resultan:

$$\dot{\Theta} = -\epsilon \chi \operatorname{sen} \Theta \operatorname{sen}(2\varphi) \quad (5.9a)$$

$$\dot{\varphi} = \epsilon (1 + \chi \cos \Theta \cos(2\varphi)) \quad (5.9b)$$

donde $\chi = (N-1)V/\epsilon$ es el parámetro de orden (como se verá más adelante).

Las ecuaciones (5.9) pueden expresarse en función de las derivadas del valor medio del hamiltoniano, \mathcal{H} , y de la métrica simpléctica como:

$$\dot{\Theta} = -\left(\frac{N}{2} \operatorname{sen} \Theta\right)^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi} \quad (5.10a)$$

$$\dot{\varphi} = \left(\frac{N}{2} \operatorname{sen} \Theta\right)^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Theta} \quad (5.10b)$$

donde

$$\mathcal{H} = \langle \zeta | H | \zeta \rangle = \frac{N}{2} \epsilon (-\cos \Theta + \chi \operatorname{sen}^2 \Theta \operatorname{sen}(2\varphi)) \quad (5.11a)$$

o bien

$$\frac{N}{2} \operatorname{sen} \Theta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\varphi} \\ \dot{\Theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Theta} \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

No resulta difícil en este sistema particular colocar el resultado (5.12) en función de las coordenadas canónicas; ellas son:

$$p = -\frac{N}{2} \cos \Theta \quad (|p| \leq \frac{N}{2}) \quad (5.13a)$$

$$q = \varphi + \pi/4 \quad (5.13b)$$

expresando el valor medio del hamiltoniano, es decir la energía, como:

$$\mathcal{H} = \langle \zeta | H | \zeta \rangle = \epsilon \left(p + \frac{\chi}{N} \left(\frac{N^2}{4} - p^2 \right) \operatorname{sen}(2q) \right) \quad (5.11b)$$

quedan las ecuaciones de evolución en la forma tradicional

$$\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \quad (5.14)$$

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \quad (5.15)$$

El análisis de la energía en función de las coordenadas (Θ, φ) del espacio de fases muestra un cambio cualitativo en función de que el parámetro χ sea mayor o menor que uno.

Para χ mayor que 1 se encuentra (Fig.1) que las órbitas, líneas de energía constante, son de dos tipos. El primer tipo corresponde a órbitas en que tanto q como p se repiten en sus valores dando lugar a trayectorias cerradas o locales denominadas libraciones (Gol 72; Kan 80a). Estas órbitas locales ocurren alrededor de los puntos estacionarios

$$(q_{m,1}, p_{m,1}) = \left(\left(m \mp \frac{1}{4} \right) \pi, -\pi/2\chi \right) \quad (5.16)$$

$((q_{m,1}, p_{m,1}))$ se corresponde con los signos superiores).

Los puntos (q_{n1}, p_{n1}) corresponden a los máximos de la energía, en tanto que los mínimos tienen lugar en (q_{n2}, p_{n2}) .

Las trayectorias alrededor de los máximos (mínimos) son degeneradas en energía ya que un incremento en π de la coordenada q deja invariante el hamiltoniano reducido $\mathcal{H}(q,p)$, (5.11),

$$\mathcal{H}(q+\pi, p) = \mathcal{E} \left(p + \frac{\chi}{2} \left(\frac{N^2}{4} - p^2 \right) \text{sen}(2q) \right) = \mathcal{H}(q, p) \quad (5.17)$$

Esta invariancia en la superficie de energía es el reflejo, en la aproximación HFDT, de la conservación de la paridad señalada en la sección 5.1.

El segundo grupo de órbitas para $\chi > 1$, corresponde a aquellas en que q crece indefinidamente repitiéndose p en sus valores, estas trayectorias son de la clase de las rotaciones (Gol 72; Kan 80a).

Las órbitas que separan libraciones de rotaciones son las trayectorias críticas, que nacen y mueren en los puntos de ensilladura ubicados en

$$(q_{m,2}, p_{m,2}) = \left(\left(m \mp \frac{1}{4} \right) \pi \mp q_s, \pm N/2 \right) \quad (5.18)$$

donde

$$q_s = \frac{1}{2} \arccos(1/\chi)$$

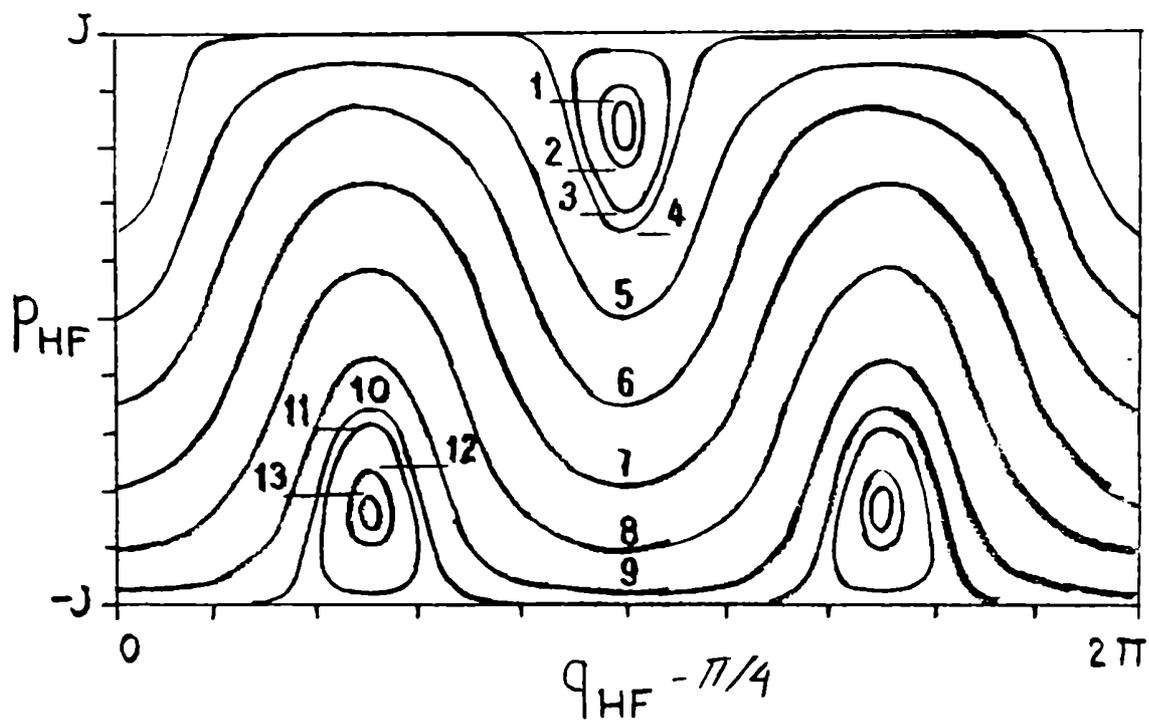


Figura 1: Orbitas de HFDT en el modelo LMG. ($\chi = 1.5$)

$$y \quad m = \frac{1}{2} (4h \pm 1)$$

Cuando el parámetro de orden, χ , es menor que uno, (Fig.2), ninguno de los puntos (q_n, p_n) descriptos como máximos, mínimos y puntos de ensilladura se encuentran en la hoja física. De ello resulta que el único tipo de órbitas que tiene lugar son las rotaciones, colapsando la línea de mínima energía en el polo sur, $p = -N/2$.

El drástico cambio en las características de la superficie de energía constante señalado, es referido habitualmente en la literatura como una transición de fase (Gil 79a).

5.2.2 Comparación de los resultados de HFDT con la resolución exacta.

La comparación entre la solución exacta y HFDT para el modelo LMG ha sido realizada en primer término por Krieger^(Kri 77) quien estudió el sistema para un número de partículas relativamente alto ($N=40$), encontrando un aceptable acuerdo entre ambas soluciones.

Los estudios para un número bajo de partículas ($N=6, 10$) que aquí se desarrollan (ver asimismo Sol 82) desde el punto de vista de TDEF como aproximación para tiempos cortos (sección 3.3) llevan a una conclusión distinta de la de Krieger, aunque compatible con ella según se verá.

Para realizar el estudio en la base rotante con HFDT (secc. 3.3) resulta conveniente escribir las componentes rotadas del vector \underline{J}

$$\underline{I} = R(\zeta) \underline{J} R^\dagger(\zeta) \quad (5.19)$$

$$\begin{pmatrix} I_z \\ I_+ \\ I_- \end{pmatrix} = \frac{1}{(1+|\zeta|^2)} \begin{pmatrix} 1-|\zeta|^2 & -\zeta^* & -\zeta \\ 2\zeta & 1 & -\zeta^2 \\ 2\zeta^* & -\zeta^{*2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_z \\ J_+ \\ J_- \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

En función de ellas, el hamiltoniano LMG rotado puede expresarse como:

$$H(\zeta) = R(\zeta) H R^\dagger(\zeta) \quad (5.21)$$

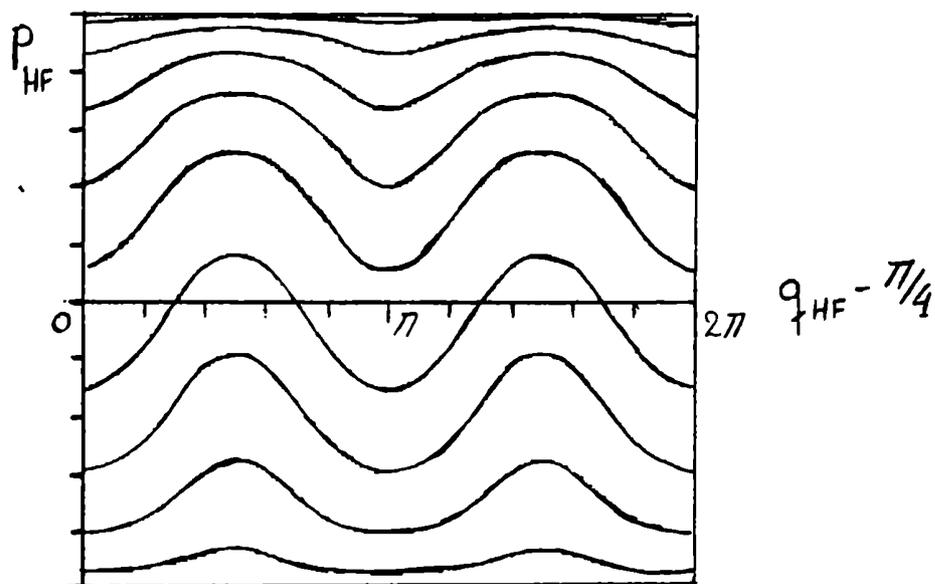


Figura 2: Orbitas de HFDT en el modelo LMG. ($\chi = .5$)

$$\begin{aligned}
H(\zeta) = & \left\{ \epsilon \left[(1-|\zeta|^2) I_z + \zeta^* I_+ + \zeta I_- \right] + \right. \\
& + \frac{V}{1+|\zeta|^2} \left[(\zeta^2 + \zeta^{*2}) \left(2 I_z^2 - \frac{1}{2} (I_+ I_- + I_- I_+) \right) \right] + \\
& + (\zeta^3 - \zeta) (I_+ I_z + I_z I_+) + (\zeta^{*3} - \zeta^*) (I_- I_z + I_z I_-) + \\
& \left. + \frac{1}{2} (1 + \zeta^{*4}) I_+^2 + \frac{1}{2} (1 + \zeta^4) I_-^2 \right\} \frac{1}{1+|\zeta|^2} \quad (5.22)
\end{aligned}$$

El procedimiento de linearización ^(Lip 65) origina el hamiltoniano de Hartree Fock (H_{HF}) que aquí se expresa en la forma:

$$H_{HF} = \Omega_0 J + \underline{\Omega}_{HF} \cdot \underline{I} \quad (5.23a)$$

$$= \Omega_0 J + \Omega_z I_z + \Omega_+ I_+ + \Omega_- I_- \quad (5.23b)$$

donde

$$\Omega_+ = \Omega_-^* = \frac{\epsilon}{1+|\zeta|^2} \left(\zeta^* + \chi \frac{(\zeta - \zeta^{*3})}{1+|\zeta|^2} \right) \quad (5.24)$$

La energía de la trayectoria HFDT resulta

$$\begin{aligned}
\langle 0 | H_{HF} | 0 \rangle &= \langle 0 | H | 0 \rangle = \frac{\epsilon J}{1+|\zeta|^2} \left(|\zeta|^2 - 1 + \chi \frac{\zeta^2 + \zeta^{*2}}{1+|\zeta|^2} \right) \\
&= J (\Omega_0 - \Omega_z) \quad (5.25)
\end{aligned}$$

Los valores de Ω_0 y Ω_z resultan hasta cierto punto arbitrarios, dado que no afectan las ecuaciones de movimiento (5.6). Ellos son responsables de la existencia de una fase entre los distintos vectores de la base, ya que éstos resultan de aplicar I_+^N al estado cero

$$|j\rangle = N_j I_+^N |0\rangle \quad (5.26)$$

con N_j - constante de normalización

Esta arbitrariedad puede eliminarse exigiendo

$$i \frac{d}{dt} \langle j' | I_+ | j \rangle = 0 = \langle j' | i \dot{I}_+ - [\underline{\Omega}_{HF} \cdot \underline{I}, I_+] | j \rangle \quad (5.27)$$

de lo cual resulta

$$\Omega_2 = \frac{\epsilon}{1+|\zeta|^2} \left\{ 2|\zeta|^2 + \chi(\zeta^2 + \zeta^{*2}) \frac{1-|\zeta|^2}{1+|\zeta|^2} \right\} \quad (5.28)$$

$$\Omega_0 = -\epsilon \left\{ 1 - \chi|\zeta|^2 \frac{\zeta^2 + \zeta^{*2}}{(1+|\zeta|^2)^2} \right\} \quad (5.29)$$

(esta elección fija la fase relativa entre los vectores de la base móvil).

Los elementos de matriz del hamiltoniano residual en la base móvil son:

$$\Omega_{kk} \equiv \langle k | V_{res} | k \rangle = \epsilon k + h_0 [3k^2 - 4Jk - k - (N-1)k|\zeta|^2] \quad (5.30a)$$

$$\Omega_{k, k+1} \equiv \langle k | V_{res} | k+1 \rangle = 2k h_1^* ((2J-k)(k+1))^{1/2} \quad (5.30b)$$

$$\Omega_{k, k+2} \equiv \langle k | V_{res} | k+2 \rangle = h_2^* ((2J-k)(k+1)(2J-k-1)(k+2))^{1/2} \quad (5.30c)$$

donde

$$h_0 = V \frac{\zeta^2 + \zeta^{*2}}{(1+|\zeta|^2)^2} \quad (5.31a)$$

$$h_1 = V \frac{\zeta^{*3} - \zeta}{(1+|\zeta|^2)^2} \quad (5.31b)$$

$$h_2 = \frac{V}{2} \frac{1 + \zeta^{*4}}{(1+|\zeta|^2)^2} \quad (5.31c)$$

Resulta evidente de (5.30b) que el hamiltoniano residual no conecta el estado de HFDT con su primer estado excitado

$$\langle 0 | V_{res} | 1 \rangle = 0 \quad (5.32)$$

dado que $|1\rangle$ se genera de $|0\rangle$ por la acción de un operador de un cuerpo y son precisamente estas interacciones las incluidas en HFDT.

La medida del tiempo mínimo de validez de la aproximación HFDT en el modelo LMG viene dado por

$$t_{min} \sim (2VN|h_2|)^{-1} \sim (\chi|h_2|)^{-1} \quad (5.33)$$

Con el fin de realizar la comparación de la propagación temporal según HFDT con la propagación exacta, se ha estudiado el valor medio del operador de un cuerpo \underline{J} , tanto en lo que respecta a su módulo como en

cuanto al ángulo relativo entre el aproximado y el exacto, así como también el valor absoluto del recubrimiento entre las funciones de onda.

Se ha incluido igualmente, a modo de comparación como solución de tiempos cortos, a la resultante de trincar la base móvil guardando solamente los vectores $|0\rangle$ y $|2\rangle$ (en adelante se llamará a esta aproximación la "solución de segundo orden").

Los resultados más interesantes se obtienen al considerar la situación para $\mathcal{P} \gg 1$ y órbitas del tipo de las libraciones.

En la fig. 3 puede verse el recubrimiento $(|a_0|^2 = |\langle 0|\psi\rangle|^2)$ del estado de HFDT con el exacto para las condiciones $\mathcal{E}(0) = (0.3, 0.0)$, $\mathcal{Z} = 1.5$, $N = 6$, en la figura se muestra asimismo el valor de $|a_0|^2$ en la aproximación de segundo orden.

Puede observarse en la fig. 3 que la aproximación de segundo orden oscila con alta frecuencia y coincide con la exacta sólo para tiempos muy cortos. Esto se debe a que ella está privilegiando modos intrínsecos que en HFDT aparecen suavizados por no ser colectivos; de esta forma la aproximación de segundo orden produce un comportamiento para tiempos mayores que t_{min} cualitativamente inferior que la aproximación de orden cero.

En la fig. 3 resalta una recurrencia de la solución HFDT respecto de la exacta para periodos bastante mayores que el de HFDT.

En la fig. 4 pueden verse los mismos elementos para idéntica órbita pero con $N=10$. De la comparación de las figuras 3 y 4 surge que el periodo de recurrencia crece con el número de partículas, encontrándose una relación numérica aproximada de $\frac{t_{rec 6}}{t_{rec 10}} \sim \sqrt{\frac{6}{10}}$.

El análisis del vector polarización $\langle \psi | \underline{J} | \psi \rangle$ se realiza por medio de la figura 5. Allí puede verse que el módulo se mantiene en una banda superficial de ancho 1, sin adentrarse en demasía en la esfera. Existen puntos en que su valor es muy próximo a J , pero para ellos el ángulo entre el vector exacto y el aproximado es cercano a 90° . Estos puntos coinciden con los de mínimo recubrimiento y señalan que el vector de estado exacto es muy cercano a un determinante de Slater, pero se halla en un punto de la esfera de Bloch distante aproximadamente 90° del señalado por HFDT.

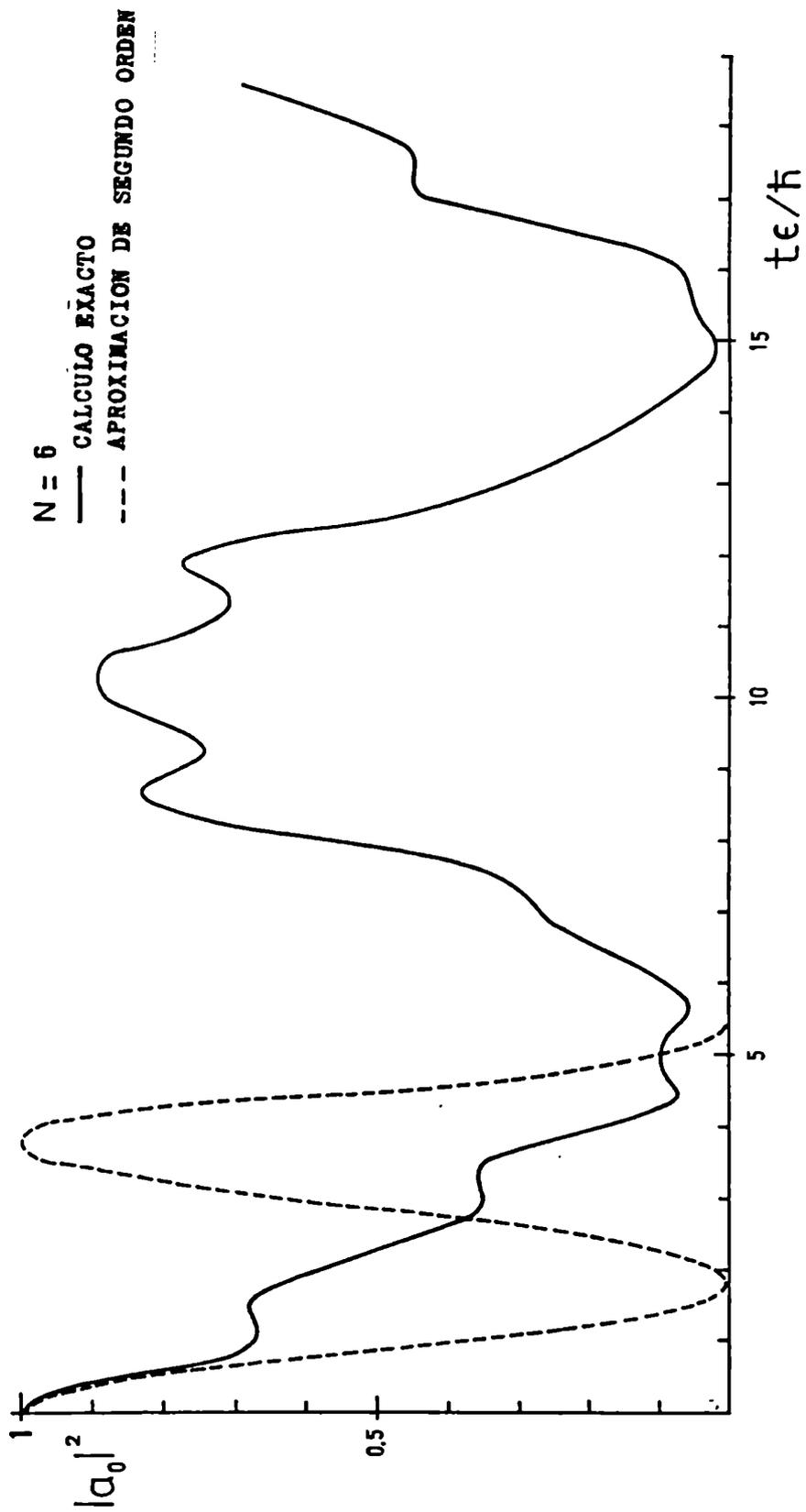


Figura 3: Recubrimientos entre los vectores de estado exacto y aproximados.

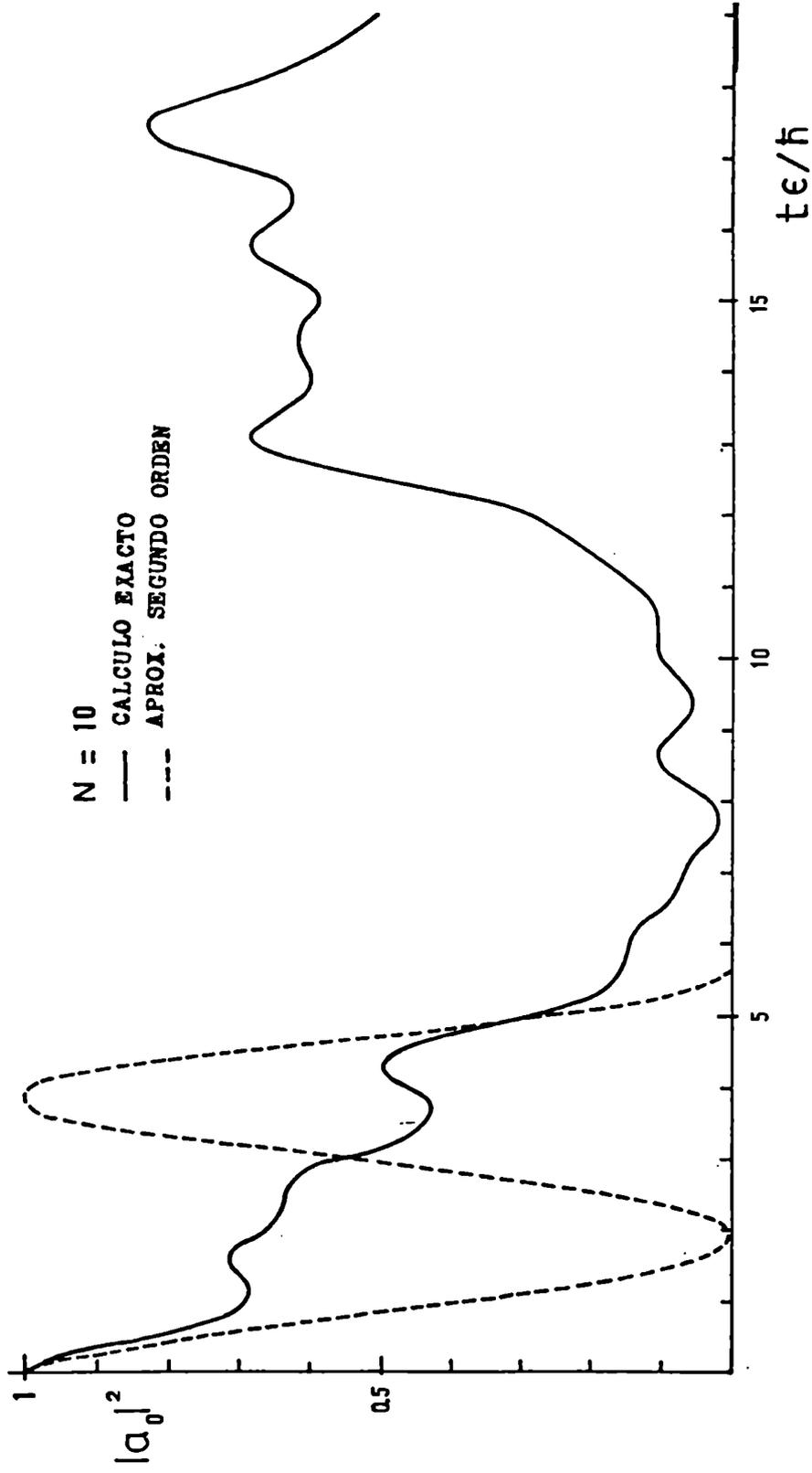


Figura 4: Recubrimientos entre los vectores de estado exacto y aproximado .

