

- Dissertação apresentada à Pró-Reitoria de Pós-Graduação e Pesquisa do Instituto Tecnológico de Aeronáutica, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestra em Ciências no Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Física Nuclear.

Gerline Teixeira de Lima

COMPARAÇÃO DE APROXIMAÇÕES DE
MUITOS CORPOS EM UM SISTEMA
UNIDIMENSIONAL

Dissertação aprovada em sua versão final pelos abaixo assinados:



Prof. Dr. Brett Vern Carlson

Orientador

Prof. Dr. Luiz Carlos Sandoval Góes
Pró-Reitor de Pós-Graduação e Pesquisa

Campo Montenegro
São José dos Campos, SP - Brasil
2017

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Divisão de Informação e Documentação

Lima, Gerline Teixeira de
Comparação de aproximações de muitos corpos em um sistema unidimensional / Gerline
Teixeira de Lima.
São José dos Campos, 2017.
61f.

Dissertação de Mestrado – Curso de Física. Área de Física Nuclear – Instituto Tecnológico de
Aeronáutica, 2017. Orientador: Prof. Dr. Brett Vern Carlson.

1. Muitos Corpos. 2. Segunda Quantização. 3. Ansatz de Bethe. 4. Hartree-Fock, BCS,
Emparelhamento, Unidimensional. I. Centro Técnico Aeroespacial. Instituto Tecnológico de
Aeronáutica. Divisão de Física. II. Título.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

LIMA, Gerline Teixeira de. **Comparação de aproximações de muitos corpos em um sistema unidimensional**. 2017. 61f. Dissertação de Mestrado – Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos.

CESSÃO DE DIREITOS

NOME DA AUTORA: Gerline Teixeira de Lima

TÍTULO DO TRABALHO: Comparação de aproximações de muitos corpos em um sistema unidimensional.

TIPO DO TRABALHO/ANO: Dissertação / 2017

É concedida ao Instituto Tecnológico de Aeronáutica permissão para reproduzir cópias desta dissertação e para emprestar ou vender cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. A autora reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta dissertação pode ser reproduzida sem a autorização da autora.

Gerline Teixeira de Lima
Av. Cidade Jardim, 679
12.233-066 – São José dos Campos–SP

COMPARAÇÃO DE APROXIMAÇÕES DE MUITOS CORPOS EM UM SISTEMA UNIDIMENSIONAL

Gerline Teixeira de Lima

Composição da Banca Examinadora:

Prof. Dr. Tobias Frederico	Presidente	-	ITA
Prof. Dr. Brett Vern Carlson	Orientador	-	ITA
Prof. Dr. Wayne Leonardo Silva de Paula	Membro Interno	-	ITA
Prof. Dr. Renato Higa	Membro Externo	-	IFUSP

Aos futuros estudantes.

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer ao professor Dr. Brett Vern Carlson, pela orientação, paciência e confiança depositada na realização deste trabalho. A minha família, principalmente meus pais e minha avó Otília. Aos meus colegas de trabalho, especialmente ao Dr. Flaviano Williams Fernandes, Dr. Tiago de Jesus Santos e Me. Ronaldo Vieira Lobato. E a CAPES, pelo apoio a pesquisa.

"Vá em frente, você consegue!"
— PROF. DR. BRETT VERN CARLSON

Resumo

As correlações de dois corpos desempenham um papel importante na determinação da energia do estado fundamental e das excitações de sistemas nucleares. Grandes classes dessas correlações, dos tipos de partícula-partícula, buraco-buraco e do tipo partícula-buraco, podem ser levadas em consideração através de aproximações do tipo HF, BCS e qRPA. Para melhor compreensão da aplicabilidade dessas aproximações, comparamos elas com soluções exatas de um gás de Fermi de spin 1/2 unidimensional. A solução exata é obtida usando o ansatz de Bethe (KARBACH; MÜLLER, 1997) (KARBACH *et al.*, 1998) e foi descrita por Gaudin (M.GAUDIN, 1967). Aqui, a solução exata do estado fundamental é comparada com as aproximações BCS, qRPA, HF e com uma soma de escadas no meio nuclear. Comparamos também o potencial químico dessas aproximações, o emparelhamento das aproximações BCS e qRPA e os momentos de Fermi da solução HF e da solução exata de Gaudin.

Abstract

Two-body correlations play an important role in determining the ground state energy and the excitations of nuclear systems. Large classes of these correlations, of particle-particle and hole-hole types as well as of particle-hole type, can be taken into account through approximations of the types HF, BCS and qRPA. For a better understanding of the applicability of these approximations we compare them with exact solutions of a one-dimensional spin 1/2 Fermi gas. The exact solution is obtained using the Bethe ansatz (KARBACH, 1997) (KARBACH, 1998) and has been described by Gaudin (M.GAUDIN, 1967). Here the exact ground state solution is compared to the BCS, qRPA and HF approximations as well as to an in-medium ladder sum. We also compare the chemical potential of the approximations, the BCS and qRPA pairing and the Fermi moment of the HF solution and the exact Gaudin solution.

Lista de Figuras

FIGURA 2.1 – Representação do nível de Fermi com preenchimento dos níveis de energia a partir do nível mais baixo para o mais alto.	19
FIGURA 2.2 – Sistema de férmions para estados cheios e vazios	20
FIGURA 3.1 – A soma de escadas no meio nuclear representada por números de inserções para B_0 , B_1 e B_2 . Retirada do artigo (KAISER, 2011). . . .	41
FIGURA 3.2 – Regras que regem a aplicação dos operadores de rotação nos vetores de base $ \sigma_1 \dots \sigma_N\rangle$ com spins <i>up</i> ($\sigma_n = \uparrow$) e <i>down</i> ($\sigma_n = \downarrow$). Retirada do artigo (KARBACH; MÜLLER, 1997).	46
FIGURA 3.3 – Representação dos números quânticos de Bethe para os estados de classe C_1 (vermelho), C_2 (branco) e C_3 (azul). A figura caracteriza os autoestados $N \binom{N-1}{2}$ de $r=2$, para um subespaço de $N=32$. Retirada do artigo (KARBACH; MÜLLER, 1997).	48
FIGURA 3.4 – Energia por nucleon em relação ao parâmetro λ^{-1} para as aproximações de HF, BCS, qRPA, Gaudin e soma de escadas em meio nuclear.	53
FIGURA 3.5 – Potencial químico em relação ao parâmetro λ^{-1} para as aproximações de HF, BCS, qRPA e Gaudin.	54
FIGURA 3.6 – Emparelhamento em relação ao parâmetro λ^{-1} nos casos BCS e qRPA.	55
FIGURA 3.7 – Momento de Fermi em relação ao parâmetro λ^{-1} para as soluções de HF e Gaudin.	56
FIGURA 3.8 – Ocupação do estado de momento em relação ao momento linear da solução exata de Gaudin.	56

Lista de Símbolos

HF	Hartree-Fock
HFB	Hartree-Fock- Bogoliubov
BCS	Bardeen-Cooper-Schriffer
qRPA	quasi Random Phase Approximation
a_i	Operador de aniquilação de partícula
a_i^\dagger	Operador de criação de partícula
Γ	Campo médio
Δ	Campo de emparelhamento
μ	Potencial químico
ρ	Densidade de partícula
q_0	Escala de comprimento inversa
λ^{-1}	Parâmetro adimensional

Sumário

1	INTRODUÇÃO	12
1.1	Introdução	12
2	APROXIMAÇÕES NA MATÉRIA NUCLEAR	15
2.1	Segunda Quantização Aplicada a Férmions	15
2.1.1	Partículas idênticas e princípio de exclusão de Pauli	15
2.2	O gás de Fermi ideal	16
2.2.1	Modelo unidimensional e tridimensional para o gás de Fermi ideal	16
2.2.2	Definições da Segunda Quantização	18
2.3	Aproximação de Hartree e Hartree-Fock	23
2.4	O método de Hartree-Fock-Bogoliubov	27
3	O MODELO UNIDIMENSIONAL - CONCEITOS E CÁLCULOS	33
3.1	Conceitos	33
3.1.1	O sistema de dois corpos	34
3.1.2	As equações de HFB	37
3.1.3	A soma de escadas no meio nuclear	40
3.1.4	Solução exata do ansatz de Bethe	44
3.1.5	A solução exata de Gaudin	51
3.2	Cálculos e Discussões	53
4	CONCLUSÃO	58
	REFERÊNCIAS	60

1 Introdução

1.1 Introdução

Quase todos os sistemas de interesse físico são compostos de muitas partículas interagindo entre si. A importância do problema de muitos corpos, isto é, do estudo dos efeitos da interação entre as partículas no comportamento do sistema é claro. Porém, sabe-se que o estudo de problemas de muitos corpos é complexo e que ainda existem grandes dificuldades em descrever tais sistemas, independente da dimensionalidade destes. Várias aproximações às soluções de problemas de muitos corpos foram desenvolvidas, entre estas, as de Hartree, de Hartree- Fock (HF), de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) e de Brueckner. Cada uma tenta levar em conta características da interação e do sistema, consideradas importantes para sua descrição. Porém, são raros os sistemas para os quais existem soluções exatas que permitem uma comparação direta com as várias aproximações.

Neste trabalho, estudamos um sistema de muitos corpos em 1-D. Baseando-nos no artigo (M.GAUDIN, 1967), apresentamos soluções exatas do modelo unidimensional para spin 1/2 do gás de Fermi usando o ansatz de Bethe. Comparamos essas soluções com as soluções de Bardeen-Cooper e Schriffer (BCS), (sendo esta desenvolvida através da aproximação de HFB) e com as aproximações de quasi-partícula de fase aleatória (do Inglês qRPA). Outras aproximações também são calculadas, dentre elas, a de HF e uma soma de escadas no meio nuclear. Além da energia, comparamos o potencial químico e o emparelhamento nas aproximações de BCS e qRPA.

O trabalho está apresentado da seguinte maneira:

No capítulo 2 discutimos inicialmente tópicos de matéria nuclear e o desenvolvimento básico da segunda quantização aplicada a férmions. Abordamos o conceito do princípio de exclusão de Pauli e o modelo do gás de Fermi de um gás ideal para 1-D e 3-D. Mostramos definições básicas de operadores de criação (a^\dagger) e aniquilação (a), que será a linguagem abordada no trabalho.

Posteriormente abordamos o método de Hartree, HF e HFB. Desenvolvemos as funções de onda de Hartree e HF, onde explicamos a diferença entre elas e descrevemos didati-

camente a hamiltoniana na linguagem de segunda quantização, a fim de obter por meio desta as equações de auto-consistência de HF. Já para HFB, aproximação que consiste do movimento independente de quasi-partículas, para encontrar soluções da teoria HFB em um sistema homogêneo, reduzimos a hamiltoniana a dois potenciais, o de campo médio (contém correlações de longo alcance) e o de emparelhamento (contém correlações de curto alcance). Descrevemos a hamiltoniana pelo teorema de Wick para expandirmos os produtos de criação e aniquilação de operadores, podendo assim reduzir produtos arbitrários para somas de produtos de pares em termos de um conjunto completo de estados independentes. Escrevemos as matrizes e os autovetores de HFB, determinando assim o operador de quasi-partícula do sistema.

Dividimos o capítulo 3 em duas seções. Na primeira, discutimos conceitos e cálculos de cada método a serem desenvolvidos através do sistema descrito pela equação 3.1, que é a hamiltoniana do problema. Dentre os tópicos abordados, no sistema de dois corpos, discutimos a equação de movimento no estado de spin-singlete antissimétrico, chegando por meio desta à equação de estado ligado e à função de onda para formar soluções antissimétricas.

Retomamos as equações de HFB para analisar o campo médio e de emparelhamento independentes do momento e determinamos a matriz de HFB para o número de onda, bem como as equações de auto-consistência e a densidade de energia desta. Neste tópico, discutimos também o potencial químico de HFB e como a solução de HF pode ser obtida com o limite de emparelhamento zero.

A soma de escadas discute as contribuições da soma de escadas no meio nuclear, com zero, uma e duas inserções da contribuição com matéria. Trazemos a abordagem de (KAISER, 2011) para o caso de uma interação de contato, obtendo assim, a densidade de energia da soma de escadas no meio nuclear, bem como seu potencial efetivo.

Na discussão do ansatz de Bethe tratamos do modelo ferromagnético e antiferromagnético. Abordamos nestes itens a diferença entre as hamiltonianas do modelo de Heisenberg (que diferem apenas por um sinal mas possuem diferentes propriedades físicas), a ação e caracterização dos autoestados do ansatz de Bethe nos subespaços invariantes e como podemos calcular os números quânticos de Bethe e a energia do estado fundamental.

Finalizamos a primeira parte do capítulo 3 discutindo a solução exata de Gaudin. Nesta seção, descrevemos as duas equações acopladas que determinam o número de ocupação dos estados de momento, $n(k)$, e a partir destas determinamos a densidade de energia e o potencial químico.

Na segunda e última parte do capítulo 3, esboçamos e discutimos o resultado dos cálculos de energia (BCS, Gaudin, HF, qRPA e soma de escadas), do potencial químico (BCS, Gaudin, HF e qRPA), o momento de Fermi para a aproximação de HF e a solução

exata de Gaudin, o emparelhamento de BCS e do qRPA e, por fim, as ocupações dos estados de momento linear da solução de Gaudin.

Já no capítulo 4, apresentamos as conclusões sobre o trabalho.

2 Aproximações na Matéria Nuclear

2.1 Segunda Quantização Aplicada a Férmions

2.1.1 Partículas idênticas e princípio de exclusão de Pauli

Formulado em 1925 por Wolfgang Pauli, este princípio afirma que a função de onda total de um sistema composto por dois férmions idênticos deve ser antissimétrica, ou seja, férmions idênticos não podem ocupar o mesmo nível quântico simultaneamente (PAULI, 1925).

Inicialmente fazemos uma análise para a função de onda espacial. Considere um sistema formado pela partículas 1 na posição \mathbf{r}_1 e 2 na posição \mathbf{r}_2 , a função de onda total é dada pelo produto das funções de onda ψ_α e ψ_β , onde α e β representam os diferentes estados que as partículas 1 e 2 podem assumir. Para satisfazer o princípio da indistinguibilidade é necessário adicionar a contribuição da partícula 1 na posição \mathbf{r}_2 e 2 na posição \mathbf{r}_1 , o que resulta em

$$\Psi_2 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_2) \pm \psi_\alpha(\mathbf{r}_2)\psi_\beta(\mathbf{r}_1)). \quad (2.1)$$

No entanto, devido ao princípio de exclusão de Pauli, duas partículas não podem ocupar o mesmo estado quântico, ou seja, a função de onda total deve se anular quando o estado de uma partícula for igual à outra, $\alpha \rightarrow \beta$. Na Eq. 2.1, a opção que satisfaz essa condição resulta no sinal negativo no segundo termo,

$$\Psi_2 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_2) - \psi_\alpha(\mathbf{r}_2)\psi_\beta(\mathbf{r}_1)). \quad (2.2)$$

Contudo, para o caso de um sistema formado por três partículas idênticas, a função

de onda normalizada que satisfaz a condição de antissimetria é dada pela equação

$$\begin{aligned} \Psi_3 = & \frac{1}{\sqrt{6}} [\psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_2)\psi_\gamma(\mathbf{r}_3) + \psi_\alpha(\mathbf{r}_2)\psi_\beta(\mathbf{r}_3)\psi_\gamma(\mathbf{r}_1) + \\ & + \psi_\alpha(\mathbf{r}_3)\psi_\beta(\mathbf{r}_1)\psi_\gamma(\mathbf{r}_2) - \psi_\alpha(\mathbf{r}_3)\psi_\beta(\mathbf{r}_2)\psi_\gamma(\mathbf{r}_1) - \\ & - \psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_3)\psi_\gamma(\mathbf{r}_2) - \psi_\alpha(\mathbf{r}_2)\psi_\beta(\mathbf{r}_1)\psi_\gamma(\mathbf{r}_3)], \end{aligned} \quad (2.3)$$

que pode ser escrita na forma matricial

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(\mathbf{r}_1) & \psi_\beta(\mathbf{r}_1) & \psi_\gamma(\mathbf{r}_1) \\ \psi_\alpha(\mathbf{r}_2) & \psi_\beta(\mathbf{r}_2) & \psi_\gamma(\mathbf{r}_2) \\ \psi_\alpha(\mathbf{r}_3) & \psi_\beta(\mathbf{r}_3) & \psi_\gamma(\mathbf{r}_3) \end{vmatrix}, \quad (2.4)$$

onde ψ representa as funções de onda de cada partícula do sistema físico. Portanto, podemos generalizar para o caso de um sistema constituído por N partículas,

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(\mathbf{r}_1) & \cdots & \psi_N(\mathbf{r}_1) \\ \psi_\alpha(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_N(\mathbf{r}_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_\alpha(\mathbf{r}_N) & \cdots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (2.5)$$

A função acima é chamada de determinante de Slater (SLATER, 1931) e define a função de onda de um sistema de N partículas idênticas de spin semi-inteiro, que por sua vez satisfaz o princípio de exclusão de Pauli.

