

# Representación del operador estadístico de sistemas en no equilibrio mediante integrales funcionales

V. K. Fedyanin y C. Rodríguez Laboratorio de Física Teórica. Instituto Unificado de Investigaciones Nucleares. Dubna (URSS), Departamento de Física Teórica. Universidad de La Habana.

## RESUMEN

Se presenta un procedimiento para la obtención de representaciones exactas en términos de integrales funcionales para el operador estadístico de una amplia clase de modelos cuántico-estadísticos correspondientes a sistemas en no-equilibrio.

## ABSTRACT

A general procedure to obtain exact path - integral representations for the density - matrix of a wide class of quantum statistical models corresponding to non - equilibrium systems is presented.

## 1. INTRODUCCIÓN

En el trabajo [1] se presentó un procedimiento general que permite la obtención de representaciones exactas en términos de integrales funcionales para la suma estadística, funciones de correlación y de Green de una amplia clase de modelos cuántico-estadísticos correspondientes a sistemas en estado de equilibrio termodinámico. Tales representaciones constituyen un punto de partida adecuado, tanto para el estudio de las propiedades exactas del modelo, como para la formulación de diferentes métodos aproximados de cálculo de las magnitudes de interés: teoría de perturbaciones, aproximación cuasiclásica, método variacional, etcétera.

En el presente trabajo consideramos la evolución temporal de sistemas del mismo tipo sometidos a la acción de un campo externo que puede depender del tiempo. La clase de modelos considerados y el tipo de magnitudes a analizar

se precisan en el §2, mientras que las representaciones en términos de integrales funcionales se obtienen en el § 3.

Debe señalarse que la aplicación de los métodos de integrales funcionales a la Estadística Cuántica de sistemas en no equilibrio, ha sido hasta el momento, muy limitada. Sin embargo el éxito obtenido en su aplicación al problema del polarón [2,3,4,] permite considerar que representan una alternativa útil en situaciones donde se hace difícil describir el sistema por una ecuación cinética o la presencia de campos fuertes impide aplicar la teoría de la respuesta lineal. Por otra parte el procedimiento que se describe en el presente trabajo es más general que el utilizado en [2,3,4] siendo aplicable tanto a sistemas electrón-fonón como a sistemas espinoidales y otros modelos de la Estadística Cuántica.

# CLASE DE MODELOS A CONSIDERAR. OPERADOR ESTADÍSTICO

Consideraremos la evolución temporal para  $t > t_0$  de un sistema descrito por un hamiltoniano del tipo:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + e^{\epsilon t} \hat{V} + e^{\epsilon t} \hat{H}_I \quad (1)$$

donde  $\hat{H}_0$  es un operador de una partícula y  $\hat{V}$ ,  $\hat{H}_I$  son del tipo:

$$\hat{V} = \sum_s h_s(t) \hat{\mathcal{L}}_s + h_s^*(t) \hat{\mathcal{L}}_s^+ \quad (2)$$

$$\hat{H}_I = - \sum_{s,s'} J_{ss'} \hat{\mathcal{L}}_s \hat{\mathcal{L}}_{s'}^+ \quad (3)$$

Aquí  $\hat{\mathcal{L}}_s, \hat{\mathcal{L}}_s^+$  representa un conjunto de operadores mecánico-cuánticos linealmente independientes (el significado del índice  $s$  depende del sistema concreto bajo estudio),  $J_{ss'}$  es un elemento

matricial de interacción por pares ( $J_{ss'} = J_{s's}^*$ ) y  $h_s(t), h_s^*(t)$

representan al campo externo. El término  $e^{\epsilon t}$

se introduce para efectuar la conexión adiabática de la interacción y el campo externo. Para ello al final de los cálculos se efectúan los límites  $t_0 \rightarrow -\infty, \epsilon \rightarrow 0+$ , en ese orden. Ejemplos conocidos de sistemas donde el hamiltoniano tiene esa estructura, son los siguientes:

