Apendice D

D-1 Formalismo de la aproximación de fases al azar. Canal de partícula-agujero

Si partimos de un conjunto de estados excitados del Hamiltoniano H, podemos escribir:

$$H \mid \nu > = \hbar \, \omega_\nu \mid \nu > \tag{D-1}$$

es posible definir operadores $\Gamma_\nu^\dagger$ y Γ_ν tales que:

$$|\nu> = \Gamma_\nu^\dagger |0> \tag{D-2-a}$$

$$\Gamma_\nu |0> = 0 \tag{D-2-b}$$

Colocando (D-2-a) en la ecuación de Schrödinger, expresión (D-1), obtenemos la siguiente ecuación de movimiento:

$$[\, H \,,\, \Gamma_\nu^\dagger \,] \; |0> = \hbar\omega_\nu \; \Gamma_\nu^\dagger |0> \tag{D-3}$$

donde hemos supuesto que:

$$H \; |0> = 0$$

Multiplicando a izquierda por un estado arbitrario, $\langle 0|\delta\Gamma$, resulta:

$$\langle 0|\ [\delta\Gamma,[H,\Gamma_\nu^\dagger]]\ |0\rangle = \hbar\ \omega_\nu\ \langle 0|[\delta\Gamma,\tau_\nu^\dagger]\ |0\rangle \tag{D-4}$$

Si aproximamos $|0\rangle$ por $|HF\rangle$, y $\Gamma_\nu^\dagger$ por el operador colectivo de partícula-agujero:

$$\Gamma_\nu^\dagger = \sum_{mi} c_{mi}^\nu\ a_m^\dagger\ a_i \tag{D-5}$$

la ecuación (D-4) conduce a:

$$\sum_{mi} c_{mi}^\nu\ \langle HF|[a_j^\dagger\ a_n,[H,a_m^\dagger\ a_i]]|HF\rangle = \hbar\omega_\nu\ c_{nj}^\nu \tag{D-6}$$

que corresponde a la aproximación de Tamm-Dancoff.

No hay ninguna razón por la cual no podamos usar en (D-5) un operador más general. Si pensamos en un estado fundamental distinto del de Hartree-Fock, $|HF\rangle$, no sólo debemos tener en cuenta estados que crean un par, sino también estados que destruyen un par. Podemos tomar:

$$\Gamma_\nu^\dagger = \sum_i X_{mi}^\nu\ a_m^\dagger\ a_i - \sum_i Y_{mi}^\nu\ a_i^\dagger\ a_m \tag{D-7}$$

de esta forma el vacio de RPA, $|RPA\rangle$, será tal que:

$$\Gamma_\nu\ |RPA\rangle = 0 \tag{D-8}$$

A partir de (D-4) obtenemos dos conjuntos de ecuaciones:

$$\langle RPA|[a_i^\dagger\ a_m,[H,\Gamma_\nu^\dagger]]|RPA\rangle = \hbar\omega_\nu\ \langle RPA|[a_i^\dagger\ a_m,\Gamma_\nu^\dagger]|RPA\rangle \tag{D-9-a}$$

$$\langle RPA|[a_m^\dagger\ a_i,[H,\Gamma_\nu^\dagger]]|RPA\rangle = \hbar\omega_\nu\ \langle RPA|[a_m^\dagger\ a_i,\Gamma_\nu^\dagger]|RPA\rangle \tag{D-9-b}$$

donde $h\omega_\nu$, es la energía del estado excitado $|\nu\rangle$. Estas ecuaciones contienen valores de espectación de cuatro fermiones, los cuales son difíciles de calcular,debido al hecho que todavia no sabemos quien es $|RPA\rangle$.

Nos conformaremos con la aproximación, comunmente llamada de cuasi-bosón. Si suponemos que el estado correlacionado no difiere mucho del obtenido a través de la aproximación de Hartree-Fock, podemos reemplazar $|RPA\rangle$ por $|HF\rangle$. Esta aproximación viola el principio de exclusión de Pauli. La bondad de la aproximación de cuasi-bosón puede chequearse a partir de cálculos realistas. En esta aproximación, "X_{mi}^ν" y "Y_{mi}^ν" tienen un significado directo: su valor absoluto elevado al cuadrado da la probabilidad de encontrar los estados "$a_m^\dagger\ a_i|0\rangle$" y "$a_i^\dagger\ a_m|0\rangle$" en el estado excitado $|\nu\rangle$, respectivamente, es decir:

$$\langle 0|a_i^\dagger\ a_m|\nu\rangle \cong \langle HF|[a_i^\dagger\ a_m,\Gamma_\nu^\dagger]|HF\rangle = X_{mi}^\nu \tag{D-10-a}$$

$$\langle 0|a_m^\dagger\ a_i|\nu\rangle \cong \langle HF|[a_m^\dagger\ a_i,\Gamma_\nu^\dagger]|HF\rangle = Y_{mi}^\nu \tag{D-10-b}$$