2.2 O gás de Fermi ideal

O modelo de gás ideal aplicado na Mecânica Clássica consiste em um modelo teórico onde partículas pontuais não-interagentes movem-se aleatoriamente. Tal como este, o gás de Fermi ideal é um modelo quântico composto por férmions não interagentes, ou seja, para partículas compostas de spin semi-inteiro que obedecem ao princípio de exclusão de Pauli.

2.2.1 Modelo unidimensional e tridimensional para o gás de Fermi ideal

Para um modelo unidimensional, um gás de partículas de massa m confinado em uma caixa com comprimento L é constituído por N partículas não-interagentes, distribuídas em uma linha reta na coordenada x dentro do intervalo $0 < x < L$, onde o potencial de

interação é zero ($V = 0$) (GRIFFITHS, 1994). A energia do sistema é dada por

$$E\Psi(x_{1j}, \dots, x_{ij}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N), \quad (2.6)$$

fornecendo para cada partícula

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \Psi(x_i) = E_i \Psi(x_i) \quad (2.7)$$

onde

$$E_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \quad (2.8)$$

e a energia total

$$E = \sum_i^N E_i. \quad (2.9)$$

A função de onda de cada partícula deve ser contínua no intervalo $0 < x < L$. A condição de contorno então satisfaz

$$\psi(x) = \psi(x + L),$$

que implica em

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \exp^{i(k_l x)},$$

onde

$$k_l = \frac{l\pi}{L}, \quad (2.10)$$

possui valores de l inteiros positivos $l = 0, \pm 1, \dots, n$. O nível de energia E_l de uma partícula em um gás de Fermi no sistema unidimensional pode ser expresso por

$$\begin{aligned} E_l &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{l\pi}{L} \right)^2 \right] \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2 l^2}{2mL^2}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Tal como feito para o sistema unidimensional, em um sistema tridimensional consideraremos um gás de partículas de massa m confinado em uma caixa de arestas com comprimento L , cujas partículas possuem função de onda no espaço cartesiano $\psi(x, y, z)$, onde esta é a solução da equação $H\psi = E\psi$. Nesse caso E é a energia da partícula. A hamiltoniana da equação 2.7 passa então a ser

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z), \quad (2.12)$$

Sabendo que a função $\psi(x, y, z)$ deve ser contínua dentro da caixa e periódica nas

extremidades, a função de onda deve satisfazer as seguintes condições de contorno

$$\begin{aligned}\psi(x, y, z) &= \psi(x + L, y, z), \\ \psi(x, y, z) &= \psi(x, y + L, z), \\ \psi(x, y, z) &= \psi(x, y, z + L).\end{aligned}$$

Portanto, como resultado, a solução normalizada para ψ deve ser dada como demonstra a Eq. 2.13,

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{1}{L}\right)^{3/2} \exp[i(k_l x + k_n y + k_p z)], \quad (2.13)$$

onde

$$\begin{aligned}k_l &= \frac{l\pi}{L}, \\ k_n &= \frac{n\pi}{L}, \\ k_p &= \frac{p\pi}{L}.\end{aligned} \quad (2.14)$$

l, n e p são números inteiros que representam os níveis quânticos do sistema. Sabendo que $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, substituimos na Eq. 2.8, o que resulta na expressão dos níveis de energia da partícula do gás de Fermi, 2.15,

$$\begin{aligned}E_{l,n,p} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{l\pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{p\pi}{L}\right)^2 \right], \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} [l^2 + n^2 + p^2].\end{aligned} \quad (2.15)$$

Para férmions, os níveis são preenchidos do nível mais baixo para o mais alto, sendo que o nível mais alto é conhecido como nível de Fermi (n_F), onde a partícula possui a energia de Fermi e_F , cada partícula ocupa um nível de energia até que sejam preenchidos todos abaixo de n_F , como representado na Fig. 2.1.

2.2.2 Definições da Segunda Quantização

A segunda quantização transforma funções de onda em operadores que respeitam a equação de Schrödinger. Este formalismo é representado por um sistema algebraico usado para descrever um estado quântico com N partículas, conhecido como espaço de Fock, de modo que as partículas obedecem o princípio de exclusão de Pauli. Segundo (SAKURAI; NAPOLITANO, 2013) “Qualquer estado de partículas interagentes pode ser escrita em uma base de partículas independentes (autokets de operadores de uma partícula com autovalor

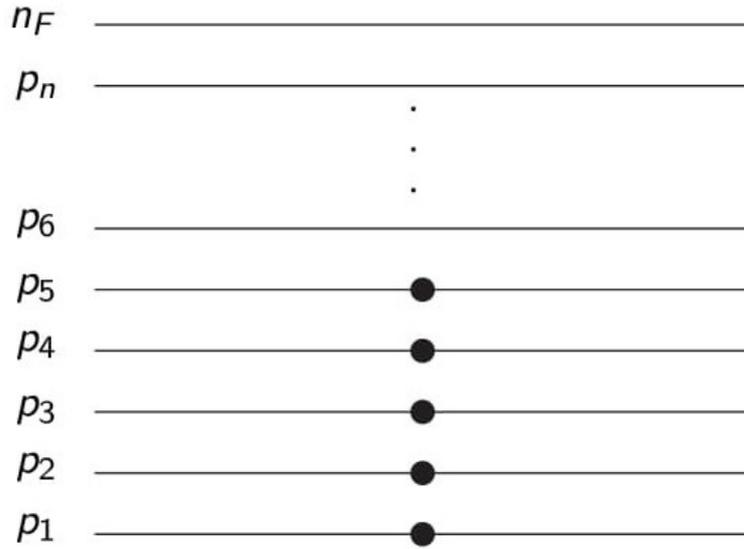


FIGURA 2.1 – Representação do nível de Fermi com preenchimento dos níveis de energia a partir do nível mais baixo para o mais alto.

k_i ”). Assim, podemos escrever um sistema de estados de partículas $\Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N}$ como

$$\Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N} = |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle, \quad (2.16)$$

onde cada estado em n_i representa um estado em Φ . Para determinar estados vazios ($n_i = 0$) ou cheios ($n_i = 1$), utilizamos os operadores a_k para aniquilação e a_k^\dagger para criação. As definições dos operadores a_k e a_k^\dagger para férmions também implicam nas operações (MATTUCK, 1976)

$$a_i^\dagger |1\rangle = 0, \quad (2.17)$$

$$a_i^\dagger |0\rangle = |1\rangle, \quad (2.18)$$

$$a_i |1\rangle = |0\rangle, \quad (2.19)$$

$$a_i |0\rangle = 0, \quad (2.20)$$

tratando de férmions, cada n_i pode ser um estado vazio (0) ou cheio (1) obedecendo o princípio de Pauli e satisfazendo as relações

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \delta_{ij} \quad (2.21)$$

$$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = \{a_i, a_j\} = 0. \quad (2.22)$$

Para um estado fundamental temos que

$$a_i^\dagger |\Psi_0\rangle = 0 \quad (i \leq N) \quad (2.23)$$

$$a_i |\Psi_0\rangle = 0 \quad (i > N). \quad (2.24)$$

A Eq. 2.23 obedece o princípio de exclusão de Pauli, que por definição possui todos os orbitais ocupados em $|\Psi_0\rangle$. Já na Eq. 2.24, não é possível aniquilar uma partícula se ela não existe. A figura abaixo exhibe casos de um sistema de férmions para estados cheios e vazios. Podemos escrever a figura 2.2 (a) em segunda quantização como

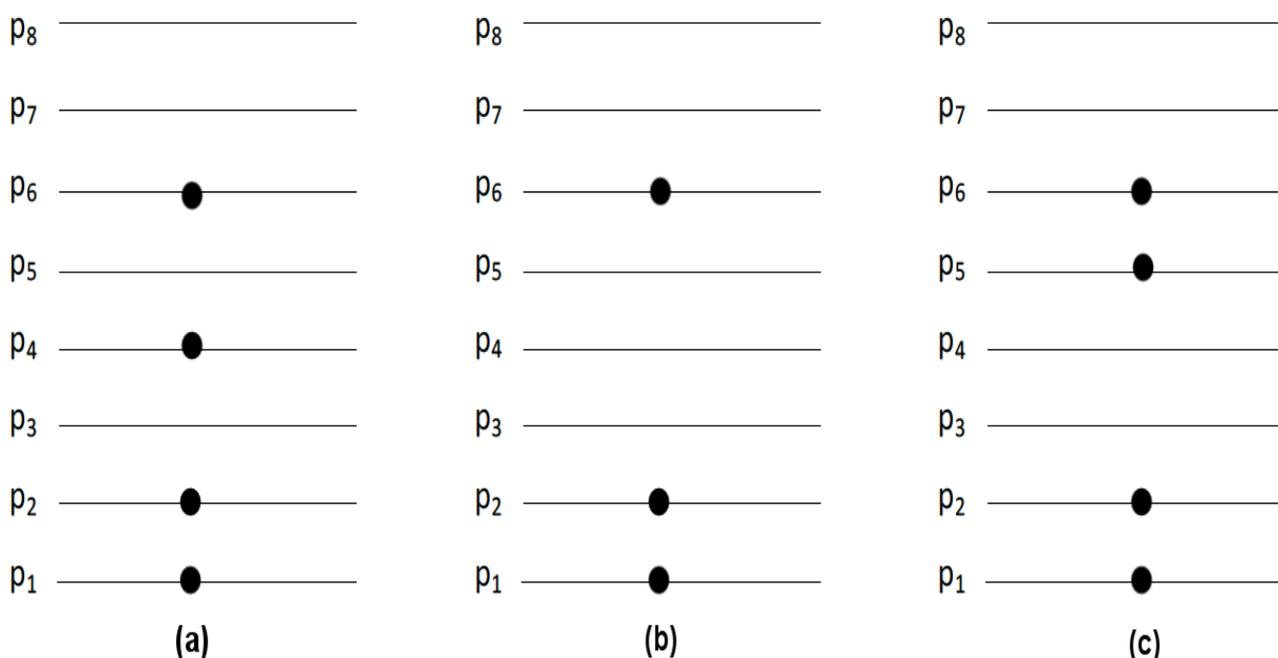


FIGURA 2.2 – Sistema de férmions para estados cheios e vazios

$$\Phi_{n_1=p_1, n_2=p_2, n_3=p_4, n_4=p_6} = |1, 1, 0, 1, 0, 1, \dots\rangle. \quad (2.25)$$

Na (b) temos uma aniquilação no estado n_4 , logo

$$\begin{aligned} \Phi_{n_1=p_1, n_2=p_2, n_3=p_6} &= |1, 1, 0, 0, 0, 1, \dots\rangle = \\ &= a_4 |1, 1, 0, 0, 0, 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Já para (c) temos uma criação no estado n_5 , de maneira que

$$\begin{aligned}\Phi_{n_1=p_1, n_2=p_2, n_3=p_3, n_4=p_4} &= |1, 1, 0, 0, 1, 1, \dots\rangle = \\ &= a_5^\dagger |1, 1, 0, 0, 1, 1, \dots\rangle.\end{aligned}\quad (2.27)$$

No espaço de Fock todos os espaços de kets são normalizados sempre a 1, inclusive o vácuo $\langle 0|0\rangle = 1$, logo, os operadores de criação e aniquilação podem ser expressos por:

$$\begin{aligned}a_i^\dagger |n_1, n_2, n_3, \dots, n_{i-1}, 0, n_{i+1}, \dots\rangle &= (-1)^{v_i} |n_1, n_2, n_3, \dots, n_{i-1}, 1_i, n_{i+1}, \dots\rangle, \\ a_i^\dagger |n_1, n_2, n_3, \dots, n_{i-1}, 0, n_{i+1}, \dots\rangle &= 0,\end{aligned}\quad (2.28)$$

para criação e

$$\begin{aligned}a_i |n_1, n_2, n_3, \dots, n_{i-1}, 1_i, n_{i+1}, \dots\rangle &= (-1)^{v_i} |n_1, n_2, n_3, \dots, n_{i-1}, 0_i, n_{i+1}, \dots\rangle, \\ a_i |n_1, n_2, n_3, \dots, n_{i-1}, 1_i, n_{i+1}, \dots\rangle &= 0,\end{aligned}\quad (2.29)$$

para aniquilação. Onde v_i mede o número total de partículas em estados de partículas únicas e podemos expressar como

$$v_i = \sum_{\beta < i} N_\beta, \quad \text{onde} \quad N_\beta = a_\beta^\dagger a_\beta, \quad (2.30)$$

e $\beta < i$.

A partir da definição do fator de fase $(-1)^{v_i}$, podemos expressar

$$\begin{aligned}N_i |n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\rangle &= n_i |n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\rangle, \quad \text{que é igual a} \\ a_i^\dagger a_i |n_i\rangle &= n_i |n_i\rangle,\end{aligned}\quad (2.31)$$

sendo $n_i = 0, 1$ a ocupação da partícula no estado i . As regras para operadores de construção e aniquilação são expressas na Tabela. 2.1.

Operadores	Resultados	Discusões
$a_2 1, 1, 1, 0, 1, 1, \dots\rangle$	$ 1, 0, 1, 0, 1, 1, \dots\rangle$	Aniquila a partícula no estado n_2
$a_2^\dagger 1, 1, 1, 0, 1, 1, \dots\rangle$	0	Não é possível criar uma partícula em n_2 pois esta já existe
$a_4 1, 1, 1, 0, 1, 1, \dots\rangle$	0	Não é possível aniquilar uma partícula em n_4 pois esta não existe
$a_4^\dagger 1, 1, 1, 0, 1, 1, \dots\rangle$	$ 1, 1, 1, 1, 1, 1, \dots\rangle$	Cria uma partícula no estado n_4
$a_n 0, 0, \dots, 1_j, \dots\rangle$	$\delta_{nj} 0, 0, \dots, 0_j\rangle$	Aniquila a partícula no estado j
$a_m^\dagger 0, 0, \dots, 0_m, \dots\rangle$	$ 0, 0, \dots, 1_m, \dots\rangle$	Cria uma partícula no estado m

TABELA 2.1 – Regras aplicadas aos operadores de construção e aniquilação.

Segundo o princípio de exclusão de Pauli, cada nível de energia pode conter apenas uma partícula. No entanto, considerando que os férmions podem apresentar dois estados

distintos devido à projeção de spin $m_s = \pm\frac{1}{2}$, cada nível quântico representado pelos índices n , m e p pode acomodar duas partículas, uma para o estado $m_s = +\frac{1}{2}$ (*spin up*) e outra para o estado $m_s = -\frac{1}{2}$ (*spin down*). As funções de onda representando os estados de spins com as projeções $m_s = \pm\frac{1}{2}$ são

$$\begin{aligned}\chi_{\uparrow} &= |\uparrow\rangle, \\ \chi_{\downarrow} &= |\downarrow\rangle,\end{aligned}$$

ou na forma matricial

$$\begin{aligned}\chi_{\uparrow} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \chi_{\downarrow} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Além do mais, é válido lembrar que $\chi_{\uparrow,\downarrow}$ devem satisfazer as condições de ortogonalidade, ou seja,

$$\begin{aligned}\langle\chi_{\uparrow}|\chi_{\uparrow}\rangle &= 1, \\ \langle\chi_{\downarrow}|\chi_{\downarrow}\rangle &= 1, \\ \langle\chi_{\uparrow}|\chi_{\downarrow}\rangle &= 0.\end{aligned}$$

Em geral, não trataremos de conceitos de partículas e buracos simples e sim, conceitos como quasi-partículas e buracos.

Segundo (MATTUCK, 1976), uma quasi-partícula é considerada como uma “partícula vestida”, ou seja, ela é constituída em torno de uma partícula real no seu “núcleo” mas o comportamento da partícula é afetado pelo ambiente. A quasi-partícula possui fraca interação com outras e suas propriedades diferem de uma partícula real, como sua massa efetiva e tempo de vida. As quasi-partículas são uma ferramenta matemática capaz de simplificar a interação dos fenômenos emergentes que ocorrem dentro de um sólido, na supercondutividade, por exemplo.

Um buraco é a ausência de uma quasi-partícula (estas ocupam níveis de energia definidos), já os buracos são formados quando uma partícula abaixo da energia de Fermi (e_F) é elevada a um nível acima da mesma.

