

Tema 5

Excitacions II

La teoria RPA



Sumari

- ❑ La teoria RPA (random-phase approximation)
 - ❑ Equacions del moviment de l'oscil.lador harmònic
 - ❑ Teories d'excitacions de sistemes de Fermions
 - ❑ La teoria RPA
 - ❑ Propietats de les solucions
- ❑ El model esquemàtic RPA
 - ❑ Resolució gràfica
 - ❑ Cas de degeneració total

□ Teoria RPA

Random-phase approximation (nom històric!)

Millora de la teoria TD

Regles de suma

Estat fonamental més sofisticat

□ 'Equacions del moviment' per l'oscil·lador harmònic

Operadors de creació-aniquilació de fonons: O_λ^+ , O_λ

$$H = \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} O_{\lambda}^+ O_{\lambda}$$

Commutador bosònic $[O_k, O_{\lambda}^+] = \delta_{k\lambda}$, $[O_k, O_{\lambda}] = 0$, $[O_k^+, O_{\lambda}^+] = 0$

Equació d'operadors $[H, O_{\lambda}^+] = \hbar \omega_{\lambda} O_{\lambda}^+$ **Determina tot l'espectre!**

Buit de fonons $|0\rangle$ $H|0\rangle = E_0|0\rangle$

Fonó λ $O_{\lambda}^+|0\rangle$ $HO_{\lambda}^+|0\rangle = (O_{\lambda}^+H + \hbar\omega_{\lambda}O_{\lambda}^+)|0\rangle = (E_0 + \hbar\omega_{\lambda})O_{\lambda}^+|0\rangle$

Condicó d'estat buit de fonons $O_{\lambda}|0\rangle = 0$, $\forall \lambda$



$$[H, O_\lambda^+] = \hbar\omega_\lambda O_\lambda^+ \Rightarrow [\delta O_\lambda, [H, O_\lambda^+]] = \hbar\omega_\lambda [\delta O_\lambda, O_\lambda^+]$$

↓
variació

Definim el doble commutador simmetritzat

$$[\delta O_\lambda, H, O_\lambda^+] \equiv \frac{1}{2} \{ [\delta O_\lambda, H], O_\lambda^+ \} + [\delta O_\lambda, [H, O_\lambda^+]] \}$$

I amb el resultat següent (exercici)

$$[\delta O_\lambda, H], O_\lambda^+ = [\delta O_\lambda, [H, O_\lambda^+]] + [[\delta O_\lambda, O_\lambda^+], H]$$

$$\langle 0 | [\delta O_\lambda, H], O_\lambda^+ | 0 \rangle = \langle 0 | [\delta O_\lambda, [H, O_\lambda^+]] | 0 \rangle + \underbrace{\langle 0 | [[\delta O_\lambda, O_\lambda^+], H] | 0 \rangle}_{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle 0 | [\delta O_\lambda, O_\lambda^+] | 0 \rangle = 0}$$

Arribam a

$$[\delta O_\lambda, [H, O_\lambda^+]] = \hbar\omega_\lambda [\delta O_\lambda, O_\lambda^+] \Rightarrow \langle 0 | [\delta O_\lambda, H, O_\lambda^+] | 0 \rangle = \hbar\omega_\lambda \langle 0 | [\delta O_\lambda, O_\lambda^+] | 0 \rangle$$

Equacions del moviment

□ Teories d'excitacions per a sistemes de fermions

Excitacions bosòniques

Basades en les equacions del moviment de l'oscil.lador harmònic

$$\langle \phi | [\delta O_\lambda, H, O_\lambda^+] | \phi \rangle = \hbar \omega_\lambda \langle \phi | [\delta O_\lambda, O_\lambda^+] | \phi \rangle$$

Aproximació per a l'estat fonamental dels fermions, buit de les excitacions tipus bosó