($N = 10, \lambda = 1.5$)

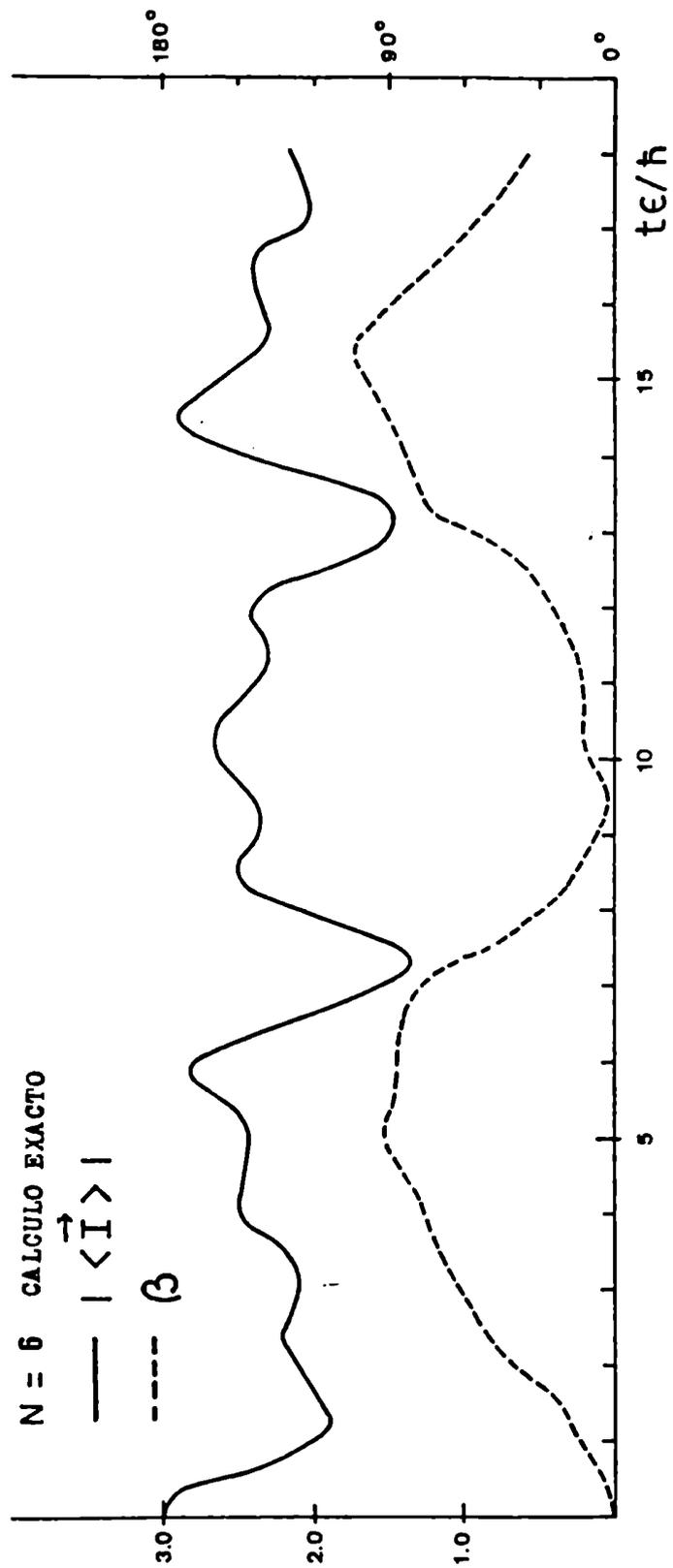


Figura 5: Polarización. ($N = 6$, $\chi = 1.5$).

Estos resultados pueden interpretarse en el sentido de que el sistema estaría realizando transiciones entre las órbitas degeneradas en energía de HFDT por debajo de la superficie de la esfera. Como se verá más adelante este efecto corresponde a la ruptura de la simetría de paridad por el generador de evolución autoconsistente.

5.2.3 Las ecuaciones DVCS.

Como se expresara en la sección 5.1, el modelo de LNG presenta dos subespacios invariantes debido a que el hamiltoniano (5.5) no mezcla estados con un número par de partículas excitadas con los correspondientes a un número impar de partículas en el estado de energía no perturbada \mathcal{E} .

El operador de paridad, \mathcal{P} , se expresa en función de los operadores de $SU(2)$ como una rotación en π

$$\mathcal{P} = e^{i\pi(J_2 - J)} \quad (5.34)$$

y tiene como autovectores a los estados de Dicke $|n\rangle = \frac{1}{n!} \sqrt{\frac{n!}{m!(n-m)!}} |n, m\rangle$ con autovalores $(-1)^{m-J}$. \mathcal{P} resulta un operador cíclico de orden dos ($\mathcal{P}^2 = \mathbb{1}$) y sus proyectores asociados con los subespacios simétrico y antisimétrico son

$$\mathcal{P}_S = \frac{1}{2} (1 + \mathcal{P}) \quad (5.35a)$$

$$\mathcal{P}_A = \frac{1}{2} (1 - \mathcal{P}) \quad (5.35b)$$

La acción de \mathcal{P} sobre un estado coherente $|\zeta\rangle$ se determina con igual facilidad, resultando

$$\mathcal{P}|\zeta\rangle = |-\zeta\rangle \quad (5.36)$$

dando un valor medio en estos estados de

$$\langle \zeta | \mathcal{P} | \zeta \rangle = \langle \zeta | -\zeta \rangle = \left(\frac{1 - |\zeta|^2}{1 + |\zeta|^2} \right)^N = \cos \Theta \leq 1 \quad (5.37)$$

además, \mathcal{P} efectúa transiciones con $\langle \pm \zeta | \mathcal{P} | \mp \zeta \rangle = \langle \zeta | \zeta \rangle = 1$.

Si se estudian las trayectorias de HFDT para distintos valores del parámetro de orden χ , (5.12), se observa que : 1) para $\chi = 0$ las trayecto-

rias son los paralelos de la esfera de Bloch; 2) a medida que χ crece a partir de cero, las trayectorias (fig.2) se van ondulando con amplitudes crecientes y 3) luego de la transición de fase aparecen las trayectorias cerradas alrededor de los puntos estacionarios.

Paralelamente con el incremento de χ aumenta la ruptura de la simetría en el modelo de LMG. Si se evalúa esta ruptura por

$$\Delta \langle F \rangle = \max (\cos \theta)^N - \min (\cos \theta)^N \quad (5.38)$$

en una dada trayectoria, se concluye que ella reviste mayor importancia cuanto más deformada sea la órbita (mayor valor de χ) y para número de partículas, N , bajo (como el estudiado en la sección anterior) y en especial para las trayectorias que se acercan más a los polos ($\theta = 0, \pi$), es decir cerca de las trayectorias críticas.

Para realizar la descripción DVCS del problema conviene basarse en los estados de buena paridad ^(Kan 80b)

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|z\rangle - |-z\rangle) \quad (5.39a)$$

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|z\rangle + |-z\rangle) \quad (5.39b)$$

y el hamiltoniano DVCS

$$\sum_m \alpha_m \mathcal{H}_m = \alpha_+ \mathcal{H}_+ + \alpha_- \mathcal{H}_- \quad (5.40)$$

con $\alpha_{\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm \cos \theta(0))$ y

$$\mathcal{H}_{\pm} = \epsilon J (-\cos \theta + \chi \sin^2 \theta \cos(2\varphi)) \quad (5.41)$$

que corresponde a un estado inicial de Hartree-Fock caracterizado por $\theta = \theta(0)$.

La métrica simpléctica - (2.16), (4.14)- resulta aquí

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{\epsilon\varphi} \\ -\sigma_{\epsilon\varphi} & 0 \end{pmatrix} \quad (5.42)$$

con $\sigma_{\epsilon\varphi} = \frac{d}{d\theta} p(\theta)$ (5.43)

$$y \quad P(\theta) = \alpha_+ P_+(\theta) + \alpha_- P_-(\theta) \quad (5.44)$$

$$\text{siendo} \quad P_{\pm}(\theta) = (1 - \cos \theta) \frac{(1 \pm \cos^{N-1} \theta)}{(1 \pm \cos'' \theta)} \quad (5.45)$$

De las ecuaciones (5.40) y (5.43) para el hamiltoniano y la métrica se extrae la dinámica de θ y φ en la aproximación DVCS

$$\dot{\theta} = - \left(\frac{d}{d\theta} P(\theta) \right)^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi} \quad (5.46a)$$

$$\dot{\varphi} = \left(\frac{d}{d\theta} P(\theta) \right)^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta} \quad (5.46b)$$

Finalmente puede obtenerse la fase relativa, ψ , entre los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$, siendo su derivada temporal

$$\dot{\psi} = \mathcal{H}_+ - \mathcal{H}_- - \dot{\varphi} (P_+ - P_-) = \mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_- \quad (5.47)$$

donde \mathcal{L}_{\pm} es el lagrangiano de buena paridad,

$$\mathcal{L}_{\pm} = \langle \pm | \pm \rangle^{-1} (i \langle \pm | \dot{\pm} \rangle - \mathcal{H}_{\pm}) \quad (5.48)$$

Es importante observar que la aproximación HFDT se puede recuperar de DVCS en el caso en que $\Delta(\langle P \rangle) \neq 0$ en la órbita.

5.2.4 Comparación del resultado DVCS con la resolución exacta.

Las ecuaciones (5.46) y (5.47) fueron resueltas para varios estados iniciales del tipo de HFDT y varias combinaciones de número de partículas e intensidad de interacción.

Para $\mathcal{X}=1.5$, $N=6$, es decir valores del parámetro de orden y el número de partículas de interés a efectos de estudiar la ruptura de simetría, se obtuvo un retrato en fases (θ, φ) , (fig.6), semejante al correspondiente a HFDT, aún cuando debe observarse variación en las órbitas en las cercanías de $\theta=0$ y π como así también un cerramiento en la trayectoria crítica, dado que la trayectoria rotulada 10 que se corresponde a través de las mismas condiciones iniciales con la órbita 10 de la fig.1 (HFDT) resulta una órbita cerrada en DVCS y abierta en HFDT.

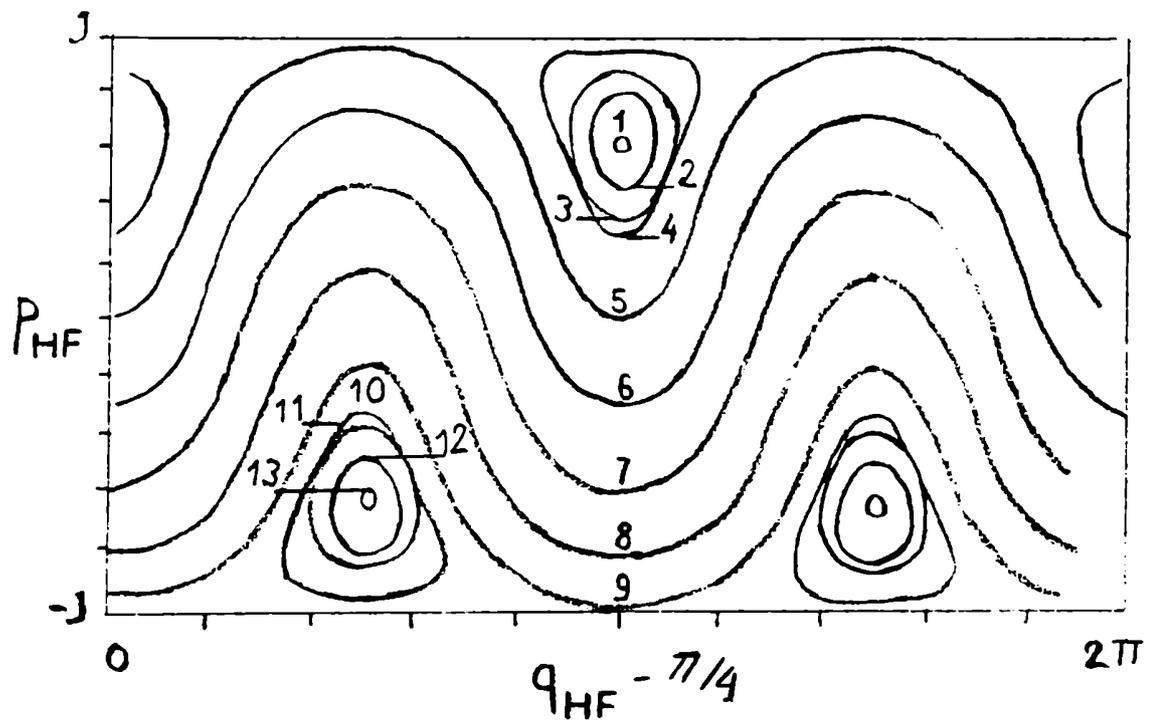


Figura 6: Retrato en fases DVCS. ($\chi = 1.5$)

Es posible calcular, en conexión con este cambio en la ubicación de la órbita crítica, la energía de la misma en ambas aproximaciones, ésta resulta $-\epsilon J$ en HFDT y $-\epsilon J(1-\frac{\alpha}{J})$ en DVCS.

Se debe hacer notar aquí que en la aproximación DVCS el cambio cualitativo de las órbitas (θ, φ) que se experimenta al pasar de $\chi < 1$ a $\chi > 1$ no implica la existencia de una transición de fase, ya que el retraso en fases (fig. 6) resultante corresponde a una proyección particular del espacio de fases completo $(\theta, \varphi, \pi, \psi)$, con $\pi = \langle p \rangle$.

De igual forma que para HFDT, sección 5.2.2, se ha calculado el vector polarización $\langle \underline{J} \rangle$ y al recubrimiento del estado DVCS con el estado exacto para determinar el comportamiento de la aproximación DVCS,

En la fig. 7 se muestra el recubrimiento entre los vectores de estado exacto, HFDT y DVCS para $\chi = 1.5, N=6$ y condiciones iniciales correspondientes a la órbita rotulada 2 en la fig. 6, es decir $(\theta, \varphi) = (\arccos 0.8, 0)$. La mejor descripción resultante de DVCS respecto de HFDT resulta aquí notoria. El estado DVCS se mantiene correlacionado en un 80% con el exacto por un tiempo de varios periodos de HFDT.

En la figura 8 pueden observarse los mismos elementos que en la fig. 7 para la órbita rotulada 7 (en la fig. 6), que tiene condiciones iniciales $(\theta, \varphi) = (\arccos 0.6, 0)$, la trayectoria resulta una rotación en HFDT, observándose en este caso que la aproximación DVCS da resultados muy próximos a los de HFDT.

La polarización, $\langle \underline{J} \rangle$, resulta también un buen indicador ya que representa el valor de expectación de los observables de un cuerpo, íntimamente ligados con ambas aproximaciones (DVCS, HFDT). En la fig. 9 se ha graficado el coseno del ángulo formado por $\langle \underline{J} \rangle_{\text{exacto}}$ con $\langle \underline{J} \rangle_{\text{aprox.}}$, $\cos \beta$, para ambos métodos y en las condiciones de la fig. 7 ($\chi = 1.5, N=6, (\theta, \varphi) = (\arccos 0.8, 0)$).

Resulta de la fig. 9 un notable acuerdo entre DVCS y la resolución exacta, manteniéndose $\cos \beta$ muy cercano a 1 ($\beta \approx 0$) en contraste con las oscilaciones de HFDT.

En la fig. 10 puede verse el módulo de la polarización en igua-

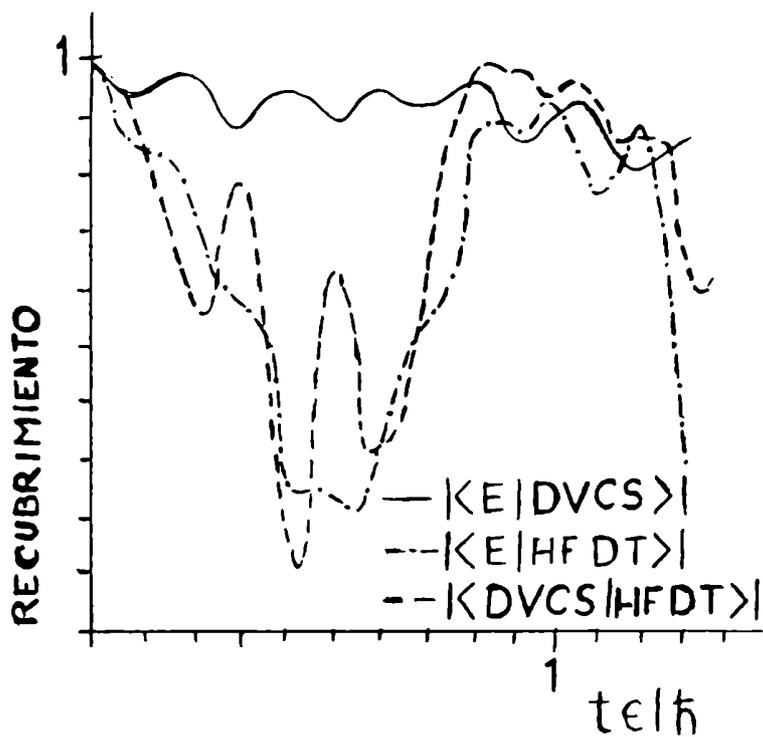


Figura 7: Recubrimientos entre los vectores de estado exacto, HFDT y DVCS.
 ($N = 6$, $\chi = 1.5$, orbita 2).

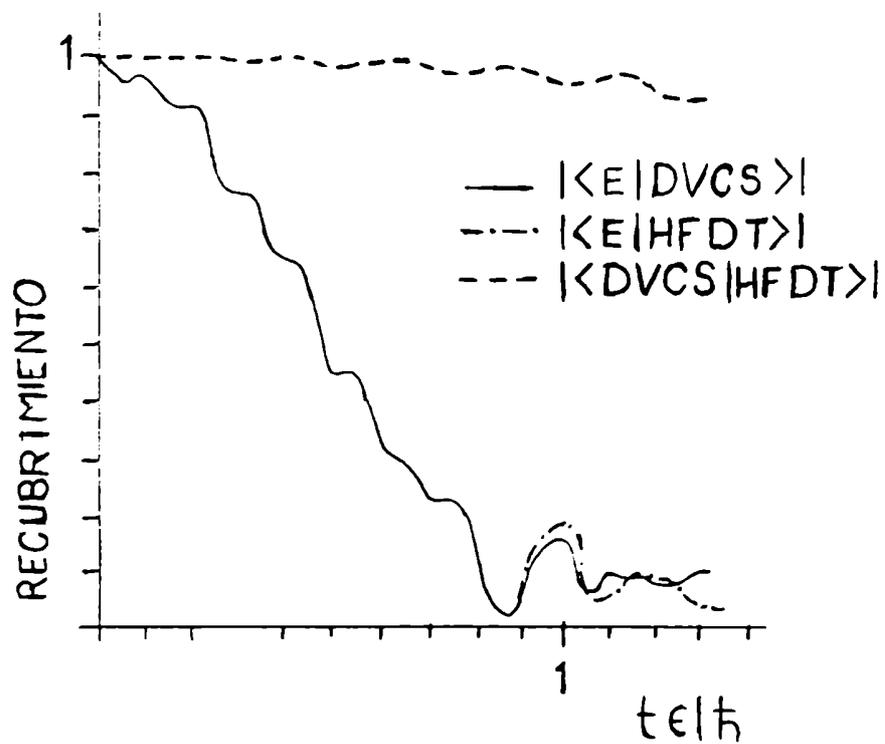


Figura 8: Recubrimiento entre los vectores de estado exacto, HFDT y DVCS.
 ($N = 6$, $\lambda = 1.5$, órbita 7)

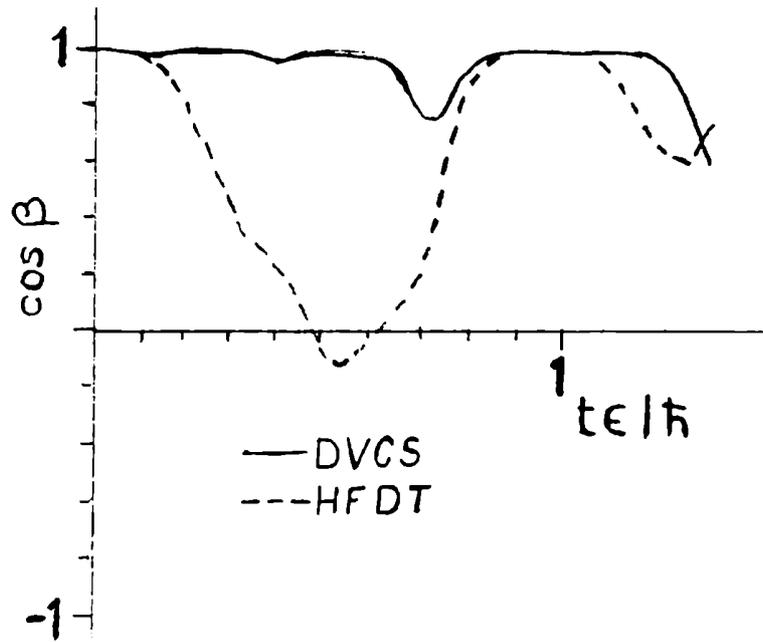


Figura 9: Coseno del ángulo entre los vectores de polarización.

($N = 6$, $\chi = -1.5$, órbita 2)

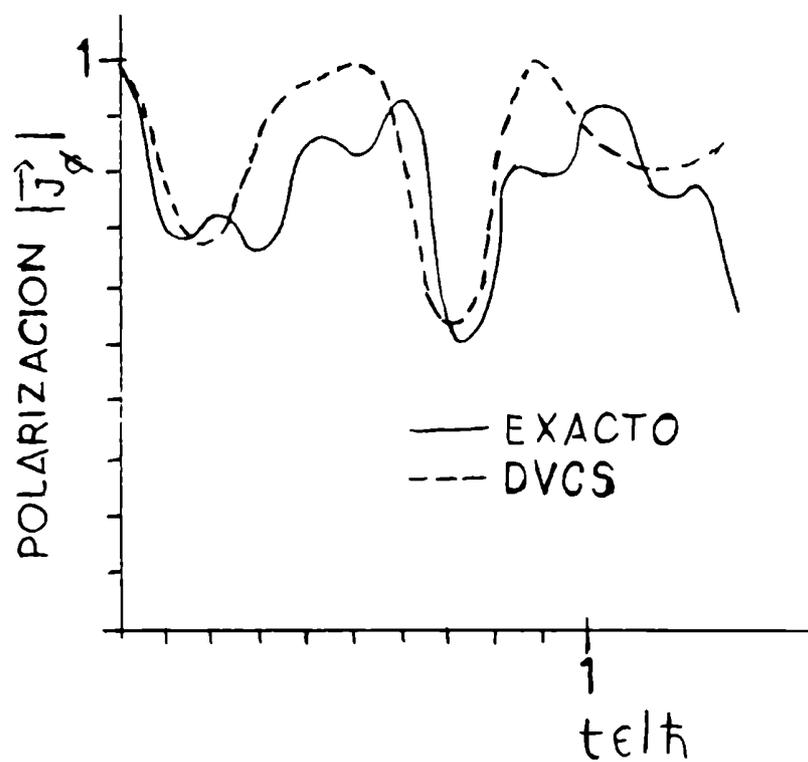


Figura 10: Módulo del vector de polarización. ($N = 6$, $\chi = 1.5$, órbita 2)

las condiciones que las figuras 7 y 9, nuevamente se obtiene un buen acuerdo entre la resolución exacta y DVCS.