2.3 Aproximação de Hartree e Hartree-Fock

As aproximações de Hartree e Hartree-Fock foram desenvolvidas a fim de propor soluções aproximadas de uma hamiltoniana fermiônica de muitos corpos. A eficiência deste método consiste em reduzir problemas nucleares de muitos corpos a solução de equações de um corpo por um método auto-consistente, de maneira que o problema de interação de muitas partículas se reduz ao problema de uma partícula única sofrendo ação de um campo médio.

Consideramos um operador hamiltoniano de um sistema de N nucleons que pode ser descrito como (CUSTODIO, 2015)

$$H = \sum_i^N T_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij}(r_i, r_j), \quad (2.32)$$

onde T_i representa a energia cinética da partícula e v_{ij} a interação entre os núcleons. No caso de partículas não interagentes, a função de onda pode ser expressa como

$$T_i(\psi) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r). \quad (2.33)$$

A Eq. 2.33 é uma equação solúvel de uma partícula independente. No método de Hartree, a função de onda é escrita como um produto de funções, violando assim o princípio de exclusão de Pauli e desprezando a indistinguibilidade (OLIVEIRA, 1972),

$$\phi(1, 2, 3, \dots, N) = \psi_1(1) \psi_2(2) \psi_3(3) \dots \psi_N(N). \quad (2.34)$$

A correção para tornar a função de onda antissimétrica e com indistinguibilidade entre as partículas é feita no método de Hartree-Fock (HF) a partir da inclusão de termos de troca. Para fazer da função de onda nuclear um produto antissimétrico, aplicamos a Eq. 2.5 na 2.34.

$$\Psi_A(1, 2, 3, \dots, N) = A\{\psi_1(1) \psi_2(2) \psi_3(3) \dots \psi_N(N)\}. \quad (2.35)$$

onde Ψ_A é o determinante de Slater das funções de partícula única.

Escrevendo a hamiltoniana 2.32 na linguagem de segunda quantização, teremos uma hamiltoniana geral de dois corpos escrita como

$$H = \hat{T} + \hat{V}, \quad (2.36)$$

onde

$$\hat{T} = \sum_{pq} \langle p | \hat{H}_T | q \rangle a_p^\dagger a_q, \quad (2.37)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{4} \sum_{pqrs} \langle pr | \hat{H}_V | qs \rangle a_p^\dagger a_r^\dagger a_s a_q. \quad (2.38)$$

\hat{H}_T e \hat{H}_V representam os operadores de energia cinética e potencial, respectivamente, na linguagem de segunda quantização, e os índices p, q, r, s representam os números quânticos dos estados. Para melhor compreensão, consideremos o caso de uma partícula livre unidimensional de massa m que se propaga na direção x . Sendo assim

$$\hat{H}_T = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad (2.39)$$

Para converter \hat{H}_T para a linguagem de segunda quantização usamos a regra

$$T = \langle \Psi | \hat{H}_T | \Psi \rangle, \quad (2.40)$$

no qual Ψ é a função de onda do sistema físico sendo definido na forma de segunda quantização de acordo com as Eqs. 2.41 e 2.42,

$$|\Psi\rangle = \sum_q |\varphi_q\rangle a_q, \quad (2.41)$$

$$\langle \Psi | = \sum_p a_p^\dagger \langle \varphi_p |. \quad (2.42)$$

Portanto, substituindo Ψ em 2.40 temos

$$\hat{T} = \sum_p a_p^\dagger \langle \varphi_p | \hat{H}_T \sum_q |\varphi_q\rangle a_q, \quad (2.43)$$

$$= \sum_{pq} a_p^\dagger a_q \langle \varphi_p | \hat{H}_T | \varphi_q \rangle. \quad (2.44)$$

Quando φ satisfaz a equação de autovalor, como por exemplo,

$$\hat{H}_T |\varphi_p\rangle = \frac{p^2}{2m} |\varphi_p\rangle, \quad (2.45)$$

e que φ 's são autofunções ortogonais

$$\langle \varphi_p | \varphi_q \rangle = \delta_{p,q}, \quad (2.46)$$

temos

$$\hat{T} = \sum_{pq} \frac{p^2}{2m} a_p^\dagger a_q \delta_{p,q}. \quad (2.47)$$

Por conseguinte chegamos na expressão da hamiltoniana da partícula livre na linguagem de segunda quantização,

$$\hat{T} = \sum_p \frac{p^2}{2m} a_p^\dagger a_p. \quad (2.48)$$

Mas, em geral, temos

$$\hat{T} = \sum_{pq} \langle p | \hat{H}_T | q \rangle a_p^\dagger a_q. \quad (2.49)$$

Como feito para a energia cinética na Eq. 2.40, a hamiltoniana da energia potencial pode ser descrita como

$$\begin{aligned} \hat{H}_V &= \frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij}(r_i, r_j), \\ \hat{V} &= \langle \Psi | \hat{H}_V | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.50)$$

A partir das definições de Ψ nas Eqs. 2.41 e 2.42, definimos o potencial como:

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \left[\sum_p \langle \varphi_p | a_p^\dagger \sum_r \langle \varphi_r | a_r^\dagger | \hat{H}_V | \sum_q |\varphi_q\rangle a_q \sum_s |\varphi_s\rangle a_s \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{pqrs} a_p^\dagger a_r^\dagger a_q a_s \langle \varphi_p \varphi_r | \hat{H}_V | \varphi_s \varphi_q \rangle. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Substituindo o H_V por v

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{pqrs} a_p^\dagger a_r^\dagger a_q a_s \langle \varphi_p \varphi_r | v | \varphi_s \varphi_q \rangle, \\ &= \frac{1}{2} \sum_{pqrs} a_p^\dagger a_r^\dagger a_q a_s v_{pqrs}. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Através de uma análise da Eq. 2.52, pode-se perceber que o termo v_{pqrs} deve obedecer as seguintes propriedades de antissimetria

$$v_{pqrs} = -v_{prsq} = -v_{rpsq} = v_{rpsq}. \quad (2.53)$$

Desta maneira, para evitar a contagem dupla de cada par de interação, pode-se representar

a hamiltoniana de v_{pqrs} como

$$\begin{aligned} H_V &= \frac{1}{4} \sum_{pqrs} a_p^\dagger a_r^\dagger a_q a_s \langle \varphi_p \varphi_r | v | \varphi_q \varphi_s \rangle, \\ &= \frac{1}{4} \sum_{pqrs} \langle pr | v | qs \rangle a_p^\dagger a_r^\dagger a_s a_q. \end{aligned} \quad (2.54)$$

satisfazendo as Eqs. 2.21 e 2.22.

A função de onda de um sistema fermiônico pode ser representada segundo a Eq. 2.5, empregando a linguagem de segunda quantização, como

$$|\Psi_N\rangle = a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger \dots a_{k_i}^\dagger \dots a_{k_N}^\dagger |0\rangle, \quad (2.55)$$

que corresponde à criação de partículas que ocupa cada estado k_i a partir do vácuo. Neste caso $|\Psi_N\rangle$ representa o estado fundamental do sistema físico.

Para deduzir as equações de auto-consistência de Hartree-Fock, partimos do valor esperado da Hamiltoniana, Eq. 2.36, referente ao sistema em um estado arbitrário. A função de onda para tal sistema físico segundo a Eq. 2.5, pode ser representada na forma $|\Psi_N^Z\rangle$, onde a relação entre as funções de onda do estado fundamental $|\Psi_N\rangle$ e $|\Psi_N^Z\rangle$ referente ao estado com energia total $E(Z) > E_0$ (neste caso E_0 é a energia do estado fundamental) é dada pelo teorema de Thouless (THOULESS, 1960),

$$|\Psi_N^Z\rangle = e^Z |\Psi_N\rangle, \quad (2.56)$$

$$Z = \sum_{\substack{m>N \\ i\leq N}} z_{mi} a_m^\dagger a_i. \quad (2.57)$$

Portanto o valor esperado da energia no estado $|\Psi_N^Z\rangle$ é dada por

$$\langle \Psi_N^Z | H | \Psi_N^Z \rangle = \langle e^Z \Psi_N | H | e^Z \Psi_N \rangle. \quad (2.58)$$

Escrevendo o operador e^Z na sua forma expandida,

$$\begin{aligned} e^Z &= 1 + Z + \frac{Z^2}{2!} + \dots, \\ &= 1 + \sum_{\substack{m>N \\ i\leq N}} z_{mi} a_m^\dagger a_i + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{m>N \\ i\leq N}} z_{mi} a_m a_i^\dagger \sum_{\substack{m'>N \\ i'\leq N}} z_{m'i'} a_{m'}^\dagger a_{i'} + \dots, \\ &= 1 + \sum_{\substack{m>N \\ i\leq N}} z_{mi} a_m^\dagger a_i + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{m>N \\ i\leq N}} \sum_{\substack{m'>N \\ i'\leq N}} z_{mi} z_{m'i'} a_m a_i^\dagger a_{m'}^\dagger a_{i'} + \dots \end{aligned} \quad (2.59)$$

e substituindo na Eq. 2.58, temos a expansão,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_N^Z | H | \Psi_N^Z \rangle &= \langle \Psi_N | H | \Psi_N \rangle + \left\langle \Psi_N \left| H \sum_{\substack{m>N \\ i \leq N}} z_{mi} a_m^\dagger a_i \right| \Psi_N \right\rangle \\ &+ \left\langle \Psi_N \left| \sum_{\substack{m>N \\ i \leq N}} z_{mi}^* a_i^\dagger a_m H \right| \Psi_N \right\rangle + \dots \end{aligned} \quad (2.60)$$

Aplicando o princípio variacional na Eq. 2.60, obtém-se

$$\begin{aligned} \left. \frac{dE(Z)}{dZ_{mi}} \right|_{Z=0} &= [\langle \Psi_N | H a_m^\dagger a_i | \Psi_N \rangle] + O(Z^2), \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.61)$$

A equação independente obtida da derivada com respeito a Z^* é similar a 2.61. O segundo termo do lado direito da equação representa a dependência em relação a Z , de modo que na condição $Z = 0$ tais termos se anulam, restando apenas o primeiro termo da expansão que define os operadores H e $a_m^\dagger a_i$.

Assim, as equações de auto-consistência podem ser definidas como

$$\langle \Psi_N | H a_m^\dagger a_i | \Psi_N \rangle \equiv h_{im} = \langle i | H_T | m \rangle + \sum_{j \leq N} \langle ij | v | mj \rangle = 0, \quad (2.62)$$

$$\langle \Psi_N | a_i^\dagger a_m H | \Psi_N \rangle \equiv h_{mi} = \langle m | H_T | i \rangle + \sum_{j \leq N} \langle mj | v | ij \rangle = 0, \quad (2.63)$$

que são as condições de Hartree-Fock.

2.4 O método de Hartree-Fock-Bogoliubov

A aproximação de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) consiste em uma transformação canônica de (anti) comutação desenvolvida a fim de encontrar soluções da teoria BCS em um sistema homogêneo (BOGOLIUBOV, 1959).

A teoria de Bardeen-Cooper e Schrieffer (BCS) foi proposta no fim dos anos 50 para descrever as observações experimentais nos supercondutores. A teoria explica a formação dos pares de Cooper e como estes se deslocam sem resistência na rede cristalina, uma vez que elétrons individuais sofrem resistência. Ao observarem o acoplamento entre elétrons e fônons, verificou-se que os elétrons dos pares de Cooper possuem energia um pouco inferior que a energia dos elétrons individuais não emparelhados, ou seja, há um “gap” de energia entre os elétrons emparelhados e os elétrons livres (BARDEEN *et al.*, 1957).

A diferença entre pares de Cooper e elétrons não emparelhados está na interação. Quando o elétron é único dá-se a troca de energia entre o elétron por interação com os átomos da rede, gerando uma vibração na mesma. Esta interação causa uma resistência no deslocamento dos elétrons individuais, porém, se dois elétrons estiverem ligados em um par de Cooper, esta interação com átomos da rede só será realizada se a energia trocada for maior do que o gap de energia. Quando a densidade é alta, não há formação de pares de Cooper por serem rapidamente aniquilados em sua formação. No núcleo, o emparelhamento é um resultado do fato de que um par de nucleons é quase ligado no vácuo, assim, o espaço da fase de pouca matéria nuclear é suficiente para o emparelhamento ocorrer.

A aproximação de HFB consiste no movimento independente das quasi-partículas, de maneira que a hamiltoniana será reduzida a dois potenciais: O potencial médio auto-consistente, Γ , proveniente da teoria de HF que contém todas as correlações de longo alcance, e, um campo de emparelhamento adicional, Δ (gap de energia), conhecido da teoria de BCS, que resume as correlações de emparelhamento de curto alcance (BALBUENA, 2003).

Para tanto, começaremos utilizando o teorema de Wick (WICK, 1950) para que possamos expandir produtos de criação e aniquilação de operadores. Escreveremos o hamiltoniano 2.36 em termos de um conjunto completo de estados independentes.

Pelo teorema de Wick (P.RING; P.SCHUCK, 1980) podemos reduzir produtos arbitrários de operadores de criação e aniquilação para somas de produtos de pares destes operadores. No caso de um estado simples ϕ no vácuo

$$|\phi\rangle = \prod_{i=1}^N a_i^\dagger |0\rangle, \quad (2.64)$$

temos

$$a_p^\dagger a_r = \langle \phi | a_p^\dagger a_r | \phi \rangle + : a_p^\dagger a_r :$$

onde

$$\langle \phi | : a_p^\dagger a_r : | \phi \rangle = 0$$

e

$$\langle \phi | a_p^\dagger a_r | \phi \rangle = \begin{cases} \delta_{pr} & p, r \leq N \\ 0 & p > N \text{ ou } r > N \end{cases}. \quad (2.65)$$

De modo que estes valores definem a aproximação de HF.

Para calcular HFB, usamos a expansão de Wick para um produto de quatro operadores

fermiônicos. Esta expansão resulta em produtos normais e de contração, assim:

$$\begin{aligned}
a_p^\dagger a_r^\dagger a_s a_q &= \langle \phi | a_p^\dagger a_q | \phi \rangle \langle \phi | a_r^\dagger a_s | \phi \rangle - \langle \phi | a_p^\dagger a_s | \phi \rangle \langle \phi | a_r^\dagger a_q | \phi \rangle \\
&+ \langle \phi | a_p^\dagger a_q | \phi \rangle : a_r^\dagger a_s : + \langle \phi | a_r^\dagger a_s | \phi \rangle : a_p^\dagger a_q : \\
&- \langle \phi | a_p^\dagger a_s | \phi \rangle : a_r^\dagger a_q : - \langle \phi | a_r^\dagger a_q | \phi \rangle : a_p^\dagger a_s : \\
&+ \langle \phi | a_p^\dagger a_r^\dagger | \phi \rangle : a_s a_q : + \langle \phi | a_s a_q | \phi \rangle : a_p^\dagger a_r^\dagger : \\
&+ : a_p^\dagger a_r^\dagger a_s a_q : .
\end{aligned} \tag{2.66}$$

Escrevemos o operador de energia cinética como

$$\hat{T} = \sum_{pr} t_{pr} a_p^\dagger a_q, \tag{2.67}$$

e o operador da interação V como

$$\hat{V} = \frac{1}{4} \sum_{prqs} v_{prqs} a_p^\dagger a_r^\dagger a_s a_q \tag{2.68}$$

onde

$$v_{prqs} = -v_{prqs} = -v_{prsq} = v_{rpsq}. \tag{2.69}$$

As equações de HFB podem ser obtidas utilizando o teorema de Wick a partir da aplicação de 2.66 em 2.36, supondo que o estado fundamental tem os seguintes elementos de matriz,

$$\begin{aligned}
\langle \Phi | a_p^\dagger a_r | \Phi \rangle &= \rho_{rp} \\
\langle \Phi | a_p a_r | \Phi \rangle &= \kappa_{rp} \\
\langle \Phi | a_r^\dagger a_p^\dagger | \Phi \rangle &= \kappa_{rp}^*,
\end{aligned}$$

em que ρ_{rp} representa a densidade normal, κ_{rp}^* e κ_{rp} representam as densidades anômalas.

