Apendice E

Formalismo de la Función de Respuesta Lineal

Al tratar excitaciones colectivas en un sistema nuclear, se parte de la ecuación de Schrödinger estacionaria:

$$H \, |\nu\rangle = E_\nu \, |\nu\rangle \qquad \text{(E-1)}$$

reduciéndose el problema a diagonalizar el Hamiltoniano, al menos en alguna aproximación.

Sin embargo, podemos empezar de manera diferente. Podemos investigar la influencia de un campo externo débil, F, dependiente del tiempo:

$$F(t) = F \exp(-i\omega t) + F^\dagger \exp(i\omega t) \qquad \text{(E-2)}$$

sobre el sistema. Supondremos que F es un operador de un cuerpo

$$F = \sum_{k,l} f_{kl} \, a_k^\dagger \, a_l \qquad \text{(E-3)}$$

El efecto de este campo será introducir pequeñas modificaciones en la densidad nuclear. De este modo, la densidad nuclear oscilará con el campo externo, produciéndose resonancias cuando la frecuencia ω sea próxima a la energía de excitación del sistema. En esta forma obtenemos información sobre los estados excitados del sistema, pudiendo además, derivar un formalismo RPA para fuerzas dependientes de la densidad.

E-1 Derivación de la Función de Respuesta Lineal

Como sabemos, la función de onda de un sistema nuclear, $|\phi(t)\rangle$, en un campo externo dependiente del tiempo, no es más estacionaria, y la densidad de un cuerpo:

$$\rho_{kl}(t) = \langle\phi(t)|a_k^\dagger \, a_l|\phi(t)\rangle \qquad \text{(E-4)}$$

depende del tiempo.

Queremos calcular esta densidad bajo las siguientes aproximaciones:

i) $\rho(t)$ corresponde a un determinante de Slater $(\rho^2=\rho)$, y obedece la siguiente ecuación de movimiento:

$$i\hbar \, \dot{\rho} = [h(\rho)+f(t),\rho] \qquad \text{(E-5)}$$

esta es la ecuación de Hartree-Fock dependiente del tiempo, donde $h(\rho)$ es el campo de partícula independiente de Hartree-Fock, y $f(t)$ es el campo externo dependiente del tiempo.

ii) $f(t)$ es débil, de modo que solamente introduce pequeñas oscilaciones alrededor de la densidad estacionaria ρ^0, que es solución estacionaria de la ecuación de Hartree-Fock:

$$0 = [h(\rho^0),\rho^0] \qquad \text{(E-6)}$$

de modo que:

$$\rho(t) = \rho^{o} + \delta\rho(t) \tag{E-7}$$

donde:

$$\delta\rho(t) = \rho^{1} \exp(-i\omega t) + \rho^{1} \exp(i\omega t) \tag{E-8}$$

Trabajaremos en la base en que ρ^{o} y $h(\rho^{o})$ son diagonales, es decir:

$$\rho^{o}_{kl} = \delta_{kl}\, \rho^{o}_{k} = \begin{cases} 0 \text{ para partículas} \\ 1 \text{ para agujeros} \end{cases} \tag{E-9}$$

$$(h_{o}) = (h(\rho^{o}))_{kl} = \delta_{kl}\, \varepsilon_{k} \tag{E-10}$$

Reemplazando la expresión (E-7) en (E-5), resulta:

$$ih\, \delta\dot{\rho} = [h\ ,\delta\rho] + [(\delta h/\delta\rho)\delta\rho, \rho^{o}] + [f, \rho^{o}] \tag{E-11}$$

donde:

$$(\delta h/\delta\rho)\delta\rho = \sum_{m,i} \left[(\partial h/\partial\rho_{mi})_{\rho=\rho^{o}}\, \delta\rho_{mi} + (\partial h/\partial\rho_{im})_{\rho=\rho^{o}}\, \delta\rho_{im} \right] \tag{E-12}$$

En (E-12) los elementos de las contribuciones de los canales de p-p y h-h a temperatura cero se anulan, obteniendo la siguiente ecuación matricial:

$$\left(\begin{bmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{bmatrix} - \hbar\omega \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \rho^{(1)ph} \\ \rho^{(1)hp} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} f^{ph} \\ f^{hp} \end{bmatrix} \quad (6)$$

(E-13)

siendo:

$$A_{minj} = (\varepsilon_m - \varepsilon_i)\, \delta_{mn} \delta_{ij} + \partial h_{mi} / \partial \rho_{nj} \qquad \text{(E-14-a)}$$

$$B_{minj} = \partial h_{mi} / \partial \rho_{jn} \qquad \text{(E-14-b)}$$

Las matrices A y B se corresponden exactamente a las matrices obtenidas en el formalismo de la RPA, discutido en el Apéndice D.

La ecuación de respuesta lineal, es una ecuación inhomogénea, que puede ser resuelta invirtiendo el miembro de la izquierda de (E-13); encontrando así una conexión lineal entre el campo F y el cambio en la densidad nuclear:

$$\rho^1_{kl} = \sum_{p,q} R_{kl,pq}(\omega)\ f_{pq} \qquad \text{(E-15)}$$

donde $R_{klpq}(\omega)$ se conoce como la Función de Respuesta Lineal. Esta función depende de la frecuencia del campo externo, y presenta polos en las autofrecuencias del sistema, que un campo débil f es capaz de excitar. Para encontrar estas resonancias ($\omega = \Omega_\nu$) debemos mirar las soluciones de la ecuación homogénea (E-13), la que puede escribirse como:

$$(S - \hbar\omega \, \eta) \, \rho^1 = 0 \tag{E-16}$$

donde hemos adoptado la notación del Apéndice D.