A) Modelo de Heisenberg en un campo magnético externo

En este caso  $\hat{\mathcal{L}}_s = \hat{S}_f^i$  es el operador de Pauli de la componente  $i$ -ésima de espín en el sitio "f" de una red cristalina y:

$V = \sum_{f,g} h_f(t) \hat{S}_f^i + h_f^*(t) \hat{S}_f^i$

$$J_{fg} = J_{fg}^i \delta_{ij}$$

donde  $h_f^i(t)$  es la componente  $i$ -ésima del campo externo en el sitio "f" de la red (multiplicada

por  $\frac{e\hbar}{mc}$ ) y  $J_{fg}^{ij}$  es la energía de

intercambio entre los espines

$$S_f^i \text{ y } S_g^j$$

B) Sistemas de bosones o fermiones con interacción por pares en un potencial externo dependiente del tiempo

En este caso:

$$\hat{H}_0 = \int d^3\vec{r} \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{1}{2} U(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}(\vec{r});$$

$$\hat{V} = \int d^3\vec{r} V(\vec{r}, t) \hat{n}(\vec{r})$$

$$\hat{H}_I = \frac{1}{2} \iint d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \hat{n}(\vec{r}_1) \hat{n}(\vec{r}_2)$$

Donde  $\hat{\Psi}^+(\vec{r}), \hat{\Psi}(\vec{r})$  son los operadores de creación y aniquilación

y  $\hat{n}(\vec{r}) = \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r})$  es el operador de densidad de partículas.

El índice  $s$  coincide aquí con  $\vec{r}$ ,  $V(\vec{r}, t)$  es el potencial externo y  $U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$  es la energía potencial de interacción por pares.

C) Sistema electrón-fonón en un campo electromagnético externo

Consideremos un electrón en la banda de conducción (isótropa y parabólica) de un cristal, interactuando con los modos fonónicos y con un campo electromagnético

externo  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  (calibración de Landau). El hamiltoniano del sistema tiene la forma [5]

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \left[ \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 + \sum_{\sigma, \vec{k}} \hbar \omega_{\sigma}(\vec{k}) \left( \hat{a}_{\sigma \vec{k}}^+ \hat{a}_{\sigma \vec{k}} + \frac{1}{2} \right) +$$

$$+ e^{\epsilon t} \sum_{\sigma, \vec{k}} Q_{\sigma}(\vec{k}) \left( \hat{a}_{\sigma \vec{k}}^+ + \hat{a}_{\sigma, \vec{k}} \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Consideremos la transformación canónica [6]

$$\hat{a}_{\sigma, \vec{k}} \rightarrow \hat{b}_{\sigma, \vec{k}} = \hat{a}_{\sigma, \vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}; \hat{a}_{\sigma, \vec{k}}^+ \rightarrow \hat{b}_{\sigma, \vec{k}}^+ = \hat{a}_{\sigma, \vec{k}}^+ e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r}; \hat{p} \rightarrow \hat{p}' = \hat{p}$$

$$-\sum_{\sigma, \vec{k}} \hbar \vec{k} \hat{b}_{\sigma, \vec{k}}^+ \hat{b}_{\sigma, \vec{k}} = \hat{p}$$

Entonces  $\hat{H}$  se escribe en la forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \frac{m^*}{2} \hat{V}^2$$

donde

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma, \vec{k}} \hbar \omega_{\sigma}(\vec{k}) \left( \hat{b}_{\sigma, \vec{k}}^+ \hat{b}_{\sigma, \vec{k}} + \frac{1}{2} \right);$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{\sigma, \vec{k}} Q_{\sigma}(\vec{k}) e^{\epsilon t} \left( \hat{b}_{\sigma, \vec{k}} + \hat{b}_{\sigma, \vec{k}}^+ \right)$$

$$m^* \hat{V} = \hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) -$$

$$-\sum_{\sigma, \vec{k}} \hbar \vec{k} \hat{b}_{\sigma, \vec{k}}^+ \hat{b}_{\sigma, \vec{k}}$$

la estructura del término  $\frac{m^*}{2} \hat{V}^2$  corresponde a la de  $\hat{H}_1$  en (3) si

consideramos  $s = 1, 2, 3$ ;  $J_{ss'} = -$

$$-\frac{m^*}{2} \delta_{ss'}, \text{ y } \hat{\mathcal{L}}_s = \hat{\mathcal{L}}_s^+ = \hat{V}_s$$

