



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

8

DISSERTAÇÃO

OBTENÇÃO UNIFICADA DAS EQUAÇÕES DA
RPA PARTÍCULA-BURACO,
PARTÍCULA-PARTÍCULA E BURACO-BURACO

Luiz Antonio Barreiro

Orientador

Alfredo Pio Noronha Rodrigues Galeão



IFT/TE
M-83

Julho 1992

OBTENÇÃO UNIFICADA DAS
EQUAÇÕES DA RPA
PARTÍCULA-BURACO,
PARTÍCULA-PARTÍCULA E
BURACO-BURACO

Luiz Antonio Barreiro

Dissertação apresentada no Instituto de Física Teórica para
obtenção do título de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Alfredo Pio Noronha Rodrigues Galeao

São Paulo, 1992

Agradecimentos

- Ao Prof. Alfredo Pio Noronha Rodrigues Galeão pela orientação , paciência e amizade que me tem oferecido durante todo esse tempo.
- Ao Prof. Gerhard Wilhen Bund pela acolhida no Instituto de Física Teórica.
- Ao Prof. Valdir Casaca Aguilera-Navarro pela ajuda na resolução dos problemas numéricos.
- Aos professores, colegas e funcionários do IFT pelo apoio e camaradagem.
- À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nivel Superior - Capes pelo suporte financeiro.

RESUMO

Deduzimos de modo unificado, pelo Método de Coordenadas Geradoras, as equações da RPA nos canais partícula-buraco, partícula-partícula e buraco-buraco. Para isso utilizamos o teorema de Thouless para escrever a forma geral de um estado produto na vizinhança do vácuo de Hartree-Fock. Uma aproximação de pequenas amplitudes permite transformar a equação de Hill-Wheeler numa equação de Schrödinger para osciladores harmônicos acoplados na representação de Bargmann. A procura dos modos normais desses osciladores leva às equações da RPA nos três canais acima mencionados. Fizemos uma aplicação numérica para o ^{210}Pb e ^{206}Pb .

ABSTRACT

We deduce in a unified way, by the Generator Coordinate Method, the RPA equations in the particle-hole, particle-particle and hole-hole channels. To this end, we make use of Thouless' theorem to write a general expression for a product state in the neighbourhood of the Hartree-Fock vacuum. A small amplitude approximation allows us to transform the Hill-Wheeler equation into a Schrödinger equation for coupled harmonic oscillators in the Bargmann representation. The search for the normal modes of those oscillators leads to the RPA equations in the three channels mentioned above. A numerical application to ^{210}Pb and ^{206}Pb has also been made.

ÍNDICE

I) Introdução Geral	3
II) Espaço de Bargmann	6
III) Aproximação de Campo Médio	15
III-1) Introdução	15
III-2) Partículas Independentes	15
III-3) Método de Hartree-Fock	16
III-4) Transformação Canônica de Bogoliubov	18
IV) Introdução de Correlações no Vácuo de Hartree-Fock	21
IV-1) Introdução	21
IV-2) Correlações no Estado Fundamental	21
IV-3) Aproximação de Pequenas Amplitudes	23
IV-4) Transformação da Equação de Hill-Wheeler numa Equação Diferencial	32
V) Obtenção das Equações da RPA	36
V-1) Introdução	36
V-2) Diagonalização do Termo de Partícula-Buraco	36
V-3) Diagonalização dos Termos de Partícula-Partícula e Buraco-Buraco	40
V-4) Interpretação dos Resultados	49
V-5) Estado Fundamental	52
V-6) Excitações Partícula-Buraco	55
V-7) Excitações Partícula-Partícula e Buraco-Buraco	56
VI) Aplicação Numérica das Equações da RPA $pp + hh$	59
VI-1) Introdução	59
VI-2) Espaço Modelo	59
VI-3) Interações Efetivas	59

VI-4) Base de Estados de Duas Partículas64
VI-5) Cálculo dos Elementos de Matriz das Interações66
VI-6) Resultados69
VII) Conclusão72

APÊNDICES

A) Estabilidade da Solução de H.F. e suas Implicações74
A-1) Existência das Soluções da RPA.....	.74
A-2) Relações de Completeza.....	.76
B) Detalhes do Cálculo dos Elementos de Matriz das Interações80
B-1) Interação Gaussiana80
B-2) Termo de Spin-Órbita.....	.82
Referências88

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO GERAL

Claramente, para um sistema complexo de muitos corpos, como o núcleo, não temos como resolver exatamente a equação de Schrödinger. É essencial, portanto, procurarmos nos utilizar de algum aspecto simplificador. Assim, evidências experimentais nos permitem considerar o núcleo, pelo menos em primeira aproximação, como sendo constituído de nucleons se movendo em um potencial médio. Portanto, alguns de seus estados excitados correspondem à excitação de uma partícula para níveis energéticos superiores ao mais alto nível ocupado (nível de Fermi). A este tipo de estado excitado denominamos estado de partícula-buraco¹. Quando várias destas excitações ocorrem de modo coerente, nós temos os chamados modos vibracionais. Na verdade, temos uma variedade muito rica destes modos vibracionais, distinguidos um do outro pelo momento angular (J), paridade (π) e isospin (τ) da excitação correspondente.

Na tentativa de descrever estas vibrações coletivas, a teoria mais largamente utilizada é a Aproximação da Fase Aleatória ou RPA (Random Phase Approximation²). Contudo, sabemos que estes tipos de oscilações, conhecidas por vibrações normais, não esgotam todas as possibilidades. A existência de transições favorecidas envolvendo transferências de dois nucleons com

$$J^\pi = 0^+, 2^+, 4^+, \dots,$$

partindo de um núcleo (A) de camadas fechadas³ para seus vizinhos com $A \pm 2$ nucleons, sugere a existência de campos de emparelhamento com multipolaridade $\lambda = 0, 2, 4, \dots$ (BeB 71; Bro 74). Estes campos seriam caracterizados por fônons carregando isospin $\tau = 1$, spin $S = 0$ e número quântico de transferência $\alpha = \pm 2$. Seus quanta com multipolaridade λ estão

¹ Esta nomenclatura será melhor explicada no capítulo III

² O nome se origina de uma teoria similar desenvolvida para oscilações de plasma, onde se assume que as amplitudes de excitação de um par de elétrons, correspondendo a diferentes momentos transferidos, têm fases completamente aleatórias entre si.

³ Por núcleo de camada fechada entendemos que o mais próximo nível energético vazio do núcleo está a uma grande distância energética do nível de Fermi

associados a pares de partículas (buracos) acoplados a momento angular total $J = \lambda$. Estes são os modos vibracionais de emparelhamento.

De modo análogo ao caso das vibrações normais, as evidências experimentais indicam que esses estados podem ser bem descritos pela adição ou remoção de pares de nucleons ao estado fundamental do núcleo inicial. A idéia básica é que as funções de onda associadas a dois núcleos pares vizinhos, apesar de extremamente complexas, são de alguma forma semelhantes, devendo existir um operador simples que transforme uma na outra. Assim, a teoria RPA comum, isto é, no canal partícula-buraco (ph), pode ser generalizada para os canais partícula-partícula (pp) e buraco-buraco(hh) de maneira a descrever os modos coletivos correspondentes às vibrações de emparelhamento. A proposta desta dissertação é fazer um estudo unificado da teoria RPA nos canais partícula-buraco, partícula-partícula e buraco-buraco.