La fórmula (E-16) no es más que la ecuación del formalismo de la RPA, y sus soluciones dan las amplitudes:

$$\rho^1_{pq} (\Omega) = \langle 0 | a^\dagger_p \, a_q | \nu \rangle \tag{E-17}$$

El conocimiento de los modos propios del sistema, es decir las energías Ω_ν, y las amplitudes X e Y del formalismo de la RPA, permite hallar una expresión para la Función de Respuesta Lineal. De este modo, a partir de

$$\rho^1 = \hbar^{-1} \chi \, (\Omega - \omega)^{-1} \, \eta \, \chi^\dagger \, f \tag{E-18}$$

la Función de Respuesta Lineal resulta

$$R_{pqp'q'}(\omega) = (\hbar^{-1}) \sum_{\nu>0} \left[\frac{\langle 0 | a^\dagger_q \, a_p | \nu \rangle \langle \nu | a^\dagger_{p'} a_{q'} | 0 \rangle}{\omega - \Omega_\nu + i\eta} - \frac{\langle 0 | a^\dagger_{p'} a_{q'} | \nu \rangle \langle \nu | a^\dagger_q \, a_p | 0 \rangle}{\omega + \Omega_\nu + i\eta} \right] \tag{E-19}$$

donde $|0\rangle$ y $|\nu\rangle$ son autoestados estacionarios no perturbados.

Si introducimos la Función de Respuesta Lineal $R^{o}_{pqp'q'}(\omega)$ para un sistema sin interacción:

$$R_{pq,p'q'} = \delta_{pp'}\delta_{qq'} \frac{\rho^{o}_{q} - \rho^{o}_{p}}{\omega - \varepsilon + \varepsilon + i\eta} \qquad \text{(E-20)}$$

podemos derivar, en la aproximación RPA otra expresión para $R_{pqp'q'}(\omega)$. Con ayuda de la ecuación de linealización de Bethe-Salpeter obtenemos:

$$R_{pq,p'q'}(\omega) = R^{o}_{pq,p'q'}(\omega) +$$

$$+ \sum_{\substack{p_1 \; q_1 \\ p_2 \; q_2}} R^{o}_{pq,p_1q_1}(\omega) H_{int}(p_1q_1,p_2q_2)\; R_{p\;q\;,p'q'}(\omega)$$

(E-21)

La extensión de este formalismo a temperatura finita, puede hacerse en forma sencilla) a través de la introducción de una matriz diagonal con factores de ocupación térmicos:

$$\tau = \begin{bmatrix} (n_{j_1}(T)-n_{j_2}(T)) & & \\ & \ddots & \\ & & -(n_{j_1}(T)-n_{j_2}(T)) \end{bmatrix} \qquad \text{(E-22)}$$

Luego de algún álgebra el resultado es

$$R_{pqp'q'}(\omega) = (h^{-1}) \sum_{\nu>0} \left[\frac{\langle 0|a_q^{\dagger} a_p|\nu\rangle\langle\nu|a_{p'}^{\dagger} a_{q'}|0\rangle}{\omega - \Omega_\nu + i\eta} - \right.$$

$$\left. - \frac{\langle 0|a_{p'}^{\dagger} a_{q'}|\nu\rangle\langle\nu|a_q^{\dagger} a_p|0\rangle}{\omega + \Omega_\nu + i\eta} \right] (n_p - n_q)$$

(E-23)

donde $n_j(T)$ es el número de ocupación térmico.

De esta forma es que la Función de Respuesta Lineal no perturbada tiene la forma:

$$R_T^o(\omega)_{pq,p'q'} = \delta_{pp'}\delta_{qq'} (n_p(T) - n_q(T)) .$$

$$\left(\frac{1}{\omega - \varepsilon_p + \varepsilon_q + i\eta} - \frac{1}{\omega + \varepsilon_p - \varepsilon_q + i\eta} \right)$$

(E-24)

Haciendo uso, nuevamente, de la Ecuación de linealización de Bethe-Salpeter, obtenemos:

$$R_{T,pq,p'q'}(\omega) = R^o_{T,pq,p'q'}(\omega) +$$

$$+ \sum_{\substack{p_1 \, q_1 \\ p_2 \, q_2}} R^o_{pq,p_1q_1}(\omega) H_{int}(p_1q_1, p_2q_2) R_{p\ q\ ,p'q'}(\omega)$$

(E-25)

E-2 Cálculo de Probabilidades de Transición

Una propiedad muy útil de la Función de Respuesta Lineal, radica en el hecho que su parte imaginaria está relacionada con la probabilidad total de transición. Si definimos:

$$R_F(\omega) = Tr\,(f^{\dagger}\,\rho^{1}(\omega)) =$$
$$= \sum_{\substack{pq \\ p'q'}} f^{*}_{pq}\, R_{pqp'q'}(\omega)\, f_{p'q'} \qquad \text{(E-26)}$$

podemos verificar que para $\omega>0$:

$$Im\, R_F(\omega) = -\pi \sum_{\nu>0} |\langle\nu|F|0\rangle|^2\, \delta(h\omega-h\Omega_\nu) \qquad \text{(E-27)}$$

obteniendo la regla de suma pesada en energía a través de una simple integral:

$$S = \int_0^{\infty} d\omega\, \omega\, Im\, R_F(\omega) =$$

$$= \sum_{\nu>0} |\langle\nu|F|0\rangle|^2\, h\Omega_\nu \qquad \text{(E-28)}$$

donde $|\langle\nu|F|0\rangle|^2$ es el residuo de $R_F(\omega)$ en el polo $\omega=\Omega_\nu$.