Sea ahora  $\hat{\rho}$  el operador estadístico del sistema (1) que, en el esquema de Schrödinger, satisface la ecuación de Liouville:

$$i\hbar \frac{\delta \hat{\rho}}{\delta t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

con las condiciones inicial y de normalización,

$$\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_0 \quad \text{Sp} \hat{\rho} = 1$$

donde  $\hat{\rho}_0$  es el operador estadístico en ausencia de campo externo e interacción.

### 3. REPRESENTACIÓN DEL OPERADOR ESTADÍSTICO MEDIANTE UNA INTEGRAL FUNCIONAL

Consideremos ahora la representación de  $\hat{\rho}_I(t)$  y  $M(t)$  mediante

Consideremos al operador  $\hat{\rho}$  en el esquema de interacción definido de la forma:

$$\hat{\rho}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \hat{\rho} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \quad (4)$$

Está claro que  $\hat{\rho}_I(t_0) = \hat{\rho}_0$  y que  $\hat{\rho}_I(t)$  satisface la ecuación:

$$i\hbar \frac{\delta \hat{\rho}_I(t)}{\delta t} = e^{\epsilon t} \left[ \hat{V}_I(\hbar, t) + \hat{H}_I(t), \hat{\rho}_I(t) \right]$$

donde  $\hat{V}_I(\hbar, t)$  y  $\hat{H}_I(t)$  son los operadores  $\hat{V}$  y  $\hat{H}_I$  en la representación de interacción. La ecuación anterior tiene como solución:

$$\hat{\rho}_I(t) = U(t, t_0) \hat{\rho}_0 \hat{U}^+(t, t_0) \quad (5)$$

donde el operador de evolución  $\hat{U}(t, t_0)$  viene dado por:

$$U(t, t_0) = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon \tau} [\hat{V}_I(\hbar, \tau) + \hat{H}_I(\tau)]} \quad (6)$$

y el símbolo  $T$  designa el ordenamiento cronológico de los operadores:

$$T\{\hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2)\} = \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) \end{cases} \begin{matrix} t_1 > t_2 \\ t_2 > t_1 \end{matrix}$$

Sea  $\hat{M}$  el operador correspondiente a una variable dinámica del sistema. El valor medio  $M(t)$  de la correspondiente magnitud es

$$A(t) = \text{Sp} \hat{M}_I(t) \hat{\rho}_I(t) \quad (7)$$

$$\Phi_0[x] = \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} \sum_{s,s'} (J^{-1})_{s',s} \dot{X}_s(\tau) \dot{X}_{s'}^*(\tau) \quad (8)$$

o en notación matricial:

$$\Phi_0[x] = \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} \dot{X}^+(\tau) J^{-1} \dot{X}(\tau)$$

donde  $x = \{x_s(t)\}$  y  $J = \{J_{ss'}\}$ . Definamos el promedio con peso  $\Phi_0$  de un funcional  $M[x]$  en la forma:

$$\langle M[x] \rangle_{\Phi_0} = \frac{\int Dx M[x] \exp[-\Phi_0[x]]}{\int Dx \exp[-\Phi_0[x]]} \quad (9)$$

donde

$$D_x = \prod_s \mathcal{D}X_s \mathcal{D}X_s^* \quad (10)$$

y se integra por todas las trayectorias definidas en  $[t_0, t]$  con condiciones de fronteras arbitrarias.