Há várias maneiras de se derivar as equações RPA-ph (vibrações normais). Cada método ilustra os diferentes aspectos dos processos físicos envolvidos. Algumas destas maneiras são: Funções de Green, Hartree-Fock dependente do tempo, Equações de Movimento de Rowe e Método de Coordenadas Geradoras. Dentre estas várias técnicas, a que melhor se adaptou às nossas necessidades e foi aqui adotada, foi a de Coordenadas Geradoras, que faz uso de um tratamento variacional, para descrever os movimentos coletivos. Este método foi o escolhido por levar a um tratamento formal relativamente simples e deixar bastante claro quais as aproximações envolvidas. Nosso tratamento teórico segue de perto aquele de Ripka e Padjen (RiP 69) com uma pequena generalização. Isso permite obter as equações da RPA pp, hh e ph de uma forma unificada sendo que a equação RPA ph desacopla-se naturalmente das duas primeiras, como veremos nos capítulos IV e V. Utilizando-se as equações obtidas para os canais pp e hh, realizamos cálculos numéricos para ^{210}Pb e ^{206}Pb , respectivamente. Em cada caso, primeiramente utilizamos um potencial gaussiano simples e, posteriormente, utilizamos um potencial efetivo mais realístico devido à Gogny (Gog 75).

A organização desta dissertação é a seguinte. No capítulo II, fazemos um estudo do espaço de Bargmann, cujo objetivo é obter alguns dos resultados utilizados nos capítulos seguintes. No capítulo III discutimos um pouco sobre partículas independentes, quasi-

partículas e o método de Hartree-Fock. Finalizamos este capítulo apresentando uma generalização do teorema de Thouless para quasipartículas. Nos capítulos IV e V encontra-se a parte central desta dissertação. No capítulo IV, partindo do teorema de Thouless generalizado, procedemos ao desenvolvimento formal do método de coordenadas geradoras, culminando com a obtenção de uma equação para osciladores harmônicos acoplados na representação de Bargmann. No capítulo V obtemos de maneira unificada as equações da RPA, como condições a serem satisfeitas para que tenhamos o desacoplamento das equações do capítulo anterior. Além disso, discutimos a solução correspondente ao estado fundamental destes osciladores bem como aquelas correspondentes aos estados excitados de interesse. Os pontos de cálculo mais detalhado neste estudo são descritos no apêndice A. O capítulo VI trata da aplicação numérica das equações da RPA $pp+hh$ ao cálculo de alguns níveis do ^{210}Pb e ^{206}Pb . Os detalhes do cálculo dos elementos de matriz das interações efetivas escolhidas são apresentados no apêndice B. As conclusões finais sobre o trabalho são apresentadas no capítulo VII.

As referências são indicadas, entre parenteses, por meio de 3 letras retiradas dos nomes dos autores e 2 algarismos indicando o ano da publicação. Os dados bibliográficos completos estão listados nas páginas finais.

CAPÍTULO II

ESPAÇO DE BARGMANN

Em mecânica quântica, os estados $|\varphi\rangle$ são vetores em um espaço de Hilbert abstrato, H . Para um cálculo concreto nós necessitamos de alguma representação, por exemplo, a representação das coordenadas ¹, onde as funções de onda são dadas por

$$\varphi_S(q) = \langle q | \varphi \rangle. \quad (\text{II.1})$$

Ou seja, nós utilizamos os auto-estados do operador de posição \mathbf{Q} como base. As funções de onda obtidas são elementos de outro espaço de Hilbert, isomorfo ao primeiro, que é o espaço no qual foi desenvolvida historicamente a mecânica de Schrödinger e que denotaremos por S . Claramente, podemos também utilizar o operador momento \mathbf{P} , obtendo a representação em outro espaço de Hilbert, F , cujos elementos são as funções

$$\varphi_F(p) = \langle p | \varphi \rangle. \quad (\text{II.2})$$

Como é bem sabido, as funções de onda φ_S e φ_F estão relacionadas por uma transformada de Fourier, isto é,

$$\varphi_F(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-ipq} \varphi_S(q). \quad (\text{II.3})$$

A grande vantagem destas representações é que os autovalores de \mathbf{Q} e \mathbf{P} são reais e correspondem diretamente à coordenada e ao momento associado. Uma desvantagem é que os estados de base possuem norma infinita,

$$\langle q | q' \rangle = \delta(q - q'), \quad \langle p | p' \rangle = \delta(p - p'). \quad (\text{II.4})$$

Obviamente, se definirmos um operador em termos de \mathbf{Q} e \mathbf{P} poderemos utilizar suas auto-funções como uma nova base. Por exemplo, ao invés de \mathbf{Q} ou \mathbf{P} , podemos escolher o operador

$$\mathbf{O} = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left(\mathbf{Q} + \frac{i}{M\omega} \mathbf{P} \right), \quad (\text{II.5.a})$$

¹ Por simplicidade estamos nos concentrando no caso de um único grau de liberdade ($q \in \mathbf{R}$) e estamos ignorando o spin.

onde as constantes M e ω , por enquanto, são arbitrárias.

Facilmente se prova, utilizando $[\mathbf{P}, \mathbf{Q}] = \hbar/i$, que os operadores \mathbf{O} e o seu hermitiano conjugado,

$$\mathbf{O}^\dagger = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left(\mathbf{Q} - \frac{i}{M\omega} \mathbf{P} \right), \quad (\text{II.5.b})$$

obedecem à seguinte relação de comutação :

$$[\mathbf{O}, \mathbf{O}^\dagger] = 1. \quad (\text{II.6})$$

Calculando o produto

$$\begin{aligned} \hbar\omega\mathbf{O}^\dagger\mathbf{O} &= \frac{M\omega^2}{2} \left[\mathbf{Q}^2 + \frac{1}{M^2\omega^2} \mathbf{P}^2 - \frac{i}{M\omega} (\mathbf{P}\mathbf{Q} - \mathbf{Q}\mathbf{P}) \right] \\ &= \frac{M\omega^2}{2} \mathbf{Q}^2 + \frac{1}{2M} \mathbf{P}^2 - \frac{\hbar\omega}{2}, \end{aligned}$$

vemos que

$$\mathbf{H} := \hbar\omega \left(\mathbf{O}^\dagger\mathbf{O} + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2M} \mathbf{P}^2 + \frac{M\omega^2}{2} \mathbf{Q}^2, \quad (\text{II.7})$$

logo, se associarmos as constantes M e ω à massa e frequência de um oscilador harmônico, respectivamente, o que obtivemos acima é exatamente o Hamiltoniano deste oscilador harmônico. De fato, esta representação é especialmente bem adaptada ao problema do oscilador harmônico.

Calculando, agora, a relação de comutação do operador \mathbf{O} com o Hamiltoniano obtido em (II.7), temos

$$[\mathbf{H}, \mathbf{O}] = \hbar\omega[\mathbf{O}^\dagger\mathbf{O}, \mathbf{O}] = -\hbar\omega\mathbf{O}, \quad (\text{II.8})$$

onde utilizamos o resultado (II.6). A seguir, escrevamos a equação de autovalor

$$\mathbf{H} |n\rangle = E_n |n\rangle,$$

onde $|n\rangle$ é um auto-estado do oscilador e E_n seu respectivo autovalor. Calculemos, então, o autovalor energia do estado $\mathbf{O} |n\rangle$. Utilizando (II.8), temos

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\mathbf{O} |n\rangle &= \mathbf{O}\mathbf{H} |n\rangle - \hbar\omega\mathbf{O} |n\rangle \\ &= (E_n - \hbar\omega)\mathbf{O} |n\rangle \\ &= E_{n-1}\mathbf{O} |n\rangle. \end{aligned} \quad (\text{II.9})$$

A equação anterior afirma que $\mathbf{O} | n \rangle$ ¹ também é auto-estado de \mathbf{H} , só que com a energia diminuída de uma unidade de $\hbar\omega$. Podemos, pois, escrever

$$\mathbf{O} | n \rangle = \sqrt{n} | n - 1 \rangle. \quad (\text{II.10})$$

Trabalhando de modo análogo ao utilizado em (II.9) e usando o fato de que \mathbf{H} é um operador Hermitiano, podemos mostrar que $\mathbf{O}^\dagger | n \rangle$ também é auto-estado de \mathbf{H} , só que com a energia aumentada de uma unidade de $\hbar\omega$. Portanto podemos escrever, em contrapartida a (II.10),

$$\mathbf{O}^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} | n + 1 \rangle. \quad (\text{II.11})$$

Nas equações (II.10) e (II.11), os números \sqrt{n} e $\sqrt{n+1}$ são simplesmente fatores de normalização .