La ecuación (D-9) puede escribirse en forma matricial, resultando:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^{\nu} \\ Y^{\nu} \end{pmatrix} = \hbar\omega_{\nu} \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & -U \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^{\nu} \\ Y^{\nu} \end{pmatrix} \qquad \text{(D-11)}$$

con:

$$(X^{\nu})_{mi} = X^{\nu}_{mi} \qquad \text{(D-12-a)}$$

$$(Y^{\nu})_{mi} = Y^{\nu}_{mi} \qquad \text{(D-12-b)}$$

$$A_{minj} = \langle HF|[a^{\dagger}_{i}\ a_{m},[H,a^{\dagger}_{n}\ a_{j}]]|HF\rangle \qquad \text{(D-12-c)}$$

$$B_{minj} = \langle HF|[a^{\dagger}_{i}\ a_{m},[H,a^{\dagger}_{j}\ a_{n}]]|HF\rangle \qquad \text{(D-12-d)}$$

$$U_{minj} = \langle HF|[a^{\dagger}_{i}\ a_{m},a^{\dagger}_{n}\ a_{j}]|HF\rangle \qquad \text{(D-12-e)}$$

siendo "A" una matriz hermítica y "B" una matriz simétrica.

Si hacemos $Y^{\nu}_{mi}=0$, obtenemos nuevamente la aproximación de Tamm-Dancoff. Es decir que Y^{ν}_{mi}, será una buena medida de las correlaciones del estado fundamental. Si las amplitudes retrasadas del fonón, Y^{ν}_{mi}, fueran grandes en comparación con las amplitudes avanzadas, X^{ν}_{mi}, la aproximación de cuasi-bosón dejaría de ser válida.

Normalización y relaciones de clausura

Como la matriz de RPA no es hermítica, sus autovalores no pueden ser ortogonales en el sentido usual. Esperamos una clase diferente de relaciones de ortogonalidad, obtenida a partir de la condición de ortogonalidad impuesta a los estados $|\nu\rangle$:

$$\langle\nu|\nu'\rangle = \delta_{\nu\nu'} = \langle RPA|\ [\Gamma_\nu, \Gamma^\dagger_{\nu'}]\ |RPA\rangle \cong$$
$$\cong \langle HF|\ [\Gamma_\nu, \Gamma^\dagger_{\nu'}]\ |HF\rangle \qquad (D-13)$$

o bien:

$$\delta_{\nu\nu'} = \sum_{mi} (X^{\nu *}_{mi}\ X^{\nu'}_{mi} - Y^{\nu *}_{mi}\ Y^{\nu'}_{mi})\ U_{mimi} \qquad (D-14)$$

Para obtener la relación de clausura introduciremos la siguiente notación matricial:

$$\varkappa = \begin{pmatrix} X & Y^* \\ Y & X^* \end{pmatrix} \qquad \eta = \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & -U \end{pmatrix}$$

$$S = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \qquad \Omega = \begin{pmatrix} \theta & 0 \\ 0 & -\theta \end{pmatrix} \qquad (D-15)$$

con:

$$\theta_{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'}\ \hbar\omega_\nu$$

En función de estas matrices, la ecuación de dispersión puede escribirse como:

$$S\varkappa = \eta\varkappa\Omega \qquad \text{(D-16)}$$

Después de un álgebra sencilla resulta:

$$[\Omega, \varkappa^{\dagger}\eta\varkappa] = 0 \qquad \text{(D-17)}$$

pudiendo elegir:

$$\varkappa^{\dagger}\eta\varkappa = \eta \qquad \text{(D-18)}$$

esta elección respeta la condición de ortogonalidad (D-14).

Multiplicando (D-18) por η, y teniendo en cuenta que $\eta\varkappa\eta$ es la matriz inversa de $\varkappa^{\dagger}$, obtenemos la condicón de clausura:

$$\varkappa\eta\varkappa^{\dagger} = \eta \qquad \text{(D-19)}$$

o bien:

$$\delta_{mim'i'} = \sum_{\nu} (X^{\nu *}_{mi} \; X^{\nu}_{m'i'} - Y^{\nu *}_{mi} \; Y^{\nu}_{m'i'}) \; U_{mim'i'} \qquad \text{(D-20)}$$

Construcción del estado fundamental de la RPA

Podemos construir el estado fundamental de la RPA, |RPA>, a partir del vacío de Hartree-Fock, utilizando el teorema de Thouless:

$$|RPA\rangle = N_o \exp(Z)|HF\rangle \qquad (D-21)$$

$$Z = (1/2) \sum_{\substack{mi \\ nj}} Z_{minj} B^{\dagger}_{mi} B^{\dagger}_{nj} \qquad (D-22)$$

con: $B^{\dagger}_{mi} = a^{\dagger}_{m} a_{i}$

y siendo:

$$Z = Y^{*} X^{*-1} \qquad (D-23)$$

D-2 Formalismo RPA para el canal de partícula-partícula

El formalismo de la RPA para el canal de partícula-partícula (p-p) describe estados excitados en sistemas con A±2 nucleones, siendo A el número de nucleones en el núcleo original.