5.3 Conclusiones.

Del estudio realizado sobre el modelo LMG surge con claridad un cierto número de conclusiones.

En primer lugar los estudios efectuados sobre el método HFDT señalan una correspondencia entre la ruptura de las simetrías y el apartamiento de la función de onda aproximada (HFDT) del valor exacto. Asimismo los valores medios de los observables de un cuerpo se alejan de sus valores exactos con el tiempo, en mayor medida cuanto mayor es la violación de simetría. Puede inducirse de esta observación que la conservación aproximada de las simetrías debería ser una condición necesaria de toda resolución restringida del problema de muchos cuerpos.

En segundo lugar se nota que en los casos de fuerte ruptura de la simetría el método DVCS, propuesto en este trabajo de tesis, es capaz de realizar una substancial mejora en la resolución restringida del problema. No obstante lo cual, en el caso de que la simetría fuera conservada en la aproximación HFDT, los resultados de ambos métodos coincidirían. Es decir que DVCS representa una mejoría respecto de HFDT sólo si este último tratamiento produce una ruptura importante de la simetría.

En tercer lugar debe señalarse que la mayor o menor violación de simetría en HFDT depende no sólo del modelo, el valor de sus parámetros y el número de partículas, (es decir de las características del sistema), sino que además depende de las condiciones iniciales de manera crítica, como lo evidencia el modelo LMG.

Esta conclusión muestra que la validez de una aproximación no lineal y autoconsistente como HFDT debe ser estudiada en forma continua con el tiempo y depende del régimen (las condiciones iniciales) en que se estudia el problema particular.

En especial, los resultados aquí presentados recuerdan las características semiclásicas de HFDT que lo hacen poco apto para calcular en

las zonas cercanas a las trayectorias críticas donde existen caminos de igual energía cercanos al de HFDT que interfieren con él, permitiendo en la dinámica exacta el efecto túnel por debajo de la superficie de energía considerada. (El interior de la esfera de Bloch en el caso del modelo de LMG).

6. COLISIONES DE IONES LIVIANOS - HFDT

6.1 Potenciales de Skyrme.

Como se expresara en la sección 3.1, el método de HFDT ha sido utilizado frecuentemente para el cálculo de colisiones de iones en física nuclear.

La primera dificultad que se presenta al intentar este objetivo es la necesidad de conocer el potencial con que interactúan los nucleones. La determinación de las fuerzas que dominan las relaciones entre hadrones constituye hoy día un capítulo abierto y en plena evolución de la física de partículas elementales. Para los fines propios del cálculo de propiedades colectivas de los núcleos, se han modelado interacciones fenomenológicas, apropiadas para su utilización en bajas energías, que representan los primeros términos de un desarrollo analítico de la matriz de interacción, T , (Sky 56; Van 72)

$$T(\vec{k}, \vec{k}') = t_0 + t_1 (k^2 + k'^2) + t_2 \vec{k} \cdot \vec{k}' + \dots \quad (6.1a)$$

o bien en la representación coordenadas

$$T(\vec{x}, \vec{x}') = t_0 \delta(x \cdot x') + t_1 (\nabla^2 \delta + \delta \nabla^2) + t_2 \nabla \delta \nabla \quad (6.1b)$$

en estas expresiones se ha hecho omisión de las variables de spin e isospin, con el fin de simplificar la presentación.

La fuerza de rango cero, (6.1), se conoce en la literatura como interacción de Skyrme^(Sky 56) y ha sido utilizada con mucha frecuencia tanto en cálculos estáticos como dinámicos en física nuclear. Una expresión más general de esta fuerza incluye un término dependiente de la densidad, o bien una interacción de tres cuerpos, sin la cual no es posible reproducir a un mismo tiempo los niveles de energía de los estados y la energía total de los núcleos^(Sky 56; Van 72).

Una expresión más general de la interacción de Skyrme sería:

$$\begin{aligned} \langle \bar{x} | V | x' \rangle = & t_0 \delta(\bar{x} - \bar{x}') (1 + \chi_0 P_\sigma) + \\ & + \frac{t_1}{2} (\nabla^2 \delta(\bar{x} - \bar{x}') + \delta(\bar{x} - \bar{x}') \nabla^2) + \\ & + t_2 \nabla \delta(\bar{x} - \bar{x}') \nabla + i W_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot (\nabla_1 \nabla') \delta(\bar{x} - \bar{x}') + V^{(3)} \end{aligned} \quad (6.2)$$

donde P_σ es el operador de intercambio de spines

σ las matrices de Pauli

y $V^{(3)}$ el término de tres cuerpos que se expresa como:

$$V^{(3)} = t_3 \delta(\bar{x} - \bar{x}') \delta(\bar{x}' - x_2) \quad (6.3)$$

($t_0, t_1, t_2, t_3, \chi_0$ y W_0 son parámetros).

Cuando se utiliza esta fuerza en un cálculo de Hartree-Fock o HFDT se obtiene una densidad de energía que depende sólo de las densidades de partículas y de la energía cinética. Si se desprecian los términos que diferencian a protones de neutrones y las posibles orientaciones del spin se obtiene ^(Dav 82) la densidad de energía, \mathcal{H} , definida por

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \int \mathcal{H}(\bar{x}) d^3x \quad (6.4)$$

donde $\langle \bar{x} | \Psi \rangle = \mathcal{A} \prod_{j=1}^A \psi_j(\bar{x})$ y \mathcal{A} es el operador de antisimetrización, $|\Psi\rangle$ es el determinante de Slater. La expresión para \mathcal{H} en función de la densidad de partículas, ρ , y de energía cinética, $\mathcal{T}(\bar{x})$, es:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{T}(\bar{x}) + \frac{3}{8} t_0 \rho^2 + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) \rho \mathcal{T} + \\ & + \frac{1}{64} (9t_1 - 5t_2) |\nabla \rho|^2 + \frac{1}{16} t_3 \rho^3 + V_{\text{coul}} \end{aligned} \quad (6.5)$$

(con $\rho(\bar{x}) = \sum_{j=1}^A \psi_j^*(\bar{x}) \psi_j(\bar{x})$ y $\mathcal{T}(\bar{x}) = \sum_{j=1}^A |\nabla \psi_j(\bar{x})|^2$)

siendo $V_{\text{coul}} = e^2 \frac{Z}{A} \int \left(\frac{1}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \rho(\bar{x}') d^3x' \right) + \text{término de intercambio}$

(Z/A = número de protones / número de nucleones).

La mayor ventaja de la fuerza de Skyrme desde un punto de vista computacional radica en que sólo es necesario evaluar un operador diferencial, el laplaciano, para obtener las ecuaciones de movimiento.

Para determinar el valor de los parámetros incluidos en (6.5) se ajustan las predicciones de Hartree-Fock para obtener las energías correctas en los términos de volumen, superficie, simetría y Coulomb del modelo de gota líquida, y el desdoblamiento de niveles debido al término de interacción spin-órbita ^(Que 78). La restante ecuación se obtiene del ajuste de la no localidad y la densidad de saturación y más recientemente, se ha incorporado al ajuste de parámetros magnitudes como barreras de fisión ^(Bar 82) y centroides de resonancias monopolares, dipolares y cuadrupolares de los núcleos ^(Kri 80).

En la aplicación al cálculo de colisiones de iones suelen realizarse algunas aproximaciones tanto por razones numéricas como físicas ^(Dav 82; Koo 77). En general el término de acoplamiento spin-órbita es ignorado ($W_0 = 0$) debido a que su tratamiento demanda una duplicación de la memoria de cómputo requerida, igualmente los términos que contienen gradientes y laplacianos de la distribución $\delta(\bar{x} - \bar{x}')$ son reemplazados por una interacción de Yukawa de corto rango que proporciona mayor estabilidad al cálculo.

La interacción resultante produce una densidad de energía (despreciando los términos de intercambio) ^(Flo 78; Dav 82)

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}(\bar{x}) = & \frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{T}(\bar{x}) + V_{\text{Coul}} + \frac{3}{8} t_0 \rho^2 + \frac{1}{16} t_3 \rho^3 + \\
 & + \frac{1}{2} V_0 \int d^3x' \frac{\exp(-|\bar{x} - \bar{x}'|/a)}{|\bar{x} - \bar{x}'|/a} \rho(\bar{x}') \rho(\bar{x}) \quad (6.6)
 \end{aligned}$$

Los valores de los parámetros utilizados en este trabajo de tesis corresponden al conjunto seleccionado por Koonin y colaboradores ^(Koo 77; Flo 78)

t_0 (MeV fm ³)	t_3 (MeV fm ⁶)	V_0 (MeV)	a (fm)
-497.66	17288.	-363.044	0.4598

Efectuando la variación del lagrangiano con la fuerza (6.6) se obtiene la ecuación de evolución para las funciones de onda de partículas

$$i\hbar \dot{\psi}_j = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{3}{4} t_0 \rho^2 + W_Y + W_C \right) \psi_j \quad (6.7a)$$

$$\text{con } W_Y = V_0 \int d^3x' \frac{\exp(-|\bar{x}-\bar{x}'|/a)}{|\bar{x}-\bar{x}'|/a} \rho(\bar{x}') \quad (6.7b)$$

$$\text{y } W_C = 2e^2 \frac{Z}{A} \int d^3x' \frac{1}{|\bar{x}-\bar{x}'|/a} \rho(\bar{x}') \quad (6.7c)$$

6.2 Modelos bi y tridimensionales.

Idealmente sería deseable resolver las ecuaciones (6.7) sin más aproximaciones (¡ y aún con menos!) pero las limitaciones actuales para este tipo de cálculos llevan a la necesidad de realizarlos con algunas restricciones en las funciones de onda propuestas.

Existen varias aproximaciones que explotan características especiales del tipo de colisión en consideración, como ser: colisiones entre núcleos idénticos, colisiones frontales y otras (Bon 76; Dav 81,78). Los cálculos más generales en tres dimensiones son realizados con funciones de simetría definida respecto de la reflexión por el plano de reacción (Flo 78; Dav 82)

$$\Psi_\lambda(x, y, z) = \pi_\lambda \Psi(x, y, -z) \quad (6.8)$$

La discretización se realiza en general con respecto a la posición en una terna cartesiana (Flo 78; Dav 82) aunque esta forma de resolver las ecuaciones (6.7) no constituye una regla.

Para sistemas simétricos, como los utilizados para ejemplificar en este trabajo, se puede restringir aún más el conjunto de funciones de onda requiriendo que éstas sean simétricas o antisimétricas ante inversiones por el origen de coordenadas

$$\Psi_\lambda(x, y, z) = \pi'_\lambda \Psi(-x, -y, -z) = \pi'_\lambda \pi_\lambda \Psi(-x, -y, z) \quad (6.9)$$

La discretización en coordenadas cartesianas se efectúa en una malla de paso fijo, igual en todas las direcciones, debiendo ser este paso menor o igual a 1 fermi, que es el espesor característico de la superficie nuclear. El tamaño del paso de la malla espacial depende también del orden

de aproximación que se utilice para expresar numéricamente a los operadores diferenciales.

Las técnicas para la resolución de las ecuaciones (6.7) constituyen un capítulo aparte; baste decir que en este trabajo se ha utilizado una aproximación en diferencias finitas para los operadores diferenciales (orden del error $O(\Delta x^5)$) construída a través de los procedimientos usuales (Abr 72), y el método de gradiente conjugado (Mit 80; Flo 78) para obtener los potenciales de Yukawa y Coulomb, fijándose el paso de malla en 0.7 fm para las colisiones alfa-alfa.

Para realizar la integración temporal debe recurrirse igualmente a una discretización del tiempo; la solución discreta de la evolución se encuentra con alguno de los métodos usuales para ecuaciones diferenciales de primer orden. En el presente caso se utilizó un método predictor-corrector de orden Δt^5 según las fórmulas de Adams (Hil 56) y un Runge-Kutta (Hil 56) de igual orden para comenzar la integración.

Para el estudio de colisiones entre iones livianos ($A < 100$) se puede recurrir a la aproximación de mantener congeladas las funciones de onda en la coordenada perpendicular al plano de reacción (Dev 78a,b; Dav 82; Koo 78)

$$\Psi_j(z, y, z, t) \approx \tilde{\Psi}_j(x, y, t) \Psi_j(z) \quad (6.10)$$

Esta aproximación permite ahorrar memoria de cálculo y tiempo de cómputo con muy bajo costo en cuanto a pérdida de precisión (Dev 78a,b) en sistemas simétricos livianos. Se verificó, en el presente caso, que una colisión alfa-alfa con una energía de laboratorio de $E/A = 20.75$ MeV y parámetro de impacto $l_0 = 2.8 \hbar$, producía en ambos casos (con y sin la aproximación (6.10)) las mismas trayectorias dentro de la precisión del cálculo, evaluada en una malla de $35 \times 25 \times 15$ pascs y 35×25 en el caso bidimensional.

6.3 Aspectos cualitativos de las colisiones entre iones livianos.

Las características generales de las colisiones de iones des-

criptas con la formulación HFDT resultan independientes de las interacciones utilizadas.

El tipo de trayectoria es determinado esencialmente por la energía relativa y el momento angular inicial.

Para energías cercanas a la barrera de interacción y hasta un cierto valor límite superior del impulso angular orbital, $l_>$, todas las trayectorias resultan en la fusión de los fragmentos. Esta es definida operacionalmente para aquellas órbitas en las cuales los fragmentos permanecen unidos durante un tiempo suficientemente largo (típicamente la duración de una rotación de 2π del sistema dinuclear en el plano de reacción (Flo 78; Dav 82)).

Las trayectorias de fusión se caracterizan por la gran transferencia de energía desde los grados de libertad translacionales colectivos a grados de libertad internos de los núcleos; sin esta pérdida de energía la fusión no sería posible.

Para energías de laboratorio mayores de un cierto umbral (ejemplos: 54 MeV para colisiones entre iones de oxígeno) aparece un momento angular límite inferior para la fusión, $l_<$. Todas las trayectorias caracterizadas por un momento angular menor que $l_<$ son muy amortiguadas pero no llegan a la fusión. La existencia de un límite inferior para la fusión es una característica que depende de la aproximación, no encontrándose, por ejemplo, en modelos de colisiones entre iones que incluyen disipación para dar cuenta de otros grados de libertad no presentes explícitamente en la descripción.

La predicción de un límite inferior para la fusión puede ser interpretada dentro de los límites de la aproximación HFDT como una consecuencia de los largos caminos medios que presentan los nucleones (secc. 3.1) a las temperaturas de excitación nucleares. Esto implica que las colisiones entre nucleones tienen lugar esencialmente en la superficie nuclear, por lo que ésta excita sus modos propios a expensas de la energía de aquellos.

La existencia de un límite inferior para la fusión no ha sido aún determinada experimentalmente, ni existen evidencias del mismo; resulta

de esta manera un tema abierto en la investigación de las colisiones entre iones livianos.

La sección eficaz de fusión puede ser estimada utilizando una aproximación de corte abrupto^(Bon 78) y la definición operacional de fusión es:

$$\sigma_f = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) \quad (6.11)$$

donde k es el número de ondas del movimiento inicial relativo; si se realiza la suma sobre los impulsos angulares que dan estados finales de fusión, se obtiene:

$$\sigma_f = \frac{\pi \hbar^2}{2\mu E} \left((\ell_> + 1)^2 - (\ell_< + 1)^2 \right) \quad (6.12)$$

donde μ es la masa relativa y

E la energía cinética inicial medida desde el centro de masa del sistema.

6.4 Ruptura de simetrías en colisiones alfa-alfa.

A partir de los estudios realizados sobre el modelo de Lipkin Meshkov y Glick, capítulo 5, surge la posibilidad de estudiar la fidelidad y consistencia de una aproximación observando la evolución temporal del valor medio de aquellos operadores asociados con las simetrías que no se conservan explícitamente en el método utilizado.

En las colisiones de iones deben conservarse, entre otro, el valor medio del cuadrado del impulso lineal y el valor medio del cuadrado del impulso angular, pero el tratamiento que da a ellos la aproximación HFDT resulta enteramente diferente.

Si se utiliza como estado inicial para la colisión dos núcleos en su nivel fundamental, suficientemente alejados a fin de que no interactúen con sus fuerzas de corto rango y enviados uno sobre el otro con un impulso $(A\hbar k)$ (éste es el estado inicial en todos los cálculos HFDT realizados al presente^(Neg 82; Dav 82)), se obtiene para los primeros tiempos de la colisión, en los cuales los núcleos no han entrado aún en contacto, que éstos

se desplazan rigidamente según la solución tipo solitón

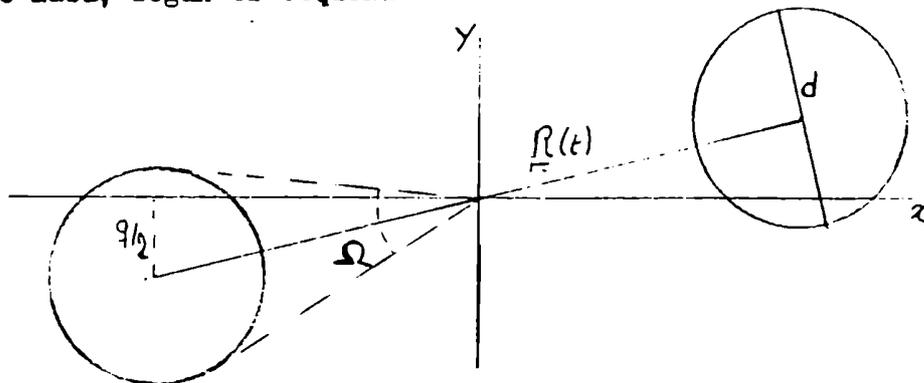
$$\psi(x, t) = \psi\left(x - \frac{\hbar k}{m} t, 0\right) \quad (6.13)$$

No resulta difícil mostrar que en estas condiciones cualquier función del impulso lineal total, \underline{P} , permanece constante en valor medio, es decir que la simetría translacional se conserva exactamente (a todo orden en \underline{P}) ya que el operador de evolución HFDT en ausencia de otro núcleo resulta simplemente el operador de translación espacial. Para estados posteriores de la evolución no es posible predecir analíticamente el respeto de la simetría a todo orden, por lo que se ha estudiado el problema numéricamente como se verá más adelante.

La situación con el impulso angular es enteramente distinta desde el mismo instante inicial. Si se estima la dispersión inicial del impulso angular según la relación de incerteza

$$\Omega \sigma_J^2 \approx \hbar^2 \quad (6.14)$$

con Ω el ángulo sólido subtendido por cada fragmento desde el centro de masa y considerando un núcleo esférico de radio d a una distancia R del centro de masa, según el esquema



resulta $\Omega \approx \frac{4d^2}{R^2}$ y se puede estimar

$$\sigma_J \approx \frac{R}{2d} \hbar \quad (6.15)$$

Volviendo a la solución tipo solitón de HFDT, (6.13), considerando que la colisión se produce con un parámetro de impacto q , se obtiene:

$$\sigma_J \approx 2\hbar \left(\frac{(q^2 + (x_0 - vt)^2)^{1/2}}{d} \right) \quad (6.16)$$

que muestra que aún en ausencia de interacción núcleo-núcleo se produce una ruptura de la simetría rotacional. La magnitud relativa de este efecto puede estimarse como:

$$\frac{\sigma_J}{|J|} \approx \frac{1}{dk} \left(1 + (x_0 - vt)^2 / q^2 \right)^{1/2} \quad (6.17)$$

resultando la variación a lo largo de una trayectoria ($-d < x < d$) del orden de

$$\Delta \left(\frac{\sigma_J}{J} \right) \approx \frac{1}{dk} \left(\left(1 + \left(\frac{d}{q} \right)^2 \right)^{1/2} - 1 \right) \quad (6.18)$$

que es de poca importancia sólo para colisiones periféricas o de parámetro de impacto aún mayor.

Un cálculo más cuidadoso del valor de la dispersión del momento angular para un núcleo esférico alejado del origen, produce:

$$\sigma_J^2 \approx \sigma_x^2 p_0^2 + \sigma_{p_x}^2 R^2 - 2 \sigma_{x p_x} R \cdot p_0 \quad (6.19)$$

donde $\sigma_x = \sigma_y$ es la dispersión espacial
 $\sigma_{p_x} = \sigma_{p_y}$ es la dispersión en impulso
 p_0 el valor medio del impulso lineal

y $\sigma_{x p_x} = \sigma_{y p_y}$ la correlación

$$\sigma_{x p_x} = \frac{1}{2} \langle x p_x + p_x x \rangle \quad (6.20)$$

Además de este efecto debido solamente a la translación rígida de la función de onda que efectúa HFDT, deben sumarse los efectos colisionales, pues este tipo de dinámica de campo central al desechar las interacciones de dos cuerpos introduce una nueva contribución a la ruptura de simetría.

En primera instancia el método de HFDT se encuentra más adaptado para la conservación de la simetría translacional que la simetría rotacional.

Con la intención de estudiar numéricamente el tratamiento de las dispersiones de \mathcal{P} y \mathcal{J} se ha desarrollado un programa de cálculo de

colisiones simétricas en tres dimensiones y uno análogo pero bidimensional siguiendo en general el trabajo realizado por Flocard y colaboradores^(Flo 78), programándose asimismo el cálculo de Hartree-Fock necesario para obtener las condiciones iniciales.

Los programas bi y tridimensionales fueron comparados a lo largo de una colisión alfa-alfa a 20.75 MeV de energía cinética de laboratorio por nucleón e impulso angular $l_0 = 2.8\hbar$, no habiéndose observado diferencia significativa alguna entre ambos tratamientos.

Debido a las restricciones en la disponibilidad de elementos de cómputo se estudió una serie de cuatro trayectorias para colisiones alfa-alfa a 20.75 MeV por nucleón (energía de laboratorio) e impulsos angulares de $0\hbar$, $2.8\hbar$, $7\hbar$ y $11\hbar$ utilizando el programa bidimensional. (Cabe aclarar que ninguno de los programas posee más restricciones para el cálculo de colisiones entre partículas más pesadas que las debidas a la disponibilidad de memoria y tiempo de cómputo).

Los cálculos fueron realizados en el computador VAX-750 del Instituto de Cálculo (FCEN-UBA) demandando cada trayectoria alrededor de 10hs. de unidad central de proceso (con utilización de aritmética de punto flotante por "hardware") corriéndose en una partición de 200K bytes con facilidades de memoria virtual. (El tamaño aproximado del programa bidimensional es de 450K bytes). (El tiempo real utilizado por cada trayectoria puede estimarse en 30hs.).

El cálculo fue realizado en una grilla espacial cartesiana de 0,7 fm de paso, estando la caja formada por 33 x 25 x (15) puntos. El paso de tiempo empleado fue de 7.9×10^{-25} seg., realizándose la integración con un método predictor - corrector de orden Δt^5 con la fórmula de Adams, iniciándose el proceso con un Runge - Kutta de igual orden^(Hil 56). Tanto la energía como la normalización y el valor medio del impulso angular se mantuvieron constantes dentro de un error numérico relativo de 10^{-4} , lo cual es perfectamente compatible con los standards aceptados en este tipo de trabajos (Neg 82; Dav 82).

En la figura 11 se muestra la posición relativa al centro de

masa, $R/2$, de uno de los fragmentos para las distintas trayectorias. Las figuras 12 a 15 exhiben, respectivamente, la energía cinética colectiva, el momento angular colectivo, $L(t) = (R \wedge P)_z$ y las dispersiones $\sigma_{J_z}^2$ y σ_P^2 .

La figura 16 muestra un clásico gráfico de la densidad de partículas proyectada sobre el plano de reacción para una trayectoria con $l_0 = 2.8h$.