Prosseguindo em nosso desenvolvimento, precisamos diagonalizar o operador não hermitiano \mathbf{O} , isto é, resolver o problema de autovalores

$$\mathbf{O} | z \rangle = z | z \rangle. \quad (\text{II.12})$$

Existe uma solução de (II.12) para qualquer valor complexo de z , e o auto-estado correspondente é dado por

$$| z \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} | n \rangle. \quad (\text{II.13})$$

Para ver isso, basta mostrar, utilizando (II.10), que o estado (II.13) satisfaz (II.12). Além disso, a equação (II.11) nos permite reescrever (II.13) na forma

$$| z \rangle = e^{z\mathbf{O}^\dagger} | 0 \rangle, \quad (\text{II.14})$$

onde $| 0 \rangle$ é o estado fundamental do oscilador, satisfazendo

$$\mathbf{O} | 0 \rangle = 0. \quad (\text{II.15})$$

Resulta imediatamente de (II.14) que

$$\mathbf{O}^\dagger | z \rangle = \frac{\partial}{\partial z} | z \rangle. \quad (\text{II.16})$$

¹ Pode-se mostrar que este estado só se anula para $n = 0$.

Agora, em lugar da relação de ortogonalidade (II.4), a nova base satisfaz

$$\begin{aligned}\langle z | z' \rangle &= \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} \frac{z^{*n} z'^{n'}}{\sqrt{n!n'!}} \langle n | n' \rangle \\ &= \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} \frac{(z^* z')^n}{n!} \\ &= \exp(z^* z') := B(z^*, z'),\end{aligned}\tag{II.17}$$

o que indica que estes estados possuem norma finita, mas obviamente não são ortogonais no sentido usual.

Em analogia a (II.1), as funções de onda, nesta representação, são dadas por

$$\varphi_B(z) = \langle z^* | \varphi \rangle.\tag{II.18}$$

Essas funções varrem um outro espaço de Hilbert, B , denominado espaço de Bargmann. Na verdade, $\varphi_B(z)$ poderia também ser função de z^* , mas, como mostraremos a seguir, isto não ocorre. Mais explicitamente, considerando $z = x + iy$ e, portanto, $x = \frac{1}{2}(z + z^*)$ e $y = \frac{1}{2i}(z - z^*)$, podemos introduzir, pela regra de derivação em cadeia, os seguintes operadores diferenciais

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad \text{e} \quad \frac{\partial}{\partial z^*} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right).$$

Utilizando estes operadores, temos,

$$\frac{\partial}{\partial z^*} \varphi_B(z) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x + iy)^n}{\sqrt{n!}} \langle n | \varphi \rangle \right\} = 0,\tag{II.19}$$

o que indica que $\varphi_B(z)$ é realmente função somente de z e não de z^* ¹. Na verdade, decorre das condições de Cauchy-Riemann que qualquer função para a qual ocorra $\frac{\partial}{\partial z^*} \varphi_B(z) = 0$, ou seja, $\frac{\partial}{\partial z} \varphi_B^*(z) = 0$ é uma função analítica de z .

Podemos também obter as expressões para os operadores \mathbf{O} e \mathbf{O}^\dagger nesta representação :

$$\mathbf{O}^\dagger | \varphi \rangle \mapsto \langle z^* | \mathbf{O}^\dagger | \varphi \rangle = z \langle z^* | \varphi \rangle = z \varphi_B(z)$$

¹ Note que estamos usando símbolo de derivada parcial, pois $\varphi(z)$ poderia também ser uma função de z^* . Além disso, como os resultados deste capítulo podem ser estendidos para mais de uma variável, manteremos a notação.

$$\mathbf{O} | \varphi \rangle \mapsto \langle z^* | \mathbf{O} | \varphi \rangle = \frac{\partial}{\partial z} \langle z^* | \varphi \rangle = \frac{\partial}{\partial z} \varphi_B(z),$$

onde utilizamos (II.12) e (II.16). Assim,

$$\mathbf{O}^\dagger \mapsto z \quad \text{e} \quad \mathbf{O} \mapsto \frac{\partial}{\partial z}, \quad (\text{II.20})$$

mapeamento esse que preserva a relação de comutação (II.6)¹. Deste modo, voltando à expressão (II.7), vemos que a Hamiltoniana do oscilador harmônico assume, nesta representação, a forma simples dada por

$$\mathbf{H} \mapsto \mathbf{H}_B = \hbar\omega \left(z \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{II.21})$$

Consideremos, agora, $\varphi_B(z)$ e $\psi_B(z)$, duas funções de onda nesta representação, portanto funções analíticas de z . Nos resta, ainda, um problema. Devemos encontrar uma medida real e positiva $d\mu(z) = \rho(z)dz$, com $dz = dx dy$, no plano complexo, que defina o produto escalar neste espaço. Assim,

$$(\varphi_B, \psi_B) = \int d\mu(z) \varphi_B^*(z) \psi_B(z). \quad (\text{II.22})$$

Necessariamente, este produto escalar deve satisfazer, de acordo com (II.20), a relação

$$(z\varphi_B, \psi_B) = (\varphi_B, \frac{\partial}{\partial z} \psi_B). \quad (\text{II.23})$$

Já que, φ_B é analítica, ou seja, $\partial\varphi_B^*/\partial z = 0$, podemos escrever

$$(\varphi_B, \frac{\partial\psi_B}{\partial z}) = \int \frac{\partial}{\partial z} (\varphi_B^* \psi_B \rho) dz - \int \varphi_B^* \psi_B \frac{\partial\rho}{\partial z} dz.$$

Como, pelas propriedades usuais das funções de onda, φ_B e ψ_B devem ir a zero no infinito, a primeira integral da expressão anterior deve se anular. Deste modo, a expressão (II.23) se reduz a

$$\int z^* \varphi_B^* \psi_B \rho dz = - \int \varphi_B^* \psi_B \frac{\partial\rho}{\partial z} dz.$$

¹ É necessário cuidado para não se confundir o conteúdo das equações (II.12) e (II.16) com o de (II.20). As duas primeiras exprimem uma igualdade entre vettores no mesmo espaço de Hilbert, enquanto que a última se refere a um mapeamento entre dois espaços distintos.

Esta expressão sugere que

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} = -z^* \rho.$$

Resolvendo-se esta equação diferencial, obtemos

$$\rho = C \exp(-z^* z), \quad (\text{II.24})$$

onde C é uma constante de integração .