Creació de l'excitació tipus bosó λ

variació

Aquest esquema reproduïx TD quan

$$\left. \begin{aligned} |\phi\rangle &= |v\rangle \text{ de HF} \\ O_\lambda^+ &= \sum_{nj} Y_{nj}(\lambda) a_n^+ a_j \\ \delta O_\lambda &= \{a_i^+ a_m, \forall mi\} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \sum_{nj} \langle v | [a_i^+ a_m, H, a_n^+ a_j] | v \rangle Y_{nj}(\lambda) &= \hbar \omega_\lambda \sum_{nj} \langle v | [a_i^+ a_m, a_n^+ a_j] | v \rangle Y_{nj}(\lambda) \\ \Downarrow \\ \sum_{nj} (\delta_{mn} \delta_{ij} \varepsilon_{mi} + \hat{v}_{mj in}) Y_{nj}(\omega) &= \hbar \omega Y_{mi}(\omega) \end{aligned}$$

□ La RPA

Eq. moviment $\langle \phi | [\delta O_\lambda, H, O_\lambda^+] | \phi \rangle = \hbar \omega_\lambda \langle \phi | [\delta O_\lambda, O_\lambda^+] | \phi \rangle$

$$\left\{ \begin{array}{l} |\phi\rangle = |v\rangle \\ O_\lambda^+ = \sum_{nj} Y_{nj}(\lambda) a_n^+ a_j - \underbrace{Z_{nj}(\lambda) a_j^+ a_n}_{\text{Aniquila per damunt de F i crea per davall. Correlacions}} \\ \delta O_\lambda = \{a_i^+ a_m \ \forall mi, \quad a_m^+ a_i \ \forall mi\} \end{array} \right.$$

$$\sum_{nj} \langle v | [a_i^+ a_m, H, a_n^+ a_j] | v \rangle Y_{nj} - \langle v | [a_i^+ a_m, H, a_j^+ a_n] | v \rangle Z_{nj} = \hbar \omega_\lambda \sum_{nj} \langle v | [a_i^+ a_m, a_n^+ a_j] | v \rangle Y_{nj} - \langle v | [a_i^+ a_m, a_j^+ a_n] | v \rangle Z_{nj}$$

$$\sum_{nj} \langle v | [a_m^+ a_i, H, a_n^+ a_j] | v \rangle Y_{nj} - \langle v | [a_m^+ a_i, H, a_j^+ a_n] | v \rangle Z_{nj} = \hbar \omega_\lambda \sum_{nj} \langle v | [a_m^+ a_i, a_n^+ a_j] | v \rangle Y_{nj} - \langle v | [a_m^+ a_i, a_j^+ a_n] | v \rangle Z_{nj}$$



$$\begin{aligned}
A_{mi,nj} &= \langle v | [a_i^+ a_m, H, a_n^+ a_j] | v \rangle &= \delta_{mn} \delta_{ij} \varepsilon_{mi} + \hat{v}_{mj in} \\
B_{mi,nj} &= -\langle v | [a_i^+ a_m, H, a_j^+ a_n] | v \rangle &= \hat{v}_{mn ij}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{mi,nj} &= A_{nj,mi}^* && \text{Hermítica} \\ B_{mi,nj} &= B_{nj,mi} && \text{simètrica} \end{aligned}$$



El problema RPA de valors propis

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{m_1 i_1, m_1 i_1} & \cdots \\ \cdots & \cdots \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} B_{m_1 i_1, m_1 i_1} & \cdots \\ \cdots & \cdots \end{pmatrix} \\ -\begin{pmatrix} B_{m_1 i_1, m_1 i_1}^* & \cdots \\ \cdots & \cdots \end{pmatrix} & -\begin{pmatrix} A_{m_1 i_1, m_1 i_1}^* & \cdots \\ \cdots & \cdots \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_1(\lambda) \\ \vdots \\ Z_1(\lambda) \\ \vdots \end{pmatrix} = \hbar \omega_\lambda \begin{pmatrix} Y_1(\lambda) \\ \vdots \\ Z_1(\lambda) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y(\lambda) \\ Z(\lambda) \end{pmatrix} = \hbar \omega_\lambda \begin{pmatrix} Y(\lambda) \\ Z(\lambda) \end{pmatrix}$$