Aplicando o teorema de Wick, obtemos:

$$\hat{T} = \sum_{pr} t_{pr} \rho_{rp} + \sum_{pr} t_{pr} : a_p^\dagger a_r : \tag{2.70}$$

para a energia cinética, e:

$$\begin{aligned}
V &= \frac{1}{4} \sum_{pqrs} v_{pqrs} (\rho_{qp} \rho_{sr} - \rho_{sp} \rho_{qr} + \kappa_{pr}^* \kappa_{qs}) \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{pqrs} v_{pqrs} (\rho_{qp} : a_r^\dagger a_s : + \rho_{sr} : a_p^\dagger a_q : - \rho_{sp} : a_r^\dagger a_q : - \rho_{qr} : a_p^\dagger a_s :) \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{pqrs} v_{pqrs} (\kappa_{pr}^* : a_s a_q : + \kappa_{qs} : a_p^\dagger a_r^\dagger :) \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{pqrs} v_{pqrs} : a_p^\dagger a_r^\dagger a_s a_q : . \tag{2.71}
\end{aligned}$$

para a energia potencial.

Pela simetria de interação, simplificamos os operadores de V como

$$\sum_{pqrs} v_{pqrs} \rho_{qp} : a_r^\dagger a_s : := \sum_{pqrs} v_{pqrs} \rho_{sr} : a_p^\dagger a_q : := - \sum_{pqrs} v_{pqrs} \rho_{sp} : a_r^\dagger a_q : := - \sum_{pqrs} v_{pqrs} \rho_{qr} : a_p^\dagger a_s :,$$

e

$$\sum_{pqrs} v_{pqrs} \kappa_{pr}^* : a_s a_q : := \left(\sum_{pqrs} v_{pqrs} \kappa_{sq} : a_p^\dagger a_r^\dagger : \right)^\dagger . \tag{2.72}$$

Para calcular a matriz de HFB, definimos o campo médio e o gap de energia respectivamente como

$$\Gamma_{pr} = \sum_{pqrs} v_{pqrs} \rho_{sq}, \tag{2.73}$$

$$\Delta_{pr} = \frac{1}{2} \sum_{qs} v_{pqrs} \kappa_{qs}. \tag{2.74}$$

Substituindo o campo médio (2.73) e o gap de energia (2.74) em 2.71, obtemos:

$$\begin{aligned}
V &= \frac{1}{2} \sum_{pr} (\Gamma_{pr} \rho_{pr} + \kappa_{pr}^* \Delta_{pr}) \\
&+ \sum_{pr} \Gamma_{pr} : a_p^\dagger a_r : + \frac{1}{2} \sum_{pr} \Delta_{pr} : a_p^\dagger a_r^\dagger : + \frac{1}{2} \sum_{pr} \Delta_{pr}^* : a_r a_p : \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{pqrs} v_{pqrs} : a_p^\dagger a_r^\dagger a_s a_q : . \tag{2.75}
\end{aligned}$$

Temos então

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{pr} \left(\left(t_{pr} + \frac{1}{2} \Gamma_{pr} \right) \rho_{rp} + \frac{1}{2} \Delta_{pr} \kappa_{pr}^* \right) \\
&+ \sum_{pr} (t_{pr} + \Gamma_{pr}) : a_p^\dagger a_r : + \frac{1}{2} \sum_{pr} \Delta_{pr} : a_p^\dagger a_r^\dagger : + \frac{1}{2} \sum_{pr} \Delta_{pr}^* : a_r a_p : \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{prqs} v_{prqs} : a_p^\dagger a_r^\dagger a_s a_q : .
\end{aligned} \tag{2.76}$$

Usando o fato do produto de contração ser antissimétrico

$$\begin{aligned}
: a_r a_p^\dagger : &= a_r a_p^\dagger - \langle \Phi | a_r a_p^\dagger | \Phi \rangle \\
&= \delta_{pr} - a_p^\dagger a_r - \langle \Phi | \delta_{pr} - a_p^\dagger a_r | \Phi \rangle \\
&= - (a_p^\dagger a_r - \langle \Phi | a_p^\dagger a_r | \Phi \rangle) \\
&= - : a_p^\dagger a_r :
\end{aligned}$$

e definindo h_{rp} como

$$h_{rp} = t_{pr} + \Gamma_{pr}$$

de modo que o hermitiano é dado por,

$$h_{rp} = h_{pr}^* .$$

podemos escrever

$$\sum_{pr} h_{pr} : a_p^\dagger a_r := \frac{1}{2} \sum_{pr} h_{pr} : a_p^\dagger a_r : - \frac{1}{2} \sum_{pr} h_{pr} : a_r a_p^\dagger := \frac{1}{2} \sum_{pr} h_{pr} : a_p^\dagger a_r : - \frac{1}{2} \sum_{pr} h_{pr}^* : a_p a_r^\dagger ,$$

assim, temos que a hamiltoniana é

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{pr} \left(\left(t_{pr} + \frac{1}{2} \Gamma_{pr} \right) \rho_{rp} + \frac{1}{2} \Delta_{pr} \kappa_{pr}^* \right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{pr} : \begin{pmatrix} a_p^\dagger & a_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{pr} & \Delta_{pr} \\ -\Delta_{pr}^* & -h_{pr}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_r \\ a_r^\dagger \end{pmatrix} : \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{prqs} v_{prqs} : a_p^\dagger a_r^\dagger a_s a_q : .
\end{aligned} \tag{2.77}$$

Para conservar o número de nucleons, incluímos um mutiplicador de Lagrange λ que é determinado pela adição do operador de número de partículas N , definido por

$$N = \sum_p a_p^\dagger a_p .$$

Temos assim a hamiltoniana

$$\begin{aligned}
H' = H - \lambda N &= \sum_{pr} \left(\left(t_{pr} + \frac{1}{2} \Gamma_{pr} - \lambda \delta_{pr} \right) \rho_{rp} + \frac{1}{2} \Delta_{pr} \kappa_{pr}^* \right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{pr} : \left(\begin{array}{cc} a_p^\dagger & a_p \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} h_{pr} - \lambda \delta_{pr} & \Delta_{pr} \\ -\Delta_{pr}^* & -h_{pr}^* + \lambda \delta_{pr} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} a_r \\ a_r^\dagger \end{array} \right) : \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{prqs} v_{prqs} : a_p^\dagger a_r^\dagger a_s a_q : , \tag{2.78}
\end{aligned}$$

onde o primeiro termo é a energia do estado fundamental, o segundo termo a matriz de HFB e o terceiro termo outras interações.

Para obter os autovalores e autovetores da hamiltoniana de HFB, diagonalizamos a componente de partícula única do segundo termo. Aplicando uma transformação linear nos operadores de partículas a_l^\dagger , podemos escrever os operadores de quasi-partículas de BCS, $\beta_k^\dagger \beta_k$, da forma:

$$\beta_k^+ = \sum_l U_{lk} a_l^+ + V_{lk} a_l, \tag{2.79}$$

onde o hermitiano conjugado da equação 2.79 nos dá o operador β_k . Temos, portanto, uma transformação dos operadores $(a_1 \dots a_M, a_1^+ \dots a_M^+) \rightarrow (\beta_1 \dots \beta_M, \beta_1^+ \dots \beta_M^+)$ da forma,

$$\left(\begin{array}{c} \beta \\ \beta^+ \end{array} \right) = \left(\begin{array}{cc} U^+ & V^+ \\ V^T & U^T \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} a \\ a^+ \end{array} \right) \tag{2.80}$$

A partir de 2.78, as equações de HFB podem ser escritas como,

$$\left(\begin{array}{cc} h_{pr} - \lambda \delta_{pr} & \Delta_{pr} \\ -\Delta_{pr}^* & -h_{pr}^* + \lambda \delta_{pr} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} U_n \\ V_n \end{array} \right) = E_n \left(\begin{array}{c} U_n \\ V_n \end{array} \right) \tag{2.81}$$

de maneira que as matrizes U e V formam os autovetores de HFB e determinam o operador de quasi-partícula β_k .

Quando Δ é zero, temos a aproximação de HF. Em geral, a aproximação BCS pode ser obtida de HFB por desprezar elementos não diagonais da matriz de emparelhamento Δ na base de HF.

3 O Modelo Unidimensional - Conceitos e Cálculos

3.1 Conceitos

Muitos aspectos do comportamento de supercondutores são explicados pela teoria BCS, dentre eles, a existência de um meio pelo o qual há energia necessária para separar pares de Cooper. Aqui, queremos estudar a hamiltoniana de N partículas que interage por contato, cujo sistema é descrito por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - v_0 \sum_{i=1, i < j}^N \delta(x_i - x_j), \quad (3.1)$$

de maneira que compararemos as soluções exatas do modelo unidimensional para spin $-1/2$ do gás de Fermi com soluções auto-consistentes. A Hamiltoniana possui soluções exatas e foi obtida usando o ansatz de Bethe.

As coordenadas de espaço da Eq. 3.1 consistem em intervalos $[0, L]$ (ou $[-L/2, L/2]$) com condições de contorno periódicas nas extremidades do mesmo, de modo que as autofunções de espaço livre são dadas por

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x} \quad \text{com} \quad k_n = \frac{2\pi}{L} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Para partículas de spin $1/2$, a autofunção completa pode ser escrita como

$$\psi_{n\sigma}(x) = \psi_n(x) \chi_\sigma, \quad \sigma = \pm 1/2, \quad (3.2)$$

com

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Os elementos de matriz do operador de energia cinética podem ser descritos como

$$\begin{aligned}
 t_{m\sigma m'\sigma'} &= \langle m\sigma | T | m'\sigma' \rangle \\
 &= \frac{1}{L} \int_0^L dx e^{-ik_m x} \chi_\sigma \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) e^{ik_{m'} x} \chi_{\sigma'} \\
 &= \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m} \delta_{mm'} \delta_{\sigma\sigma'},
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

enquanto que os de interação são

$$\begin{aligned}
 v_{m\sigma n\tau m'\sigma' n'\tau'} &= \langle m\sigma n\tau | V | m'\sigma' n'\tau' \rangle \\
 &= \frac{1}{L} \int_0^L dx_1 dx_2 e^{-ik_m x_1} \chi_{1\sigma} e^{-ik_n x_2} \chi_{2\tau} v_0 \delta(x_1 - x_2) e^{ik_{m'} x_1} \chi_{1\sigma'} e^{ik_{n'} x_2} \chi_{2\tau'} \\
 &= \frac{v_0}{L} \delta_{m+n, m'+n'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\tau\tau'},
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

É possível reescrever a Hamiltoniana em termos de um único parâmetro. Dada a densidade de partícula $\rho = N/L$, definimos $x' = \rho x$ e H' , como

$$H' = \frac{m}{\hbar^2 \rho^2} H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i'^2} - \lambda \sum_{i=1, i < j}^N \delta(x_i' - x_j'), \tag{3.5}$$

onde

$$\lambda = \frac{q_0}{\rho} \quad \text{com} \quad q_0 = \frac{m}{\hbar^2} v_0.$$

q_0 define uma escala de comprimento inversa, definida pela interação enquanto λ é adimensional, sendo a razão de duas quantidades inversamente proporcionais ao comprimento. Observamos que o limite de $\lambda \rightarrow 0$ corresponde a acoplamento fraco, $v_0 \rightarrow 0$ ou a densidade alta, $\rho \rightarrow \infty$. Já o limite de $\lambda \rightarrow \infty$ corresponde a acoplamento forte, $v_0 \rightarrow \infty$ ou a densidade pequena, $\rho \rightarrow 0$.

3.1.1 O sistema de dois corpos

A equação de movimento de dois corpos no estado de spin-singlete antissimétrico, descrito como

$$\Psi(x_1, x_2) (\chi_{1+}\chi_{2-} - \chi_{1-}\chi_{2+}) / \sqrt{2}, \tag{3.6}$$

é simétrica na coordenada espacial,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_2^2} - v_0 \delta(x_1 - x_2) \Psi = E \Psi,$$

esta pode ser separada em duas equações, uma equação para o movimento de centro de massa

$$-\frac{\hbar^2}{2(2m)} \frac{d^2\psi_{cm}}{dX^2} = E_{cm}\psi_{cm} \quad \text{com} \quad X = \frac{x_1 + x_2}{2}, \quad (3.7)$$

e outra para o movimento relativo

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} - v_0\delta(x)\psi = E_{rel}\psi \quad \text{com} \quad x = x_1 - x_2 \quad \text{e} \quad \mu = m/2. \quad (3.8)$$

O estado ligado tem a forma

$$\psi(x) = Ae^{-k_b|x|}$$

e satisfaz a Eq. 3.8 (com $\eta > 0$ e $\eta \rightarrow 0$)

$$\int_{-\eta}^{\eta} dx \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} - g\delta(x)\psi \right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\eta}^{\eta} - v_0\psi(0) = \int_{-\eta}^{\eta} dx (-E_2\psi) = 0. \quad (3.9)$$

Substituindo a forma explícita pela função de onda, encontramos

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} 2k_b = v_0 \quad \text{de modo que} \quad k_b = \frac{q_0}{2} \quad \text{com} \quad q_0 = \frac{m}{\hbar^2} v_0.$$

A energia do estado ligado é então,

$$-E_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} k_b^2 = -\frac{\hbar^2}{4m} q_0^2. \quad (3.10)$$

As funções de onda para os estados de spin simétricos são antissimétricas no movimento relativo e descrevem um par de partículas que não interagem. Elas podem ser escritas como

$$\psi(x) = A \sin(kx), \quad \text{com} \quad E_{rel} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}.$$

Os estados de espalhamento antisimétricos de spin-singlete satisfazem as mesmas equações do centro de massa e movimento relativo, como o estado ligado. Podemos escrevê-lo como

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} - q_0\delta(x)\psi = k^2\psi \quad \text{com} \quad E_{rel} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (3.11)$$

Consideramos duas soluções: 1) com ondas entrantes e refletidas para a esquerda e uma onda de saída para a direita e 2) outra com ondas entrantes e refletidas para a direita e uma onda de saída para a esquerda.

Temos para o primeiro caso,

$$\begin{aligned} \psi_-(x) &= e^{ikx} - \rho e^{-ikx} & x \leq 0 \\ \psi_+(x) &= \tau e^{ikx} & x \geq 0 \end{aligned} \quad (3.12)$$

a solução satisfaz as duas equações

$$\begin{aligned}\psi_-(0) &= \psi_+(0) \\ q_0\psi_-(0) &= -\left(\frac{d\psi_+}{dx} - \frac{d\psi_-}{dx}\right)\Big|_{x=0}\end{aligned}$$

fornecendo

$$\begin{aligned}1 - \rho &= \tau \\ q_0(1 - \rho) &= -(ik\tau - ik - ik\rho) \\ &= 2ik\rho.\end{aligned}\tag{3.13}$$

A solução das equações para o primeiro caso é

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{q_0}{q_0 + 2ik} \\ \tau &= \frac{2ik}{q_0 + 2ik}.\end{aligned}\tag{3.14}$$

No segundo caso, temos

$$\begin{aligned}\psi_-(x) &= \tau e^{-ikx} & x \leq 0 \\ \psi_+(x) &= e^{-ikx} - \rho e^{ikx} & x \geq 0.\end{aligned}\tag{3.15}$$

Isso fornece

$$\begin{aligned}1 - \rho &= \tau \\ q_0(1 - \rho) &= -(ik - ik\rho + ik\tau) \\ &= 2ik\rho,\end{aligned}\tag{3.16}$$

sendo a mesma solução que 3.14

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{q_0}{q_0 + 2ik} \\ \tau &= \frac{2ik}{q_0 + 2ik}.\end{aligned}$$

Para formar uma solução simétrica, somamos as equações 3.12 e 3.15 para obter

$$\begin{aligned}\psi_-(x) &= e^{ikx} - e^{-2i\delta_0} e^{-ikx} & x \leq 0 \\ \psi_+(x) &= e^{-ikx} - e^{-2i\delta_0} e^{ikx} & x \geq 0\end{aligned}$$

onde

$$\tan \delta_0 = \frac{2k}{q_0}$$

Para tornar a simetria explícita, escrevemos a função de onda como

$$\psi(x) = e^{-ik|x|} - e^{-2i\delta_0} e^{ik|x|}. \quad (3.17)$$

3.1.2 As equações de HFB

Para obter as equações de HFB no sistema estudado, analisaremos inicialmente os campos médios, dados pelas equações

$$\begin{aligned} \Gamma_{m\sigma n\tau} &= \sum_{m'\sigma'n'\tau'} v_{m\sigma m'\sigma'n'\tau} \rho_{m'\sigma'n'\tau'} \\ &= \frac{v_0}{L} \delta_{\sigma\tau} \sum_{m'n'\sigma'} \delta_{m+m', n+n'} \rho_{m'\sigma'n'\sigma'} \end{aligned} \quad (3.18)$$

e

$$\begin{aligned} \Delta_{m\sigma n\tau} &= \frac{1}{2} \sum_{m'\sigma'n'\tau'} v_{m\sigma n\tau m'\sigma'n'\tau} \kappa_{m'\sigma'n'\tau} \\ &= \frac{v_0}{2L} \sum_{m'n'} \delta_{m+n, m'+n'} \kappa_{m'\sigma n'\tau} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Como o hamiltoniano é independente do spin, o momento é conservado e assumimos que o estado fundamental é invariante à translação, esperamos que

$$\rho_{m\sigma n\tau} = \rho_{m\sigma} \delta_{mn} \delta_{\sigma\tau},$$

de modo que a Eq. 3.18 se reduz a

$$\Gamma_{m\sigma n\tau} = \frac{2v_0}{L} \delta_{mn} \delta_{\sigma\tau} \sum_{m'} \rho_{m'\sigma}. \quad (3.20)$$