O valor da constante C pode, agora, ser determinado de modo que se tenha as relações de completudeza

$$\int d\mu(z) |z\rangle\langle z| = \int d\mu(z) |z^*\rangle\langle z^*| = 1. \quad (\text{II.25})$$

Com efeito,

$$\begin{aligned} \int d\mu(z) |z\rangle\langle z| &= C \int e^{-|z|^2} dx dy \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} \frac{z^{*n} z'^{n'}}{\sqrt{n!n'!}} |n'\rangle\langle n| \\ &= \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} |n'\rangle\langle n| \frac{C}{\sqrt{n!n'!}} \underbrace{\int dx dy e^{-|z|^2} z^{*n} z'^{n'}}_I. \end{aligned}$$

A integral obtida, pode ser calculada utilizando-se coordenadas polares, $z = re^{i\theta}$. Assim,

$$\begin{aligned} I &= \int r dr d\theta e^{-r^2} r^{n+n'} e^{i\theta(n'-n)} \\ &= \int_0^{\infty} e^{-r^2} r^{n+n'+1} dr \underbrace{\int_0^{2\pi} e^{i\theta(n'-n)} d\theta}_{2\pi\delta_{n,n'}} \\ &= \pi n! \delta_{n,n'}. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} 1 = \int d\mu(z) |z\rangle\langle z| &= \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} |n'\rangle\langle n| \frac{C}{\sqrt{n!n'!}} \pi n! \delta_{n,n'} \\ &= C\pi \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = C\pi, \end{aligned}$$

ou seja, temos $C = \frac{1}{\pi}$. No caso da integral $\int d\mu(z) |z^*\rangle\langle z^*|$, basta trocarmos n por n' nas expressões acima, para demonstrarmos o mesmo resultado. Assim a métrica no espaço de Bargmann é dada por

$$d\mu(z) = \frac{1}{\pi} e^{-|z|^2} dx dy. \quad (\text{II.26})$$

Obtidos todos estes resultados, podemos escrever, para dois estados quaisquer $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$,

$$\begin{aligned} (\varphi_B, \psi_B) &= \int d\mu(z) \varphi_B^*(z) \psi_B(z) \\ &= \int d\mu(z) \langle \varphi | z^* \rangle \langle z^* | \psi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (\text{II.27})$$

ou seja, o produto escalar entre duas funções de onda no espaço de Bargmann é idêntico à contração dos dois vetores de estado correspondentes no espaço de Hilbert abstrato H . Portanto os espaços H , S , F e B são isomorfos.

Finalmente, é fácil provar que a função $B(z, z'^*)$, definida em (II.17), possui propriedades similares no espaço de Bargmann, com a métrica (II.26), à função δ de Dirac no espaço usual. Assim,

$$\begin{aligned} \varphi_B(z) &= \int d\mu(z') \langle z^* | z'^* \rangle \langle z'^* | \varphi \rangle \\ &= \int d\mu(z') B(z, z'^*) \varphi_B(z'), \end{aligned} \quad (\text{II.28})$$

onde utilizamos a completeza do conjunto $|z\rangle$, dada em (II.25). Por isso, esta função é chamada de função δ complexa de Bargmann. Na verdade, ela é uma função usual, bem comportada, e não uma distribuição, como é o caso da função δ de Dirac. Mais explicitamente, (II.28) nos dá a seguinte identidade satisfeita por qualquer função analítica

$$\varphi_B(z) = \frac{1}{\pi} \int dx' dy' \exp(z z'^* - |z'|^2) \varphi_B(z'), \quad (\text{II.29})$$

o que pode ser diretamente demonstrado para funções inteiras por um procedimento análogo ao usado para a demonstração de (II.25).

Em resumo, o espaço de Bargmann é um espaço de Hilbert de funções analíticas com uma métrica gaussiana. Naturalmente todos estes resultados podem ser estendidos para mais de uma variável complexa.

Para completar esta introdução ao espaço de Bargmann vamos procurar um mapeamento de S para B , análogo ao mapeamento de S para F dado em (II.3). Seja este mapeamento dado por

$$\varphi_B(z) = \int A(z, q)\varphi_S(q)dq, \quad (\text{II.30})$$

onde $\varphi_B(z)$ é a função de onda no espaço de Bargmann que corresponde à função de onda $\varphi_S(q)$ no espaço de coordenadas S . $A(z, q)$ é uma função a ser encontrada de modo que se a transformação integral (II.30) mapeia $\varphi_S(q)$ em $\varphi_B(z)$, então ela deve mapear $\mathbf{O}\varphi_S(q)$ e $\mathbf{O}^\dagger\varphi_S(q)$ em $(\partial/\partial z)\varphi_B(z)$ e $z\varphi_B(z)$, respectivamente. Assim,

$$\begin{aligned} \int A(z, q)(\mathbf{O}^\dagger\varphi_S(q))dq &= \int (\mathbf{O}A^*(z, q))^*\varphi_S(q)dq \\ &= z\varphi_B(z) = \int zA(z, q)\varphi_S(q)dq, \\ \int A(z, q)(\mathbf{O}\varphi_S(q))dq &= \int (\mathbf{O}^\dagger A^*(z, q))^*\varphi_S(q)dq \\ &= \frac{\partial}{\partial z}\varphi_B(z) = \int \frac{\partial}{\partial z}A(z, q)\varphi_S(q)dq. \end{aligned}$$

Portanto, concluímos que

$$\begin{aligned} zA(z, q) &= (\mathbf{O}A^*(z, q))^* = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left(qA(z, q) + \frac{\hbar}{M\omega} \frac{\partial A(z, q)}{\partial q} \right), \\ \frac{\partial}{\partial z}A(z, q) &= (\mathbf{O}^\dagger A^*(z, q))^* = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left(qA(z, q) - \frac{\hbar}{M\omega} \frac{\partial A(z, q)}{\partial q} \right), \end{aligned}$$

onde estamos utilizando as expressões (II.5) no espaço das coordenadas, S , no qual os operadores \mathbf{Q} e \mathbf{P} assumem a forma q e $-i\hbar\partial/\partial q$, respectivamente. Somando e subtraindo estas duas equações, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z}A(z, q) &= \left(\sqrt{\frac{2M\omega}{\hbar}}q - z \right) A(z, q), \\ \frac{\partial}{\partial q}A(z, q) &= \left(\sqrt{\frac{2M\omega}{\hbar}}z - \frac{M\omega}{\hbar}q \right) A(z, q). \end{aligned}$$

A solução dessas equações diferenciais é dada por

$$A(z, q) = C' \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(z^2 + \frac{M\omega}{\hbar}q^2 \right) + \sqrt{\frac{2M\omega}{\hbar}}zq \right\}, \quad (\text{II.31})$$

onde C' é uma constante a determinar. Para isso, escrevemos, a transformação (II.30) na forma

$$\langle z^* | \varphi \rangle = \int \langle z^* | q \rangle \langle q | \varphi \rangle dq, \quad (\text{II.32})$$

o que nos leva à identificação

$$A(z, q) = \langle z^* | q \rangle. \quad (\text{II.33})$$

Usando, então, (II.13), obtemos

$$A(z, q) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \langle n | q \rangle. \quad (\text{II.34})$$

Em particular, para $z = 0$, temos

$$A(0, q) = \langle n = 0 | q \rangle = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{M\omega}{2\hbar} q^2 \right), \quad (\text{II.35})$$

onde usamos a expressão bem conhecida para a função de onda do estado fundamental do oscilador harmônico. Uma comparação com a expressão (II.31), nos permite determinar a constante C' , de modo a obtermos

$$A(z, q) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(z^2 + \frac{M\omega}{\hbar} q^2 \right) + \sqrt{\frac{2M\omega}{\hbar}} zq \right\}. \quad (\text{II.36})$$

CAPÍTULO III

APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

III-1) Introdução

Procuremos neste capítulo, baseados no sucesso da fenomenologia do modelo de camadas, introduzir as idéias básicas a respeito da estrutura microscópica nuclear. Veremos que em muitos casos é possível tratar o sistema nuclear como constituído de partículas movendo-se independentemente em um campo médio. No entanto há casos em que se faz necessário uma generalização destas idéias, introduzindo-se a noção de quasipartículas. Veremos neste capítulo como isso pode ser feito.

Na seção III-2, apresentamos a idéia de partículas independentes e como sistematizá-la matematicamente. Na seção III-3, baseados no princípio variacional, descrevemos a aproximação de campo médio conhecida como método de Hartree-Fock. Finalmente, na seção III-4, nós apresentamos a transformação canônica de Bogoliubov, onde aparece a noção de quasipartículas. Com isso, generalizamos o teorema de Thouless, que servirá como ponto de partida para o próximo capítulo.