Matriu no Hermítica

No està assegurat que els valors propis siguin sempre reals

Inestabilitat

Si feim $B=0$ recuperam Tamm-Dancoff



□ Propietats de les solucions de l'equació RPA

(i) Les solucions venen a parelles

$$\begin{pmatrix} Y \\ Z \end{pmatrix}, \hbar\omega \Leftrightarrow \begin{pmatrix} Z^* \\ Y^* \end{pmatrix}, -\hbar\omega$$

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y \\ Z \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} Y \\ Z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z^* \\ Y^* \end{pmatrix} = -\hbar\omega \begin{pmatrix} Z^* \\ Y^* \end{pmatrix}$$

Propietat de simetria 'matemàtica'

Només tenen sentit físic les solucions amb $\hbar\omega \geq 0$

(ii) Ortogonalitat i normalització

$$\begin{pmatrix} Y(\lambda) \\ Z(\lambda) \end{pmatrix}, \hbar\omega_\lambda \quad \begin{pmatrix} Y(k) \\ Z(k) \end{pmatrix}, \hbar\omega_k$$

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y(\lambda) \\ Z(\lambda) \end{pmatrix} = \hbar\omega_\lambda \begin{pmatrix} Y(\lambda) \\ -Z(\lambda) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} Y^*(k) & Z^*(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} = \hbar\omega_k \begin{pmatrix} Y^*(k) & -Z^*(k) \end{pmatrix}$$

vector fila



$$0 = [\hbar\omega_k - \hbar\omega_\lambda] \begin{pmatrix} Y^*(k) & -Z^*(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y(\lambda) \\ Z(\lambda) \end{pmatrix}$$

$$\sum_{mi} [Y_{mi}^*(k)Y_{mi}(\lambda) - Z_{mi}^*(k)Z_{mi}(\lambda)] = \delta_{k\lambda}$$

(iii) Comportament quasi-bosó de les excitacions

$$O_{\lambda}^{+} = \sum_{nj} Y_{nj}(\lambda) a_n^{+} a_j - Z_{nj}(\lambda) a_j^{+} a_n \quad O_k^{+} = \sum_{nj} Y_{nj}(k) a_n^{+} a_j - Z_{nj}(k) a_j^{+} a_n$$

$$\langle v|[O_k, O_{\lambda}^{+}]|v\rangle = \begin{pmatrix} Y^{*}(k) & -Z^{*}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y(\lambda) \\ Z(\lambda) \end{pmatrix} = \delta_{k\lambda}$$

$$\langle v|[O_k^{+}, O_{\lambda}^{+}]|v\rangle = \begin{pmatrix} -Y^{*}(-k) & Z^{*}(-k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y(\lambda) \\ Z(\lambda) \end{pmatrix} = 0$$

$$\langle v|[O_k, O_{\lambda}]|v\rangle = 0$$

L'estat fonamental RPA $|v_{\text{RPA}}\rangle$

Excitacions $|\lambda\rangle = O_{\lambda}^{+}|v_{\text{RPA}}\rangle$

Condió de buit $O_{\lambda}|v_{\text{RPA}}\rangle = 0 \quad \forall \lambda$

Ortonormalització

$$\langle k|\lambda\rangle = \langle v_{\text{RPA}}|O_k O_{\lambda}^{+}|v_{\text{RPA}}\rangle = \langle v_{\text{RPA}}|[O_k, O_{\lambda}^{+}]|v_{\text{RPA}}\rangle \approx \langle v|[O_k, O_{\lambda}^{+}]|v\rangle = \delta_{k\lambda}$$