Del estudio de estos resultados resulta claro que las trayectorias elegidas caen dentro de las tres clases posibles para iones livianos. Las órbitas rotuladas por $l_0 = 0h$ y $l_0 = 2.8h$ corresponden a las colisiones fuertemente inelásticas por debajo del límite inferior de fusión, l_c ; la órbita $l_0 = 7h$ representa a las trayectorias que culminan con la fusión como lo muestra el comportamiento de $R(t)$ y la gran disipación de energía (fig. 11 y 12); la órbita con $l_0 = 11h$ corresponde a una colisión periférica que es evidenciada por la poca deflexión de la trayectoria y la relativamente escasa transferencia de energía y momento angular hacia grados de libertad internos.

El análisis de la transferencia de momento angular desde el movimiento relativo hacia los grados de libertad de partícula, fig. 13, señala que este proceso resulta de gran importancia por sobre todo en la trayectoria de fusión, ocurriendo este flujo de momento angular en un tiempo del orden de 7.9×10^{-23} seg. en coincidencia con la etapa disipativa de la colisión, fig. 12.

Para los objetivos de este trabajo las figuras 14 y 15 resultan las más trascendentes. Puede observarse en ellas que para ambas dispersiones las trayectorias por debajo de la ventana de fusión ($l_0 = 0h$ y $l_0 = 2.8h$) dan resultados coincidentes. En segundo lugar la trayectoria cuasielástica ($l_0 = 11h$) produce las menores amplitudes $\sigma_{X_{MAX}}^2 - \sigma_{X_{MIN}}^2$, $X = J, P$. En tercer lugar la trayectoria de fusión ($l_0 = 7h$) se desvía significativamente las restantes (fig. 14) corriendo el extremo absoluto hacia tiempos mayores y derivando hacia dispersiones menores que en los otros casos.

La dispersión del momento lineal exhibe una amplitud máxima relativa (diferencia entre el supremo (t= 190 pasos) y el infimo (t= 260 pasos)) de aproximadamente el 25% para la curva rotulada por $l_0 = 7h$ y menos

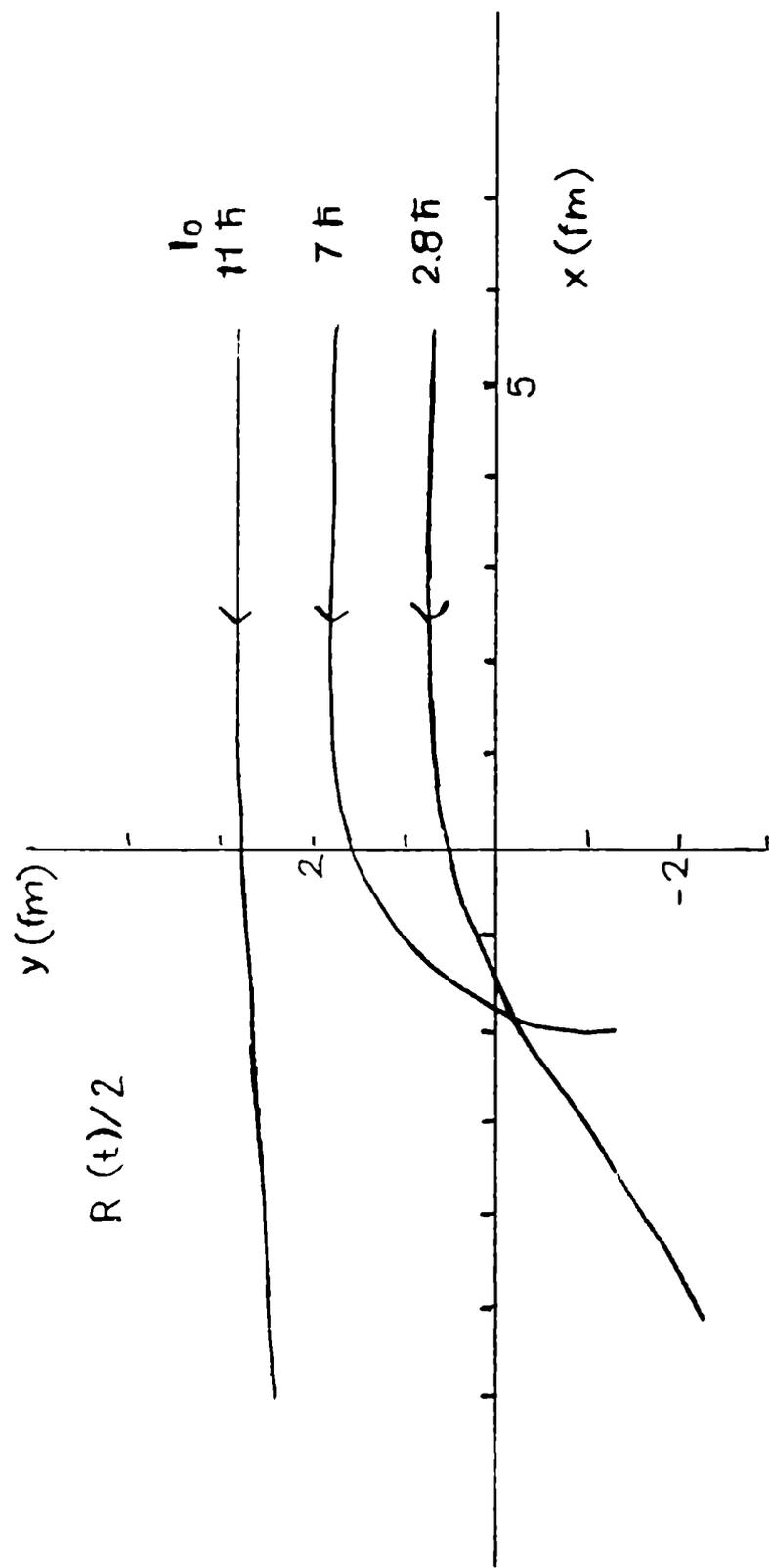


Figura 11: Trayectorias en el plano de reacción. (Alfa - Alfa)

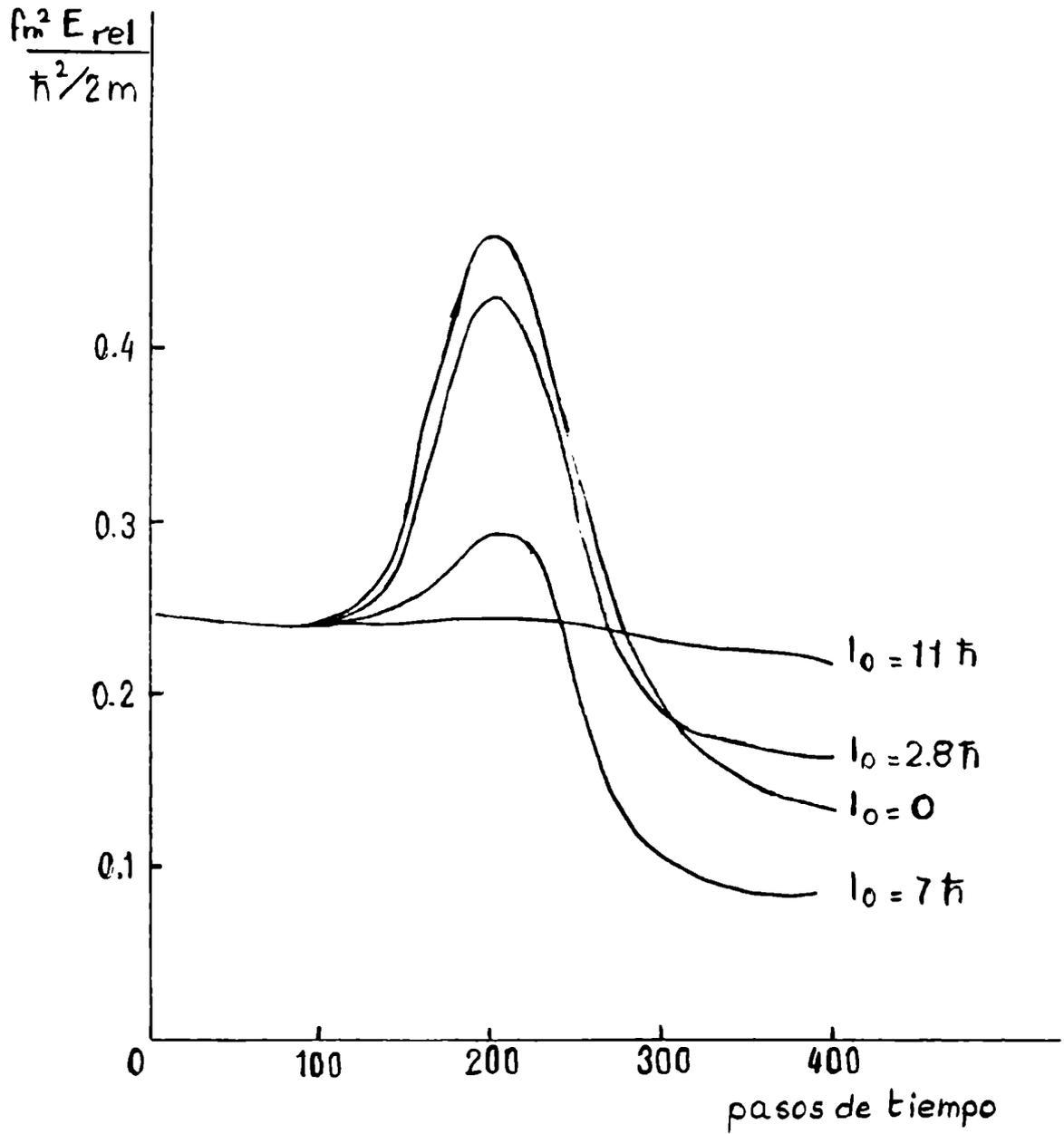


Figura 12: Energía cinética del movimiento relativo.

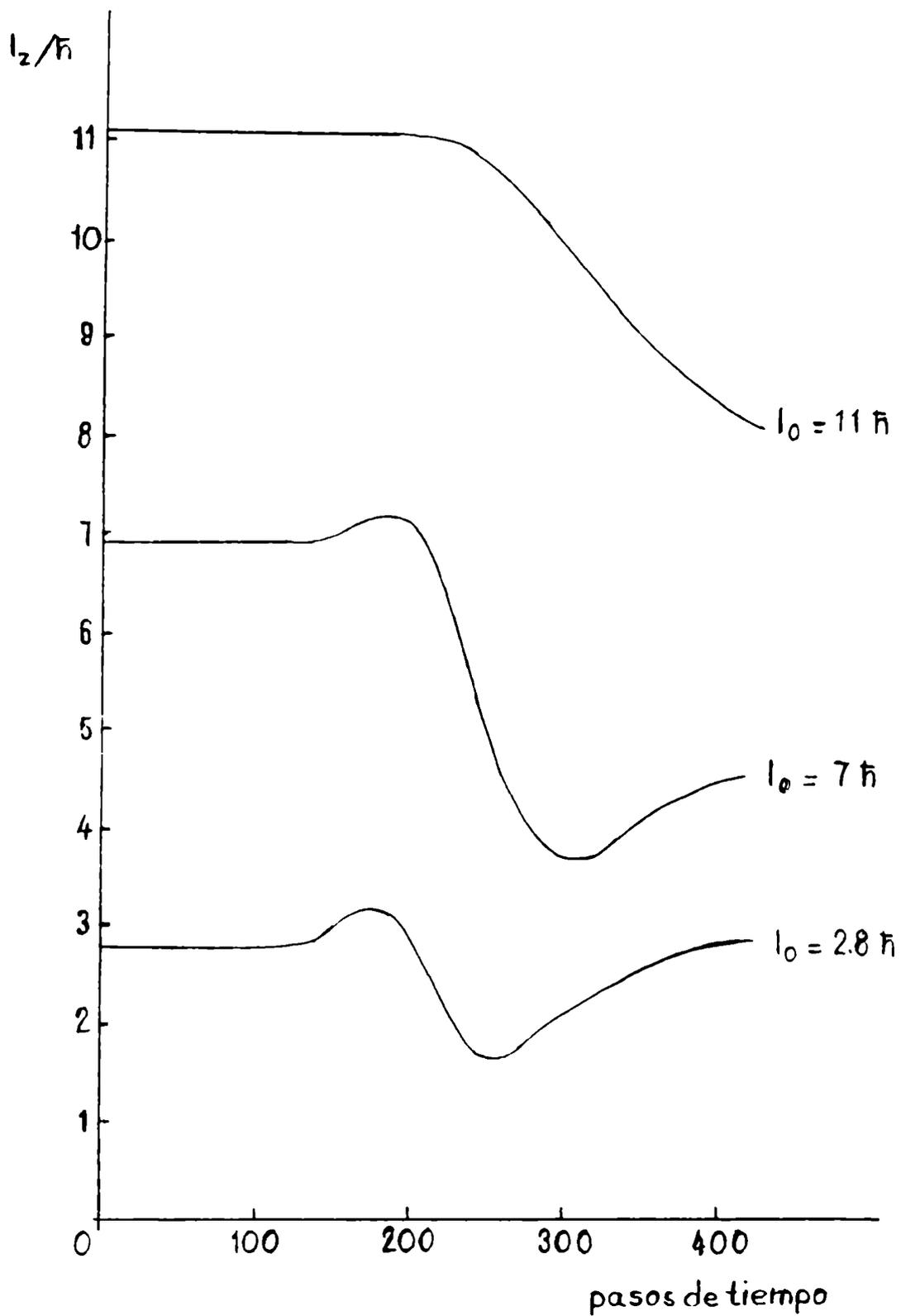


Figura 13: Momento angular del movimiento relativo.

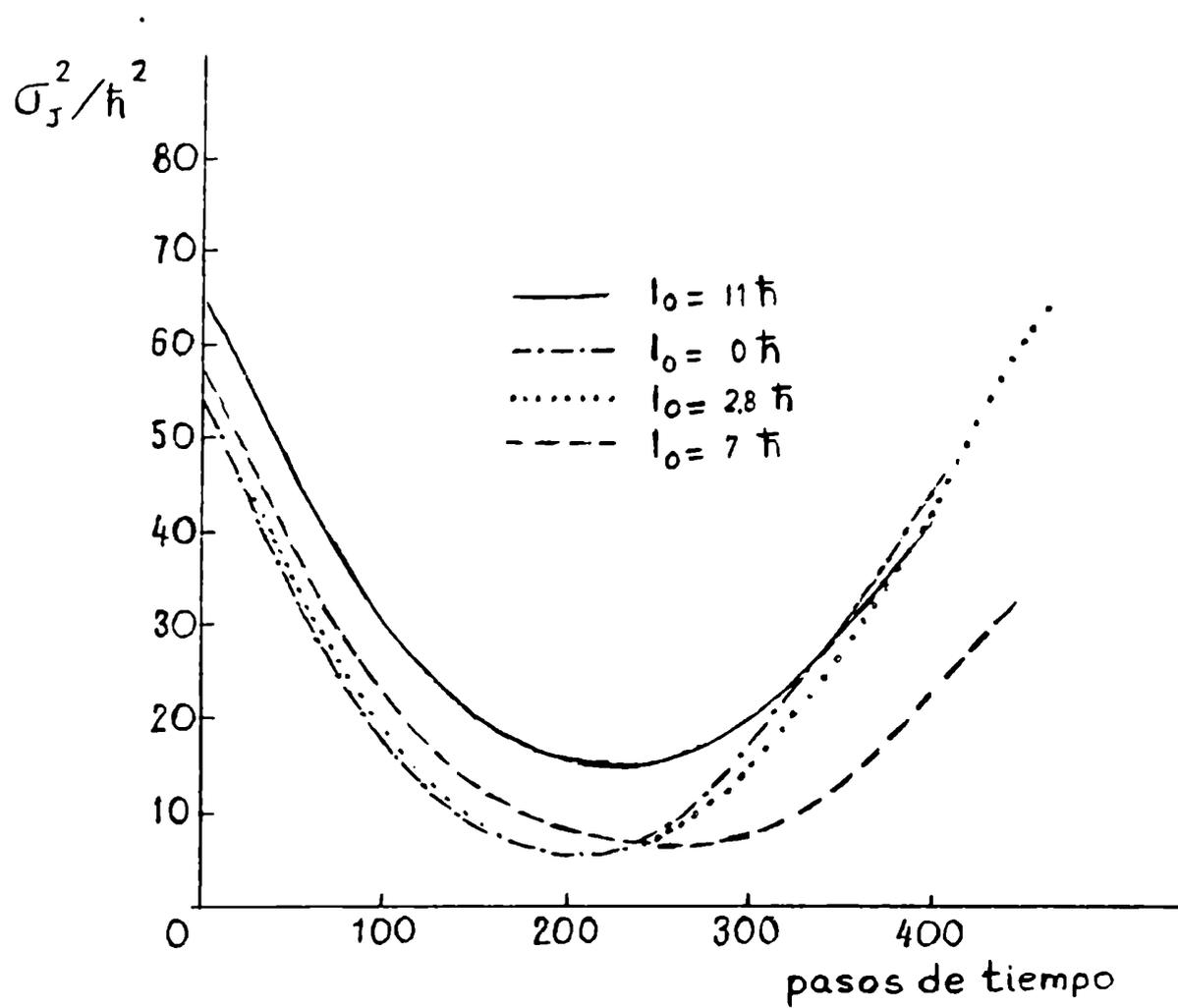


Figura 14: Dispersión del impulso angular total.

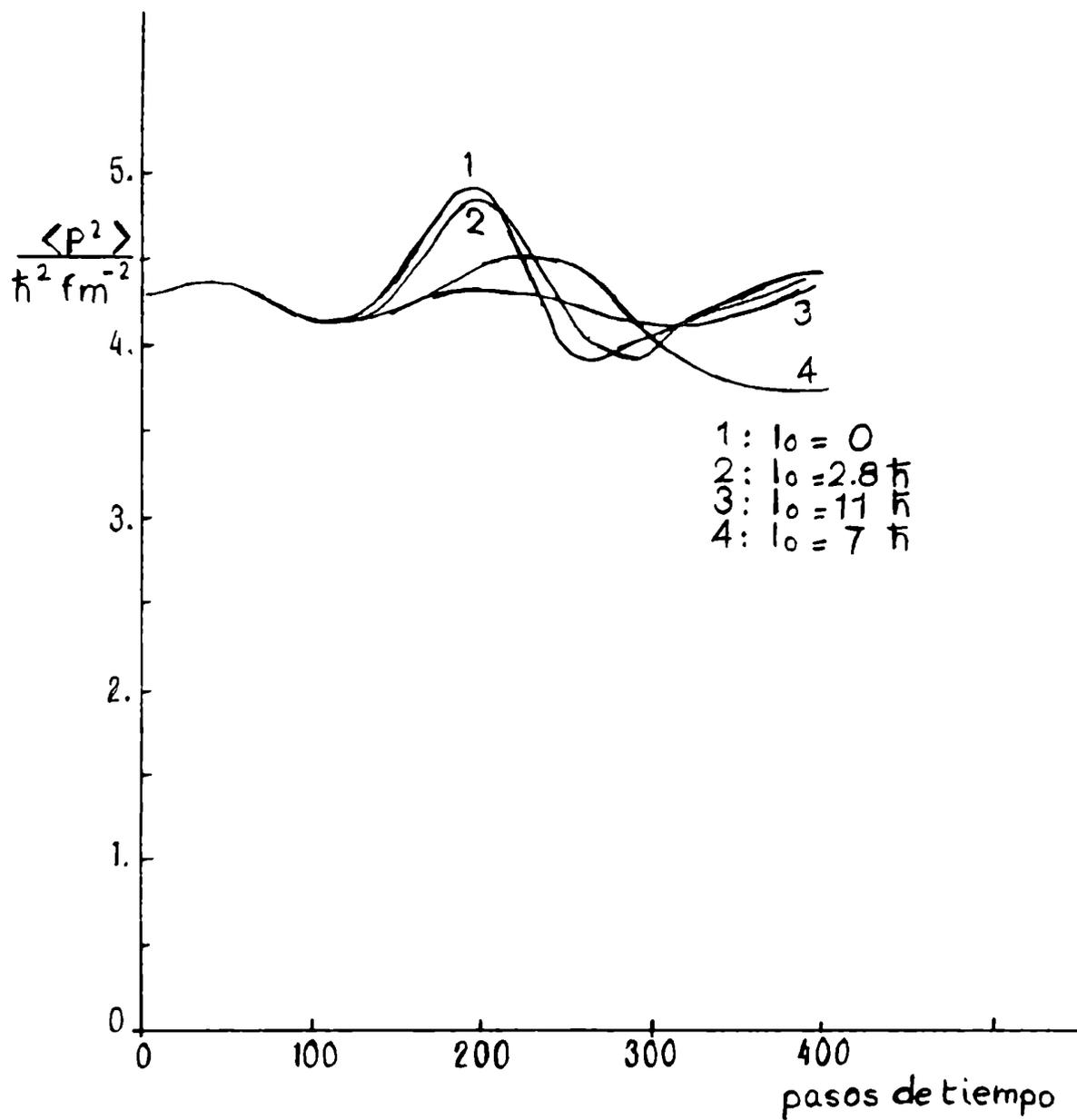


Figura 15: Dispersión del impulso lineal total.

del 12% para $l_0 = 11h$. Debe notarse que la máxima dispersión se produce en coincidencia con la máxima energía cinética para el movimiento relativo (fig.12).

En contraste con esta situación, la dispersión del momento angular sufre una variación relativa entre el 88% ($l_0 = 0h$) y el 80% ($l_0 = 11h$).

Los puntos extremos de ambas dispersiones se producen en coincidencia con el punto de mayor interpenetración de los núcleos.

Para estudiar qué parte de la importante ruptura de simetría que se manifiesta en la fuerte variación de σ_{Jz}^2 corresponde a la translación rígida de la función de onda, señalada como solución tipo solitón de las ecuaciones HFDT, (6.13), se ha graficado, fig.17, la diferencia entre σ_{Jz}^2 y el valor predicho por la ecuación (6.19) considerando tanto a R como a P_0 funciones del tiempo y manteniendo constantes los restantes elementos.

Del análisis de la fig.17 surge que la principal causa de la variación de σ_{Jz}^2 es la manera en que HFDT conduce el movimiento libre debiéndose a ello la violación de la simetría en los casos $l_0 = 0h, 2.8h$ y $11h$, como asimismo en las primeras etapas de la trayectoria de fusión. Respecto de esta última debe notarse que una nueva e importante contribución a la variación de σ_{Jz}^2 se hace presente al tener lugar la fusión (último sector de la curva).

6.5 Conclusiones.

El tratamiento que da HFDT a las simetrías rotacional y translacional resulta completamente distinto.

La simetría translacional es aceptablemente respetada al verificarse la constancia del valor medio del impulso y una fluctuación de no mayor importancia en la dispersión, que es de esperar sea aún menor para sistemas más pesados que el aquí tratado.