III-2) Partículas Independentes

Começemos recordando que o modelo de camadas se baseia na idéia de que os nucleons no núcleo podem ser considerados como partículas independentes se movendo em orbitais de partícula única, produzidos por um potencial nuclear médio, sendo apenas ligeiramente perturbados pela interação residual. As razões para isso são a ação combinada do princípio de exclusão de Pauli e o fato de a interação nucleon-nucleon, apesar de ser fortemente atrativa, possuir um caroço quase que infinitamente repulsivo para $r \lesssim 0.4$ fm. Assim, por um lado esses dois efeitos se compensam e, por outro, dois nucleons ao colidirem na matéria nuclear têm a maior parte dos estados de momento finais, acessíveis pelas leis de conservação, bloqueados pelo princípio de Pauli, não lhes restando muita alternativa senão permanecerem com os momentos que tinham inicialmente. Isso reduz enormemente a seção de choque no interior da matéria nuclear, fazendo com que o livre caminho médio seja da ordem do raio nuclear.

Com esta idéia de partículas independentes em mente, podemos construir o estado fundamental de um sistema com A nucleons criando um a um os nucleons em cada nível do potencial médio, na ordem crescente das energias. Assim, introduzindo os operadores b_α^\dagger de criação de nucleons nos estados α , obtemos para o estado fundamental $|\Phi_0\rangle$ a forma:

$$|\Phi_0\rangle = \underbrace{b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger \dots b_\gamma^\dagger}_{A \text{ operadores}} |-\rangle = \prod_{\alpha=1}^A b_\alpha^\dagger |-\rangle, \quad (\text{III.1})$$

onde o estado $|-\rangle$ é o vácuo físico, o qual não contém qualquer nucleon. Portanto qualquer operador de aniquilação b_m atuando neste vácuo produz resultado nulo, ou seja,

$$b_m |-\rangle = 0. \quad (\text{III.2})$$

Já que os nucleons são férmions, esses operadores obedecem as relações de anticomutação

$$\{b_m, b_n^\dagger\} = \delta_{m,n}; \quad \{b_m, b_n\} = 0, \quad (\text{III.3})$$

o que garante a observância do princípio de Pauli. Um estado como o dado em (III.1) é conhecido, por razões óbvias, como *estado produto*.

A notação utilizada nesta dissertação é a seguinte: *índices gregos correspondem a estados preenchidos (buracos) e índices romanos correspondem a estados vazios (partículas)*. As exceções são feitas aos índices m e n , que correspondem tanto a estados de partícula como de buraco.

III-3) Método de Hartree-Fock

Na fenomenologia do modelo de camadas, geralmente se toma para potencial médio o do oscilador harmônico. Na teoria de Hartree-Fock o intuito é encontrar este potencial médio a partir da Hamiltoniana nuclear, de tal modo que o valor esperado para a energia seja mínimo.

Para implementar esse método, precisamos considerar todos os estados produto na vizinhança de $|\Phi_0\rangle$, dado em (III.1), isto é, estados de forma

$$|\Phi'\rangle = \prod_{\alpha=1}^A c_\alpha^\dagger |-\rangle,$$

com os operadores c^\dagger sendo uma superposição linear dos operadores b^\dagger de (III.1). De acordo com um importante teorema devido a Thouless (Tho 60), estes estados produtos devem estar relacionados pela expressão

$$|\Phi'\rangle = \exp\left(\sum_{\alpha i} z_{\alpha i}^* b_\alpha b_i^\dagger\right) |\Phi_0\rangle. \quad (\text{III.4})$$

Efetuando, então, uma expansão até a segunda ordem em z , obtemos, para o kernel hamiltoniano,

$$\begin{aligned} \langle\Phi' | \mathbf{H} | \Phi'\rangle &= \langle\Phi_0 | \mathbf{H} | \Phi_0\rangle + \left(\sum_{\alpha i} z_{\alpha i} \langle\Phi_0 | b_i b_\alpha^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0\rangle + h.c.\right) + \\ &+ \sum_{\alpha i \beta j} z_{\alpha i} z_{\beta j}^* \langle\Phi_0 | b_i b_\alpha^\dagger \mathbf{H} b_\beta b_j^\dagger | \Phi_0\rangle \\ &+ \frac{1}{2} \left(\langle\Phi_0 | \left(\sum_{\alpha i} z_{\alpha i} b_i b_\alpha^\dagger\right)^2 \mathbf{H} | \Phi_0\rangle + h.c.\right), \end{aligned} \quad (\text{III.5.a})$$

onde $h.c.$ indica o conjugado hermitiano da expressão precedente. Analogamente obtemos, para o kernel norma,

$$\langle\Phi' | \Phi'\rangle = \langle\Phi_0 | \Phi_0\rangle + \sum_{\alpha i \beta j} z_{\alpha i}^* z_{\beta j} \langle\Phi_0 | b_i b_\alpha^\dagger b_\beta b_j^\dagger | \Phi_0\rangle, \quad (\text{III.5.b})$$

onde levamos em conta que

$$\begin{cases} b_\alpha^\dagger | \Phi_0\rangle = 0 & \text{com } \alpha \text{ estado ocupado (buraco),} \\ b_i | \Phi_0\rangle = 0 & \text{com } i \text{ estado vazio (partícula).} \end{cases} \quad (\text{III.6})$$

Supondo, então, que o estado $|\Phi_0\rangle$ corresponda ao mínimo na energia, temos, de acordo com o princípio variacional,

$$\delta \left(\frac{\langle\Phi' | \mathbf{H} | \Phi'\rangle}{\langle\Phi' | \Phi'\rangle} \right)_{z=0} = 0. \quad (\text{III.7})$$

Levando a cabo a variação (III.7) com respeito a $z_{\alpha i}$, obtemos o seguinte resultado:

$$\frac{\partial}{\partial z_{\alpha i}} \left(\frac{\langle\Phi' | \mathbf{H} | \Phi'\rangle}{\langle\Phi' | \Phi'\rangle} \right)_{z=0} = \langle\Phi_0 | b_i b_\alpha^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0\rangle = 0, \quad (\text{III.8})$$

onde usamos o fato que no ponto $z = 0$ temos $|\Phi'\rangle = |\Phi_0\rangle$. O significado da equação (III.8) é que a Hamiltoniana não conecta os estados de partícula-buraco com o estado fundamental de Hartree-Fock.

A equação (III.8) está escrita na base de Hartree-Fock. Para obtermos a forma usual das equações de Hartree-Fock, basta escrevermos os operadores b numa base arbitrária, como a do oscilador harmônico, por exemplo.

III-4) Transformação Canônica de Bogoliubov

A idéia de partículas independentes exposta acima funciona bem no caso de núcleos com camadas fechadas, pois neste caso a separação em energia do mais baixo nível vazio (partículas) para o nível ocupado (buraco) mais alto, nível de Fermi, é grande. Nestas circunstâncias, podemos esperar que o estado fundamental nuclear exato seja bem representado pelo estado de Hartree-Fock $|\Phi_0\rangle$, isto é, que sua contaminação por componentes de uma partícula um buraco (1p-1h), duas partículas dois buracos (2p-2h), etc. seja pequena. (Na verdade não precisamos nos preocupar com os estados de (1p-1h) pois eles não se acoplam com o estado de Hartree-Fock conforme mostra (III.8)). Quando isso não ocorre, isto é, quando não há um “gap” de energia, essa contaminação tende a ser grande e a aproximação de Hartree-Fock deixa de funcionar. Podemos, no entanto, continuar usando a idéia de campo médio, só que agora de uma forma generalizada, ou seja, um campo médio para novas entidades denominadas *quasipartículas*. Para entender essa noção, notemos inicialmente que, para o caso de Hartree-Fock, podemos introduzir um operador de destruição β_m escrevendo

$$\beta_m = \begin{cases} b_m^\dagger, & \text{(quando } m = \alpha\text{);} \\ b_m, & \text{(quando } m = i\text{)}, \end{cases} \quad \text{(III.9)}$$

que, quando aplicado ao estado $|\Phi_0\rangle$, resulta

$$\beta_m |\Phi_0\rangle = 0, \quad \text{(III.10)}$$

onde usamos (III.6). Assim, podemos interpretar, em analogia a (III.2), o estado $|\Phi_0\rangle$ como um vácuo para estes novos objetos destruídos pelo operador definido em (III.9). Estes novos objetos, denominados quasipartículas, são criados pelos hermitianos conjugados de β , dados por

$$\beta_m^\dagger = \begin{cases} b_m, & \text{(quando } m = \alpha\text{);} \\ b_m^\dagger, & \text{(quando } m = i\text{)}, \end{cases} \quad \text{(III.11)}$$

Devemos notar que os operadores de quasipartículas β e β^\dagger continuam obedecendo relações de anticomutação análogas a (III.3), o que garante que as quasipartículas sejam férmions.

