



Tema 5

Excitaciones I

La teoria de Tamm-Dancoff



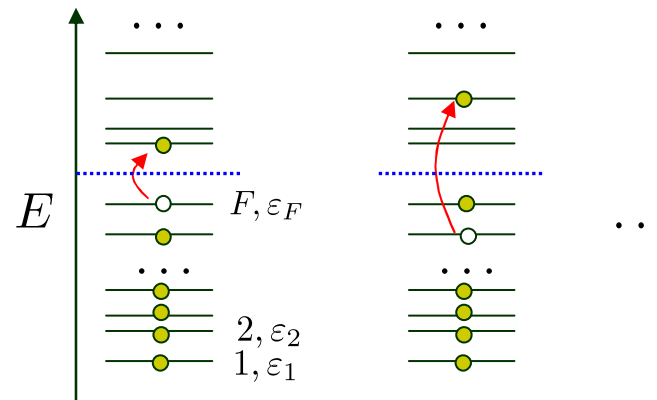
Sumari

- ❑ Teoria de Tamm-Dancoff
 - ❑ Elements de matriu
 - ❑ Equació de valors propis
 - ❑ EL model esquemàtic

□ Teoria de Tamm-Dancoff

Excitacions a sistemes finits

Les més simples: transicions partícula-forat a l'esquema de Hartree-Fock



Hamiltonià $H = T + V_{\text{ext}} + V = H_0 + V$

Amb la imatge de HF queda sense tenir en compte la 'interacció residual'

Bàsicament és la part a dos cossos

$$H = \underbrace{\mathcal{C}}_{\text{constant}} + \underbrace{\sum_{\nu=1}^F \varepsilon_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}}_{\text{a 1 cos}} + \underbrace{V_{\text{res}}}_{\text{a 2 cossos}}$$

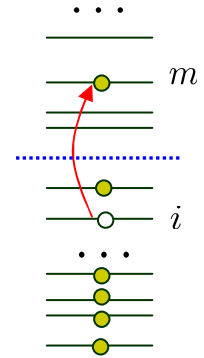


Excitacions col.lectives del sistema combinant excitacions partícula-forat (pf)
La interacció residual acobla les excitacions pf

Exc. partícula-forat $|m(i)^{-1}\rangle = a_m^+ a_i |v\rangle \quad (m > F, i \leq F)$

Índex de parella pf $\{mi \equiv 1, 2, \dots\}$

per a $mi = 1 \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{forat a } i_1 \\ \text{partícula a } m_1 \end{array} \right.$



Exc. col.lectiva

$$|\omega\rangle = \sum_{mi} Y_{mi}(\omega) |m(i)^{-1}\rangle$$

estat excitat

suma sobre parelles pf

amplades

Determinarem les amplades $\{Y_{mi}(\omega)\}$ diagonalitzant H a l'espai de transicions pf

□ Elements de matriu (exercici)

amb
$$H_0 = \sum_{\mu\nu} h_{\mu\nu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu}$$

$$\langle m(i)^{-1} | H_0 | n(j)^{-1} \rangle = \langle v | a_i^{\dagger} a_m H_0 a_n^{\dagger} a_j | v \rangle = -\delta_{mn} h_{ji} + \delta_{ij} h_{mn} + \delta_{ij} \delta_{mn} \sum_{k=1}^F h_{kk}$$

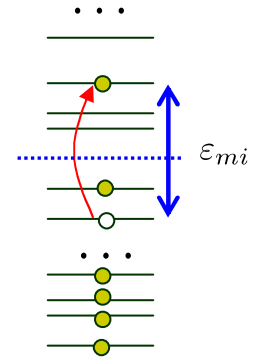
amb
$$V = \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} v_{\mu\nu\mu'\nu'} a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} a_{\mu'}$$

$$\begin{aligned} \langle m(i)^{-1} | V | n(j)^{-1} \rangle &= \langle v | a_i^{\dagger} a_m V a_n^{\dagger} a_j | v \rangle \\ &= v_{mj in} - v_{mj ni} + \delta_{ij} \sum_{k=1}^F (v_{mknk} - v_{mkkn}) \\ &\quad - \delta_{mn} \sum_{k=1}^F (v_{jkik} - v_{jkki}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \delta_{ij} \delta_{mn} \sum_{k,l=1}^F (v_{klkl} - v_{kl lk}) \end{aligned}$$

agrupant

$$\langle m(i)^{-1} | H | n(j)^{-1} \rangle = \delta_{mn} \delta_{ij} (E_v + \varepsilon_{mi}) + \underbrace{v_{mjn} - v_{mjni}}_{\hat{v}_{mjn}}$$