Por otro lado la gran variación que sufre la dispersión del momento angular a lo largo de una trayectoria (no menos de un 80% del valor inicial) evidencia que HFDT no está especialmente adaptado para respetar la simetría rotacional. La importante variación que sufre σ_{Jz}^2 se debe principal-

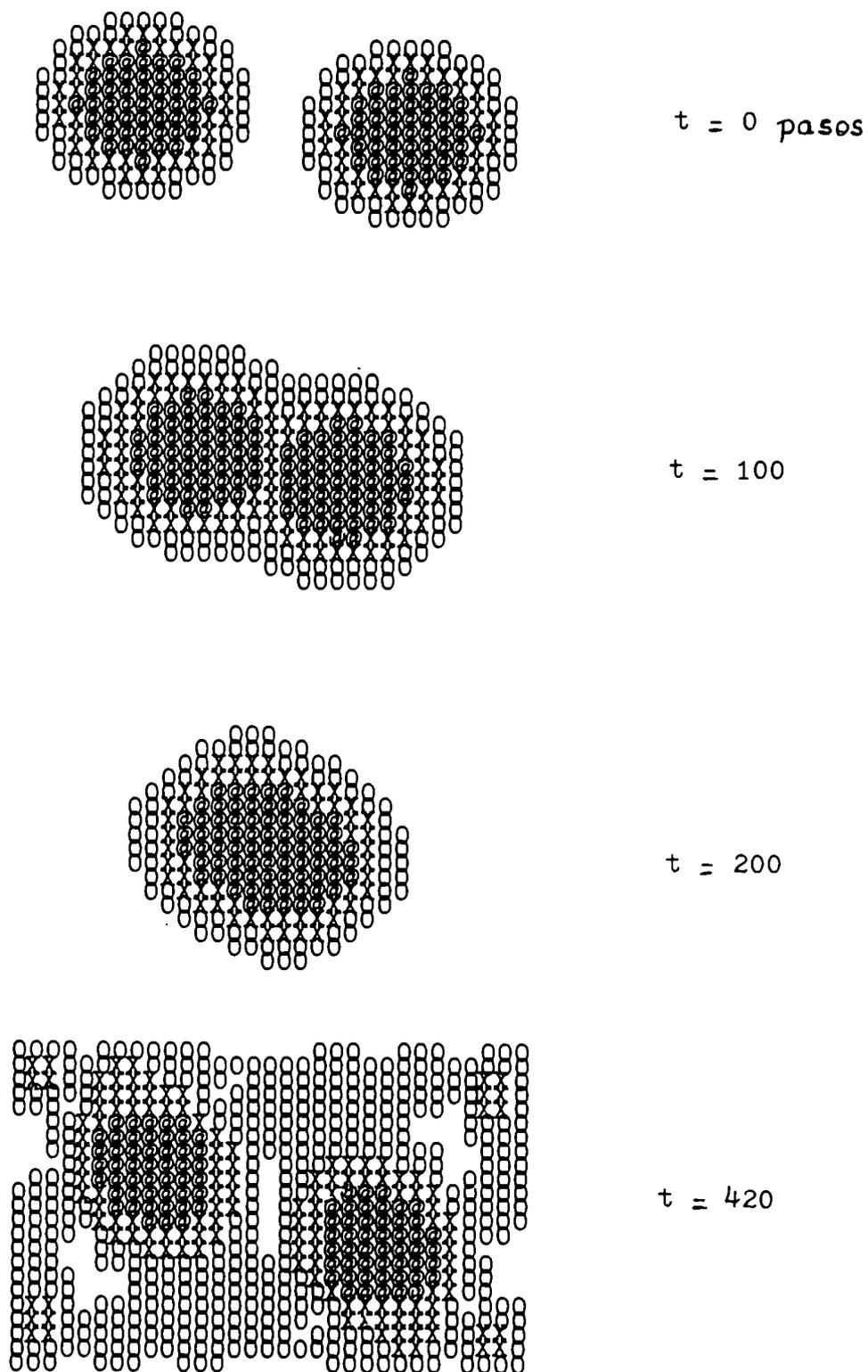


Figura 16: Densidad de partículas proyectada sobre el plano de reacción para una colisión con $l_0 = 2.8$,

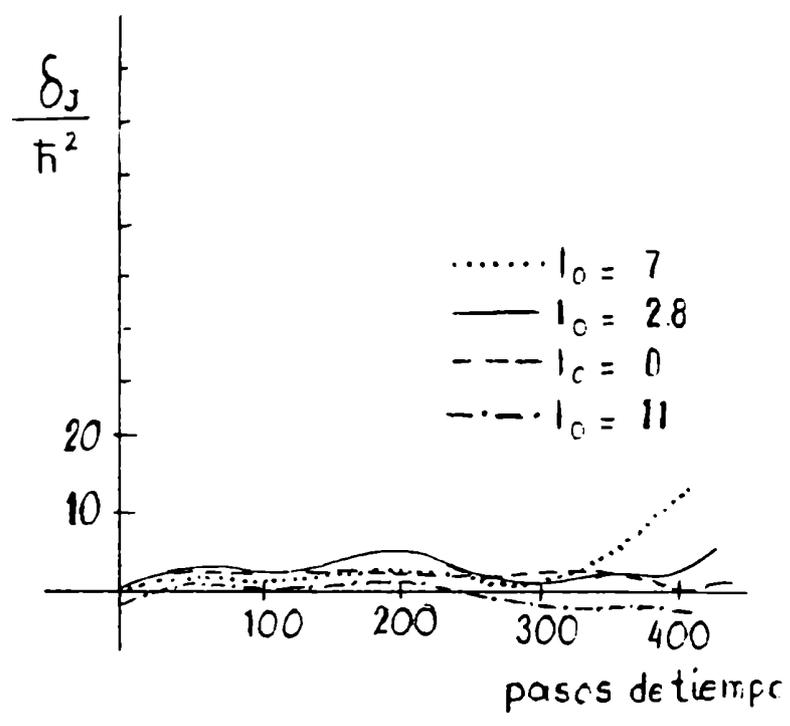


Figura 17: Dispersión del impulso angular, restado el efecto de la translación.

mente a la translación rígida (clásica) del paquete de ondas, pero no puede dejar de notarse la contribución que aparece en la etapa de fusión.

En lo que respecta al momento angular podrían resumirse las características de HFDT como: a) dependencia crítica de la clase de trayectoria respecto del valor inicial del impulso angular. b) La fusión se caracteriza por una marcada transferencia de momento angular del movimiento relativo a grados de libertad intrínsecos. c) La no conservación de la dispersión de $\overline{\sigma_{J_z}^2}$, la cual se debe en primer lugar a la translación clásica del paquete de ondas y en segundo término a los efectos colisionales contenidos en el campo promedio.

Esta perspectiva conjunta señala la necesidad de incrementar los esfuerzos para introducir una descripción más acorde con la mecánica cuántica en lo que respecta al impulso angular ya que resulta extremadamente difícil discernir en el presente estado si importantes predicciones como la existencia de un momento angular límite inferior para la fusión se deben a la naturaleza física del problema o al hecho de haber desechado en la aproximación las interacciones con caminos vecinos a la trayectoria clásica que se evidencian en la ruptura de la simetría.

7. COLISIONES DE IONES LIVIANOS - DVCS.

7.1-La simetría rotacional.

De los estudios realizados sobre el método de HFDT, presentados en el capítulo 6, surge con claridad la necesidad de dar un tratamiento de naturaleza cuántica al grado de libertad asociado con las rotaciones, ya que por un lado éste juega un papel crítico en la determinación de las características de las trayectorias, en particular de aquéllas que tienen estados finales de fusión, y por el otro, la simetría resulta fuertemente violada restando credibilidad a resultados de importancia fundamental como la existencia y la ubicación de un límite inferior para los impulsos angulares de las trayectorias de fusión (Dav 82; Flo 78; Neg 82).

Desde esta perspectiva el método DVCS aplicado a la conservación de la simetría rotacional puede proveer una referencia importante para la comparación, pues este tratamiento, igualmente microscópico y semiclásico, permite privilegiar la descripción de las rotaciones con una formulación más cercana a la mecánica cuántica, incorporando términos de más de un cuerpo que reflejan algunos aspectos de la interacción residual. Esto posibilita una mayor transferencia de momento angular del grado de libertad colectivo (movimiento relativo de los iones) a la dinámica interna de los núcleos.

Por razones de simplicidad y economía de esfuerzo, se ha concentrado el estudio sobre las rotaciones alrededor del eje perpendicular al plano de reacción, que son las que determinan las características de las trayectorias HFDT. La presentación teórica en el caso tridimensional no presenta diferencias sustanciales salvo aquellos detalles de formulación asociados con el carácter no abeliano del álgebra de Lie del grupo de las rotaciones, de modo que no se hará explícita en este trabajo.

Al igual que en los cálculos HFDT (capítulo 6) se considera que la fuerza está estructurada de forma de compensar los términos de intercambio y que las simetrías de spin e isospin se respetan en primera aproximación. Asimismo se considera que las partículas interactúan binariamente con un potencial

$$V_2(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = t_0 \delta(\bar{x}_1 - \bar{x}_2) + \frac{Z e^2}{A} \frac{1}{|\bar{x}_1 - \bar{x}_2|} + V_0 a \frac{\exp(-|\bar{x}_1 - \bar{x}_2|/a)}{|\bar{x}_1 - \bar{x}_2|} \quad (7.1)$$

donde los valores de los parámetros son los utilizados en el cálculo HFDT (6.6), agregándose de igual forma la interacción de tres cuerpos

$$V_3 = \frac{t_3}{6} \delta(\bar{x}_1 - \bar{x}_2) \delta(\bar{x}_2 - \bar{x}_3) \quad (7.2)$$

Puesto que tanto V_2 como V_3 dependen sólo del módulo de las posiciones relativas de las partículas, el operador de impulso angular conmuta con el hamiltoniano exacto.

Siguiendo la teoría desarrollada en el capítulo 4, se propone la función de onda

$$|\phi, f\rangle = \int d\Omega f(\Omega) R(\Omega) |\phi\rangle, \quad |\phi\rangle = \frac{1}{|A|} A \prod_{\alpha=1}^A |\phi_\alpha\rangle \quad (7.3a)$$

y para los fines del cálculo que sigue, se representa a la amplitud f , por medio de una expansión de Fourier,

$$f(\Omega) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-im\Omega} a_m \quad (7.3b)$$

Por otra parte,

$$R(\Omega) = \exp(iJ_z \Omega) \quad (7.3c)$$

es el operador de rotación alrededor del eje perpendicular al plano de la reacción.

Es conveniente resumir aquí el conjunto de ecuaciones obtenido en el capítulo 4 para la formulación DVCS, en el caso en que el operador asociado con la simetría de interés es el impulso angular; la acción será

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \langle \phi, f | (i \frac{\partial}{\partial t} - H) | \phi, f \rangle = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(t) dt \quad (4.3)$$

donde el lagrangiano adopta la forma

$$\mathcal{L} = \sum_m \left\{ i a_m^* \dot{a}_m \langle \phi | P_m | \phi \rangle + i |a_m|^2 \langle \phi | P_m | \phi \rangle - |a_m|^2 \langle \phi | P_m H | \phi \rangle \right\} \quad (4.5)$$

y los proyectores, P_m , se escriben explícitamente como:

$$P_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-im\theta} e^{iJ_z\theta} d\theta \quad (7.4)$$

De la variación de la acción, (4.3), se obtienen las ecuaciones de movimiento para los parámetros $\{a_m\}$ y $\{|\phi_j\rangle\}$. Las primeras se traducen en las leyes de conservación de la probabilidad de medir cada autovalor de J_z , es decir

$$|a_m|^2 \langle \phi | P_m | \phi \rangle = \langle \phi, t | P_m | \phi, t \rangle \equiv \alpha_m(t) = \alpha_m(0) \quad (4.11)$$

La ecuación de evolución de los estados de partícula independiente se obtiene de (4.12) realizando la variación que simbólicamente se expresa como:

$$\delta_{\phi} \int dt \sum_m \alpha_m \left(i \frac{\langle \phi | P_m | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | P_m | \phi \rangle} - \frac{\langle \phi | P_m H | \phi \rangle}{\langle \phi | P_m | \phi \rangle} \right) = 0 \quad (7.5)$$

En la práctica, el símbolo δ_{ϕ} se concreta en diferenciaciones respecto de las funciones de onda ϕ_j de (7.3a), de modo que (7.5) en realidad da lugar a un sistema de ecuaciones de movimiento acopladas. Globalmente, la ecuación (7.5) representa la dinámica promedio de las dinámicas en los subespacios ortogonales rotulados por los autovalores de J_z , pesadas con la probabilidad de encontrar al sistema en cada subespacio.

Para la resolución de las ecuaciones (7.5) es necesario conocer la métrica simpléctica, (2.15), (4.13), que ellas producen. Teniendo en cuenta que se han despreciado los términos de intercambio en la formulación de este modelo de colisiones, el valor medio del proyector, P_m , (que es el punto de partida para la obtención de la métrica) se expresa en función de los vectores de estado de partículas como:

$$\langle \phi | P_m | \phi \rangle = \sum_{\substack{\{m_j\}, j=1, A \\ \sum m_j = m}} \prod_{j=1}^A \langle \phi_j | P_{m_j} | \phi_j \rangle \quad (7.6)$$

en cuya derivación se explota el hecho de que J_z es un operador de un cuerpo, por lo que

$$e^{iJ_2\Omega} = e^{i\sum_j J_2(x_j)\Omega} = \prod_{j=1}^A e^{iJ_2(x_j)\Omega} \quad (7.7)$$

siendo entonces

$$P_m = \sum_{\substack{\{m_j\}_{j=1,A} \\ \sum m_j = m}} \prod_{j=1}^A P_{m_j}$$

Según lo señalado en el capítulo 4, el tensor simpléctico se obtiene como:

$$\sigma_{jk} = i \sum_m \alpha_m \left(\frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x'_k} - \frac{\partial^2}{\partial x'_k \partial x_j} \right) \ln \langle \phi(x) | P_m | \phi(x') \rangle \quad (4.14)$$

En el caso en estudio los parámetros $\{x_j\}$ pueden identificarse con la parte real e imaginaria de las funciones de onda de partícula que definen los pares coordenada impulso $(\text{Re } \phi_j, \text{Im } \phi_j)$ (Ker 76); tanto para el análisis como para el cálculo explícito es conveniente considerar la parametrización compleja con las coordenadas independientes ϕ_j y ϕ_j^* y se obtiene de (4.14) el tensor métrico para este par como:

$$\sigma'_{jk} = i \sum_m \alpha_m \frac{\partial}{\partial \phi_j^*} \frac{\partial}{\partial \phi_k} \ln \langle \phi | P_m | \phi \rangle \quad (7.8)$$

resultando

$$\begin{aligned} B_{jk} \equiv -i\sigma'_{jk} &= \delta_{jk} + \sum_m |a_m|^2 \sum_{\{m_\ell\}, \sum m_\ell = m} P_{m_j} \prod_{\ell \neq j} \langle \phi_\ell | P_{m_\ell} | \phi_\ell \rangle - \\ &- \sum_m \frac{|a_m|^2}{\langle \phi | P_m | \phi \rangle} \sum_{\{m_\ell\}, \sum m_\ell = m} (P_{m_j} | \phi_j \rangle \langle \phi_k | P_{m_k} + \\ &+ \prod_{\ell \neq k, j} \langle \phi_\ell | P_{m_\ell} | \phi_\ell \rangle) \end{aligned} \quad (7.9)$$

Es conveniente notar que los B_{ji} son los elementos de una matriz de operadores ya que está formada esencialmente por los proyectores P_m .

El operador B asociado por (7.9) a la métrica, resulta semi-definido positivo, pues

$$\langle \Psi | B | \Psi \rangle = \sum_m |a_m|^2 \left\{ \sum_j (\langle \bar{\Psi}_j | P_m | \bar{\Psi}_j \rangle - \frac{|\langle \bar{\Psi}_j | P_m | \phi \rangle|^2}{\langle \phi | P_m | \phi \rangle}) \right\} \quad (7.10)$$

donde

$$|\Psi\rangle = \sum_j \prod_{k \neq j} |\phi_k\rangle |\Psi_j\rangle = \sum_j |\Psi_j\rangle$$

y por la desigualdad de Schwartz generalizada (Mes 65), teniendo en cuenta que $P_m^2 = P_m \gg 0$

$$\langle \Psi_j | P_m | \Psi_j \rangle \langle \phi | P_m | \phi \rangle \geq |\langle \Psi_j | P_m | \phi \rangle|^2,$$

por lo tanto

$$\langle \Psi | B | \Psi \rangle \geq 0 \quad (7.11)$$

cumpliéndose solo la igualdad para el caso en que

$$|\Psi\rangle = \lambda |\phi\rangle \quad \text{o bien} \quad |\Psi\rangle = \lambda J_z |\phi\rangle$$

lo cual asegura la resolubilidad de las ecuaciones DVCS.

7.2 Recubrimiento gaussiano.

La resolución numérica exacta del sistema de ecuaciones DVCS para el problema de las colisiones entre iones no puede ser abordado con nuestra actual disponibilidad de elementos de cómputo, aún cuando se proponga un canal de reducido espacio de configuración como la colisión alfa-alfa. Resulta entonces necesario realizar aproximaciones a las mismas.

El principal problema a resolver es la proyección de la función de onda en los subespacios propios del momento angular, o en forma equivalente, determinar la función de recubrimiento, $F(\Omega)$,

$$F(\Omega) = \langle \phi | R(\Omega) | \phi \rangle \quad (7.12)$$

y la energía de correlación, $f(\Omega)$,

$$f(\Omega) = \langle \phi | H R(\Omega) | \phi \rangle \quad (7.13)$$

Este inconveniente ya ha sido encontrado por otros autores (Lam 68; Fae 70; Bri 68a,b; Rei 83) tanto en problemas estáticos como dinámicos. El procedimiento habitual ha consistido en recurrir a una aproximación gaussiana de $F(\Omega)$ y $f(\Omega)$ en el intervalo $[-\pi/2, \pi/2]$,

$$F(\Omega) \approx \langle \phi | \phi \rangle e^{i\ell\Omega} e^{-\eta\Omega^2/2} \quad (7.14)$$

$$f(\Omega) = \mathcal{F}(\Omega) \cdot \left(\frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + i \Omega H_z - \frac{1}{2} \Omega^2 H_{zz} \right) \quad (7.15)$$

donde

$$l = \langle \phi | J_z | \phi \rangle / \langle \phi | \phi \rangle$$

$$\gamma = \langle \phi | J_z^2 | \phi \rangle / \langle \phi | \phi \rangle$$

$$H_z = (\langle \phi | (J_z - l) H | \phi \rangle) / \langle \phi | \phi \rangle$$

$$H_{zz} = (\langle \phi | (J_z - l) H (J_z - l) | \phi \rangle - \gamma \langle \phi | H | \phi \rangle) / \langle \phi | \phi \rangle$$

La hipótesis gaussiana tal como está aquí presentada ha sido utilizada en el caso estático para el análisis de bandas de energía rotacionales a partir de un estado de Hartree-Fock^(Lam 68; Fas 70) o modos vibracionales^(Bri 68a) estableciéndose una estrecha vinculación entre esta aproximación y la denominada "aproximación de fases al azar"^(Bri 68a,b), habiéndose obtenido un buen acuerdo con el cálculo exacto para valores grandes de η . La aproximación gaussiana ha sido igualmente utilizada por H. Reinhardt^(Rei 83) y colaboradores para expandir la función de onda dependiente del tiempo alrededor del camino clásico (HFDT) para el caso en que ésta sea una aproximación justificada y suponiendo que no existe modificación de la trayectoria semiclásica debido a la perturbación generada por los caminos cercanos.

La aproximación de recubrimiento gaussiano significa una suposición acerca de los momentos de la densidad determinantal $|\phi|^2$, considerada como distribución de probabilidades de la variable aleatoria J_z . En efecto, como

$$\langle \phi | e^{iJ_z \Omega} | \phi \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\Omega)^m}{m!} \langle \phi | J_z^m | \phi \rangle$$

vale para todo $\Omega \in [-\pi, \pi]$, proponer (7.14) es equivalente a afirmar que

$$\langle \phi | (J_z - l)^{2m} | \phi \rangle = \frac{(2m)!}{m! 2^m} \gamma^m \langle \phi | \phi \rangle$$

y

$$\langle \phi | (J_z - l)^{2m+1} | \phi \rangle \approx 0.$$

Estas hipótesis asignan a $|\phi|^2$ el carácter de distribución

gaussiana y consisten básicamente en afirmaciones acerca de la forma y naturaleza de las correlaciones de la variable estocástica J_z que se espera dominen el problema en estudio. En este espíritu, la propuesta del recubrimiento gaussiano asigna un rol relevante a la dispersión η y puede comprenderse mejor luego de un análisis de las características más importantes de $\mathcal{F}(\Omega)$ y $f(\Omega)$.

La función $\mathcal{F}(\Omega)$ tiene módulo máximo para $\Omega=0$ (en virtud de la desigualdad de Schwartz) siendo además $\mathcal{F}(0)$ real. Por otra parte $\mathcal{F}(\Omega_i)$ puede escribirse como producto de los recubrimientos para cada partícula, $f_i(\Omega)$, ya que en virtud de (7.7)

$$\mathcal{F}(\Omega) = \prod_i f_i(\Omega) \quad (7.16)$$

con

$$f_i = \langle \phi_i | R(\Omega) | \phi_i \rangle$$

A este par de condiciones globales debe agregarse la traducción geométrica del hecho físico de que las partículas se encuentran localizadas en cada núcleo, lo que implica que la superposición será mínima (cerca de cero) si se rota la función de onda en un ángulo recto

$$\langle \phi | R(\pm \pi/2) | \phi \rangle \approx 0 \quad (7.17)$$

Por otra parte, una aproximación a la función de recubrimiento, $\mathcal{F}(\Omega)$, debe cumplir con las condiciones de contacto en $\Omega=0$

$$\mathcal{F}(0) = \langle \phi | \phi \rangle \quad (7.18a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \Omega} \Big|_{\Omega=0} = i \langle \phi | J_z | \phi \rangle \quad (7.18b)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \Omega^2} \Big|_{\Omega=0} = - \langle \phi | J_z^2 | \phi \rangle \quad (7.18c)$$

Es fácil ver que este conjunto de condiciones -es. (7.16) a (7.18)- se cumple para una aproximación del tipo gaussiano

$$\mathcal{F}(\Omega) \approx \langle \phi | \phi \rangle e^{i g(\Omega) \Omega} e^{-g_2(\Omega) \Omega^2 / 2} \quad (7.19)$$

con g_1 y g_2 funciones reales que deben cumplir además las siguientes condiciones:

$$g_2(\Omega) \geq 0$$

$$\lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{g_2(\Omega)}{\Omega^2} = 1, \quad \lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{g_1(\Omega)}{\Omega} = 1$$

$$\text{y} \quad \lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{d^2}{d\Omega^2} g_1(\Omega) = 0$$

para satisfacer las condiciones de contacto en $\Omega = 0$.

La elección más simple y a la vez usual, es (Lan 68; Fas 70; Bri 68a, b; Rei 83) la llamada hipótesis gaussiana, ec. (7.14).

El rango de validez de la hipótesis gaussiana no puede determinarse en general, pero por su génesis, su utilización estará justificada cuando $\mathcal{I}(\Omega)$ se emplee como núcleo de un operador integral sobre funciones muy concentradas en un entorno de $\Omega \approx 0$.

Siendo la expresión (7.14) de validez local, para extenderla al rango $-\pi \leq \Omega \leq \pi$ (dominio de integración para la proyección) debe utilizársela tanto en $\Omega = 0$ como en $\Omega = \pi$; en el caso de tener $|\phi\rangle$ una simetría definida, este criterio da lugar a

$$\mathcal{I}(\Omega) = \left(\chi_{-\pi/2, \pi/2}(\Omega) e^{i\ell\Omega - \gamma\Omega^2/2} + \chi_{-\pi/2, \pi/2}(\Omega - \pi) e^{i\ell(\Omega - \pi) - \gamma(\Omega - \pi)^2/2} \right)$$

donde $\chi_{-\pi/2, \pi/2}(\Omega)$ es la función característica en el intervalo $[-\pi/2, \pi/2]$.

Puesto que en principio resulta de interés estudiar la aparición de correlaciones de muchos cuerpos inducidas por la evolución temporal según el método DVCS a partir de un estado inicial de partículas independientes, $|\phi\rangle$, las condiciones para la utilización de la hipótesis gaussiana se verifican en este caso al menos en un entorno del origen de tiempos, ya que la función de onda inicial propuesta es del tipo

$$|\phi, f\rangle = |\phi\rangle = \int \delta(\Omega) \mathcal{R}(\Omega) |\phi\rangle d\Omega$$

estando $f(\Omega)$ concentrada en $\Omega = 0$.

El análisis del término de energía de correlación, $f(\Omega)$ (7.13),

puede hacerse de manera semejante al de $\mathcal{F}(\Omega)$. Como el término asociado con el hamiltoniano presenta un máximo en $\Omega = 0$, siendo $\mathcal{F}(0)$ real (dado que el hamiltoniano es hermitico y acotado inferiormente), ajustando la función y sus derivadas primera y segunda en el origen ($\Omega = 0$) se puede proponer la expresión (7.15) con iguales límites de validez que (7.19).