Los operadores equivalentes a los usados en el caso del canal de partícula-agujero (p-h), expresión (D-7), son elegidos de manera que:

$$\Gamma^{\dagger}_{a,\nu}|A,0\rangle = |A+2,\nu\rangle \qquad (D-24-a)$$

$$\Gamma^{\dagger}_{r,\lambda}|A,0\rangle = |A-2,\nu\rangle \qquad \text{(D-24-b)}$$

es decir:

$$\Gamma^{\dagger}_{a,\nu} = \sum_{m<n} X^{\nu}_{a,mn}\, a^{\dagger}_{m}\, a^{\dagger}_{n} - \sum_{i<j} Y^{\nu}_{a,ij}\, a^{\dagger}_{j}\, a^{\dagger}_{i} \qquad \text{(D-25-a)}$$

$$\Gamma^{\dagger}_{r,\lambda} = \sum_{m<n} X^{\lambda}_{r,mn}\, a_{m}\, a_{n} - \sum_{i<j} Y^{\lambda}_{r,ij}\, a_{j}\, a_{i} \qquad \text{(D-25-b)}$$

Tenemos pues, dos tipos de bosones: uno asociado a las excitaciones en el sistema con A+2 nucleones, (D-25-a), y otro asociado a las excitaciones en el sistema de A - 2 nucleones (D-25-b). Estos dos tipos de bosones dan lugar a las siguientes ecuaciones de movimiento:

$$[H,\Gamma^{\dagger}_{a,\nu}]]\ |0\rangle = \hbar\,\omega_{\nu}\,\Gamma^{\dagger}_{a,\nu} \qquad \text{(D-26-a)}$$

$$[H,\Gamma^{\dagger}_{r,\lambda}]]\ |0\rangle = \hbar\,\omega_{\nu}\,\Gamma^{\dagger}_{r,\lambda} \qquad \text{(D-26-b)}$$

Estas ecuaciones pueden escribirse de la siguiente manera:

$$(\hbar\omega_{\nu} - \varepsilon_{m} - \varepsilon_{n})\, X^{\nu}_{a,mn} =$$

$$= \sum_{m'<n'} v_{mnm'n'}\, X^{\nu}_{a,m'n'} - \sum_{i'<j'} v_{mni'j'}\, Y^{\nu}_{a,i'j'}$$

$$(-\hbar\omega_{\nu} + \varepsilon_{i} + \varepsilon_{j})\, Y^{\nu}_{a,ij} =$$

$$= - \sum_{m'<n'} \upsilon_{ijm'n'} X^{\nu}_{a,m'n'} + \sum_{i'<j'} \upsilon_{iji'j'} Y^{\nu}_{a,i'j'}$$

(D-27-a)

$$(\hbar\omega_{\lambda} - \varepsilon_{m} - \varepsilon_{n}) Y^{\lambda}_{r,mn} =$$

$$= - \sum_{i'<j'} \upsilon_{iji'j'} X^{\lambda}_{r,i'j'} + \sum_{m'<n'} \upsilon_{mnm'n'} Y^{\lambda}_{r,m'n'}$$

$$(-\hbar\omega_{\lambda} + \varepsilon_{i} + \varepsilon_{j}) X^{\lambda}_{r,ij} =$$

$$= \sum_{i'<j'} \upsilon_{iji'j'} X^{\lambda}_{r,i'j'} - \sum_{m'<n'} \upsilon_{ijm'n'} Y^{\lambda}_{r,m'n'}$$

(D-27-b)

pudiéndose expresar, al igual que en el caso de p-h, las amplitudes adelantada y atrasada de los fonones como:

$$X^{\nu}_{a,mn} = \langle A,0 | a_m a_n | A+2,\nu \rangle \qquad \text{(D-28-a)}$$

$$Y^{\nu}_{a,ij} = \langle A,0 | a_i a_j | A+2,\nu \rangle \qquad \text{(D-28-b)}$$

$$X^{\lambda}_{r,ij} = \langle A-2,\lambda | a_j a_i | A,0 \rangle \qquad \text{(D-28-c)}$$

$$Y^{\lambda}_{r,mn} = \langle A-2,\lambda | a_m a_n | A,0 \rangle \qquad \text{(D-28-d)}$$

y siendo $\upsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}$ el elemento de matriz de la interacción a estudiar.