$\downarrow$
 $\varepsilon_m - \varepsilon_i$



On recordem que

$$\begin{aligned} \varepsilon_k &= h_{kk} + \sum_{t=1}^F (v_{ktkt} - v_{kttk}) \\ E_v &= \sum_{k=1}^F h_{kk} + \frac{1}{2} \sum_{k,t=1}^F (v_{ktkt} - v_{kttk}) \\ &= \sum_{k=1}^F \varepsilon_k - \frac{1}{2} \sum_{k,t=1}^F (v_{ktkt} - v_{kttk}) \end{aligned}$$

□ Equació de valors propis de Tamm-Dancoff

$$H|\omega\rangle = E_\omega|\omega\rangle$$

$$|\omega\rangle = \sum_{nj} Y_{nj}(\omega) |n(j)^{-1}\rangle \quad \longrightarrow \quad \sum_{nj} \langle m(i)^{-1} | H | n(j)^{-1} \rangle Y_{nj}(\omega) = E_\omega Y_{mi}(\omega)$$

$$\langle m(i)^{-1} | H | n(j)^{-1} \rangle = \delta_{mn} \delta_{ij} (E_v + \varepsilon_{mi}) + \hat{v}_{mj in}$$

$$\sum_{nj} (\delta_{mn} \delta_{ij} \varepsilon_{mi} + \hat{v}_{mj in}) Y_{nj}(\omega) = \underbrace{\hbar\omega}_{E_\omega - E_v} Y_{mi}(\omega)$$

$E_\omega - E_v$, energia d'excitació de $|\omega\rangle$

Equació matricial infinita

$$\sum_{nj} A_{mi,nj} Y_{nj}(\omega) = \hbar\omega Y_{mi}(\omega)$$

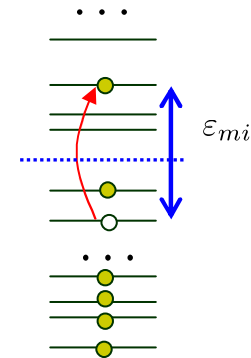
$$A_{mi,nj} = \delta_{mn} \delta_{ij} \varepsilon_{mi} + \hat{v}_{mj in}$$



$$A_{mi,nj} = \delta_{mn}\delta_{ij}\varepsilon_{mi} + \hat{v}_{mj}in$$

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{m_1 i_1} + \hat{v}_{m_1 i_1 i_1 m_1} & \hat{v}_{m_1 i_2 i_1 m_2} & \dots \\ \hat{v}_{m_2 i_1 i_2 m_1} & \varepsilon_{m_2 i_2} + \hat{v}_{m_2 i_2 i_2 m_2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \dots \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \dots \end{pmatrix}$$

A la pràctica, truncament per a $\varepsilon_{mi} \leq \Delta$



□ El model esquemàtic de Tamm-Dancoff

Interacció a dos cossos separable

En 1a quantització

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

intensitat

factoritza en el producte de dos termes a 1 cos

Exemple: interacció dipol-dipol a una esfera de radi R

$$V = e^2 \sum_{i,j=1}^N \frac{z_i z_j}{R^3}$$

Elements de matriu

Menyspreant intercanvi

$$\hat{v}_{mj in} \approx v_{mj in} = -\chi Q_{mi} Q_{nj}^*$$

on $Q_{mi} = \langle m | Q | i \rangle = \sum_{\eta} \int d^3 r \varphi_m^*(\vec{r}, \eta) Q(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}, \eta)$

Equació de valors propis de TD

$$(\varepsilon_{mi} - \hbar\omega) Y_{mi} = - \sum_{nj} \hat{v}_{mj in} Y_{nj}$$



$$(\varepsilon_{mi} - \hbar\omega) Y_{mi} = \chi Q_{mi} \sum_{nj} Q_{nj}^* Y_{nj}$$



$$(\varepsilon_{mi} - \hbar\omega) Y_{mi} = \chi Q_{mi} \sum_{nj} Q_{nj}^* Y_{nj}$$