En forma consistente con la aproximación (7.15) para $\mathcal{F}(\Omega)$, puede proponerse para todo operador A , que conmuta con el impulso angular J_z ,

$$\begin{aligned} \langle \phi | R(\Omega) A | \phi \rangle &= \langle \phi | A R(\Omega) | \phi \rangle \simeq \\ &\simeq \mathcal{F}(\Omega) \left(\frac{\langle \phi | A | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + i \Omega A_z - \frac{\Omega^2}{2} A_{zz} \right) \end{aligned} \quad (7.20)$$

donde $A_z = \langle \phi | (J_z - \ell) A | \phi \rangle / \langle \phi | \phi \rangle$

$$A_{zz} = \left(\langle \phi | (J_z - \ell) A (J_z - \ell) | \phi \rangle - \eta \langle \phi | A | \phi \rangle \right) / \langle \phi | \phi \rangle$$

que completa el cuadro de aproximaciones relacionadas con el recubrimiento gaussiano.

7.3 Las ecuaciones DVCS en la aproximación de recubrimiento gaussiano.

Con la ayuda de la aproximación de recubrimiento gaussiano se pueden obtener las ecuaciones de movimiento de los parámetros $\{a_m\}$ y $\{\phi_j\}$ de (7.3).

La integral de acción, S , está dada por (7.3) y el lagrangiano \mathcal{L} cuya expresión genérica es (4.5) tiene la forma, en este caso,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(t) = \sum_m a_m^* \left\{ i \dot{a}_m P_m^0 + i a_m \left(\langle \phi | \dot{\phi} \rangle P_m^0 + i \langle \phi | (J_z - \ell) | \dot{\phi} \rangle P_m^1 - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2} \langle \phi | (J_z - \ell)^2 | \dot{\phi} \rangle P_m^2 \right) / \langle \phi | \phi \rangle \right\} - \\ - a_m \left(P_m^0 \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + i P_m^1 H_z - \frac{1}{2} P_m^2 H_{zz} \right) \end{aligned} \quad (7.22)$$

donde $P_m^j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\Omega e^{-im\Omega} \Omega^j \langle \phi | R(\Omega) | \phi \rangle$

Los valores medios de estos momentos en la aproximación gaussiana-

na para $\bar{F}(\Omega)$, luego de extender los límites de integración hasta infinito ($\eta \gg 1$) son los siguientes:

$$P_m^0 = \frac{1}{i2\eta} \frac{\langle \phi | \phi \rangle}{\eta^{1/2}} e^{-(\ell-m)^2/2\eta} \quad (7.23a)$$

$$P_m^1 = i P_m^0 \frac{(\ell-m)}{\eta} \quad (7.23b)$$

$$P_m^2 = -P_m^0 \left(\frac{(\ell-m)^2}{\eta} - 1 \right) \frac{1}{\eta} \quad (7.23c)$$

para los n pares (impares) si $|\phi\rangle$ es par (impar) ante rotaciones en π , anulándose los P_m^d en caso contrario.

La variación de la integral de acción respecto de a_m^* produce las ecuaciones

$$\begin{aligned} P_m^0 \left(i \dot{a}_m + i a_m \left(\frac{\langle \phi | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \frac{(m-\ell)}{\eta} \frac{\langle \phi | (j-\ell) | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \frac{1}{2} \left(\langle \phi | ((j-\ell)^2 - \eta) | \dot{\phi} \rangle / \langle \phi | \phi \rangle \right) \right) = \\ = P_m^0 a_m \left(\frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \frac{(m-\ell)}{\eta} H_z + \frac{1}{2} \left(\frac{(\ell-m)^2}{\eta} - 1 \right) \frac{1}{\eta} H_{zz} \right) \end{aligned} \quad (7.25)$$

y en forma análoga a (4.11) se obtiene la integral de movimiento

$$i a_m |^2 P_m^0 = \alpha_m(t) = \alpha_m(0) \quad (7.26)$$

con cuya expresión es posible reducir la integral de acción, S, para realizar la variación según $\{\phi_j^*\}$ y obtener el equivalente de (4.12) en el caso presente, a saber

$$\begin{aligned} S \approx \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_m \alpha_m \left\{ i \left(\frac{\langle \phi | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \Omega_{1m} \frac{\langle \phi | (j_2-\ell) | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \Omega_{2m} \frac{\langle \phi | ((j_2-\ell)^2 - \eta) | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} - \right. \right. \\ \left. \left. - \left(\frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \Omega_{1m} H_z + \Omega_{2m} H_{zz} \right) \right\} \end{aligned} \quad (7.27)$$

donde $\Omega_{1m} = \frac{(m-\ell)}{\eta}$ y $\Omega_{2m} = \left(\frac{(m-\ell)^2}{\eta} - 1 \right) \frac{1}{\eta}$

Las sumas involucradas en (7.27) se resuelven de inmediato ya que $\alpha_m \propto P_m^0(0) = \langle P_m^0 \rangle$ y por lo tanto $\langle \phi, f | P_m | \phi, f \rangle = \sum_m |a_m|^2 \langle \phi | P_m | \phi \rangle = \sum_m \alpha_m = 1$ si $|\phi, f\rangle$ está normalizada inicialmente, entonces:

$$\sum_m \alpha_m = 1, \quad \sum_m \alpha_m m = l_0, \quad \sum_m \alpha_m m^2 = \eta_0 + l_0^2$$

con η_0 y l_0 los valores iniciales de η y l . Por lo tanto es

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ i \frac{\langle \phi | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} - \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \Omega_1 \left(\frac{\langle \phi | (J_z - l) | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} - H_z \right) + \right. \\ \left. + \frac{\Omega_2}{2} \left(\frac{\langle \phi | ((J_z - l)^2 - \eta) | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} - H_{zz} \right) \right\} \quad (7.28)$$

$$\text{con } \Omega_1 = (l_0 - l) / \eta$$

$$\text{y } \Omega_2 = \frac{(l_0 - l)^2 + \eta_0}{\eta^2} - \frac{1}{\eta}$$

De igual forma el valor medio de cualquier observable que conmuta con J_z , y en particular el hamiltoniano, queda expresado como:

$$\langle \phi, t | A | \phi, t \rangle = \frac{\langle \phi | A | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \\ + \frac{1}{2} \left(\frac{l_0}{\eta} - 1 \right) \frac{1}{\eta} \left(\frac{\langle \phi | (J_z - l) A (J_z - l) | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} - \eta \frac{\langle \phi | A | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right) \quad (7.29)$$

Anticipándose un resultado que será extraído a partir del cálculo detallado de la variación en el apéndice B, se ha hecho uso de que $\langle \phi | J_z | \phi \rangle / \langle \phi | \phi \rangle = l_0$ para todo tiempo. La igualdad queda justificada al observar que existe una variación asociada a $|\phi\rangle$ del tipo $J_z |\phi\rangle$ y puesto que J_z conmuta tanto con la métrica (7.9), como con el hamiltoniano, debe ser:

$$l = \langle \phi, t | J_z | \phi, t \rangle = \frac{\langle \phi | J_z | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = l_0 \quad (7.30)$$

(en el apéndice B se demuestra que (7.30) es consistente con la aproximación gaussiana).

La obtención de las ecuaciones para las funciones de onda de las partículas a partir de la variación de S (7.28) es un proceso de cálculo largo que no entraña la aparición de nuevos elementos. Este cálculo está descrito en apéndice B, del cual se extrae la ecuación de evolución

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_j} \left[1 + \frac{\Omega^2}{2} ((j_2 - \ell_j)^2 - \eta_j^2) \right] (i \frac{\partial}{\partial t} - H_0) \phi_j - \frac{1}{N_j} \mathcal{L}_D \phi_j - \frac{1}{N_j} \mathcal{L}_Z (j_2 - \ell_j) \phi_j - \\
& - \frac{1}{2} \left(\frac{2\eta_0}{\eta} - 1 \right) \frac{1}{\eta^2} \mathcal{L}_{ZZ} \frac{1}{N_j} ((j_2 - \ell_j)^2 - \eta_j^2) \phi_j = \\
& = \frac{1}{N_j} \left(1 + \frac{\Omega^2}{2} ((j_2 - \ell_j)^2 - \eta_j^2) \right) (h_{HF} - H_0) \phi_j + \\
& + \frac{2}{N_j} \Omega_2 (j_2 - \ell_j) \left[\int V(x-y) \mathcal{D}_2^*(y) dy + \frac{3}{8} t_3 \mathcal{D}_3^* \right] \phi_j - \\
& - \frac{2}{N_j} \Omega_2 \left[\int V(x-y) \mathcal{D}_2^*(y) \mathcal{D}_2^*(x) dx dy + \frac{3}{8} t_3 \int \mathcal{D}_2^*(x) \mathcal{D}_2^*(x) dx \right] (j_2 - \ell_j) \phi_j - \\
& - \frac{2}{N_j} \Omega_2 \left[\int \mathcal{D}_2^*(x) V(x-y) \mathcal{D}_2(y) dx dy + \frac{3}{8} t_3 \int \mathcal{D}_2^*(x) \mathcal{D}_2^*(x) dx \right] (j_2 - \ell_j) \phi_j - \\
& - \frac{\Omega^2}{N_j} \left[\int V(x-y) \mathcal{D}_2^*(x) \mathcal{D}_2^*(y) dx dy + \frac{3}{16} \int \mathcal{D}_2^*(x) \mathcal{D}_2^*(x) dx \right] ((j_2 - \ell_j)^2 - \eta_j^2) \phi_j + \\
& + \frac{\Omega^2}{N_j} \left[\int V(x-y) \mathcal{D}_2^*(y) dy + \frac{3}{16} t_3 \mathcal{D}_2^* \right] \phi_j \quad (7.31)
\end{aligned}$$

donde h_{HF} es el hamiltoniano de Hartree-Fock

$$h_{HF} = H_0 + 2 \int V(x-y) \rho(y) dy + \frac{3}{16} t_3 \rho^2 \quad (7.32)$$

con $\rho = \sum_{\alpha=1}^A \frac{1}{N_j} |\phi_j|^2(x) = \sum_{\alpha} \rho_j(x)$, $N_j = \int (\phi_j^* \phi_j)(x) dx$

y se ha utilizado la notación

$$D(x) = \sum_{\alpha} \frac{1}{N_j} (\phi_j^* (\frac{1}{2} \cdot l_j) \phi_j) = \sum_{\alpha} D_j(x)$$

$$D_2(x) = \sum_{\alpha} \frac{1}{N_j} (\phi_j^* ((\frac{1}{2} \cdot l_j)^2 - \eta_j) \phi_j)(x) = \sum_{\alpha} D_{2j}(x)$$

$$\rho_j = \frac{1}{N_j} \int (\phi_j^* (\frac{1}{2} \cdot l_j)^2 \phi_j) dx$$

$$l_j = \frac{1}{N_j} \int (\phi_j^* \frac{1}{2} \phi_j) dx$$

$$y \quad \mathcal{L}_j = \frac{1}{N_j} \left\{ \int (\phi_j^* [1 + \frac{\Omega_2}{2} ((\frac{1}{2} \cdot l_j)^2 - \eta_j)]) (i \frac{\partial}{\partial t} - h_{HF}) \phi_j \right\} dx +$$

$$+ \Omega_2 \left[\int V(x-y) D_2^*(x) \rho_j(y) dx dy + 2 \int V(x-y) D^*(x) D_j^*(y) dx dy \right] +$$

$$+ \Omega_2 \left[\frac{3}{16} t_3 \int (D^*(x) \rho(x) \rho_j(x)) dx + \frac{3}{4} t_3 \int (D^*(x) D_j^*(x) \rho(x)) dx \right]$$

Siendo

$$V(x-y) = \frac{3}{8} t_0 \delta(x-y) + V_{Coul}(x-y) + V_{Yuk}(x-y)$$

Se puede buscar una solución a (7.31) de la forma

$$i \dot{\phi}_j = h_{HF} \phi_j + \Psi_j \quad (7.33a)$$

donde Ψ_j es la componente de la derivada temporal proveniente de haber incluido en la función de onda total correlaciones de varios cuerpos; la función

Ψ_j cumple con la ecuación

$$\begin{aligned}
& \left(1 + \frac{\Omega^2}{2} [(1_2 - \ell_j)^2 - \gamma_j]\right) \psi_j - \Omega^2 \int (\phi_j^* (1_2 - \ell_j) \psi_j) (1_2 - \ell_j) \phi_j - \\
& - \frac{\Omega^2}{2} \int (\phi_j^* \psi_j) [(1_2 - \ell_j)^2 - \gamma_j] \phi_j - \mathcal{L}_j \phi_j + \\
& + \frac{1}{2} \left(\frac{2\gamma_0}{\gamma} - 1\right) \frac{1}{\gamma^2} \int (\phi_j^* ((1_2 - \ell_j)^2 - \gamma_j) \psi_j) ((1_2 - \ell_j)^2 - \gamma_j) \phi_j = \\
& = \Omega^2 \left\{ (1_2 - \ell_j) \left[2 \int V(x-y) \mathbb{D}_y^* \psi_j dy + \frac{3}{8} t_3 \int \mathbb{D}^* \right] + \right. \\
& \quad \left. + \int V(x-y) \mathbb{D}_2^*(y) dy + \frac{3}{16} t_3 (\mathbb{D}^*)^2 + \frac{3}{16} t_3 \mathbb{D}_2 \int - \right. \\
& \quad \left. - \frac{3}{8} t_3 \int \mathbb{D}^*(x) \mathcal{P}_1(x) dx - 2 \int \mathbb{D}^*(x) V(x-y) \mathbb{D}_y^* dx dy \right\} \phi_j - \\
& - \left(\frac{2\gamma_0}{\gamma} - 1\right) \frac{1}{\gamma^2} \left[\int \mathbb{D}^*(x) V(x-y) \mathbb{D}_y^*(y) dx dy + \frac{3}{16} t_3 \int (\mathbb{D}^*(x))^2 \mathcal{G}(x) dx \right]^* \\
& * \left\{ (1_2 - \ell_j)^2 - \gamma_j \right\} \phi_j \tag{7.33b}
\end{aligned}$$

Comparando el lado izquierdo de la fórmula (7.31) con (7.9), surge al estudiar el término diagonal que la aproximación gaussiana implica

$$\left\{ 1 + \frac{\Omega_2}{2} \left[\left(\frac{1}{2} \ell_j \right)^2 - \eta_j \right] \right\} \approx \sum_{\substack{m_k \\ k \neq j}} |a_{\Sigma m_k}|^2 \pi \langle \phi_k | P_{m_k} | \phi_k \rangle P_{m_j} \quad (7.34)$$

Como el operador de la derecha en (7.34) es definido positivo, debe tener iguales características el lado izquierdo de la igualdad, o sea

$$\left(1 + \frac{\Omega_2}{2} \left[\left(\frac{1}{2} \ell_j \right)^2 - \eta_j \right] \right) \geq 0 \quad (7.35)$$

y dado que $\left(\frac{1}{2} \ell_j \right)^2$ es un operador definido positivo y no acotado, la condición (7.35) implica

$$\Omega_2 \geq 0, \quad \eta_0 \geq \eta \quad (7.36)$$

$$2\eta \geq \eta_j (\eta_0 - 1) \quad \forall j \quad (7.37)$$

Las condiciones (7.36) y (7.37) fijan los límites en que el sistema de ecuaciones (7.31) o (7.33) puede resolverse.

7.4 Cálculos numéricos.

El estudio de las ecuaciones DVCS (7.33) se realizó numéricamente discretizando $\phi_j(x)$ en una malla bidimensional, proponiendo la factorización

$$\phi_j(\bar{x}, t) = \tilde{\phi}_j(x, y, t) \chi_j(z) \quad (7.38)$$

en una aproximación de coordenada congelada similar a la utilizada en los cálculos HFDT del capítulo 6.

El análisis se limitó a colisiones alfa-alfa por las limitaciones de memoria de cálculo y tiempo de computo que existían, discretizándose $\tilde{\phi}_j$ en una malla de 35 x 25 puntos y un paso de 0.7 fm, asumiendo una simetría de ϕ_j respecto a inversiones por el origen

$$\phi_j(\bar{x}) = \pi_j \phi_j(-\bar{x}) \quad (7.39)$$

π_j paridad de la función j -ésima
 y ajustando $\chi_j(z)$ (7.38) por una gaussiana cuya dispersión en la coordena-
 da z es igual a la que se obtiene para las coordenadas x ó y y al realizar el
 cálculo de Hartree-Fock que provee el estado fundamental de los núcleos.

Los operadores diferenciales fueron aproximados por diferencia
 finitas (Abr 72) a un orden $(\Delta x)^5$ utilizandose para la resolución de las
 ecuaciones (7.33) el método del gradiente conjugado (Mit 80) que resulta
 aplicable siempre y cuando el operador de la métrica sea definido positivo
 como se requiere en (7.35).

La integración temporal se efectuó con el método predictor-
 corrector de Adams (Hil 56) comprobándose que tanto el valor medio de J_z como
 la energía permanecían constantes dentro de un error relativo de 10^{-3} .

El potencial utilizado en el cálculo fue una versión simplifi-
 cada de (7.1)

$$V_2(\vec{x}, \vec{y}) = t_0 \delta(\vec{x} \cdot \vec{y}) \quad (7.40)$$

reajustándose los parámetros de acuerdo con el trabajo de Bonche y colabo-
 radores (Bon 78)

t_0	t_3
-1099. MeV fm ³	17624. MeV fm ⁵

con los cuales se obtiene una energía de ligadura por nucleón para las parti-
 culas alfa de 8.6 MeV, y una barrera coulombiana de aproximadamente 1 MeV
 (Dev 78b).

Como estado inicial de la colisión se consideró dos núcleos
 de ${}^4\text{He}$ en su estado fundamental (de Hartree-Fock) alejados 5.6 fm del centro
 de masas del sistema en la dirección x , con distintos parámetros de impacto.
 Se provee a cada núcleo de un impulso Ak con dirección $(-x)$ al centro de
 masas al multiplicar por $\exp(-ikx)$ la función de onda resultante del cálculo
 de Hartree-Fock; el estado inicial utilizado es idéntico al empleado en los
 cálculos de HFDT en el capítulo 6 con el fin de minimizar las diferencias
 entre DVCS y HFDT en todo cuanto no sea la dinámica.

Como resultado de este estudio numérico se pudo comprobar que la aproximación gaussiana efectuada para la función de recubrimiento $\overline{F}(\Omega)$ (7.14) deja de ser una representación consistente de los proyectores -(7.35), (7.36)- en un tiempo del orden de una centésima de la duración estimada de una colisión cuasielástica, prácticamente con independencia del impulso angular y la energía, pues la evolución para esos tiempos se limita a la translación de los núcleos.

En los instantes iniciales del proceso de colisión se observa que el valor de η decrece a partir de η_0 tanto por la componente HFDT de la derivada temporal como por la corrección introducida por DVCS (7.33). Debe notarse que la corrección Ψ_j introducida por las correlaciones no es nula a $t=0$, es decir que las trayectorias HFDT y DVCS en la variedad de Grassmann no son tangentes inicialmente. Esta tendencia inicial se ve rápidamente alterada en vista del crecimiento de Ψ_j que favorece la población de los momentos angulares cercanos a $(\eta_j^{1/2} + \ell_j)$ ya que la inversa del operador métrico

$$\sigma_{jj}^{-1} = -i \left[1 + \frac{\Omega_2}{2} \left((J_2 - \ell_j)^2 - \eta_j \right) \right]^{-1}$$

presenta el menor amortiguamiento para esos valores de n . Se encuentra que al progresar la evolución este último efecto predomina sobre el decrecimiento de η y gobierna las ecuaciones de movimiento, produciendo al cabo de algunos pasos de tiempo, una gran dispersión del determinante ($\eta > \eta_0$). A partir de allí, la aproximación gaussiana pierde significado pues al adoptar Ω_2 valores negativos crecientes y caducar la relación (7.36), la métrica σ_{jj} (de la ecuación (7.35)) tiene autovalores cero y posteriormente negativos. Cuando ello ocurre no solo no se cumple la condición (7.35) sino que resulta imposible resolver la ecuación (7.31) con un método numérico, al existir un autovalor algorítmicamente nulo.

7.5 Conclusiones.

Del análisis desarrollado en los puntos 7.1 a 7.4 surgen un número de conclusiones importantes tanto acerca de la consistencia de la

hipótesis gaussiana y las limitaciones para su aplicación como en cuanto a la importancia de la corrección de la trayectoria HFDT debido a los términos de varios cuerpos de la función de onda presentes en DVCS.

En primer lugar, debe señalarse que en el caso de una simetría fuertemente violada, como el aquí estudiado, la trayectoria del determinante asociado con la función DVCS resulta enteramente diferente del de HFDT como lo evidencia el hecho de que en una colisión HFDT la dispersión η permanece durante casi todo el proceso en valores menores que el inicial, η_0 , (salvo en la etapa final de reseparación), mientras que en el caso DVCS el valor η_0 es rápidamente superado. Este comportamiento señala la importancia de la corrección de la trayectoria debido a la incorporación de componentes de varios cuerpos en la función de onda y preanuncia que existirán significativas diferencias entre una proyección a priori como la realizada en el método DVCS y una proyección a posteriori como la propuesta por otros autores (véase Rei 83) para el caso de ruptura de simetrías.

Por otra parte se ha encontrado que en el presente caso la aplicación de la hipótesis gaussiana (h. g.) en forma autoconsistente no resulta posible ya que la naturaleza de la aproximación a los proyectores contenida en ella puede cambiar sustancialmente en el curso de la evolución, al extremo de que éstos pueden resultar, con el tiempo, operadores no definidos. Podría pensarse, como alternativa, en forzar la consistencia de la aproximación gaussiana; para ello basta observar que en la formulación DVCS exacta se tiene

$$\langle \phi, f | (J_z - l_0)^{2m} | \phi, f \rangle = cte ,$$

y en la versión que hace uso de la h. g. (7.20)

$$\langle \phi, f | (J_z - l_0)^{2m} | \phi, f \rangle \simeq \frac{(2m)!}{m! 2^m} \eta^m \left(1 + \left(\frac{\eta_0 - \eta}{\eta} \right) m \right) \quad (7.41)$$

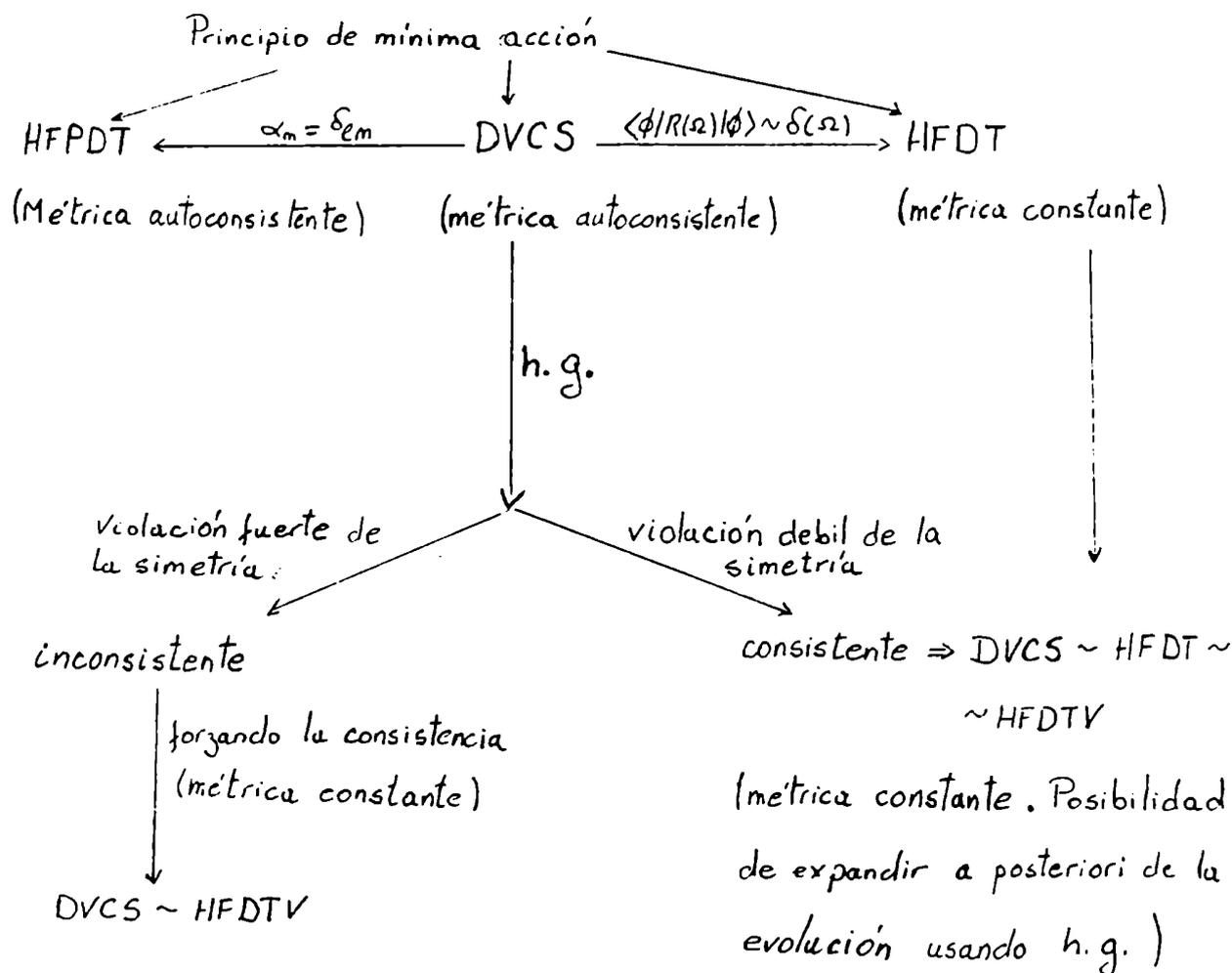
debiendo ser entonces $\eta_0 \sim \eta$ si se espera que la h. g. permita una dinámica del tipo DVCS exacto a todo tiempo.