Já para o campo de emparelhamento Δ , observamos que o estado que irá emparelhar com um estado m, σ é o estado invertido no tempo $-m, -\sigma$. Podemos então escrever a Eq. 3.19 como

$$\Delta_{m\sigma n\tau} = \frac{v_0}{L} \delta_{m+n} \delta_{\sigma+\tau} \sum_{m'} \kappa_{m'\sigma, -m'-\sigma}. \quad (3.21)$$

Devido à antissimetria de Δ e κ , temos

$$\Delta_{m\sigma, -m-\sigma} = -\Delta_{-m-\sigma, m\sigma} \quad \text{e} \quad \kappa_{m\sigma, -m-\sigma} = -\kappa_{-m-\sigma, m\sigma}.$$

Para converter as somas em integrais, usamos a condição de quantização de maneira que escreveremos

$$q_n = \frac{2\pi}{L}n \quad \text{como} \quad \Delta q_n = \frac{2\pi}{L}\Delta n,$$

para fazer a substituição ($\Delta n = 1$)

$$\sum_n f(n)\Delta n \rightarrow \sum_n f(q_n) \frac{L}{2\pi}\Delta q_n \rightarrow L \int \frac{dq}{2\pi} f(q). \quad (3.22)$$

Temos então

$$\Gamma(k) = \Gamma = 2v_0 \int \frac{dq}{2\pi} \rho_{\sigma'}(q) \quad (3.23)$$

$$\Delta_{\sigma}(k) = \Delta_{\sigma} = v_0 \int \frac{dq}{2\pi} \kappa_{\sigma}(q) \quad (3.24)$$

com

$$\Gamma_{\sigma\tau}(k) = \delta_{\sigma\tau}\Gamma, \quad \Delta_{k\sigma, -k-\sigma} = \Delta_{\sigma} \quad \text{e} \quad \kappa_{k\sigma, -k-\sigma} = \kappa_{\sigma}(k),$$

onde levamos em conta o fato de que Γ e Δ são independentes do momento. Construindo a equação da matriz HFB para o número de onda k , encontramos

$$\begin{pmatrix} h_k - \mu & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & h_k - \mu & -\Delta & 0 \\ 0 & -\Delta & \mu - h_k & 0 \\ \Delta & 0 & 0 & \mu - h_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{k\sigma} \\ u_{k-\sigma} \\ v_{k-\sigma} \\ v_{k\sigma} \end{pmatrix} = \varepsilon_k \begin{pmatrix} u_{k\sigma} \\ u_{k-\sigma} \\ v_{k-\sigma} \\ v_{k\sigma} \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

onde $h_k = t_k + \Gamma$, com $t_k = \hbar^2 k^2 / 2m$.

As soluções para estas equações são dadas por

$$\begin{aligned} u_{k\sigma}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{h_k - \mu}{\varepsilon_k} \right) \\ v_{k\sigma}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{h_k - \mu}{\varepsilon_k} \right), \end{aligned}$$

$$\varepsilon_k = \sqrt{(h_k - \mu)^2 + \Delta^2},$$

e as densidades normais e anômalas, ρ_{σ} e κ_{σ} , são respectivamente,

$$\begin{aligned} \rho_{\sigma}(k) &= v_{k\sigma}^2 \\ \kappa_{\sigma}(k) &= u_{k\sigma} v_{k\sigma}, \end{aligned}$$

de modo a completar as Eqs. 3.23 e 3.24.

As duas equações de auto-consistência de HFB são aquelas para o campo médio Γ e o

campo de emparelhamento Δ ,

$$\Gamma = v_0 \int \frac{dk}{2\pi} 2v_k^2 \quad (3.26)$$

$$\Delta = v_0 \int \frac{dk}{2\pi} u_k v_k, \quad (3.27)$$

com o vínculo da densidade de partículas dada por

$$\rho = \int \frac{dk}{2\pi} 2v_k^2.$$

Como o campo médio é uma constante proporcional à densidade de partículas, $\Gamma = v_0\rho$, não é essencial para determinar a auto-consistência. Redefinimos o potencial químico

$$e_F = \mu - \Gamma \quad \text{e usamos} \quad t_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = h_k - \Gamma. \quad (3.28)$$

Reescrevemos os coeficientes u_k e v_k como

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{t_k - e_F}{\varepsilon_k} \right) \quad (3.29)$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{t_k - e_F}{\varepsilon_k} \right) \quad (3.30)$$

com

$$\varepsilon_k = \sqrt{(t_k - e_F)^2 + \Delta^2}. \quad (3.31)$$

Os parâmetros que determinam a auto-consistência são, então, o campo de emparelhamento Δ e a energia de Fermi e_F , determinadas da auto-consistência da equação de emparelhamento e do vínculo da densidade.

Para estimar um valor inicial para e_F , usamos o limite $\Delta \rightarrow 0$, para o qual

$$v_k^2 \rightarrow \theta(t_k - e_F).$$

Neste caso, temos

$$\rho = \int \frac{dk}{2\pi} 2v_k^2 = \frac{1}{\pi} \int_{-k_F}^{k_F} dk = \frac{2k_F}{\pi}. \quad (3.32)$$

A densidade de energia de HFB, pode então ser escrita como

$$E_{hfb} = \int \frac{dk}{2\pi} \left[\left(t_k + \frac{\Gamma}{2} \right) 2\rho_{k\sigma} + \frac{\Delta}{2} \kappa_{k\sigma} \right] \quad (3.33)$$

ou então, na forma de energia de BCS,

$$E_{bcs} = \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} 2v_k^2 - v_0 \frac{\rho^2}{4} - \frac{\Delta^2}{v_0}. \quad (3.34)$$

Observamos que, devido ao fato que o campo de emparelhamento Δ é constante, a aproximação HFB é equivalente à BCS.

Para fazer a comparação com outros formalismos, normalizamos a densidade de energia dividida pela densidade vezes metade da energia de ligação de duas partículas,

$$\varepsilon_{bcs} = \frac{E_{bcs}}{\rho E_b/2} \quad \text{com} \quad E_b = \frac{\hbar^2}{4m} q_0^2. \quad (3.35)$$

O potencial químico é dado pela energia de Fermi e_F deslocado pelo campo médio $U = v_0\rho/2$,

$$\mu_{bcs} = e_F - \frac{v_0\rho}{2}$$

e normalizado como

$$\bar{\mu}_{bcs} = \frac{1}{q_0 v_0} \mu_{bcs}. \quad (3.36)$$

A solução Hartree-Fock pode ser obtida como o limite de emparelhamento zero da solução HFB. Nesse caso

$$\int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} 2v_k^2 \rightarrow \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk}{2\pi} 2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F^3}{3m\pi}, \quad (3.37)$$

e a densidade de energia torna-se

$$E_{HF} = \frac{\hbar^2 k_F^3}{3m\pi} - \left(\frac{v_0\rho}{2}\right)^2 \quad \text{com} \quad \rho = \frac{2k_F}{\pi}. \quad (3.38)$$

O potencial químico é dado por

$$\mu_{HF} = e_F - \frac{v_0\rho}{2} \quad \text{e} \quad e_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m},$$

e normalizado como

$$\bar{\mu}_{HF} = \frac{1}{q_0 v_0} \mu_{HF}. \quad (3.39)$$

Conforme o emparelhamento $\text{BCS} \rightarrow 0$, o potencial químico μ tende à aproximação de HF.

3.1.3 A soma de escadas no meio nuclear

Seguindo a análise de (KAISER, 2011) da energia de um gás de Fermi com interação de contato obtida da soma a todas as ordens dos diagramas de escadas no meio nuclear, calculamos as contribuições da soma de escadas com zero, uma e duas inserções no meio, B_0 , B_1 e B_2 , respectivamente, representados pela figura 3.1.

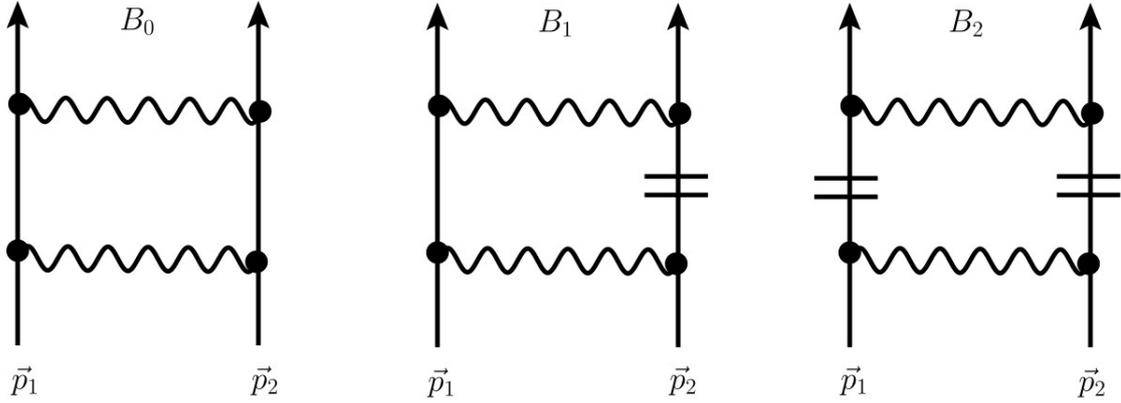


FIGURA 3.1 – A soma de escadas no meio nuclear representada por números de inserções para B_0 , B_1 e B_2 . Retirada do artigo (KAISER, 2011).

Escrevemos o momento total P e o momento de troca q como

$$P = \frac{p_1 + p_2}{2} \quad \text{e} \quad q = \frac{p_1 - p_2}{2} \quad (3.40)$$

onde $|p_1| < k_F$ e $|p_2| < k_F$.

A partir do propagador G ,

$$G(p_0, \vec{p}) = \frac{i}{p_0 - \vec{p}^2/2m_F + i\epsilon} - 2\pi\delta(p_0 - \vec{p}^2/2m_F)\theta(k_F - |\vec{p}|),$$

as contribuições no meio podem ser descritas em termos da contribuição sem matéria

$$\begin{aligned} B_0 &= -q_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl}{2\pi} \frac{1}{l^2 - q^2 - i\eta} \\ &= -\frac{q_0}{2|q|} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl}{2\pi} \left(\frac{1}{l - |q| - i\eta} - \frac{1}{l + |q| - i\eta} \right) \\ &= -i \frac{q_0}{2|q|}, \end{aligned}$$

e da contribuição com matéria,

$$B_1 = q_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl}{2\pi} \frac{1}{l^2 - q^2 - i\eta} (\theta(k_F - |P - l|) + \theta(k_F - |P + l|)). \quad (3.41)$$

Para facilitar o cálculo, reescrevemos 3.41 em termos de $|P|$. Quando $P < 0$, apenas

trocamos as duas integrais, de modo que sua soma ainda é a mesma. Assim

$$\begin{aligned}
 B_{1-} &= q_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl}{2\pi} \frac{1}{l^2 - q^2 - i\eta} \theta(k_F - ||P|-l|) \\
 &= \frac{q_0}{2|q|} \int_{|P|-k_F}^{|P|+k_F} \frac{dl}{2\pi} \left(\frac{1}{l-|q|-i\eta} - \frac{1}{l+|q|+i\eta} \right) \\
 &= \frac{q_0}{4\pi|q|} \left(\ln \left(\frac{k_F + |P| - |q|}{k_F - |P| + |q|} \right) - \ln \left(\frac{k_F + |P| + |q|}{k_F - |P| - |q|} \right) + 2\pi i \right),
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 B_{1+} &= q_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl}{2\pi} \frac{1}{l^2 - q^2 - i\eta} \theta(k_F - ||P|+l|) \\
 &= \frac{q_0}{2|q|} \int_{-k_F-|P|}^{k_F-|P|} \frac{dl}{2\pi} \left(\frac{1}{l-|q|-i\eta} - \frac{1}{l+|q|+i\eta} \right) \\
 &= \frac{q_0}{4\pi|q|} \left(\ln \left(\frac{k_F - |P| - |q|}{k_F + |P| + |q|} \right) - \ln \left(\frac{k_F - |P| + |q|}{k_F + |P| - |q|} \right) + 2\pi i \right),
 \end{aligned}$$

que é idêntico à primeira contribuição. Assim, podemos reescrever a Eq. 3.41

$$B_1 = B_{1+} + B_{1-} = \frac{q_0}{2\pi|q|} \ln \left(\frac{(k_F - |q|)^2 - P^2}{(k_F + |q|)^2 - P^2} \right) + i \frac{q_0}{|q|}. \quad (3.42)$$

Para obter a contribuição com duas inserções no meio, (KAISER, 2011) usa o fato que é puramente imaginário e que a parte imaginária total das três contribuições é dada por

$$\begin{aligned}
 \text{Im} [B_0 + B_1 + B_2] &= -q_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl}{2\pi} \pi \delta(l^2 - q^2) [\theta(k_F - |P - l|) \theta(k_F - |P + l|) \\
 &\quad + \theta(|P - l| - k_F) \theta(|P + l| - k_F)] \\
 &= -\frac{q_0}{2|q|} \pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl}{2\pi} (\delta(l - |q|)) \theta(k_F - |P - l|) \times \quad (3.43) \\
 &\quad \theta(k_F - |P + l|)
 \end{aligned}$$

$$= -\frac{q_0}{2|q|}, \quad (3.44)$$

onde o termo partícula-partícula proporcional a $\theta(|P - l| - k_F) \theta(|P + l| - k_F)$ é zero, desde que $|p_1| < k_F$ e $|p_2| < k_F$.

Podemos assim reescrever

$$B_0 + B_1 = -R(P, q) + iI(q),$$

com

$$R(P, q) = \frac{q_0}{2\pi |q|} \ln \left(\frac{(k_F + |q|)^2 - P^2}{(k_F - |q|)^2 - P^2} \right) \quad \text{e} \quad I(q) = \frac{q_0}{2|q|}$$

enquanto

$$B_0 + B_1 + B_2 = -R(P, q) - iI(q) \quad (3.45)$$

com

$$B_2 = -2iI(q) \quad (3.46)$$

Segundo Kaiser, as contribuições contendo n interações de contato, de ordem $n - 1$ no laço em meio nuclear, obtêm-se multiplicando os termos da forma $(B_0 + B_1)^{n-1-j} (B_2)^j$ por $-q_0$, bem como o fator de simetria apropriado, e integrando sobre os momentos $|p_1| < k_F$ e $|p_2| < k_F$. A distinção entre as inserções dupla em meio nuclear (B_2) e as outras (B_0 e B_1) é devida a simetrias adicionais que estas possuem. A expressão correta para as contribuições de ordem $n - 1$ são dadas por

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} \binom{n-1}{j} (B_0 + B_1)^{n-1-j} (B_2)^j \frac{1}{j+1} &= \frac{1}{nB_2} \sum_{j=0}^{n-1} \binom{n}{j+1} (B_0 + B_1)^{n-1-j} (B_2)^{j+1} \\ &= \frac{1}{nB_2} \sum_{j=1}^n \binom{n}{j} (B_0 + B_1)^{n-j} (B_2)^j \quad (3.47) \\ &= \frac{1}{nB_2} ((B_0 + B_1 + B_2)^n - (B_0 + B_1)^n). \end{aligned}$$

Se somarmos 3.47 sobre n , teremos

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{j=0}^{n-1} \binom{n-1}{j} (B_0 + B_1)^{n-1-j} (B_2)^j \frac{1}{j+1} &= -\frac{1}{B_2} \ln \left(\frac{1 - B_0 - B_1 - B_2}{1 - B_0 - B_1} \right) \\ &= \frac{1}{2iI(q)} \ln \left(\frac{1 + R(P, q) + iI(q)}{1 + R(P, q) - iI(q)} \right) \\ &= \frac{1}{I(q)} \arctan \left(\frac{I(q)}{1 + R(P, q)} \right). \quad (3.48) \end{aligned}$$

Levando em conta um fator de 2 devido à antissimetria, e outro fator de 2×2 para a multiplicidade de spin, a densidade de energia é então

$$E_{in-med} = \frac{\hbar^2 k_F^3}{3m\pi} - v_0 \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dp_1}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dp_2}{2\pi} \frac{1}{I(q)} \arctan \left(\frac{I(q)}{1 + R(P, q)} \right). \quad (3.49)$$

Quando $q_0 \ll 1$, $I(q)$ e $R(P, q)$ são pequenos, teremos

$$\arctan x \rightarrow x - \frac{x^3}{3} + \dots, \quad \text{quando} \quad |x| \ll 1,$$

de modo que

$$\frac{1}{I(q)} \arctan \left(\frac{I(q)}{1 + R(P, q)} \right) \rightarrow \frac{1}{1 + R(P, q)} - \frac{1}{3} \frac{I(q)^2}{(1 + R(R, q))^3} + \dots$$

e, à ordem mais baixa em q_0 ,

$$E_{in-med} \rightarrow E_{HF} = \frac{\hbar^2 k_F^3}{3m\pi} - v \frac{\rho^2}{4}, \quad (3.50)$$

Podemos também calcular o potencial efetivo para um determinado valor do momento p_1 como

$$U(p_1) = -v_0 \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dp_2}{2\pi} \frac{1}{I(q)} \arctan \left(\frac{I(q)}{1 + R(P, q)} \right). \quad (3.51)$$

Em termos da equação 3.51, podemos escrever

$$E_{in-med} = \frac{\hbar^2 k_F^3}{3m\pi} + \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dp_1}{2\pi} U(p_1). \quad (3.52)$$

e definimos o potencial químico como

$$\mu_{HF} = e_F + U(p_1 = k_F) \quad \text{com} \quad e_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}. \quad (3.53)$$

3.1.4 Solução exata do ansatz de Bethe

Bethe propôs o ansatz que agora carrega seu nome em 1931, quando apresentou um modelo em que obtinha os autovalores e autovetores exatos do modelo de Heisenberg unidimensional (1-D) para spin 1/2. O modelo consiste em uma rede unidimensional de partículas com interações entre vizinhos mais próximos, de modo que o ansatz fornece um método exato para o cálculo de autovalores e autovetores do sistema. Segundo (KARBACH; MÜLLER, 1997), oferece duas grandes vantagens: (I) Todos os autoestados são caracterizados por um conjunto de números quânticos que podem ser usados para distingui-los de acordo com propriedades físicas específicas. (II) Em muitos casos, os autovalores e as propriedades físicas deles derivadas, podem ser avaliados no limite termodinâmico.