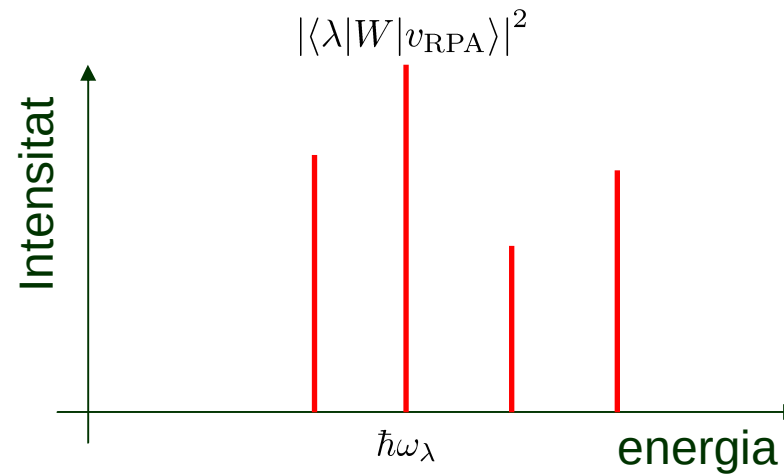
(iii) Elements de matriu de transició

Operador a 1 cos
$$W = \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}$$

$$\langle \lambda | W | v_{\text{RPA}} \rangle = \langle v_{\text{RPA}} | O_{\lambda} W | v_{\text{RPA}} \rangle = \langle v_{\text{RPA}} | [O_{\lambda}, W] | v_{\text{RPA}} \rangle$$

$$\approx \langle v | [O_{\lambda}, W] | v \rangle = \sum_{mi} (Y_{mi}^* w_{mi} + Z_{mi}^* w_{im})$$

Espectres (absorció)



□ Model esquemàtic RPA

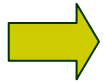
Interacció separable

1a quant. $V = -\chi \sum_{i,j=1}^N Q(i)Q(j)$

Eq. RPA
$$\begin{aligned} AY + BZ &= \hbar\omega Y \\ -B^*Y - A^*Z &= \hbar\omega Z \end{aligned} \quad \text{amb} \quad \begin{aligned} A_{mi,nj} &= \delta_{mn}\delta_{ij}\varepsilon_{mi} + \hat{v}_{mjn} \\ B_{mi,nj} &= \hat{v}_{mni} \end{aligned}$$

Aproximam

$$\begin{aligned} \hat{v}_{mjn} &\approx v_{mjn} = -\chi Q_{mi} Q_{nj}^* \\ \hat{v}_{mni} &\approx v_{mni} = -\chi Q_{mi} Q_{nj} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} (\varepsilon_{mi} - \hbar\omega)Y_{mi} - \chi Q_{mi} \sum_{nj} (Q_{nj}^* Y_{nj} + Q_{nj} Z_{nj}) &= 0 \\ (\varepsilon_{mi} + \hbar\omega)Z_{mi} - \chi Q_{mi}^* \sum_{nj} (Q_{nj}^* Y_{nj} + Q_{nj} Z_{nj}) &= 0 \end{aligned}$$

Definim $\mathcal{N} = \chi \sum_{nj} (Q_{nj}^* Y_{nj} + Q_{nj} Z_{nj})$

$$\begin{cases} (\varepsilon_{mi} - \hbar\omega)Y_{mi} - \chi Q_{mi} \sum_{nj} (Q_{nj}^* Y_{nj} + Q_{nj} Z_{nj}) = 0 \\ (\varepsilon_{mi} + \hbar\omega)Z_{mi} - \chi Q_{mi}^* \sum_{nj} (Q_{nj}^* Y_{nj} + Q_{nj} Z_{nj}) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} Y_{mi} = \frac{\mathcal{N} Q_{mi}}{\varepsilon_{mi} - \hbar\omega} \\ Z_{mi} = \frac{\mathcal{N} Q_{mi}^*}{\varepsilon_{mi} + \hbar\omega} \end{cases}$$