Esta observación lleva a establecer relaciones entre DVCS,

HFDT y Hartree-Fock dependiente del tiempo vinculado (HFDTV). (Se entiende aquí por HFDTV (Vill 65) a la resolución de las ecuaciones HFDT restringiendo la variación de los determinantes de modo de mantenerse constante el valor medio de uno o más observables que actúan de vínculo, en el caso particular que se estudia el vínculo a establecer sería

$$\langle \phi | (A_z - l_0)^2 | \phi \rangle = \gamma_0).$$

Las relaciones entre los procedimientos mencionados pueden visualizarse en el siguiente cuadro:



Otra alternativa consistiría en proponer otras funciones para el recubrimiento $\mathcal{F}(Q)$ que tengan en cuenta potencias superiores de J_g , en cuyo caso el cálculo podrá eventualmente ser no-consistente. Si en estas condiciones se forzara la consistencia las ecuaciones DVCS así obtenidas no resultarían equivalentes a HFDTV ya que la métrica del primero dependerá del tiempo en contraste con la del segundo.

Por último debe notarse que a pesar de la posibilidad expresada en el párrafo anterior, la única garantía de consistencia se encuentra en la proyección exacta de la función de onda en los distintos subespacios. Es deseable poder realizar en un futuro dicho cálculo, ya que la importancia que reviste la violación de la simetría rotacional en el caso de las colisiones de iones livianos y la trascendencia de este efecto sugiere la aplicación de un tratamiento de inspiración cuántica como el proporcionado por DVCS, sin posteriores aproximaciones.

8. RESUMEN.

En este trabajo de tesis se ha profundizado en la extracción de subdinámicas de la dinámica de Schrödinger de muchos cuerpos mediante la aplicación del principio variacional, analizando las características de las ecuaciones hamiltonianas que resultan de este procedimiento y examinando muy especialmente la evolución de los valores medios de operadores relacionados con las simetrías del sistema.

En particular, se ha analizado el método del campo medio auto-consistente (HFDT), que es la formulación más popular en la literatura del tema y la que ha merecido mayores usos y aplicaciones en el caso de la dinámica nuclear. Al estudiar las distintas formas de generar este método, se encontró que todas ellas lo señalaban como aproximación de tiempo corto, pudiéndose establecer una cota inferior para su tiempo de validez, pero no una superior.

El estudio de la ruptura de simetría en el modelo LMG sugiere que los valores medios de los observables relacionados con las simetrías del sistema físico pueden ser utilizados como estimadores consistentes de la validez de una aproximación en el transcurso del tiempo, pues se observa en este modelo una alta correlación entre violación de una simetría y apartamiento entre la función de onda exacta y la aproximada. La conservación aproximada de las simetrías representa una condición necesaria para la credibilidad de una dada formulación subdinámica que pretenda reproducir los rasgos más importantes de la dinámica de origen.

La posibilidad de utilizar funciones de onda que contengan correlaciones de varios cuerpos con el fin de restaurar las simetrías violadas, sin excesivo incremento de las dificultades de cálculo respecto de HFDT, se ha estudiado en el capítulo 4; proponiéndose como alternativa un método que conserva las simetrías (DVCS).

Este método es generado desde dos puntos de partida levemente diferentes, según que se utilice operadores de proyección sobre un determinante de Slater de referencia o coordenadas generatrices que permiten la super-

posición de varios de esos determinantes, obtenidos todos ellos a partir de uno dado por la acción de un grupo de Lie. La imposición del principio variacional da lugar a una dinámica sobre la variedad de Grassmann, que coincide con la de HFDT en el límite "estrictamente clásico" en el cual el generador de evolución HFDT respeta las simetrías del sistema. En el otro extremo, podría situarse el límite "estrictamente cuántico" en el cual la función de onda variacional es autofunción del operador de simetría; este extremo habitualmente reproducido al proyectar el determinante de Slater (HFPDT), se recupera también a partir de DVCS. Por lo tanto, se ha establecido que éste representa una suerte de método interpolador entre HFDT y HFPDT, con los cuales se identifica en los respectivos límites.

La aplicación del método DVCS al modelo LMG produce un significativo incremento en la concordancia entre la aproximación y los resultados exactos para aquellas trayectorias de fuerte ruptura de la simetría, coincidiendo con HFDT en los restantes casos.

Asimismo se estudió, sobre el modelo LMG, la posibilidad de introducir perturbaciones a una aproximación de HFDT utilizada como orden cero para la evolución temporal, observando que esta variante resulta de utilidad sólo para tiempos muy cortos, del orden del límite inferior de validez en el tiempo de HFDT. Esta observación lleva a concluir que las correcciones a la dinámica determinantal encarnada por HFDT deben buscarse dentro de su mismo espíritu, en el sentido de concepción global (enfrentado a local) y extracción de subdinámica colectiva.

Con las herramientas desarrolladas se estudiaron aspectos de las colisiones de iones livianos (en un modelo alfa-alfa) en la aproximación HFDT. Con este objetivo se desarrolló un juego de programas bi y tridimensionales con los cuales se examinaron comportamientos relacionados con la ruptura de simetrías en este modelo.

Se observó un tratamiento muy disímil por parte de HFDT de los grados de libertad translacional y rotacional, ya que la simetría translacional se conserva aceptablemente en contraposición con la rotacional. Se pudo determinar que la ruptura de dicha simetría se debe en primer lugar al hecho

que debido a las características saturantes de la interacción nuclear, los participantes de la colisión se aproximan comportándose como esferas rígidas, trasladándose con la dinámica HFDT, y en segundo lugar, a la intensa disipación ocurrida en los procesos del tipo de fusión y fuertemente inelástico que no encuentra una respuesta satisfactoria en la descripción de campo medio. Asimismo se observó que las trayectorias de fusión están caracterizadas no sólo por una gran transferencia de energía del movimiento translacional relativo a grados de libertad internos, sino también por una rápida transferencia de momento angular del movimiento relativo al intrínseco, en los momentos iniciales de la fusión.

Se concluye que atributos de esta dinámica tales como la dependencia crítica de las características de las órbitas respecto del impulso angular inicial, la rápida transferencia de éste desde el movimiento relativo al interno de los núcleos y la fuerte variación de la dispersión del momento angular con la consiguiente violación de simetría reclaman un tratamiento especial de este grado de libertad que supere al proporcionado por HFDT y permita corroborar o rectificar predicciones tales como la existencia de un límite inferior del momento angular para las trayectorias de fusión.

Finalmente se intentó resolver el problema de las colisiones de iones livianos en la aproximación DVCS dando un tratamiento privilegiado a las rotaciones en el plano de reacción. Debido a los excesivos requerimientos de cómputo (para nuestras actuales posibilidades) se recurrió a la utilización de una hipótesis gaussiana para las funciones de recubrimiento que deben calcularse en el método DVCS, implementándose un programa para resolver las ecuaciones numéricamente.

El análisis numérico permitió mostrar e interpretar luego por vía analítica que en el caso de una ruptura importante de la simetría la hipótesis gaussiana pierde en breve tiempo su consistencia al producir operadores no-definidos como aproximación de operadores definidos positivos. Un análisis posterior de consistencia muestra que la imposición de la hipótesis gaussiana se justifica cuando DVCS, HFDT y HFDTV son equivalentes; en este caso se puede llevar a cabo la proyección aproximada descrita con la hipóte-

sis gaussiana con posterioridad al cálculo de la trayectoria HFDT, ya que los caminos más cercanos al clásico, que podrían contribuir a una superposición, resultan paralelos a él. Por el contrario, en el caso de fuerte interacción con caminos vecinos, como en las colisiones de iones livianos, es necesario recurrir a la resolución exacta de las ecuaciones DVCS.

Este trabajo inaugura la posibilidad de cotejar el método de HFDT con otro de similares fundamentos (DVCS) y establece así la primera alternativa factible de realización a aquél, con una formulación igualmente microscópica. Como próxima aplicación, resultará necesario, en un futuro cercano, realizar un cuidadoso estudio de las llamadas ventanas de fusión para las colisiones entre iones livianos, con el objetivo de dilucidar en qué medida su existencia y ubicación dependen de la restricción del vector de estado a un único determinante de Slater.



Apéndice A: PROYECTORES.

Los proyectores juegan un rol esencial en la aproximación DVCS, es por ello que resulta conveniente contar con expresiones generales de los mismos que faciliten el cálculo.

El método de proyección de Peierls-Yoccoz^(Pei 57; Boh 69; Lam 68) ha sido ampliamente utilizado en relación con las rotaciones. En este apéndice se intenta una generalización a la expresión para los proyectores;

$$P_k^J = \int (D_{kk}^J(\omega))^* R(\omega) d\omega \quad (\text{A.1a})$$

con $D_{kk}^J(\omega) = \langle Jk | R(\omega) | Jk \rangle \quad (\text{A.1b})$

las matrices asociadas a las rotaciones y $|Jk\rangle$ los estados de la J -ésima representación irreducible del grupo de las rotaciones ($SU(2) \simeq O(3)$).

Sea G un grupo de Lie compacto y $g(\Omega) \in G$ los operadores del grupo en una representación finita y unitaria, R , y sean $\{|\nu\alpha\rangle\}$ los vectores de la ν -ésima representación irreducible de G , autoestados de los operadores diagonales del álgebra \mathfrak{g} asociada al grupo de Lie G , en una descomposición normal del álgebra^(Gil 74*)

$$H_i |\nu\alpha\rangle = \alpha_i |\nu\alpha\rangle \quad (\text{A.2})$$

con $[H_i, H_j] = 0$, $[H_i, E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha$

y $\mathfrak{g} = \{H_i\} \oplus \{E_\alpha\}$, $i = 1, \dots, l$, $l = \text{rango del álgebra.}$

$\{H_i\}$ antihermíticos en una representación unitaria.

Teorema 1: el operador

$$P_\alpha^\nu = d^{-1} \int d\mu(g) (D_{\alpha\alpha}^\nu(g))^* g \quad (\text{A.3})$$

asociado con los elementos, g , de un grupo de Lie compacto G , en una representación unitaria, finita, no necesariamente irreducible, a través de la medida invariante μ y la función

$$D_{\alpha\alpha}^\nu = \langle \nu\alpha | g | \nu\alpha \rangle \quad (\text{A.4})$$

(con $(D_{\alpha}^{\nu})^* = \langle \nu\alpha | g^{-1} | \nu\alpha \rangle$
 nes unitarias),

dado que se trata de representacio-

es el operador de proyección sobre el estado $|\nu\alpha\rangle$.

Este teorema propone la extensión del operador (A.1) en forma natural para cualquier grupo de simetrías. Los requerimientos de compacidad y finitud aseguran que la representación, R, del grupo es completamente reducible. (Las representaciones reducibles son en este caso suma directa de representaciones irreducibles (Ham 64)).

Para la demostración del teorema es conveniente estudiar en primer lugar un operador, B, asociado con el proyector (A.3).

Lema 1: Si el operador $B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'}$ definido por

$$B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'} = \int d\mu(g) g |\nu\alpha\rangle \langle \nu'\alpha' | g^{-1} \quad (\text{A.5})$$

es proporcional a la identidad en el subespacio irreducible ν -ésimo (proyecta sobre la representación ν -ésima), es decir

$$B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'} \delta_{\alpha\alpha'} d I_{\nu} \quad (\text{A.6})$$

entonces P_{α}^{ν} es el proyector sobre el estado $|\nu\alpha\rangle$.

En efecto, considérese la acción de $B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'}$ sobre un vector $|\eta\delta\rangle$

$$\begin{aligned} B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'} |\eta\delta\rangle &= \int d\mu(g) g |\nu\alpha\rangle \langle \nu'\alpha' | g^{-1} |\eta\delta\rangle \\ &= \int d\mu(g) g |\nu\alpha\rangle (D_{\alpha'\delta}^{\nu'})^* \delta_{\nu'\eta} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

ya que g no conecta representaciones irreducibles (R es completamente reducible por ser finita y G compacto). Luego si se cumple (A.6)

$$\begin{aligned} B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'} |\eta\delta\rangle &= \delta_{\nu\nu'} d \delta_{\alpha\alpha'} I_{\nu} |\eta\delta\rangle \\ d \delta_{\nu\nu'} \delta_{\alpha\alpha'} |\nu\alpha\rangle &= \int d\mu(g) (D_{\alpha'\delta}^{\nu'}) g |\nu\alpha\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

entonces $P_{\alpha'\alpha}^{\nu'} |\nu\alpha\rangle = \delta_{\nu\nu'} \delta_{\alpha\alpha'} |\nu\alpha\rangle$

con lo que queda probado el lema 1.

Lema 2: El operador $B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'}$ proyecta sobre el subespacio irreducible ν -ésimo de la forma

$$B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'} = d \delta_{\nu\nu'} \delta_{\alpha\alpha'} I_{\nu} \quad (\text{A.6})$$

Para demostrar (A.6) se multiplica $B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'}$ (A.5) por $k \in G$ y k^{-1} (por izquierda y derecha respectivamente), y utilizando la invariancia de la medida se obtiene

$$\begin{aligned} k B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'} k^{-1} &= \int d\mu(g) (kg) |\nu\alpha\rangle \langle \nu\alpha' | g^{-1} k^{-1} \\ &= \int d\mu(kg) (kg) |\nu\alpha\rangle \langle \nu\alpha' | (kg)^{-1} \\ &= B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

luego $B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'}$ conmuta con todos los elementos de G .

Ahora bien, como el lema de Schur ^(Gil 74a; Ham 64) establece que si una matriz, A , es tal que

$$D(g) A = A D'(g) \quad , \forall g \in G$$

con D y D' representaciones no equivalentes, entonces $A = 0$, y si D y D' son equivalentes entonces $A = d I$.

Como consecuencia del lema de Schur

$$B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'} B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu} \quad (\text{A.10a})$$

$$y \quad B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu} = d_{\alpha\alpha'} I_{\nu} \quad (\text{A.10b})$$

donde $d_{\alpha\alpha'}$ es un número no necesariamente distinto de cero.

Para establecer el valor de $d_{\alpha\alpha'}$ es conveniente estudiar la descomposición de G en coclases. Considérese el subgrupo abeliano H , de G ($H \subset G$) generado por los operadores $\{H_i\}$ (A.2), el subgrupo H genera una descomposición de G en coclases de la forma ^(Gil 74a)

$$g = ch \quad , g \in G \quad , h \in H \quad , c \in G/H \quad (\text{A.11a})$$

y una descomposición de la medida invariante (Gil 74a)

$$d\mu(g) = d\mu_c(c) d\mu_H(H) \quad (\text{A.11b})$$

resultando además $d\mu(h) = \prod_{i=1}^{\ell} d\omega_i$ por ser H abeliano (si $h = \exp(\sum_{i=1}^{\ell} H_i \omega_i)$).

El operador $B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'}$ se puede escribir entonces como:

$$\begin{aligned} B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'} &= \iint d\mu_c(c) d\mu_H(h) \langle h | \nu \alpha \rangle \langle \nu \alpha' | h^{-1} c^{-1} \\ &= \int d\mu_c(c) \langle \nu \alpha | c \rangle \langle \nu \alpha' | c^{-1} \int (\prod d\omega_j) \exp(\sum_j (\alpha_j - \alpha'_j) \omega_j) \\ &= \int d\mu_c(c) \langle \nu \alpha | c \rangle \langle \nu \alpha' | c^{-1} \delta_{\alpha\alpha'} (2\pi)^{\ell} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Utilizando los resultados de (A.10) y (A.12)

$$\begin{aligned} B_{\alpha\alpha'}^{\nu\nu'} &= \delta_{\nu\nu'} \delta_{\alpha\alpha'} d_{\alpha'} \int d\mu_c(c) \langle \nu \alpha | c \rangle \langle \nu \alpha | c^{-1} \\ &= \delta_{\nu\nu'} \delta_{\alpha\alpha'} d_{\alpha} I_{\nu} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

con $d_{\alpha} \neq 0$

$$d_{\alpha} = (2\pi)^{\ell} \int d\mu_c(c) |\langle \nu \alpha | c | \nu \alpha \rangle|^2 \quad (\text{A.14})$$

Como consecuencia de (A.13) y (A.14) queda demostrado el lema

2.

De la demostración de los lemas 1 y 2, surge como corolario el teorema 1. El proyector P_{α}^{ν} puede escribirse, utilizando la descomposición en coclases (A.11a), (A.11b) y (A.14)

$$\begin{aligned} P_{\alpha}^{\nu} &= \frac{1}{d_{\alpha}} \left[\int d\mu_c(c) (d_{\alpha}^{\nu}(c))^* c \right] * \left[\int d\mu_H(h) e^{\sum_j \alpha_j^* \omega_j} h(\omega) \right] \\ &= \frac{1}{d_{\alpha}} \left[\int d\mu_H(h) e^{\sum_j \alpha_j^* \omega_j} h(\omega) \right] * \left[\int d\mu_c(c) (d_{\alpha}^{\nu}(c))^* c \right] \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

con

$$d_{\alpha}^{\nu}(c) = \langle \nu \alpha | c | \nu \alpha \rangle$$

que expresa a P_{α}^{ν} como producto de un proyector en la representación ν -ésima, por un proyector sobre los autovectores de autovalor $\{\alpha_i\}$. Equivalente a proyectar la componente z del impulso angular y luego el impulso

angular total J.

Apéndice B: VALORES MEDIOS Y ECUACIONES VARIACIONALES.

En este apéndice se desarrollan los cálculos necesarios para la obtención de las fórmulas (7.31) y (7.33).

B.1 Valores medios.

Partiendo de un estado de partícula independiente de Hartree-Fock

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}} A \prod_{\alpha=1}^A |\alpha\rangle \quad (\text{B.1})$$

donde $\alpha=(j, s, \zeta)$ indica tanto la función de onda espacial, $\phi_j(\vec{x})$, como el estado de spin e isospin, se obtiene inmediatamente el valor medio de J_z ($J_z = \sum_{\alpha=1}^A J_z(x_\alpha)$) como:

$$\ell = 4 \sum_{j=1}^{A/4} \frac{1}{N_j} \int (\phi_j^* J_z \phi_j)(x) dx \quad (\text{B.2})$$

con
$$N_j = \int (\phi_j^* \phi_j)(x) dx \quad (\text{B.3})$$

donde el factor 4 da cuenta de los distintos estados de spin e isospin.

La dispersión de J_z resulta

$$\begin{aligned} \eta &= \sum_{\alpha \neq \beta} (\prod |\phi_\alpha\rangle)^\dagger J_\alpha J_\beta (A \prod_\sigma |\phi_\sigma\rangle) \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} - \ell^2 \\ &= 4 \sum_{j=1}^{N/4} \frac{1}{N_j} \int (\phi_j^* J_z^2 \phi_j) + \left(4 \sum_j \frac{1}{N_j} \int \phi_j^* J_z \phi_j \right)^2 - \\ &\quad - 4 \sum_j \frac{1}{N_j} \left(\int \phi_j^* J_z \phi_j \right)^2 - \ell^2 - 4 \sum_{j \neq k} \left| \int \phi_j^* J_z \phi_k \right| \frac{1}{N_j N_k} \end{aligned}$$

o sea

$$\eta = 4 \left(\sum_j \frac{1}{N_j} \int (\phi_j^* (J_z - \ell_j)^2 \phi_j) - \sum_{j \neq k} \frac{1}{N_j} \frac{1}{N_k} \left| \int \phi_j^* J_z \phi_k \right|^2 \right) \quad (\text{B.4})$$

con

$$\ell_j = \frac{1}{N_j} \int (\phi_j^* J_z \phi_j)$$

si se desprecian los términos de intercambio (lo cual es exacto en el caso de las partículas alfa de acuerdo a la simetría impuesta a las funciones de onda (7.39))

$$\eta \approx \sum_{\alpha=1}^A \frac{1}{N_\alpha} \int (\phi_\alpha^* (J_z - \ell_\alpha)^2 \phi_\alpha) \quad (\text{B.5})$$

Interesa igualmente el valor medio del hamiltoniano y de la derivada temporal en el estado $|\phi\rangle$ (B.1), estudiando por separado los términos de uno, dos y tres cuerpos se obtienen a) para los operadores de un cuerpo:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\langle\phi|\phi\rangle} \langle\phi| i \frac{\partial}{\partial t} - H_0 |\phi\rangle &= \\ &= i \sum_{\alpha} \frac{1}{N_j} \int (\phi_j^* \dot{\phi}_j) - \sum_{\alpha} \frac{1}{N_j} \int (\phi_j^* H_0 \phi_j) \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

donde $H_0 = -\sum \frac{p^2}{2m}$

b) Para los operadores de dos cuerpos la expresión resulta análoga a la de η (al promediar en spin e isospin)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\langle\phi|\phi\rangle} \langle\phi| \sum_{\alpha < \beta} V(x_{\alpha} - x_{\beta}) |\phi\rangle &= \sum_{\alpha < \beta} \frac{1}{N_i N_j} \int V(x-y) |\phi_i(x)|^2 |\phi_j(y)|^2 dx dy - \\ &- \sum_{\alpha < \beta} \frac{1}{N_i} \frac{1}{N_j} \int V(x-y) (\phi_i^* \phi_j)(x) (\phi_j^* \phi_i)(y) dx dy \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

que se traduce para el término proporcional a $\delta(x-y)$ en

$$\frac{\langle\phi| t_0 \sum_{\alpha < \beta} \delta(x_{\alpha} - x_{\beta}) |\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \approx \frac{3}{8} t_0 \int \rho^2(x) dx \quad (\text{B.8})$$

donde $\rho = \sum_{\alpha=1} \frac{1}{N_j} |\phi_j(x)|^2$

y para los términos de Coulomb y Yukawa (considerando compensados los términos de intercambio)

$$\frac{\langle\phi| V_{\text{Coul}} |\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} = \frac{1}{2} \frac{Z}{A} e^2 \int \frac{1}{|\bar{x} - \bar{y}|} \rho(x) \rho(y) dx dy \quad (\text{B.9})$$

$$\text{y} \quad \frac{\langle\phi| V_{\text{Yuk}} |\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \approx \frac{V_0}{2} \int \exp(-|x-y|/a) \frac{1}{|x-y|/a} \rho(x) \rho(y) dx dy \quad (\text{B.10})$$

c) Con un procedimiento análogo puede arribarse al valor medio de los términos de tres cuerpos

$$\frac{1}{\langle\phi|\phi\rangle} \langle\phi| t_3 \sum_{\alpha < \beta < \delta} \delta(x_{\alpha} - x_{\beta}) \delta(x_{\beta} - x_{\delta}) |\phi\rangle \approx \frac{t_3}{16} \int \rho^3(x) dx \quad (\text{B.11})$$

Para el cálculo de los valores medios de productos del opera-

por otro operador, A , es conveniente observar que se obtienen estos al variar el valor medio de A reemplazando a $|\phi\rangle$ por $J_z|\phi\rangle$. Considerese el caso general

$$\frac{\langle \phi | A | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \sum_{i,j,k} \langle \phi_i \phi_j \phi_k | A | \phi_i \phi_j \phi_k \rangle \frac{1}{N_i N_j N_k}$$

entonces

$$\frac{\langle \phi | A (J_z - l) | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \sum_{i,j,k} \frac{\langle \phi_i \phi_j \phi_k | A (J_z - l_i) + (J_z - l_k) + (J_z - l_j) | \phi_i \phi_j \phi_k \rangle}{N_i N_j N_k}$$

+ términos de intercambio.