Consideremos en particular el promedio:

$$Q[F] = \left\langle \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} \sum_s \left[ F_s^*(\tau) \dot{X}_s(\tau) + F_s(\tau) \dot{X}_s^*(\tau) \right] \right\} \right\rangle_{\Phi_0} \quad (11)$$

No es difícil demostrar que:

$$Q[F] = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} \sum_{s,s'} J_{ss'} F_s^*(\tau) F_{s'}(\tau) \right\} \quad (12)$$

Para ello definamos la matriz  $R$  de forma que:

$$R^+ J^{-1} R = I$$

Y sea  $\dot{x} = R\dot{y}$ . La forma cuadrática  $\dot{X}^+ J^{-1} \dot{X} + F^+ \dot{X} + \dot{X}^+ F$  que aparece al

$$T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} \hat{H}_I(\tau)} = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} \sum_{s,s'} J_{ss'} \hat{\mathcal{L}}_s(\tau) \hat{\mathcal{L}}_s^+(\tau)}$$

sustituir (11) en (9) toma la forma:

$$\begin{aligned} \dot{X}^+ J^{-1} \dot{X} + F^+ \dot{X} + \dot{X}^+ F &= \dot{y}^+ \dot{y} + F^+ R \dot{y} + \\ + \dot{y}^+ R^+ F &= (\dot{y}^+ R^+ F)^+ (\dot{y}^+ R^+ F) - F^+ (R R^+) F \end{aligned}$$

Ahora teniendo en cuenta que  $R R^+ = J$  y definiendo

$$\dot{Z} = R (\dot{y} + R^+ F)$$

obtenemos:

$$\begin{aligned} \dot{X}^+ J^{-1} \dot{X} + F^+ \dot{X} + \dot{X}^+ F &= \dot{Z}^+ J^{-1} \dot{Z} - \\ &- F^+ J F \quad (13) \end{aligned}$$

Además:

$$\begin{aligned} DZ &= \prod_s \mathcal{D}Z_s \mathcal{D}Z_s^* = \\ &= \prod_s (\det R) (\det R^+) \mathcal{D}y_s \mathcal{D}y_s^* = \\ &= \prod_s \mathcal{D}X_s \mathcal{D}X_s^* \equiv DX \quad (14) \end{aligned}$$

De modo que sustituyendo (11), (13) y (14) en (9) obtenemos:

$$Q[F] = \exp \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} F^+(\tau) J F(\tau) \frac{\int DZ e^{-\Phi_0[Z]}}{\int DZ e^{-\Phi_0[Z]}}$$

que, evidentemente, conduce a (12).

Apliquemos ahora el resultado obtenido a la expresión:

Con ayuda de (11) y (12)

(aquí  $F_s^*(\tau) \rightarrow \hat{\mathcal{L}}_s(\tau)$  y

$F_s(\tau) \rightarrow \hat{\mathcal{L}}_s^+(\tau)$ )

obtenemos:

$$T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} \hat{H}_I(\tau) =$$

$$= \langle T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} \hat{V}_I[\dot{x}, \tau] \rangle_{\phi_0}$$

$$Z_0[x, y] = S_p \left\{ T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} \hat{V}_I(h+\dot{x}, \tau) \hat{\rho}_0 \left[ T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} V_I(h+\dot{y}, \tau) \right]^+ \right\} \quad (17)$$

y para  $\hat{U}(t, t_0)$  (6) se obtiene

$$\hat{U}(t, t_0) =$$

$$= \langle T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} V_I(h+\dot{x}, \tau) \rangle_{\phi_0} \quad (14)$$

El sentido físico de esta expresión es claro, pues la magnitud, bajo el signo de promedio en (14) representa al operador de evolución para el sistema sin interacción en un campo externo  $h+\dot{x}$ . Resulta que el operador de evolución del sistema con interacción es igual al promedio (con peso  $\phi_0$  determinado por la interacción) del operador de evolución del sistema sin interacción en un campo externo aleatorio, por todas las configuraciones posibles del campo aleatorio.