Em resumo, podemos interpretar o vácuo físico, $| - \rangle$, como que repleto de determinadas entidades denominadas quasipartículas. Assim, para obtermos o vácuo destas dadas quasipartículas, destruimos todas estas entidades do vácuo físico, o que exatamente fizemos em (III.1), levando-se em conta (III.9).

Pelo que vimos, no caso de Hartree-Fock as quasipartículas ou são partículas, ou são buracos. Já no caso geral, há uma superposição de níveis, principalmente na vizinhança do nível de Fermi, ou seja uma superposição de partículas e buracos. Isso sugere definir, no caso geral, os operadores de criação de quasipartículas por meio da transformação canônica de Bogoliubov,

$$\beta_m^\dagger = \sum_n (u_{mn} b_n^\dagger + v_{mn} b_n), \quad (\text{III.12})$$

cujos coeficientes devem ser tais que os β_m^\dagger e β_m continuem a satisfazer relações de anticomutação análogas a (III.3). Então o vácuo para estas quasipartículas deve ser dado por

$$| \Phi_q \rangle = \prod_m \beta_m | - \rangle, \quad (\text{III.13})$$

como é fácil verificar, pois $\beta_n | \Phi_q \rangle = 0$. Vemos, pois, que o estado (III.13) é também um estado produto, mas em um sentido generalizado, onde o número de termos no produtório não é, em geral, limitado, como em (III.1), mas varre todos os estados de quasipartículas tais que $\beta_m | - \rangle \neq 0$. Desta maneira, qualquer estado produto pode ser interpretado como o vácuo de um determinado tipo de quasipartícula.

Com estas idéias em mente, o teorema de Thouless pode ser generalizado, passando a ter o seguinte enunciado (RiS-80):

“Partindo de uma função de onda produto $| \Phi' \rangle$, a qual é vácuo dos operadores de quasipartículas β , qualquer outra função de onda produto $| \Phi \rangle$, não ortogonal a $| \Phi' \rangle$, pode ser escrita, a menos de uma normalização na forma

$$| \Phi(w) \rangle = \exp \left(\sum_{m,n} w_{mn}^* \beta_m^\dagger \beta_n \right) | \Phi' \rangle. \quad (\text{III.14})$$

O estado $| \Phi(w) \rangle$ será o vácuo de certas quasipartículas γ ligadas a β por uma transformação canônica da forma

$$\gamma_m^\dagger = \sum_n u'_{mn} \beta_n^\dagger + v'_{mn} \beta_n. \quad (\text{III.15})$$

Utilizando este teorema, poderíamos, por um método análogo ao da seção III-2, obter as conhecidas equações de Hartree-Fock-Bogoliubov.

No caso particular em que o estado de partida $|\Phi'\rangle$ é um vácuo de Hartree-Fock, os estados m e n ou são partículas, ou são buracos. Assim, usando o resultado (III.11), a equação (III.14) pode ser reescrita do seguinte modo

$$|\Phi(x, y, z)\rangle = \exp\left\{\sum_{i < j} x_{ij}^* b_i^\dagger b_j^\dagger + \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta}^* b_\beta b_\alpha + \sum_{\alpha, i} z_{\alpha i}^* b_\alpha b_i^\dagger\right\} |\Phi_0\rangle. \quad (\text{III.16})$$

CAPÍTULO IV

INTRODUÇÃO DE CORRELAÇÕES NO VÁCUO DE HARTREE-FOCK

IV-1) Introdução

Vamos supor, em todo o restante desta dissertação, que estamos na vizinhança de um núcleo de camadas fechadas e, portanto, que o vácuo de Hartree-Fock descreve bem o seu estado fundamental. Ainda assim, pode acontecer que, para certos fenômenos, seja necessário levar em conta a presença de correlações no estado fundamental. Veremos neste capítulo como isso pode ser feito pelo método de coordenadas geradoras.

Na seção IV-2, obtemos a equação integral de Hill-Wheeler para a função peso do estado fundamental correlacionado. Na seção IV-3, procedemos a uma aproximação de pequenas amplitudes que nos permite, na seção IV-4, transformar aquela equação integral numa equação diferencial. Esta tem a forma de uma equação para osciladores harmônicos acoplados na representação de Bargmann, que foi discutida no capítulo II.

IV-2) Correlações no Estado Fundamental

Se desejarmos incluir correlações no estado fundamental, devemos procurar escrevê-lo, não como um único estado de forma (III.16) (estado produto = estado sem correlações), mas sim como uma superposição de estados desse tipo. Como x, y, z são variáveis contínuas, escrevemos, então,

$$|\Psi\rangle = \int dx dy dz f(x, y, z) |\Phi(x, y, z)\rangle, \quad (\text{IV.1})$$

onde a integração se dá sobre as partes reais e imaginárias de cada x_{ij} , $y_{\alpha\beta}$ e $z_{\alpha i}$ em (III.16).

Temos, agora, em mãos um caso particular do *método de coordenadas geradoras*, isto é, precisamos determinar a função peso $f(x, y, z)$ de modo que o valor esperado do hamiltoniano nuclear no estado $|\Psi\rangle$ seja estacionário em relação a variações $\delta f(x, y, z)$.

No entanto, temos uma restrição devida ao fato de $|\Psi\rangle$ não possuir número definido de partículas. Isto porque $|\Psi\rangle$ é construído a partir de $|\Phi(x, y, z)\rangle$, que, como é evidente de (III.16), não tem número definido de partículas. Assim introduzimos a condição que o valor esperado do operador número N , no estado $|\Psi\rangle$, seja igual ao número real n de partículas

do sistema físico a ser reproduzido. Portanto, pelo princípio variacional, devemos resolver a seguinte equação :

$$\delta \frac{\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0, \quad (\text{IV.2})$$

sujeita ao vínculo

$$\frac{\langle \Psi | \mathbf{N} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = n. \quad (\text{IV.3})$$

Então, usando o conhecido método de multiplicadores de Lagrange, o problema variacional (IV.2) se torna

$$\delta \left(\frac{\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - \lambda \frac{\langle \Psi | \mathbf{N} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = 0. \quad (\text{IV.4})$$

Agora, claramente vemos que esta equação variacional é equivalente às seguintes duas equações

$$\delta \langle \Psi | \mathbf{H} - \lambda \mathbf{N} | \Psi \rangle = 0 \quad (\text{IV.5.a})$$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1. \quad (\text{IV.5.b})$$

Considerando cada termo de (IV.4) sujeitos à restrição (IV.5.b) separadamente, vemos que o termo hamiltoniano exige a energia E como multiplicador de Lagrange, já o termo do operador número exige o número de partículas n como multiplicador. Deste modo, para resolvermos o problema (IV.5.a) com o vínculo (IV.5.b), introduzimos o multiplicador de Lagrange $E - \lambda n$, com o que, o problema fica reescrito como

$$\delta (\langle \Psi | \mathbf{H} - \lambda \mathbf{N} | \Psi \rangle - (E - \lambda n) \langle \Psi | \Psi \rangle) = 0. \quad (\text{IV.6})$$