3.1.4.1 O modelo ferromagnético

A hamiltoniana do modelo de Heisenberg foi introduzida pelo mesmo em 1928, através dos estudos das propriedades do estado fundamental e excitações baixas de um sistema ferromagnético. A hamiltoniana apresenta um conjunto de spins \hat{S}_m localizados e fixados

na rede com troca de interações entre vizinhos próximos

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle mn \rangle} \hat{\mathbf{S}}_m \cdot \hat{\mathbf{S}}_n, \quad (3.54)$$

onde a relação de comutação é descrita como

$$\left[\hat{S}_m^j, \hat{S}_n^k \right] = -i \delta_{mn} \epsilon^{jk} \hat{S}_n^l, \quad \hat{\mathbf{S}}^2 = S(S+1), \quad (3.55)$$

sendo J a magnitude do acoplamento e \mathbf{S} a magnitude de cada spin. Quando o acoplamento $J > 0$, o estado fundamental de uma cadeia de N spins terá seus vizinhos alinhados em uma mesma direção. Em um sistema unidimensional (1-D) de N spins $s = 1/2$, a hamiltoniana de Heisenberg agindo no espaço de Hilbert é representada por

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{n=1}^N \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} \\ &= -J \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2} (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) + S_n^z S_{n+1}^z \right], \end{aligned} \quad (3.56)$$

(KARBACH; MÜLLER, 1997) com condições de contorno periódicas dada por $\mathbf{S}_{n+1} = \mathbf{S}_1$, onde $\mathbf{S}_n = (S_n^x, S_n^y, S_n^z)$ e $S_n^\pm \equiv (S_n^x \pm iS_n^y)$ obedecem às regras de comutação de spins.

$$\hat{S}_n^\pm \equiv \hat{S}_n^x \pm i\hat{S}_n^y, \quad \left[\hat{S}_n^z, \hat{S}_n^\pm \right] = \pm i\delta_{nn'} \hat{S}_n^\pm, \quad \left[\hat{S}_n^+, \hat{S}_n^- \right] = 2\delta_{nn'} \hat{S}_n^z. \quad (3.57)$$

A hamiltoniana 3.56 pode ser expressa como uma matriz real e simétrica em uma dimensão $2^N \times 2^N$ gerada pelos vetores de base ortogonais $|\sigma_1 \dots \sigma_N\rangle$ com spins *up* ($\sigma_n = \uparrow$) ou *down* ($\sigma_n = \downarrow$). A figura 3.1, representa as regras de aplicação dos operadores de spins nos vetores de base e suas regras.

A matriz hamiltoniana pode ser escrita em forma diagonal de bloco. A simetria de rotação sobre o eixo- z no espaço de spin, eixo de quantização, implica que a componente z de spin total $S_T^z \equiv \sum_{n=1}^N S_n^z$ é conservada, tal que $[H, S_T^z] = 0$. Assim, a Hamiltoniana se separa em blocos de estados com o mesmo valor \mathbf{S}_T^z .

De acordo com a figura 3.2, a operação da hamiltoniana 3.56 em $|\sigma_1 \dots \sigma_N\rangle$ produz uma combinação linear de vetores de base, cada um dos quais são classificados de acordo com o número quântico $S_T^z = \frac{N}{2} - r$, onde r é o número de spins para baixo, o que é necessário para diagonalizar o bloco de um número quântico da matriz hamiltoniana.

O bloco com $r = 0$ (todos spins para cima) consiste em um único vetor $|F\rangle \equiv |\uparrow \dots \uparrow\rangle$,

	$ \dots \uparrow \dots\rangle$	$ \dots \downarrow \dots\rangle$
S_k^+	0	$ \dots \uparrow \dots\rangle$
S_k^-	$ \dots \downarrow \dots\rangle$	0
S_k^z	$\frac{1}{2} \dots \uparrow \dots\rangle$	$-\frac{1}{2} \dots \downarrow \dots\rangle$

FIGURA 3.2 – Regras que regem a aplicação dos operadores de rotação nos vetores de base $|\sigma_1 \dots \sigma_N\rangle$ com spins *up* ($\sigma_n = \uparrow$) e *down* ($\sigma_n = \downarrow$). Retirada do artigo (KARBACH; MÜLLER, 1997).

com autoestado de $H |F\rangle = E_0 |F\rangle$ e energia $E_0 = -JN/4$.

$$|n\rangle = S_n^- |F\rangle, \quad n = 1, \dots, N. \quad (3.58)$$

O bloco com $r = N$ (todos com spin para baixo), consiste também em um único vetor $|F\rangle \equiv |\downarrow \dots \downarrow\rangle$ com a mesma energia $E_0 = -JN/4$. Estes são os estados de spins totalmente alinhados.

Os vetores de base N no subespaço invariante com $r = 1$ (um spin para baixo) são marcados pela posição de spin invertido. Para diagonalizar o bloco $r = 1$ de H , que tem tamanho $N \times N$, supomos que os autovetores possuem a mesma invariância sob translações da hamiltoniana para escrever

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \exp(ikn) |n\rangle, \quad k = \frac{2\pi m}{N}, \quad m = 0, \dots, N-1, \quad (3.59)$$

Os vetores $|\psi\rangle$ são autovetores do operador de translação com autovalores de $\exp(ik)$ e são também autovetores de H com autovalores de

$$E - E_0 = J(1 - \cos(k)). \quad (3.60)$$

O ansatz de Bethe age sobre os subespaços invariantes com $2 \leq r \leq N/2$. Observe que os estados $r \geq N-1$, com um spin *up*, possui propriedades similares. Nestes casos, a base translacionalmente invariante não diagonaliza completamente a matriz hamiltoniana mesmo considerando simetrias adicionais, como por exemplo, a simetria total de rotação no espaço de spin ou a simetria de reflexão na rede.

Para $r = 1$, o ansatz para qualquer autovetor $H |\phi\rangle = E |\phi\rangle$ é uma superposição dos vetores de base

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N a(n) |n\rangle, \quad (3.61)$$

de maneira que os coeficientes $a(n)$ satisfazem as equações lineares,

$$2[E - E_0]a(n) = J[2a(n) - a(n-1) - a(n+1)], \quad a(n+N) = a(n)N, \quad (3.62)$$

para n inteiro, e com condições de contorno periódicas. Este sistema de equações diferenciais possui N soluções linearmente independentes

$$a(n) = \exp(ikn), \quad k = \frac{2\pi}{N}m, \quad m = 0, 1, \dots, N-1, \quad (3.63)$$

que fornece os resultados anteriores.

Já no subespaço de $r = 2$, com dimensão $N \binom{N+1}{2}$, precisamos determinar os coeficientes de $a(n_1, n_2)$ para todos os autoestados. O autovetor pode ser expandido como,

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1 < n_2 \leq N} a(n_1, n_2) |n_1, n_2\rangle. \quad (3.64)$$

O ansatz de Bethe de tais coeficientes é dado por

$$a(n_1, n_2) = \exp(i(k_1 n_1 + k_2 n_2 + \frac{1}{2}\theta_{1,2})) + \exp(i(k_1 n_2 + k_2 n_1 + \frac{1}{2}\theta_{2,1})), \quad (3.65)$$

onde o ângulo de fase $\theta_{12} = -\theta_{21} \equiv \theta$ depende de dois vetores de onda k_1, k_2 que satisfazem

$$2 \cot \frac{\theta}{2} = \cot \frac{k_1}{2} - \cot \frac{k_2}{2}. \quad (3.66)$$

Duas relações adicionais entre k_1, k_2 e θ expressam a exigência de que a função de onda 3.64 seja translacionalmente invariante, o que implica $a(n_1, n_2) = a(n_2, n_1 + N)$. Esta condição é satisfeita desde que

$$\exp(ik_1 N) = \exp(i\theta), \quad \exp(ik_2 N) = \exp(-i\theta), \quad (3.67)$$

ou

$$Nk_1 = 2\pi\lambda_1 + \theta, \quad Nk_2 = 2\pi\lambda_2 - \theta, \quad (3.68)$$

onde os inteiros $\lambda_i \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ são chamados de números quânticos de Bethe.

Os autoestados são encontrados resolvendo este sistema de relações algébricas. Cada solução k_1, k_2, θ determina um conjunto de coeficientes de expansão de $a(n_1, n_2)$ e assim determina o autovetor com energia

$$E = E_0 + J \sum_{j=1,2} (1 - \cos k_j), \quad k = k_1 + k_2 = \frac{2\pi}{N}(\lambda_1 + \lambda_2). \quad (3.69)$$

Para $r = 2$, as soluções se dividem em três classes.

1° uma classe C_1 de estados para os quais um dos números quânticos de Bethe é zero, $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 0, 1, \dots, N - 1$.

2° Uma classe C_2 de estados λ_1 e λ_2 não nulos, que diferem em dois ou mais: $\lambda_2 - \lambda_1 \geq 2$. Existem $N \frac{N-5}{2} + 3$ desses pares.

3° Uma classe C_3 de estados com λ_1 e λ_2 não nulos, que são iguais ou diferentes por unidade. Existem $2N - 3$ desses pares, mas somente $N - 3$ produzem soluções, a maioria dos quais são complexos.

A figura 3.2 esboça os pares de números quânticos de Bethe (λ_1, λ_2) permitidos que caracterizam os autoestados $N \frac{(N-1)}{2}$ no subespaço $r = 2$ para $N = 32$. Os estados das classes C_1, C_2 e C_3 estão coloridos em vermelho, branco e azul, respectivamente.

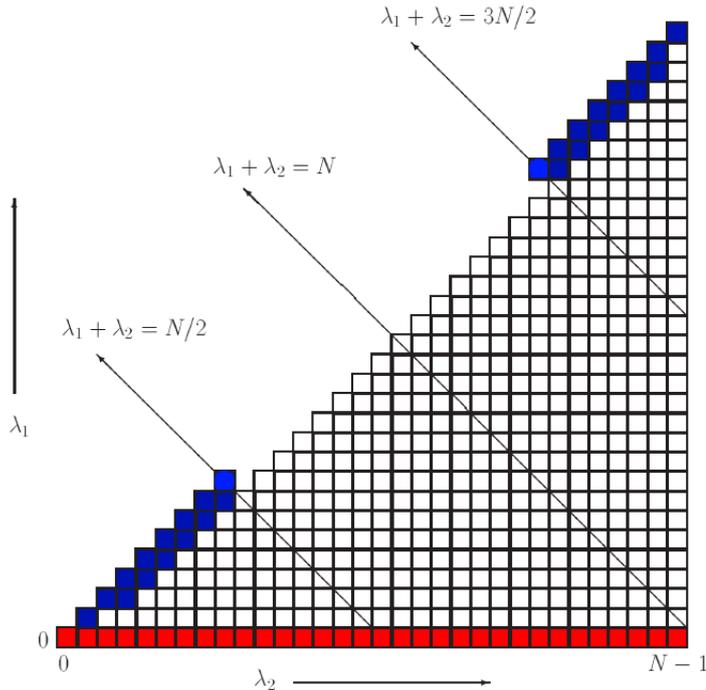


FIGURA 3.3 – Representação dos números quânticos de Bethe para os estados de classe C_1 (vermelho), C_2 (branco) e C_3 (azul). A figura caracteriza os autoestados $N \frac{(N-1)}{2}$ de $r = 2$, para um subespaço de $N=32$. Retirada do artigo (KARBACH; MÜLLER, 1997).

3.1.4.2 O modelo antiferromagnético

No modelo antiferromagnético de Heisenberg (1-D), escrevemos a hamiltoniana como

$$H_A = J \sum_{n=1}^N \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1}. \quad (3.70)$$

A diferença da hamiltoniana (3.54) para (3.70) é apenas o sinal. Na hamiltoniana antiferromagnética de Heisenberg H_A , todos os autoestados permanecem os mesmos que

em (3.54), mas os autovalores de energia possuem sinais opostos, logo, há diferentes propriedades físicas. O estado $|F\rangle$ (vetor do estado fundamental ferromagnético), agora tem energia mais alta.

A reflexão sobre a ordem antiferromagnética de longo alcance, tal como o vetor $|F\rangle$ faz para a ordem ferromagnética de longo alcance, sugere que a primeira poderia ser representadas por dois vetores

$$|N_1\rangle \equiv |\uparrow\downarrow\uparrow \dots \downarrow\rangle, \quad |N_2\rangle \equiv |\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\rangle, \quad (3.71)$$

que são chamados estados de Néel. Assumindo que o número de spins N em (3.70) é par e que as condições de contorno periódicas são impostas (KARBACH *et al.*, 1998).

Mas nem $|N_1\rangle$, $|N_2\rangle$, ou as combinações lineares invariantes à translação, $|N_{\pm}\rangle = (|N_1\rangle \pm |N_2\rangle) / \sqrt{2}$, são autovetores de H_A . No valor esperado de energia $\langle H_A \rangle$, o estado de Néel minimiza somente $\langle S_n^z S_{n+1}^z \rangle$. Um estado com a simetria de rotação completa de H_A pode ter uma energia mais baixa. Como $|N_{\pm}\rangle$, o estado fundamental $|A\rangle$ é encontrado no subespaço com $S_T^z \equiv \sum_n S_n^z = 0$.