Definim la constant $\mathcal{N} = \chi \sum_{nj} Q_{nj}^* Y_{nj}$

I de l'equació de valors propis ara és $Y_{mi} = \frac{\mathcal{N} Q_{mi}}{\varepsilon_{mi} - \hbar\omega}$

Recordem que amb $|\omega\rangle = \sum_{mi} Y_{mi} |m(i)^{-1}\rangle$ la condició de normalització és

$$1 = \langle\omega|\omega\rangle = \sum_{mi} |Y_{mi}|^2$$

L'equació secular

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{N} &= \chi \sum_{nj} Q_{nj}^* Y_{nj} \\ Y_{nj} &= \frac{\mathcal{N} Q_{nj}}{\varepsilon_{nj} - \hbar\omega} \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\mathcal{N} = \chi \mathcal{N} \sum_{nj} \frac{|Q_{nj}|^2}{\varepsilon_{nj} - \hbar\omega}$$

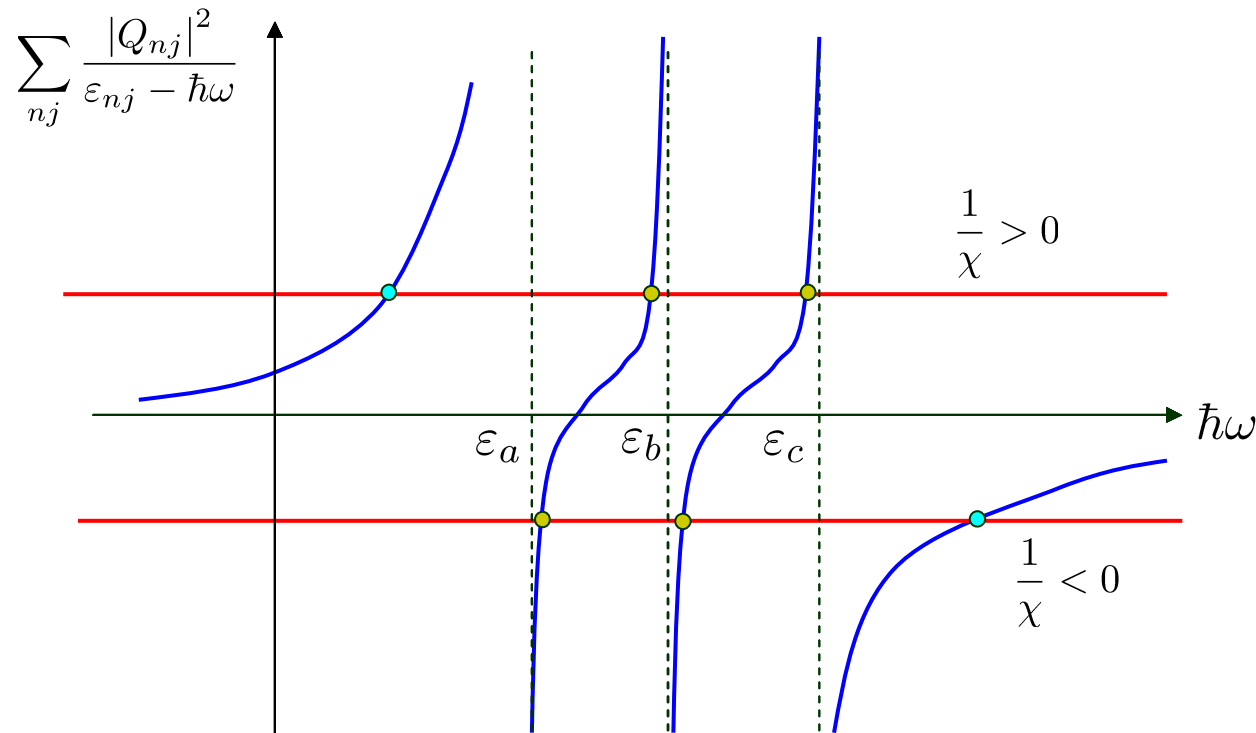
$$\sum_{nj} \frac{|Q_{nj}|^2}{\varepsilon_{nj} - \hbar\omega} = \frac{1}{\chi}$$

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

La resolució gràfica

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

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



Interacció atractiva
Estat col.lectiu a baixa
energia (magnons)
Estabilitat?

Interacció repulsiva
Estat col.lectiu a alta
energia (plasmons)