Per normalització $\sum_{mi} (|Y_{mi}|^2 - |Z_{mi}|^2) = 1$

L'equació transcendent $\mathcal{N} = \chi \sum_{nj} \left(\frac{Q_{nj}^* \mathcal{N} Q_{nj}}{\varepsilon_{nj} - \hbar\omega} + \frac{Q_{nj}^* \mathcal{N} Q_{nj}}{\varepsilon_{nj} + \hbar\omega} \right)$

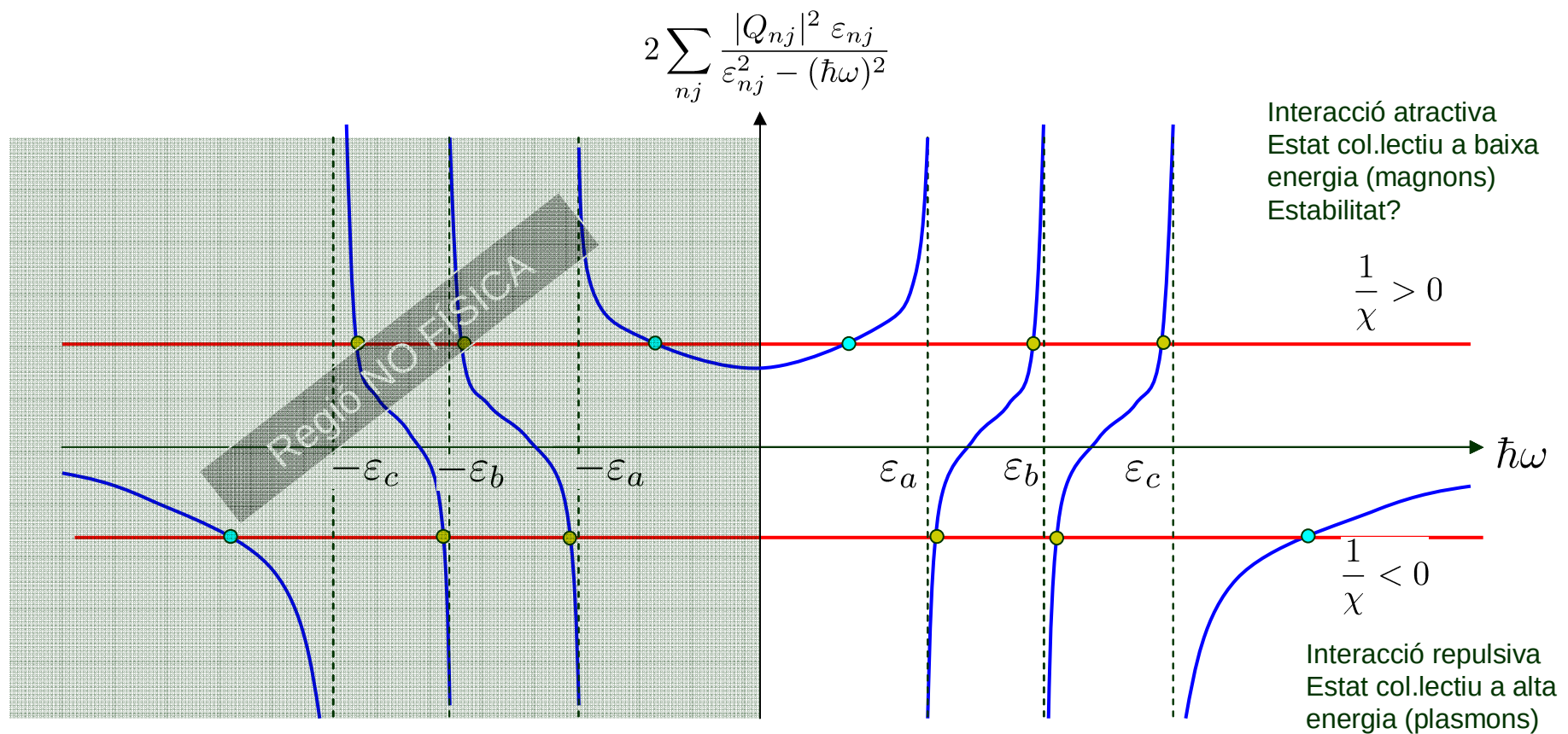
$$2 \sum_{nj} \frac{|Q_{nj}|^2 \varepsilon_{nj}}{\varepsilon_{nj}^2 - (\hbar\omega)^2} = \frac{1}{\chi}$$