No ansatz de Bethe, todos os autoestados de H_A com $S_T^z = 0$ podem ser obtidos a partir do estado de referência $|F\rangle$ excitando $r \equiv N/2$ partículas com momento k_i e energias $-J(1 - \cos k_i)$, onde cada autoestado é especificado por um conjunto diferente de $N/2$ (números quânticos de Bethe) $\{\lambda_i\}$. Os índices de fase k_i e os ângulos de fase θ_{ij} nos coeficientes da função de onda de Bethe resultam das equações do ansatz de Bethe (3.66) e (3.68). Para N -finito, o estado fundamental $|A\rangle$ tem momento real k_i e números quânticos de Bethe

$$\{\lambda_i\}_A = \{1, 3, 5, \dots, N - 1\}, \quad (3.72)$$

podendo relacionar o momento de partícula k_i com uma nova variável z_i , como

$$k_i \equiv \pi - \phi(z_i). \quad (3.73)$$

Através da função $\phi(z) \equiv 2\arctan(z)$, a relação entre cada ângulo de fase θ_{ij} para um par de partículas e diferença $z_i - z_j$, é dada por

$$\theta_{ij} = \pi \operatorname{sgn}[\Re(z_i - z_j)] - \phi[(z_i - z_j)/2], \quad (3.74)$$

onde $\Re(x)$ denota a parte real de x , e $\operatorname{sgn}(y) = \pm 1$, o sinal de y . Substituindo (3.73) e (3.74) em (3.68) produzimos as equações do ansatz de Bethe para as variáveis z_i :

$$N\phi(z_i) = 2\pi I_i + \sum_{j \neq i} \phi[(z_i - z_j)/2], \quad i = 1, \dots, r. \quad (3.75)$$

Os novos números quânticos de Bethe I_i assumem valores inteiros para valores de r ímpares e semi-inteiros para r pares. Para o estado fundamental $|A\rangle$, dada a solução $\{z_1, \dots, z_r\}$ das equações para um estado especificado por $\{I_1, \dots, I_r\}$, a energia e o número de onda são descritos como

$$\{I_i\}_A = \left\{ -\frac{N}{4} + \frac{1}{2}, -\frac{N}{4} + \frac{3}{2}, \dots, \frac{N}{4} - \frac{1}{2} \right\}, \quad (3.76)$$

$$(E - E_F)/J = \sum_{i=1}^r \varepsilon(z_i), \quad (3.77)$$

$$k = \sum_{i=1}^r [\pi - \phi(z_i)] = \pi r - \frac{2\pi}{N} \sum_{i=1}^r I_i. \quad (3.78)$$

A função de onda de Bethe (3.64 em um sistema para $r = N$) é obtida a partir de $\{z_i\}$ por meio das equações (3.73) e (3.74). O estado fundamental $|A\rangle$ pertence a uma classe de autoestados que são caracterizados por soluções reais $\{z_i\}$ das equações do ansatz de Bethe. Para encontrá-los numericamente, convertamos (3.75) em

$$z_i^{(n+1)} = \tan \left(\frac{\pi}{N} I_i + \frac{1}{2N} \sum_{j \neq i} \phi \left[\frac{(z_i^{(n)} - z_j^{(n)})}{2} \right] \right). \quad (3.79)$$

A configuração z_i para o estado fundamental de N -finito obtém $|A\rangle$ numericamente. Todas as raízes são reais e seus valores são classificados na ordem dos números quânticos de Bethe associados a I_i .

A inversa da função discreta $Z_N(z_i) \equiv I_i/N$ é reescrita a partir da Eq. (3.75) sob a forma:

$$2\pi Z_N(z_i) = \phi(z_i) - \frac{1}{N} \sum_{j \neq i} \phi \left[\frac{(z_i - z_j)}{2} \right]. \quad (3.80)$$

Para $N \rightarrow \infty$, $Z_N(z_i)$ se torna uma função contínua de $Z(z)$ cuja derivada, $\sigma_0(z) \equiv dZ/dz$ representa a distribuição das raízes. Na Eq. (3.80) a soma $(1/N) \sum_j \dots$ é substituída pela integral $\int dz' \sigma_0(z')$. Após a diferenciação, a versão contínua de (3.80) se torna uma equação integral linear

$$2\pi\sigma_0(z) = -\varepsilon(z) - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4dz'}{4 + (z - z')^2} \sigma_0(z'). \quad (3.81)$$

onde $\varepsilon(z) = \delta k / \delta z = -2/(1 + z^2)$.

Aplicando a transformada de Fourier em 3.81 produzimos uma equação algébrica para $\tilde{\sigma}(u) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{iuz} \sigma_0(z)$. Aplicando a transformada de Fourier inversa à sua solução

resulta em

$$\sigma_0(z) = \frac{1}{4} \operatorname{sech}(\pi z/2). \quad (3.82)$$

A energia do estado fundamental por sítio pode ser reescrita como (Eq. 3.77)

$$\frac{E_A - E_F}{JN} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \varepsilon(z) \sigma_0(z) = -\ln 2. \quad (3.83)$$

Este valor é menor do que o valor esperado de energia dos estados de Néel. O estado $|A\rangle$ tem um spin total $S_T = 0$ (singlete). Ao contrário de $|F\rangle$, que retém a simetria de rotação completa de (3.70) este estado não exibe ordem magnética de longo alcance. O número de onda de $|A\rangle$, obtido de (3.78), é $k_A = 0$ para $N/2$ pares e $k_A = \pi$ para $N/2$ ímpar. O estado $|A\rangle$ para $N \rightarrow \infty$ pode ser descrito por uma distribuição contínua de k ,

$$\rho_0(k) = \left[8 \sin^2 \frac{k}{2} \cosh \left(\frac{\pi}{2} \cot \frac{k}{2} \right) \right]^{-1} \quad (3.84)$$

para $0 \leq k \leq 2\pi$.

3.1.5 A solução exata de Gaudin

A solução exata do gás de Fermi unidimensional (Eq. 3.1), foi obtida por Gaudin usando o ansatz de Bethe. A solução (M.GAUDIN, 1967) pode ser escrita como duas equações acopladas que determinam o número de ocupação do estado de momento, $n(k)$, dada a restrição da densidade de partículas ρ ,

$$n(k) = 2 - 2q_0 \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dq}{2\pi} \frac{n(q)}{(k-q)^2 + q_0^2} \quad (3.85)$$

com

$$\rho = 2 \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dq}{2\pi} n(q) \quad \text{e} \quad q_0 = \frac{m}{\hbar^2} v_0. \quad (3.86)$$

O momento de Fermi k_F é determinado pela exigência da consistência das duas equações. A distribuição de momento é 2 no limite de interação zero, correspondente a uma partícula em cada estado com um *spin up* e um *spin down*, e diminui à medida que a força de interação aumenta. Uma vez obtidas as soluções para as duas equações (k_F e $n(k)$), a densidade de energia pode ser calculada como

$$E_g = 2 \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dq}{2\pi} \frac{\hbar^2}{2m} q^2 n(q) - \frac{\rho}{2} \frac{\hbar^2}{4m} q_0^2. \quad (3.87)$$

O primeiro termo nesta expressão corresponde à energia cinética. O segundo termo pode ser reescrito como $-\rho E_2/2$ e corresponde à energia de ligação das partículas em pares,

com a densidade de pares sendo metade da densidade de partículas. Em baixa densidade, a contribuição do termo de energia cinética tende a zero em relação ao do termo de ligação do par. Definindo

$$F(x) = n(k_F x) \quad \text{e} \quad K = \frac{k_F}{q_0},$$

lembrando a definição de $\lambda = q_0/\rho$, podemos escrever as equações de auto-consistência em forma normalizada como (M.CASAS *et al.*, 1991),

$$F(x) = 2 - \frac{K}{\pi} \int_{-1}^1 dy \frac{F(y)}{1 + K^2(x-y)^2} \quad (3.88)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{K}{\pi} \int_{-1}^1 dy F(y), \quad (3.89)$$

onde o parâmetro K e a distribuição de ocupação $F(x)$ devem ser determinados auto-consistentemente, como acontece com as densidades de energia BCS e HF. Escalamos a densidade de energia de Gaudin dividindo pelo fator $\rho E_b/2$ e depois transformamos a forma normalizada. Assim, reescrevemos a Eq. (3.87) como

$$\varepsilon_g = \frac{E_g}{\rho E_2/2} = -1 + \frac{4}{\pi} K^3 \lambda \int_{-1}^1 dy y^2 F(y). \quad (3.90)$$

o potencial químico pode ser obtido como

$$\mu_g = \frac{E_g}{\rho} + \rho \frac{d}{d\rho} (E_g/\rho). \quad (3.91)$$

Usando o fato que $q_0 v_0 = 4E_2$ e $\lambda = q_0/\rho$, podemos normalizar (3.91) obtendo

$$\bar{\mu}_g = \frac{\mu_g}{q_0 v_0} = \frac{1}{8} \left(\varepsilon_g - \lambda \frac{d\varepsilon_g}{d\lambda} \right), \quad (3.92)$$

onde o potencial químico deve ser calculado numericamente.

Também analisamos os resultados de uma aproximação qRPA (*quasi-Random Phase Approximation*) na qual os campos médios são obtidos de uma equação do tipo Brueckner, utilizando a função resposta qRPA, estudado por (T.ALM; P.SCHUCK, 1996).

$$\begin{pmatrix} U_p & \Delta_p \\ \Delta_k & -U_p \end{pmatrix} = -\frac{i}{2} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} Tr \left[\Pi \left(\frac{p-k}{2}, \frac{p-k}{2}; p+k, p_0+k_0 \right) \times \right. \\ \left. \times Y(k_0) S_k Y(k_0) \right] \quad (3.93)$$

A energia do qRPA é fornecida pela energia do BCS usando os campos médios da Eq.

3.93.

$$E_{qrpa} = \int \frac{dk}{2\pi} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{U_k}{2} \right) \left(1 - \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \right) - \int \frac{dk}{4\pi} \Delta_k \frac{\Delta_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \quad (3.94)$$

3.2 Cálculos e Discussões

As figuras de 3.3 a 3.7 esboçam as relações entre as aproximações de muitos corpos para a energia (ε), o potencial químico (μ) e o emparelhamento (Δ) em função do parâmetro adimensional λ^{-1} . O parâmetro adimensional é definido pela hamiltoniana 3.1 escrita em termos de um único parâmetro, que é a densidade de partícula (ρ) dividida pela escala de comprimento inversa (q_0) definida pela interação.

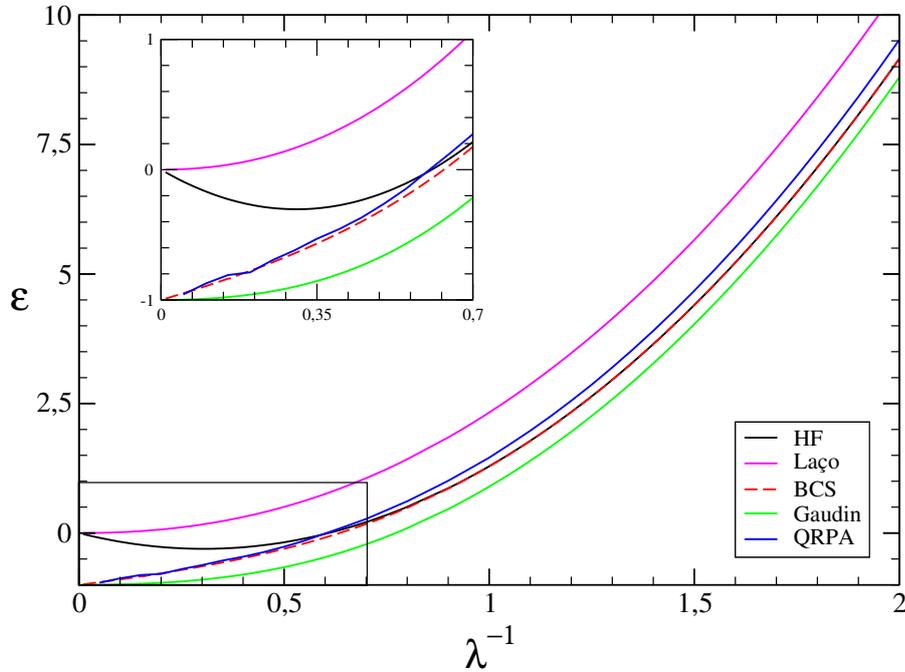


FIGURA 3.4 – Energia por nucleon em relação ao parâmetro λ^{-1} para as aproximações de HF, BCS, qRPA, Gaudin e soma de escadas em meio nuclear.

Valores pequenos do parâmetro λ^{-1} correspondem a densidade baixa (ou acoplamento forte) enquanto valores grandes correspondem a densidade alta (ou acoplamento fraco). As grandezas ε , μ e Δ foram normalizadas usando os seguintes critérios,

$$\varepsilon = \frac{E}{\rho E_2/2} \quad \text{para energias,} \quad (3.95)$$

$$\mu = \frac{\mu}{4E_2} \quad \text{para potenciais químicos,} \quad (3.96)$$

$$\Delta = \frac{\Delta}{E_2} \quad \text{para emparelhamento,} \quad (3.97)$$

onde $E_2 = \frac{m}{4\hbar^2}v_0^2$ é a energia de ligação de um par no vácuo.

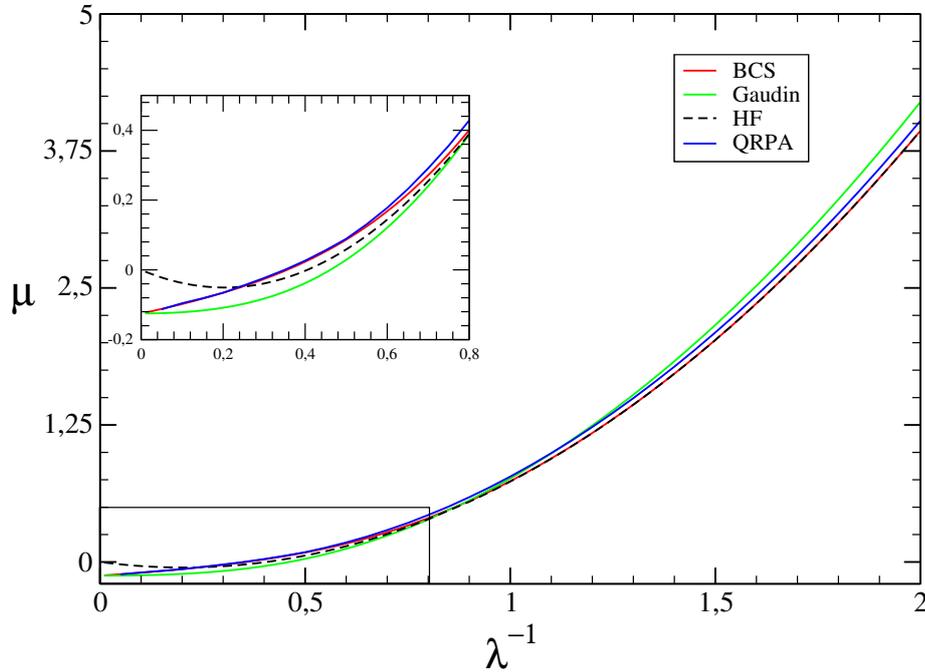


FIGURA 3.5 – Potencial químico em relação ao parâmetro λ^{-1} para as aproximações de HF, BCS, qRPA e Gaudin.

A Fig. 3.4 mostra os valores das energias do estado fundamental. A linha vermelha mostra os valores encontrados para a aproximação de BCS (3.35), a linha preta mostra os valores da aproximação de HF (3.38), a azul esboça a aproximação de qRPA (3.94), a linha rosa exhibe os resultados da energia da soma de escadas, que chamaremos de laço (3.52) e a solução exata de Gaudin (3.90) é representada pela linha verde, respectivamente. Podemos observar que as energias de qRPA, BCS e Gaudin no limite de densidade zero (acoplamento forte) tendem a -1, onde estas soluções descrevem a matéria totalmente ligada em pares.

Com o aumento da densidade, os pares começam a se desfazer, contudo, devido ao movimento dos núcleons esse processo ocorre mais rapidamente nos casos BCS e qRPA do que na solução exata. Já as energias de laço e HF no limite de densidade zero tendem a zero, uma vez que estas aproximações não contém pares ligados.

A divergência entre Gaudin e BCS para valores mais altos de λ^{-1} ocorre em razão do tratamento diferente dos pares. A aproximação de BCS considera apenas pares com momento zero, enquanto a solução exata de Gaudin permite pares com momentos arbitrários.

Esperávamos que a energia de laço estivesse próxima a energia de HF, uma vez que estas aproximações não descrevem pares ligados. No entanto, observamos uma diferença

nos cálculos entre o potencial efetivo da soma de escadas e o potencial de HF, onde a proximidade entre tais aproximações começa a ocorrer apenas para altos valores de λ^{-1} (acoplamento muito fraco). Verificamos que em $\lambda^{-1} = 30$ o potencial da soma de escadas alcançou apenas 95% do valor potencial de HF.