Ahora de (14) y (15) sigue que:

$$\hat{\rho}_I(t) = \langle\langle T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} \hat{V}_I(h+\dot{x}, \tau) \hat{\rho}_0 \left[ T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{\epsilon\tau} \hat{V}_I(h+\dot{y}, \tau) \right]^+ \rangle\rangle_{\phi_0} \quad (15)$$

Donde hemos introducido la notación:

$$\langle\langle \dots \rangle\rangle_{\phi_0} =$$

$$= \frac{\int Dx \int Dy \exp\{-\phi_0[x] - \phi_0^*[y]\} \dots}{\int Dx \int Dy \exp\{-\phi_0[x] - \phi_0^*[y]\}}$$

(16)

Consideremos finalmente los promedios de variables dinámicas  $\hat{M}$  que se construyen como combinaciones (sumas y productos) de los operadores  $\hat{\mathcal{L}}_s, \hat{\mathcal{L}}_s^+$ . Definamos el funcional:

Está claro que  $Z_0[x, x] = 1$  y

$$\langle\langle Z_0(x, y) \rangle\rangle_{\phi_0} = 1. \text{ Además}$$

$$\hat{\mathcal{L}}_s(t) = i\hbar e^{-\epsilon t} \langle\langle \frac{\delta Z_0[x, y]}{\delta \dot{x}_s(t)} \rangle\rangle_{\phi_0} =$$

$$= -i\hbar e^{-\epsilon t} \langle\langle \frac{\delta Z_0[x, y]}{\delta \dot{y}_s(t)} \rangle\rangle_{\phi_0} \quad (18)$$

$$\hat{\mathcal{L}}_s^+(t) = i\hbar e^{-\epsilon t} \langle\langle \frac{\delta Z_0[x, y]}{\delta \dot{x}_s^*(t)} \rangle\rangle_{\phi_0} =$$

$$= -i\hbar e^{-\epsilon t} \langle\langle \frac{\delta Z_0[x, y]}{\delta \dot{y}_s^*(t)} \rangle\rangle_{\phi_0} \quad (19)$$

Mediante sucesivas derivadas funcionales podemos obtener las expresiones para los promedios

de magnitudes del tipo

$\hat{\mathcal{L}}_s \hat{\mathcal{L}}_s^+$ , etcétera. Sustituyendo (18) y (19) en (16) e integrando por partes se obtiene:

$$\hat{\mathcal{L}}_s(t) = - \int_{s'} J^{-1} \langle\langle \dot{x}_{s'}^*(t) Z_0[x, y] \rangle\rangle_{\phi_0}$$

(20)

$$L_s^+(t) = -\int_{s'} J_{ss'} \langle \langle X_s(t) Z_0[x,y] \rangle \rangle$$

$Z_0[x,y]$  y el cálculo exacto o aproximado de las integrales funcionales del tipo de (20) y (21) son problemas a resolver para cada sistema en concreto.

La forma explícita del funcional

**BIBLIOGRAFÍA**

1. B.V. Mochinsky; C. Rodríguez; V.K. Fedyanin  
Teoreticheskaja y Matematicheskaja Fizika (1980) v. 45, No. 2, p. 251-260.
2. R.P. Feynman; R.W. Hellwarth; C.K. Iddings; P.M. Platzman.  
Phys. Rev. (1962), v. 127, No. 4, p. 1004-1017.
3. K.K. Thornber; R.P. Feynman.  
Phys. Rev. B 1970 v.1. No. 10, p. 4089-4114.
4. V.M. Fomin.  
Teoreticheskaja y Matematicheskaja Fizika (1981) v. 49, No. 1, p. 102-116.
5. H. Frohlich.  
Advances in Physics (1954) v.3, No. 11, p.325-361.
6. N.N. Bogolubov.  
Ukrainskii matematicheskii Zhurnal. (1950), V. II, No. 2, p. 3-24.

Recibido: 22/4/83