Equació que fixa
l'energia d'excitació
 $\hbar\omega$

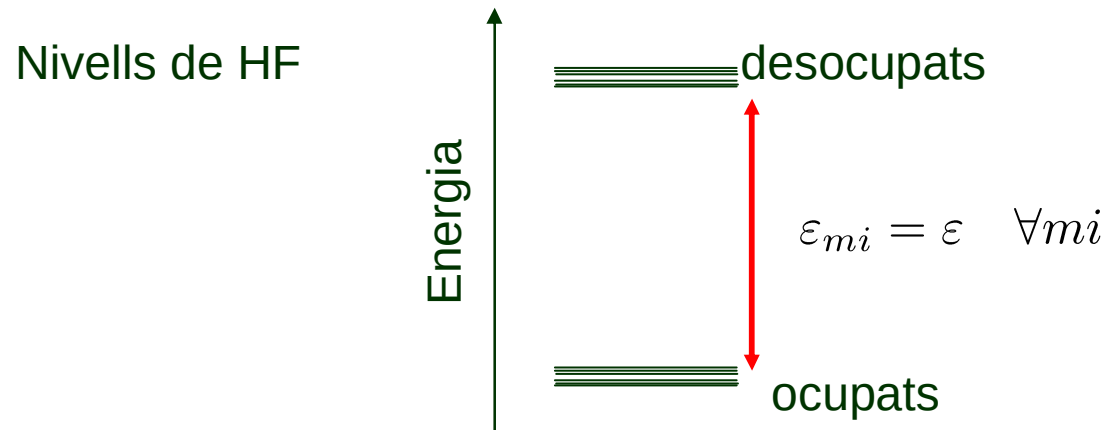
La resolució gràfica

Suposem per simplificar que hi ha només 3 parelles pf $\{\varepsilon_{nj}\} = \{\varepsilon_a, \varepsilon_b, \varepsilon_c\}$

$$2 \sum_{nj} \frac{|Q_{nj}|^2 \varepsilon_{nj}}{\varepsilon_{nj}^2 - (\hbar\omega)^2} = \frac{1}{\chi}$$



El cas de degeneració total



$$2 \sum_{nj} \frac{|Q_{nj}|^2 \varepsilon_{nj}}{\varepsilon_{nj}^2 - (\hbar\omega)^2} = \frac{1}{\chi} \quad \longrightarrow \quad (\hbar\omega)^2 = \varepsilon^2 - 2 \chi \varepsilon \sum_{nj} |Q_{nj}|^2$$

{
 Int. atractiva
 $\chi > 0 \Rightarrow \hbar\omega < \varepsilon$
 Int. repulsiva
 $\chi < 0 \Rightarrow \hbar\omega < \varepsilon$

$$\left[\text{Tamm-Dancoff} \right] \quad \longrightarrow \quad (\hbar\omega)^2 = \varepsilon^2 - 2 \chi \varepsilon \sum_{nj} |Q_{nj}|^2 + \chi^2 \left(\sum_{nj} |Q_{nj}|^2 \right)^2$$

Veim que en el model esquemàtic es $\hbar\omega_{\text{RPA}} < \hbar\omega_{\text{TD}}$