El sistema de ecuaciones (D-27) brinda simultáneamente los autoestados de un sistema con A±2 nucleones, a diferencia de lo que sucedía en el caso del canal de p-h, que tenía en cuenta excitaciones correspondientes al mismo número de partículas.

La condición de normalización presenta la misma forma que para el caso de p-h:

$$\delta_{\nu\nu'} = \sum_{m<n} X^{\nu *}_{mn} \; X^{\nu'}_{mn} - \sum_{i<j} Y^{\nu *}_{ij} \; Y^{\nu'}_{ij} \qquad \text{(D-29-a)}$$

$$\delta_{\lambda\lambda'} = - \sum_{m<n} Y^{\lambda *}_{mn} \; Y^{\lambda'}_{mn} + \sum_{i<j} X^{\lambda *}_{ij} \; X^{\lambda'}_{ij} \qquad \text{(D-29-b)}$$

y la condición de clausura es

$$\delta_{rr'} . \delta_{ss'} = \sum_{\nu} X^{\nu *}_{rs} \; X^{\nu}_{r's'} - \sum_{\nu} Y^{\nu *}_{rs} \; Y^{\nu'}_{r's'} \qquad \text{(D-30)}$$

El formalismo de la RPA de p-p ha sido aplicado satisfactoriamente en núcleos próximos a capa cerrada, describiéndose las excitaciones del sistema con A±2 nucleones. En el Capítulo I hemos extendido el formalismo a temperatura distinta de cero.

D-3 Formalismo RPA para cuasipartículas

Lejos de los núcleos de capa cerrada, las correlaciones de apareamiento no son despreciables, lo que implica que su efecto sobre la descripción de partícula independiente no pueden ser despreciadas. Sabemos que el estado fundamental de la teoría BCS es adecuado para tratar estas propiedades. Podemos construir una teoría RPA similar al caso de núcleos no superconductores.

Para derivar las ecuaciones correspondientes a este formalismo partiremos del siguiente Hamiltoniano:

$$H = H^{0} + H^{11} + H^{40} + H^{22} \tag{D-31}$$

en la expresión (D-31) hemos adoptado la notación usada en el Apéndice A.

Tomaremos al bosón $\Gamma_{\nu}^{\dagger}$ como :

$$\Gamma_{\nu}^{\dagger} = (1/2) \sum_{k,k'} X_{kk'}^{\nu}\, \alpha_{k}^{\dagger}\, \alpha_{k'}^{\dagger} - \sum_{k,k'} Y_{kk'}^{\nu}\, \alpha_{k'}\alpha_{k} \tag{D-32}$$

La ecuación matricial resultante tiene la misma forma que la expresión (D-11), con la salvedad que los índices de suma varian sobre todos los pares (k<k') de configuraciones del espacio. Esto significa que tenemos contribuciones de los canales de p-h, p-p y h-h.

A temperatura cero las matrices del formalismo de la RPA para un sistema de cuasipartículas son:

$$(X^{\nu})_{kk'} = X^{\nu}_{kk'} \qquad \text{(D-33-a)}$$

$$(Y^{\nu})_{kk'} = Y^{\nu}_{kk'} \qquad \text{(D-33-b)}$$

$$A_{kk'll'} = \langle HF|[\alpha^{\dagger}_{k}\ \alpha^{\dagger}_{k'},[H,\alpha_{l}\ \alpha_{l'}]]|HF\rangle \qquad \text{(D-33-c)}$$

$$B_{kk'll'} = -\ \langle HF|[\alpha_{k}\ \alpha_{k'},[H,\alpha_{l'}\ \alpha_{l}]]|HF\rangle \qquad \text{(D-33-d)}$$

$$U_{kk'll'} = \langle HF|[\alpha^{\dagger}_{k}\ \alpha^{\dagger}_{k'},\alpha_{l}\ \alpha_{l'}]|HF\rangle \qquad \text{(D-33-e)}$$

La condición de normalización puede escribirse como:

$$\delta_{\nu\nu'} = \sum_{k,k'} (\ X^{\nu *}_{kk'}\ X^{\nu'}_{kk'} - Y^{\nu *}_{kk'}\ Y^{\nu'}_{kk'}\ ) \qquad \text{(D-34-a)}$$

mientras que la condición de clausura resulta:

$$\delta_{kk'}\delta_{ll'} = \sum_{\nu} (\ X^{\nu *}_{kk'}\ X^{\nu}_{ll'} - Y^{\nu *}_{kk'}\ Y^{\nu'}_{ll'}\ ) \qquad \text{(D-35)}$$

La extensión de este formalismo a temperatura finita ha sido descripta en el Capítulo I y en el Capítulo II de esta Tesis.