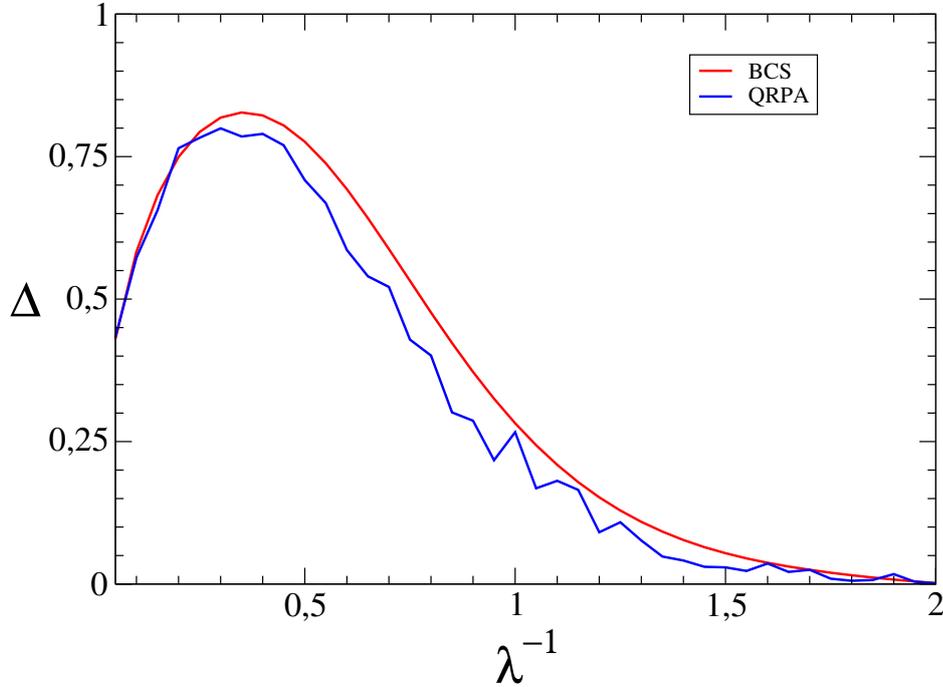


FIGURA 3.6 – Emparelhamento em relação ao parâmetro λ^{-1} nos casos BCS e qRPA.

O resultado dos cálculos dos potenciais químicos nos casos BCS (3.36), Gaudin (3.91), HF (3.39) e qRPA são apresentados na Fig. 3.5.

O potencial químico tende a metade da energia do par ligado para as soluções com pares, quando λ^{-1} tende a zero. Assim, os potenciais químicos normalizados, μ , das soluções BCS, qRPA e Gaudin tendem a $1/8$ quando λ^{-1} tende a zero. Em densidades mais altas, percebemos que o potencial de BCS tende ao potencial de HF. No limite do acoplamento forte, a aproximação de qRPA e BCS têm praticamente os mesmos valores, dado que estes tendem à energia do par ligado, ou seja, os dois tendem à mesma energia quando a densidade vai para zero. Na Fig. 3.6, mostramos o campo de emparelhamento

como função do parâmetro λ^{-1} . Podemos observar que o campo de emparelhamento da solução qRPA tem valores similares aos da solução BCS. O campo da solução BCS tem valor máximo por volta de $\lambda^{-1} \approx 0.75$, diminuindo monotonicamente para valores maiores de λ^{-1} convergindo assintoticamente a zero para valores de $\lambda^{-1} \geq 2.05$. Verificamos aqui um problema na convergência da solução qRPA. Ainda desconhecemos uma solução satisfatória para este problema.

Esboçamos na Fig. 3.7, os momentos de Fermi k_F das soluções de HF e Gaudin.

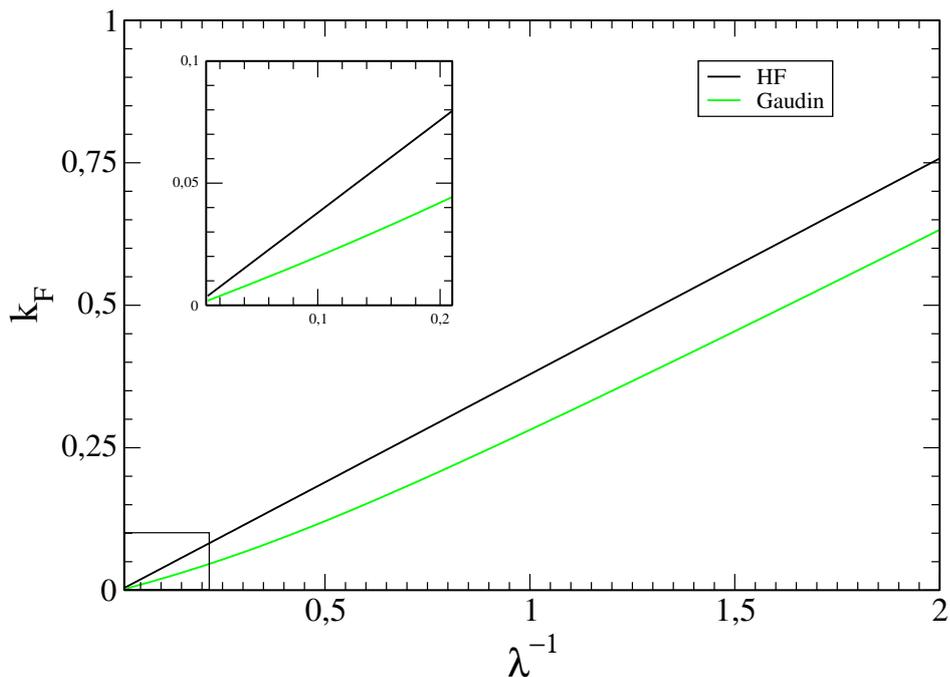


FIGURA 3.7 – Momento de Fermi em relação ao parâmetro λ^{-1} para as soluções de HF e Gaudin.

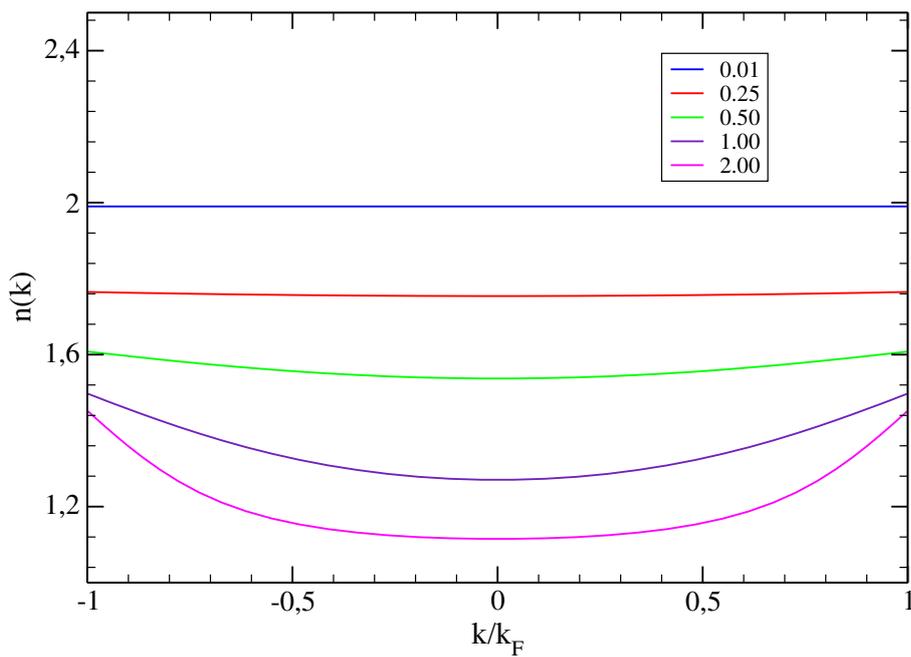


FIGURA 3.8 – Ocupação do estado de momento em relação ao momento linear da solução exata de Gaudin.

Sabemos que, para acoplamento muito forte, todos os núcleons da solução exata estão ligados em pares. Assim, vemos que o momento de Fermi da solução de Gaudin possui metade do momento de Fermi da solução de HF por descrever pares de nucleons em vez de cada nucleons individual. Conforme aumentamos a densidade, os momentos de Fermi começam a crescer em paralelo, porém, não sabemos quanto da variação do momento de

Fermi da solução de Gaudin é devido à quebra de pares e quanto é devido apenas ao seu movimento.

A Fig. 3.8 exibe os resultados da solução de Gaudin para o número de ocupação dos estados de momento linear (3.86), para vários valores de λ^{-1} . Verificamos que, quanto mais forte o acoplamento (ou menor a densidade), a distribuição de momento fica mais próxima de 2 e conforme aumentamos a densidade (ou diminuimos o acoplamento), a distribuição de momento $n(k)$ diminui. Isso ocorre devido à quebra e ao movimento dos pares.

4 Conclusão

Neste trabalho, comparamos várias aproximações auto-consistentes de um sistema unidimensional com a solução exata proposta por Gaudin (M.GAUDIN, 1967). As aproximações abordadas foram as de HF, HFB, qRPA e a soma de escadas no meio nuclear. Comparamos, além da energia por nucleon, o potencial químico, o momento de Fermi (k_F) das soluções de Gaudin e da aproximação de HF, bem como o emparelhamento de HFB e qRPA.

Verificamos que às baixas densidades (ou acoplamento forte), λ^{-1} pequeno, as soluções de qRPA e HFB são próximas à solução exata. A divergência da energia da solução de Gaudin e HFB ocorre pela diferença no tratamento de pares. Com o aumento da densidade, os pares das aproximações de HFB e qRPA começam a se desfazer enquanto os pares da solução exata começam também a se movimentar.

No limite da densidade baixa (acoplamento muito forte), as soluções de qRPA, Gaudin e HFB tendem \tilde{A} energia do par ligado, enquanto a energia de HF e laço tendem a zero, pois estas não contém pares ligados. Esperávamos que o potencial efetivo da soma de escadas e HF estivessem próximos, porém, somente a densidades elevadas (acoplamento muito fraco) o valor potencial de HF pode ser alcançado.

Tal como para energia, o potencial químico no limite do acoplamento forte (densidade baixa) tende à energia do par ligado para as soluções exatas de qRPA e HFB. Conforme aumentamos o parâmetro λ^{-1} , os pares das aproximações de HFB e qRPA começam a se quebrar e sua solução tende \tilde{A} aproximação de HF.

Analisamos o momento de Fermi k_F na solução de Gaudin e HF e verificamos que a densidades baixas (λ^{-1} pequeno), a solução de Gaudin descreve pares de nucleons, tendo assim, metade do k_F de HF. Constatamos que quando aumenta a densidade (ou diminui o acoplamento), os valores de k_F aumentam mais ou menos em paralelo. Não sabemos quanto da variação de k_F na solução de Gaudin ocorre devido ao movimento dos pares ou quanto pela sua quebra.

Na ocupação dos estados de momento linear da solução exata de Gaudin, observamos que, no limite do acoplamento forte (densidade muito baixa), que corresponde a matéria na qual todos os nucleons estão ligados em pares, a distribuição do momento tende a

2. Conforme aumentamos a densidade (ou diminuimos o acoplamento), a distribuição de momento $n(k)$ diminui devido à quebra e ao movimento dos pares.

O campo de emparelhamento entre a aproximação de HFB e qRPA possuem valores aproximados. No entanto, constatamos um problema na convergência de qRPA cuja solução ainda desconhecemos. O problema na solução de qRPA não se trata apenas de um problema numérico. Devido a isso, retiramos o desenvolvimento desta aproximação do trabalho e deixamos apenas os resultados obtidos previamente.

Através dos resultados analisados, podemos concluir que nenhuma das aproximações inclui todas as interações e correlações da solução exata. Ainda estamos longe de descrever o sistema de muitos corpos, mesmo para o caso 1-D.

Referências

BALBUENA, E. **Hartree-Fock-Bogoliubov Calculations for Nuclei far from Stability**. Doctor of Philosophy — Vanderbilt University, Nashville, Tennessee, 2003.

BARDEEN, J.; COOPER, L.; SCHRIEFFER, J. Theory of Superconductivity. **Physical Review**, v. 105, n. 5, 1957.

BOGOLIUBOV, N. The Compensation Principle and the Self-Consistent Field Method. **Soviet Physics Uspekhi**, v. 67(2), p. 549–580, 1959.

CUSTODIO, R. Uma forma simplificada de deduzir as equações de Hartree e Hartree-Fock. **Química Nova**, v. 38, n. 7, p. 995–1001, mar. 2015.

GRIFFITHS, D. J. **Introduction to Quantum Mechanics**. 1rd. ed. United States: Pearson, 1994.

KAISER, N. Resummation of Fermionic in-medium Ladder Diagrams to all Orders. **Nuclear Physics A**, v. 860, p. 41–55, 2011.

KARBACH, M.; HU, K.; MÜLLER, G. Introduction to the Bethe Ansatz II. **Computers in Physics**, v. 12, p. 565–573, nov. 1998.

KARBACH, M.; MÜLLER, G. Introduction to the Bethe Ansatz I. **Computers in Physics**, v. 11, p. 36–43, set. 1997.

MATTUCK, R. **A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem**. 2rd. ed. New York: Dover, 1976.

M.CASAS; ESEBBAG, C.; A.EXTREMERA; GETINO, J.; LLANO, M. de; A.PLASTINO; H.RUBIO. Cooper Pairing in a Soluble One-Dimensional Many-Fermion Model. **Physical Review A**, v. 44,4915, p. 55–56, out. 1991.

M.GAUDIN. Un Systeme a une Dimension de Fermions en Interaction. **Physics Letters**, v. 44, n°8, p. 4915–4922, jan. 1967.

OLIVEIRA, D. de. **A Aproximação de Hartree-Fock Aplicada a Problemas de Estrutura Nuclear**. Doctor of Philosophy — Instituto de Física da U.S.P, São Paulo, São Paulo, 1972.

PAULI, W. Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren. **Zeitschrift für Physik**, v. 31, 1925.

P.RING; P.SCHUCK. **The Nuclear Many-Body Problem**. New York: Springer-Verlag, 1980.

SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J. **Mecânica Quântica Moderna**. 2rd. ed. São Paulo: Bookman, 2013.

SLATER, J. Molecular Energy Levels and Valence Bonds. **Physical Review**, v. 38, p. 1109–1144, set. 1931.

T.ALM; P.SCHUCK. Collective modes of the one-dimensional Fermi gas within the quasiparticle random-phase approximation. **Physical Review B**, v. 54, p. 2471–2479, jul. 1996.

THOULESS, D. Stability Conditions and Nuclear Rotations in the Hartree-Fock Theory. **Nuclear Physics**, v. 21, p. 225–232, jul. 1960.

WICK, G. The Evaluation of the Collision Matrix. **Physical Review**, v. 80, n. 2, 1950.

FOLHA DE REGISTRO DO DOCUMENTO

1. CLASSIFICAÇÃO/TIPO <p style="text-align: center;">DM</p>	2. DATA <p style="text-align: center;">26 de julho de 2017</p>	3. DOCUMENTO Nº <p style="text-align: center;">DCTA/ITA/DM-056/2017</p>	4. Nº DE PÁGINAS <p style="text-align: center;">61</p>
5. TÍTULO E SUBTÍTULO: Comparação de aproximações de muitos corpos em um sistema unidimensional			
6. AUTORA(ES): Gerline Teixeira de Lima			
7. INSTITUIÇÃO(ÕES)/ÓRGÃO(S) INTERNO(S)/DIVISÃO(ÕES): Instituto Tecnológico de Aeronáutica – Divisão de Física – ITA/FIS			
8. PALAVRAS-CHAVE SUGERIDAS PELA AUTORA: Física nuclear; Ansatz de Bethe; Teoria de muitos corpos; Hartree-Fock; BCS.			
9. PALAVRAS-CHAVE RESULTANTES DE INDEXAÇÃO: Teoria de muitos corpos; Cálculo unidimensional; Interações de emparelhamento; Teoria do campo (Física); Física nuclear.			
10. APRESENTAÇÃO: (X) Nacional () Internacional ITA, São José dos Campos. Curso de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Física. Área de Física Nuclear Teórica. Orientador: Prof. Dr. Brett Vern Carlson. Defesa em 03/07/2017. Publicada em 2017.			
11. RESUMO: As correlações de dois corpos desempenham um papel importante na determinação da energia do estado fundamental e das excitações de sistemas nucleares. Grandes classes dessas correlações, dos tipos de partícula-partícula, buraco-buraco e do tipo partícula-buraco, podem ser levadas em consideração através de aproximações do tipo HF, BCS e qRPA. Para melhor compreensão da aplicabilidade dessas aproximações, comparamos elas com soluções exatas de um gás de Fermi de spin 1/2 unidimensional. A solução exata é obtida usando o ansatz de Bethe (KARBACH; MÜLLER, 1997) (KARBACH <i>et al.</i> , 1998) e foi descrita por Gaudin (M.GAUDIN, 1967). Aqui, a solução exata do estado fundamental é comparada com as aproximações BCS, qRPA, HF e com uma soma de escadas no meio nuclear. Comparamos também o potencial químico dessas aproximações, o emparelhamento das aproximações BCS e qRPA e os momentos de Fermi da solução HF e da solução exata de Gaudin.			
12. GRAU DE SIGILO: (X) OSTENSIVO () RESERVADO () CONFIDENCIAL () SECRETO			