A modo de ejemplo considerese $A = I$ como $\frac{\langle \phi | I | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = 1$, se tiene entonces

$$\langle \phi | (J_z - l) | \phi \rangle = \sum_i (l_i - l_i) = 0$$

igualmente si $A = J_z$, resulta $\langle \phi | J_z | \phi \rangle = \sum l_j$ y se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\langle \phi | (J_z - l) J_z | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} &= \gamma = \sum_{\alpha=1}^A \left(\frac{\langle \phi_j | J_z^2 | \phi_j \rangle}{N_j} - l_j^2 \right) \\ &= \sum_{\alpha} \frac{1}{N_j} \langle \phi_j | (J_z - l_j)^2 | \phi_j \rangle \end{aligned}$$

Aplicando el procedimiento reiteradas veces sobre las expresiones respectivas del valor medio del potencial y de $L_0 \equiv \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right)$, se obtienen las correlaciones:

$$L_{02} \equiv \frac{\langle \phi | (J_z - l) L_0 | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \sum_{\alpha} \frac{1}{N_j} \int (\phi_j^* (J_z - l_j) L_0 \phi_j) \quad (\text{B.12})$$

$$L_{022} \equiv \langle \phi | ((J_z - l)^2 - \gamma_j) L_0 | \phi \rangle = \sum_{\alpha} \frac{1}{N_j} \int (\phi_j^* ((J_z - l_j)^2 - \gamma_j) \phi_j) \quad (\text{B.13})$$

donde $\gamma_j = \frac{1}{N_j} \int (\phi_j^* (J_z - l_j)^2 \phi_j)$

Siendo las correlaciones para los potenciales de dos cuerpos (V_2) y de tres cuerpos (V_3):

$$V_{22} \equiv \frac{\langle \phi | (J_z - l) V_2 | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = 2 \int V_2(x,y) \rho(x) \rho(y) dx dy \quad (\text{B.14})$$

$$\text{con } \mathbb{J}(y) = \sum \frac{1}{N_j} (\phi_j^* (\mathbb{J}_z - \ell_j) \phi_j)(y)$$

$$V_{2ZZ} \equiv \frac{\langle \phi | (\mathbb{J}_z - \ell)^2 - \gamma \rangle V_2 | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} =$$

$$= 2 \int (\mathbb{J}^*(x) V(x, y) \mathbb{J}(y) + V(x, y) \mathbb{J}_2^*(x) \rho(y)) dx dy \quad (\text{B.15})$$

$$\text{siendo } \mathbb{J}_2(x) = \sum \frac{1}{N_j} (\phi_j^* ((\mathbb{J}_z - \ell_j)^2 - \gamma_j) \phi_j)(x)$$

y para la parte de tres cuerpos

$$V_{3Z} \equiv \langle \phi | (\mathbb{J}_z - \ell) V_3 | \phi \rangle = \frac{3t_3}{16} \int \mathbb{J}^*(x) \rho^2(x) dx \quad (\text{B.16})$$

y

$$V_{3ZZ} \equiv \frac{\langle \phi | (\mathbb{J}_z - \ell)^2 - \gamma \rangle V_3 | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{3}{16} t_3 \int (2 \mathbb{J}^{*2}(x) + \mathbb{J}_2^* \rho) \rho(x) dx \quad (\text{B.17})$$

Las ecuaciones (B.1) a (B.17) permiten construir la densidad lagrangiana (7.28) como:

$$\mathcal{L} \equiv \mathcal{L} + \Omega_1 \mathcal{L}_z + \frac{\Omega_2}{2} \mathcal{L}_{zz} \quad (\text{B.18})$$

$$\text{con } \Omega_1 = \frac{(\ell_0 - \ell)}{\gamma} \quad \text{y} \quad \Omega_2 = \frac{1}{\gamma} \left(\frac{(\ell_0 - \ell)^2 + \gamma_0}{\gamma} - 1 \right)$$

$$\text{donde } \mathcal{L} = \left(\langle \phi | L_0 | \phi \rangle + \langle \phi | V_2 | \phi \rangle + \langle \phi | V_3 | \phi \rangle \right) \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (\text{B.19a})$$

$$\mathcal{L}_z = L_{0z} + V_{2z} + V_{3z} \quad (\text{B.19b})$$

$$\mathcal{L}_{zz} = L_{0zz} + V_{2zz} + V_{3zz} \quad (\text{B.19c})$$

B.2 Ecuaciones variacionales.

Antes de proceder a la variación de la ecuación (B.18) es conveniente determinar consistentemente con la aproximación gaussiana el valor de $\frac{d\ell}{dt}$. Variando $|\phi\rangle$ a $|\mathbb{J}_z|\phi\rangle$ se obtiene para la parte del lagrangiano correspondiente a la derivada temporal:

$$\delta_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\langle \phi | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \Omega_1 \frac{\langle \phi | (\frac{1}{2} - l) | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \frac{\Omega_2}{2} \frac{\langle \phi | ((\frac{1}{2} - l)^2 - \eta) | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right) +$$

+ complejo conjugado = 0

(B.20)

ya que $[\frac{1}{2}, H] = 0$.

La ecuación (B.20) se traduce en

$$\frac{dl}{dt} - \frac{\eta}{2} \frac{d\eta}{dt} - \frac{(l_0 - l)}{\eta^2} \frac{\langle \phi | (\frac{1}{2} - l)^3 | \dot{\phi} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \frac{dl}{dt} + \frac{(l_0 - l)}{\eta} \frac{d\eta}{dt} +$$

$$+ \Omega_2 \left\{ \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \frac{d}{dt} \left(\langle \phi | (\frac{1}{2} - l)^3 | \phi \rangle \right) + 2\eta \frac{dl}{dt} \right\} -$$

$$- \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{2\eta_0}{\eta^3} - \frac{1}{\eta^2} + \frac{(l - l_0)^2}{\eta^3} \right) \frac{\langle \phi | (\frac{1}{2} - l)^3 | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} - 2 \frac{(l - l_0)}{\eta} \right\} \frac{d\eta}{dt} = 0$$

es decir

$$\left\{ - \frac{(l_0 - l)}{\eta^2} \frac{\langle \phi | (\frac{1}{2} - l)^3 | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + 2\eta \Omega_2 \right\} \frac{dl}{dt} -$$

$$- \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{2\eta_0}{\eta^3} - \frac{1}{\eta^2} \right) + \frac{(l - l_0)^2}{\eta^3} \right\} \frac{\langle \phi | (\frac{1}{2} - l)^3 | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \frac{d\eta}{dt} +$$

$$+ \Omega_2 \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \frac{d}{dt} \langle \phi | (\frac{1}{2} - l)^3 | \phi \rangle = 0$$

pero bajo la hipótesis gaussiana $\langle \phi | (\frac{1}{2} - l)^3 | \phi \rangle = 0$, luego

$$2\eta \Omega_2 \frac{dl}{dt} = 0 = 2 \left(\frac{(l - l_0)^2}{\eta} + \frac{\eta_0}{\eta} \cdot 1 \right) \frac{dl}{dt} \quad (\text{B.21a})$$

que implica

$$\frac{dl}{dt} = 0 \quad \text{o} \quad (l - l_0)^2 + \eta_0 = \eta \quad (\text{B.21b})$$

Debe notarse que la ecuación (B.21) está íntimamente relacionada con la constancia de

$$\langle \phi, f | (\frac{1}{2} - l_0)^3 | \phi, f \rangle = 3(l_0 - l)(\eta - \eta_0) + (l - l_0)^3$$

resulta entonces consistente considerar $\frac{dl}{dt} = 0$, $l = l_0$ luego de efectuarse las variaciones respecto de ϕ_i^* .

Las ecuaciones de movimiento para las funciones ϕ_j se

obtienen de variar (B.18) respecto de ϕ_j^* , para simplificar en lo posible éstas, se notará

$$V \equiv V(x-y) = \frac{3}{8} t_0 \delta(x-y) + V_{\text{coul}} + V_{\text{YUK}}$$

las ecuaciones toman entonces la forma:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_j} \left[1 + \frac{\Omega^2}{2} \left((J_z - l_j)^2 - \eta_j \right) \right] L_0 \phi_j - \frac{1}{N_j} L_j \phi_j - \\ & - \frac{1}{N_j} L_z (J_z - l_j) \phi_j - \frac{1}{2} \left(\frac{2\eta_0}{\eta} - 1 \right) \frac{1}{\eta^2} L_{zz} \frac{1}{N_j} \left[(J_z - l_j)^2 - \eta_j \right] \phi_j \\ & = \frac{1}{N_j} \left[1 + \frac{\Omega^2}{2} \left((J_z - l_j)^2 - \eta_j \right) \right] (h_{HF} - H_0) \phi_j + \\ & + \frac{3}{N_j} \left\{ 2 (J_z - l_j) \left[\int V(x-y) \mathbb{Q}_1^*(y) dy + \frac{3}{8} t_3 \mathbb{Q}_1^* \right] - \right. \\ & \quad - 2 \left[\int V(x-y) \mathbb{Q}_1^*(y) \rho_j(x) dx + \frac{3}{8} t_3 \int \mathbb{Q}_1^* \rho_j dx \right] (J_z - l_j) \phi_j \\ & \quad - 2 \left[\int V(x-y) \mathbb{Q}_j^*(y) \rho(x) dx dy + \frac{3}{8} t_3 \int \mathbb{Q}_j^* \rho^2 dx \right] (J_z - l_j) \phi_j \\ & \quad - \left[\int V(x-y) \rho(x) \rho_j(y) dx dy + \frac{3}{16} t_3 \int \rho^2 \rho_j dx \right] \left((J_z - l_j)^2 - \eta_j \right) \phi_j \\ & \quad \left. + \left[\int V(x-y) \mathbb{Q}_2^*(y) dy + \frac{3}{16} t_3 \mathbb{Q}_2^* \rho + \frac{3}{16} t_3 (\mathbb{Q}^*)^2 \right] \right\} \phi_j \end{aligned}$$

(B.22)

donde

$$\begin{aligned} L_j = & \frac{1}{N_j} \left\{ \int (\phi_j^* L_0 \phi_j) + \frac{\Omega^2}{2} \int (\phi_j^* \left[(J_z - l_j)^2 - \eta_j \right] L_0 \phi_j) - \right. \\ & - \left[(h_{HF} - H_0) \rho_j \right] - \Omega_2 \left\{ \frac{1}{2} \int (h_{HF} - H_0) \mathbb{Q}_{2j}^* \right\} + \\ & + \int (V(x-y) \mathbb{Q}_2^* \rho_j(y) dx dy) + 2 \int (V(x-y) \mathbb{Q}(x) \mathbb{Q}_j^*(y) dx dy) + \\ & \left. + \frac{3}{16} t_3 \int (\mathbb{Q}_2^* \rho \rho_j) + \frac{3}{4} t_3 \int (\mathbb{Q}^* \mathbb{Q}_j \rho) \right\} \end{aligned}$$

$$\rho_j = \frac{1}{N_j} |\phi_j(x)|^2$$

$$D_j = \frac{1}{N_j} (\phi_j^*(\frac{1}{2} - l_j) \phi_j)(x)$$

$$\gamma \quad h_{HF} = H_0 + 2 \int V(x-y) \rho(y) dy + \frac{3}{16} t_3 \rho^2$$

De acuerdo con lo señalado en el capítulo 7, proponiendo como solución $i\dot{\phi}_j = h_{HF} \phi_j + \psi_j$ se obtiene para ψ_j la ecuación:

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{\Omega^2}{2} [(\frac{1}{2} - l_j)^2 - \eta_j]\right) \psi_j - \Omega_2 \int (\phi_j^*(\frac{1}{2} - l_j) \psi_j) (\frac{1}{2} - l_j) \phi_j - \\ & - \frac{\Omega^2}{2} \int (\phi_j^* \psi_j) [(\frac{1}{2} - l_j)^2 - \eta_j] \phi_j - \mathcal{L}_j \phi_j + \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{2\eta_0}{\eta} - 1\right) \frac{1}{\eta^2} \int (\phi_j^* ((\frac{1}{2} - l_j)^2 - \eta_j) \psi_j) ((\frac{1}{2} - l_j)^2 - \eta_j) \phi_j = \\ & = -\Omega_2 \left\{ (\frac{1}{2} - l_j) \left[2 \int V(x-y) D_j^*(y) dy + \frac{3}{8} t_3 \rho D_j^* \right] + \right. \\ & \quad + \int V(x-y) D_j^*(y) dy + \frac{3}{16} t_3 (D_j^*)^2 + \frac{3}{16} t_3 D_j^* \rho - \\ & \quad - \frac{3}{8} t_3 \int (D_j^* \rho \rho_j) - 2 \int (V(x-y) D_j^*(x) D_j^*(y) dx dy) \left. \right\} \phi_j - \\ & - \left(\frac{2\eta_0}{\eta} - 1\right) \frac{1}{\eta^2} \left[\int V(x-y) D_j^*(y) D_j^*(x) dx dy + \frac{3}{16} t_3 \int ((D_j^*)^2 \rho) \right]^* \\ & * \left| (\frac{1}{2} - l_j)^2 - \eta_j \right| \phi_j \quad (B.23) \end{aligned}$$

REFERENCIAS.

- Abr 72. M. Abramowitz and I. Stegun, Handbook of Mathematical Functions. Dover Publications Inc., New York (1972).
- Abr 78 R. Abraham and E. Marsden, Foundations of Mechanics. Benjamin Inc., Reading Mass. (1978).
- Arn 78 V. I. Arnold, Mathematical Methods of Classical Mechanics. Springer Verlag, New York (1978).
- Are 72 P. Arecchi, E. Courtens, R. Gilmore, H. Thomas. Phys. Rev. A 6, 2211 (1972).
- Bal 75 R. Balescu, Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics. Wiley Interscience, New York (1975).
- Bar 82 J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet, H. B. Hakansson. Nuclear Phys. A 386, 79 (1982).
- Boh 69 A. Bohr and B. R. Mottelson, Nuclear Structure (V I). Benjamin Inc. New York (1969).
- Bon 76 P. Bonche, S. Koonin, J. W. Negele. Phys. Rev. C 13, 1226 (1976).
- Bon 78 P. Bonche, B. Grammaticos, S. Koonin. Phys. Rev. C 17, 1700 (1978).
- Bri 68a D. M. Brink, A. Weiguny. Nuclear Phys. A 120, 59 (1968).
- Bri 68b D. M. Brink, A. Weiguny. Physics Letters B 26, 497 (1968).
- Dav 78 K. T. R. Davies, H. T. Feldmeier, H. Flocard, M. S. Weiss. Phys. Rev. C 18, 632 (1978).
- Dav 81 K. T. R. Davies, S. E. Koonin. Phys. Rev. C 23, 2042 (1981).
- Dav 82 K. T. Davies, K. R. S. Devi, S. E. Koonin, M. R. Strayer. Narnal Aid preprint MAP - 25 (1982).
- Dev 78a K. R. S. Devi, M. R. Strayer. Jour. Phys. G4, L97 (1978).
- Dev 78b K. R. S. Devi, M. R. Strayer. Phys. Lett. B 77, 135 (1978).
- Dir 30 P. A. Dirac. Proc. Cambr. Philos. Soc. 26, 376 (1930).
- Dor 82 C. O. Dorso, E. S. Hernández. Phys. Rev. C 26, 528 (1982).
- Fae 70 A. Faessler, A. Plastino. Z. Physik 239, 73 (1970).
- Fen 82 D. H. Feng, R. Gilmore. Phys. Rev. C 26, 1244 (1982).
- Flo 78 H. Flocard, S. E. Koonin, M. S. Weiss. Phys. Rev. C 17, 1682 (1978).

- Gil 72 R. Gilmore. *Annals of Phys.* 74, 391 (1972).
- Gil 74a R. Gilmore. *Lie Groups and Lie Algebras and some of their Application*
John Wiley & Sons, New York (1974).
- Gil 74b R. Gilmore. *Rev. Mex. Fis.* 23, 143 (1974).
- Gil 79a R. Gilmore, D. H. Feng. *Phys. Letters B* 85, 155 (1979).
- Gil 79b R. Gilmore. *J. Math. Phys.* 20, 891 (1979).
- Gil 83 R. Gilmore, M. Valliers, D. H. Feng, H. Z. Sun. *Proc. of the Int. Workshop on Collective Motion in Nuclei. Suzhou, PRC, (1983)*. L. M. Yang (Editor).
- Gla 63 R. J. Glauber. *Phys. Rev.* 131, 2766 (1963).
- Gri 76 J. J. Griffin, P. Lichtner. Preprint ORO 4856-51 (1976). U. of Maryland.
- Gol 72 H. Goldstein. *Mecánica Clásica*. Ed. Aguilar, Madrid (1972).
- Ham 64 M. Hamermesh. *Group Theory*. Addison Wesley Publ. Co., Reading Mass. (1964).
- Her 82 E. S. Hernández, H. G. Solari. *Phys. Rev. C* 25, 2087 (1982).
- Her 83a E. S. Hernández, H. G. Solari. *Nucl. Phys.* A397, 115 (1983).
- Her 83b E. S. Hernández, H. G. Solari. *III Coloquio Internacional sobre Método de Teoría de Grupos en Física, ICTP, Trieste (1983)* a publicar por *Lecture Notes in Physics*. Springer Verlag.
- Hil 56 F. Hildebrand. T.M. H. Edition, Mc Graw Hill (1956).
- Hol 73 G. Holzwarth. *Nucl. Phys. A* 207, 545 (1973).
- Kan 79 K. K. Kan, J. J. Griffin, P. C. Lichtner, M. Dworzecka. *Nucl. Phys. A* 332, 109 (1979).
- Kan 80a K. K. Kan, P. C. Lichtner, M. Dworzecka, J. J. Griffin. *Phys. Rev. C* 21, 1098 (1980).
- Kan 80b K. K. Kan. *Phys. Rev. C* 22, 2228 (1980).
- Kav 68 V. G. Kaveeshwar, K. T. Chung. *Phys. Rev.* 172, 35 (1968).
- Ker 76 A. K. Kerman, S. E. Koonin. *Ann. Phys.* 100, 332 (1976).
- Kri 77 S. J. Krieger. *Nucl. Phys. A* 276, 12 (1977).
- Kri 80 H. Krivine, J. Treiner, O. Bohigas. *Nucl. Phys. A* 366, 155 (1980).
- Köh 79 H. S. Köhler, H. Flocard. *Nucl. Phys. A* 323, 189 (1979).

- Koo 77 S. E. Koonin, K. T. Davies, V. Maruhn-Regwani, H. Feldmeier, S. J. Krieger, J. N. Negele. *Phys. Rev. C* 15, 1359 (1977).
- Koo 78 S. E. Koonin, B. Flanders, H. Flooard, M. Weiss. *Phys. Lett.* B77, 13 (1978).
- Kra 81 P. Kramer, M. Saraceno. *Geometry of the Time-dependent Variational Principle in Quantum Mechanics*. Lecture Notes in Physics 140, Springer, Berlin (1981).
- Kur 80 H. Kuratsuji, T. Suzuki. *Phys. Letters B* 92, 19 (1980).
- Kur 81a H. Kuratsuji, Y. Mizobuchi. *J. Math. Phys.* 22, 757 (1981).
- Kur 81b H. Kuratsuji. *Phys. Letters B* 103, 79 (1981).
- Kur 82a H. Kuratsuji. *Phys. Letters B* 108, 367 (1982).
- Kur 82b H. Kuratsuji. KUNS report 628, Kyoto University (1982).
- Laoh 64 A. D. Mc Lachlan, M. A. Ball. *Rev. Modern Phys.* 36, 844 (1964).
- Lam 68 H. A. Lamme, E. Boecker. *Nucl. Phys. A* 111, 492 (1968).
- Lan 72 P. W. Langhoff, S. T. Epstein, M. Karplus. *Rev. Modern Phys.* 44, 602 (1972).
- Lich 72 P. C. Lichtner, M. Dworzecka, K. K. Kan, J. J. Griffin. Preprint ORO-5126, U. Maryland (1972).
- Lich 78 D. B. Lichtenberg. *Unitary Symmetries and Elementary Particles*. Academic Press. , New York (1978).
- Lich 79a P. Lichtner, J. J. Griffin, H. Schultheis, A. Volkov. *Phys. Rev. C* 20, 845 (1979).
- Lich 79b P. Lichtner, J. J. Griffin. *Phys. Review Letters* 37, 1521 (1979).
- Lip 65 H. J. Lipkin, N. Meshkov, A. J. Glick. *Nucl. Phys.* 62, 188 (1965).
- Mar 59 P. C. Martin, J. Schwinger. *Phys. Rev.* 115, 1342 (1959).
- Mes 65 A. Messiah. *Mecánica Cuántica* (V I). Ed. Tecnos, Madrid (1965).
- Mit 80 A. R. Mitchell, D. F. Griffiths. *The Finite Difference Method in Partial Differential Equations*. John Wiley & Sons., New York (1980).
- Neg 82 J. W. Negele. *Rev. Modern Phys.* 54, 913 (1982).
- Per 72 A. Perelomov. *Commun. Math. Phys.* 26, 222 (1972).
- Per 75 A. Perelomov. *Commun. Math. Phys.* 44, 197 (1975).
- Pei 57 R. E. Peierls, S. Yoccoz. *Proc. Phys. Soc. A* 70, 381 (1957).

- Pri 72a I. Prigogine, C. George, F. Henin, L. Rosenfeld. *Chemical Scripta* 4, 5 (1972).
- Pri 72b I. Prigogine, C. George, L. Rosenfeld. *Nat. Fys. Medd.* 38, N° 12 (1972).
- Pri 77 I. Prigogine, F. Mayne, C. George, M. De Haan. *Proc. Acad. Sci. USA* 74, 4152 (1977).
- Que 78 P. Quentin, H. Flooard. *Ann. Rev. Nucl. Part. Science* 28, 523 (1978).
- Ree 80 M. Reed, B. Simon. Methods of Modern Mathematical Physics (V I). Academic Press, New York (1980).
- Rei 79 P. G. Reinhardt. *Journal of Physics G* 65, L91 (1979).
- Rei 83 H. Reinhardt, R. Y. Cusson, K. Goetze. *Nucl. Phys. A* 398, 141 (1983).
- Roo 82 O. S. van Roosmalen. Algebraic descriptions of nuclear and molecular rotation-vibration spectra: Mean field techniques and interacting boson models. Ph. D. Tesis, Groningen (1982).
- Ros 80 G. Rosensteel, D. J. Rowe. *Annals of Physics* 126, 198 (1980).
- Row 80a D. J. Rowe, A. Ryman, G. Rosensteel. *Phys. Rev. A* 22, 2362 (1980).
- Row 80b D. J. Rowe, A. Ryman. *Phys. Review Letters* 45, 406 (1980).
- Row 82 D. J. Rowe. *Nucl. Phys. A* 391, 307 (1982).
- Sar 83 M. Saraceno, G. Dussel. *Comunicación privada* (1983).
- Scu 82 G. E. Scuseria, R. H. Contreras. *Chem. Phys. Lett.* 93, 425 (1982).
- Schu 81 L. Schulman. Techniques and Applications of Path Integrals. John Wiley & Sons, New York (1981).
- Sky 56 T. H. R. Skyrme. *Phil. Mag.* 1, 1043 (1956).
- Sol 82 H. G. Solari, E. S. Hernández. *Phys. Rev. C* 26, 2310 (1982).
- Sol 83 H. G. Solari, E. S. Hernández. *Phys. Rev. C* 28, 2472 (1983).
- Van 72 D. Vantherin, D. M. Brink. *Phys. Rev. C* 5, 626 (1972).
- Vill 65 F. Villars. *Scuola Int. di Fisica "Enrico Fermi" XXXVI corso*, (1965).