Esta equação tem a forma geral

$$\delta (\langle \Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle) = 0, \quad (\text{IV.7})$$

que é equivalente a

$$\langle \delta \Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \mathbf{A} | \delta \Psi \rangle = 0. \quad (\text{IV.8})$$

Como (IV.7) deve valer para uma variação arbitrária do estado Ψ , podemos substituir $\delta \Psi$ por $i \delta \Psi$, obtendo

$$-i (\langle \delta \Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \mathbf{A} | \delta \Psi \rangle) = 0. \quad (\text{IV.9})$$

Como (IV.7) e (IV.9) devem ser satisfeitas simultaneamente, temos

$$\langle \delta\Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle = 0, \quad (\text{IV.10})$$

que é, portanto, equivalente a (IV.7). Podemos, assim, substituir a equação (IV.6) por

$$\langle \delta\Psi | \mathbf{H} - \lambda\mathbf{N} | \Psi \rangle - (E - \lambda n)\langle \delta\Psi | \Psi \rangle = 0. \quad (\text{IV.11})$$

Substituindo $|\Psi\rangle$ dado em (IV.1), obtemos

$$\int dx dy dz dx' dy' dz' (\delta f^*(x, y, z)) \{ \langle \Phi(x, y, z) | \mathbf{H} - \lambda\mathbf{N} | \Phi(x', y', z') \rangle - (E - \lambda n)\langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle \} f(x', y', z') = 0.$$

Como $\delta f^*(x, y, z)$ é arbitrário, nós chegamos à equação integral de Hill-Wheeler,

$$\int dx' dy' dz' \{ \langle \Phi(x, y, z) | H - \lambda N | \Phi(x', y', z') \rangle - (E - \lambda n)\langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle \} f(x', y', z') = 0. \quad (\text{IV.12})$$

IV-3) Aproximação de Pequenas Amplitudes

A hipótese básica à qual estaremos restritos dentro desta dissertação é que as amplitudes x, y e z sejam pequenas quando comparadas à unidade. Ou seja, estamos interessados em pequenas vibrações ao redor de $|\Phi_0\rangle$ (vácuo de Hartree-Fock). Assim, considerando uma aproximação até a ordem quadrática em x, y e z , o estado dado em (III.16) fica escrito como

$$|\Phi(x, y, z)\rangle \simeq \left\{ 1 + \Sigma_{ij} + \Sigma_{\alpha\beta} + \Sigma_{\alpha i} + \frac{1}{2}(\Sigma_{ij} + \Sigma_{\alpha\beta} + \Sigma_{\alpha i})^2 \right\} |\Phi_0\rangle, \quad (\text{IV.13})$$

onde definimos os operadores

$$\Sigma_{ij} = \sum_{i < j} x_{ij}^* b_i^\dagger b_j^\dagger, \quad (\text{IV.14.a})$$

$$\Sigma_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta}^* b_\beta b_\alpha, \quad (\text{IV.14.b})$$

$$\Sigma_{\alpha i} = \sum_{\alpha i} z_{\alpha i}^* b_\alpha b_i^\dagger. \quad (\text{IV.14.c})$$

Desse modo, para o kernel norma, escrevemos:

$$\begin{aligned}
\langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle &\simeq \langle \Phi_0 | \left\{ 1 + \Sigma_{ij} + \Sigma_{\alpha\beta} + \Sigma_{\alpha i} + \frac{1}{2} (\Sigma_{ij} + \Sigma_{\alpha\beta} + \Sigma_{\alpha i})^2 \right\}^\dagger \times \\
&\quad \left\{ 1 + \Sigma'_{ij} + \Sigma'_{\alpha\beta} + \Sigma'_{\alpha i} + \frac{1}{2} (\Sigma'_{ij} + \Sigma'_{\alpha\beta} + \Sigma'_{\alpha i})^2 \right\} | \Phi_0 \rangle \\
&\simeq \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle + \\
&\quad + \left(\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha i}^\dagger | \Phi_0 \rangle \right) + \text{h.c.'} + \\
&\quad + \left(\frac{1}{2} \langle \Phi_0 | (\Sigma_{ij} + \Sigma_{\alpha\beta} + \Sigma_{\alpha i})^{2\dagger} | \Phi_0 \rangle + \text{h.c.'} \right) + \\
&\quad + \langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \Sigma'_{kl} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \Sigma'_{\gamma\delta} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha i}^\dagger \Sigma'_{\beta j} | \Phi_0 \rangle + \\
&\quad + \left(\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \Sigma'_{\alpha\beta} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \Sigma'_{\alpha k} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \Sigma'_{\gamma i} | \Phi_0 \rangle \right) + \text{h.c.'} ,
\end{aligned} \tag{IV.15}$$

onde h.c.' significa que devemos substituir cada termo sem *linha* pelo seu hermitiano conjugado com *linha* e vice-versa. Além disso, nos operadores Σ' , os coeficientes x, y, z passam para x', y', z' . Devemos notar, também, que os índices dos operadores Σ são índices de soma e portanto podem ser rotulados com a letra que melhor nos convier. Analisando cada termo de (IV.15), vemos, seja por conservação de número de partículas, seja devido a (III.6), que

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha i}^\dagger | \Phi_0 \rangle = 0,$$

$$\langle \Phi_0 | (\Sigma_{ij} + \Sigma_{\alpha\beta} + \Sigma_{\alpha i})^{2\dagger} | \Phi_0 \rangle = 0,$$

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \Sigma'_{\alpha\beta} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \Sigma'_{\alpha k} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \Sigma'_{\gamma i} | \Phi_0 \rangle = 0.$$

Analisando um dos termos restantes, temos

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \Sigma'_{kl} | \Phi_0 \rangle = \sum_{i < j} \sum_{k < l} \underbrace{\langle \Phi_0 | b_j b_i b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle}_{\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{jk} \delta_{il}} x_{ij} x'_{kl}. \tag{IV.16}$$

Mas, devido às restrições impostas aos índices ($i < j; k < l$), só um dos termos em delta sobrevive. Assim,

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \Sigma'_{kl} | \Phi_0 \rangle = \sum_{i < j} x_{ij} x'_{ij}. \tag{IV.17.a}$$

De modo análogo, encontramos

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \Sigma'_{\gamma\delta} | \Phi_0 \rangle = \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} y'_{\alpha\beta}^*, \quad (\text{IV.17.b})$$

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha i}^\dagger \Sigma'_{\beta j} | \Phi_0 \rangle = \sum_{\alpha i} z_{\alpha i} z'_{\alpha i}^*. \quad (\text{IV.17.c})$$

Portanto, substituindo todos estes resultados em (IV.15), obtemos

$$\langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle \simeq 1 + \sum_{i < j} x_{ij} x'_{ij} + \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} y'_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha, i} z_{\alpha i} z'_{\alpha i}, \quad (\text{IV.18})$$

onde estamos considerando o estado $|\Phi_0\rangle$ normalizado.

De maneira análoga, a aproximação quadrática para o kernel Hamiltoniano fica escrita como

$$\begin{aligned} \langle \Phi(x, y, z) | \mathbf{H} | \Phi(x', y', z') \rangle &\simeq \\ &\simeq \langle \Phi_0 | \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle + \\ &+ \left((\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha i}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle) + \text{h.c.}' \right) + \\ &+ \left(\frac{1}{2} \langle \Phi_0 | (\Sigma_{ij} + \Sigma_{\alpha\beta} + \Sigma_{\alpha i})^2 \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle + \text{h.c.}' \right) + \\ &+ \langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{kl} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\gamma\delta} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha i}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\beta j} | \Phi_0 \rangle + \\ &+ \left((\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\alpha\beta} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\alpha k} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\gamma i} | \Phi_0 \rangle) + \text{h.c.}' \right). \end{aligned} \quad (\text{IV.19})$$

Lembremos que a Hamiltoniana, em linguagem de segunda quantização, pode ser escrita, na base de Hartree-Fock, como

$$\mathbf{H} = E_0^{(HF)} + \sum_m \varepsilon_m : b_m^\dagger b_m : + \frac{1}{4} \sum_{mnm'n'} V_{mnm'n'} : b_m^\dagger b_n^\dagger b_n b_m : , \quad (\text{IV.20.a})$$

onde

$$E_0^{(HF)} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} - \sum_{\alpha < \beta} V_{\alpha\beta\alpha\beta}, \quad (\text{IV.20.b})$$

é a energia de Hartree-Fock, os ε_m são as energias de partícula única, $V_{mnm'n'}$ é o elemento de matriz antissimetrizado do potencial nuclear de dois corpos ($V_{mnm'n'} = \langle mn | V | m'n' \rangle - \langle mn | V | n'm' \rangle$) e os dois pontos indicam o produto normal dos operadores em relação a $|\Phi_0\rangle$. Por exemplo,

$$: b_i^\dagger b_j := b_i^\dagger b_j,$$

$$: b_\alpha^\dagger b_\beta := -b_\beta b_\alpha^\dagger,$$

$$: b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger b_\gamma b_i := b_\gamma b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger b_i,$$

ou seja, os operadores são ordenados de modo que todos os operadores de aniquilação (de quasipartículas) fiquem à direita de todos os operadores de criação (de quasipartículas) e o termo adquire um sinal + ou - conforme a permutação necessária para isso seja par ou ímpar. Decorre imediatamente dessa definição que o valor de espera no vácuo de Hartree-Fock de qualquer produto normal de operadores se anula. Observemos que, como a hamiltoniana \mathbf{H} conserva o número de partículas, vários termos da expansão (IV.19) se anulam. Com efeito,

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle = 0,$$

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \Sigma_{kl}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \Sigma_{\gamma\delta}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle = 0,$$

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \Sigma_{\alpha k}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \Sigma_{\gamma i}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle = 0,$$

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\alpha\beta} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\alpha k} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\gamma i} | \Phi_0 \rangle = 0.$$

Com estes resultados, a expansão (IV.19) fica escrita como

$$\begin{aligned} \langle \Phi(x, y, z) | \mathbf{H} | \Phi(x', y', z') \rangle &\simeq E_0^{(HF)} + \\ &+ \langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{kl} | \Phi_0 \rangle + \\ &+ \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\gamma\delta} | \Phi_0 \rangle + \\ &+ \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha i}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\beta j} | \Phi_0 \rangle + \\ &+ \left((\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle + \frac{1}{2} \langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha i}^\dagger \Sigma_{\beta j}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle) + \text{h.c.}' \right), \end{aligned} \tag{IV.21}$$

onde usamos a condição de Hartree-Fock, dada em (III.8), que implica em

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha i}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle = 0.$$

Para calcularmos os elementos de matriz acima vamos usar o teorema de Wick (RiS-80), o qual estabelece que, para qualquer produto de operadores de campo de férmions vale a igualdade

$$\begin{aligned} ABCD\dots EF &= : ABCD\dots EF : + \\ &+ : \langle AB \rangle CD\dots EF : - : \langle AC \rangle BD\dots EF : + \dots \\ &+ : \langle AB \rangle \langle CD \rangle \dots EF : - : \langle AC \rangle \langle BD \rangle \dots EF : + \dots \\ &+ : \langle AB \rangle \langle CD \rangle \dots \langle EF \rangle : - : \langle AC \rangle \langle BD \rangle \dots \langle EF \rangle + \dots, \end{aligned} \quad (\text{IV.22.a})$$

onde $\langle AB \rangle$ indica a contração dos operadores A e B definida por

$$\langle AB \rangle = \langle \Phi_0 | AB | \Phi_0 \rangle. \quad (\text{IV.22.b})$$

No presente caso as únicas contrações não nulas são do tipo

$$\langle b_\alpha^\dagger b_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{IV.22.c})$$

$$\langle b_i b_j^\dagger \rangle = \delta_{ij}.$$

É um corolário imediato do teorema de Wick que os únicos termos que sobrevivem no cálculo do valor de espera no vácuo de Hartree-Fock de um produto de operadores são aqueles em que todos os operadores estão contraídos de todas as possíveis maneiras.

Analisemos o segundo termo não nulo de (IV.21),

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \mathbf{H} \Sigma_{kl}' | \Phi_0 \rangle &= \sum_{i < j} E_0^{(HF)} x_{ij} x_{ij}^* + \sum_m \sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} \epsilon_m \langle \Phi_0 | b_j b_i : b_m^\dagger b_m : b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle x_{kl}^* \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{mnm'n'} \sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} V_{mnm'n'} \langle \Phi_0 | b_j b_i : b_m^\dagger b_n^\dagger b_{n'} b_{m'} : b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle x_{kl}^*. \end{aligned} \quad (\text{IV.23})$$

Usando o teorema de Wick para escrever : $b_m^\dagger b_m := b_m^\dagger b_m - \langle b_m^\dagger b_m \rangle$ no elemento de matriz do termo cinético, obtemos

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | b_j b_i : b_m^\dagger b_m : b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle = & \langle \Phi_0 | b_j b_i b_m^\dagger b_m b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle + \\ & - \langle \Phi_0 | b_j b_i \langle b_m^\dagger b_m \rangle b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{IV.24.a})$$

Com o corolário acima em mente, observamos que o segundo termo do segundo membro de (IV.24.a), a menos do sinal, se torna idêntico a uma parte do primeiro termo na qual é feita a contração $\langle b_m^\dagger b_m \rangle$, deixando-se os demais operadores contraídos de todas as maneiras possíveis. Assim, o que resta do primeiro termo são as contribuições onde não estão contraídos entre si os operadores que estão dentro do produto normal, a saber, b_m^\dagger e b_m . Deste modo obtemos

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | b_j b_i : b_m^\dagger b_m : b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle = & \langle b_i b_m^\dagger \rangle \langle b_m b_k^\dagger \rangle \langle b_j b_l^\dagger \rangle + \langle b_i b_k^\dagger \rangle \langle b_j b_m^\dagger \rangle \langle b_m b_l^\dagger \rangle + \\ & - \langle b_i b_m^\dagger \rangle \langle b_m b_l^\dagger \rangle \langle b_j b_k^\dagger \rangle - \langle b_m b_k^\dagger \rangle \langle b_j b_m^\dagger \rangle \langle b_i b_l^\dagger \rangle, \end{aligned} \quad (\text{IV.24.b})$$

ou ainda, levando em conta (IV.22.c),

$$\langle \Phi_0 | b_j b_i : b_m^\dagger b_m : b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle = (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk}) (\delta_{im} + \delta_{jm}). \quad (\text{IV.24.c})$$

Portanto o termo cinético fica escrito como

$$\sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} (\varepsilon_i + \varepsilon_j) \delta_{ik} \delta_{jl} x_{kl}^*, \quad (\text{IV.25})$$

onde novamente levamos em conta a restrição nos índices. Agora, voltando a (IV.23) e usando novamente o teorema de Wick no termo de potencial, obtemos

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | b_j b_i : b_m^\dagger b_n^\dagger b_n b_{m'} : b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle = & \langle \Phi_0 | b_j b_i b_m^\dagger b_n^\dagger b_n b_{m'} b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle + \\ & - \left[\langle \Phi_0 | b_j b_i : b_m^\dagger b_{m'} : b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle \langle b_n^\dagger b_n \rangle + \right. \\ & + \langle \Phi_0 | b_j b_i : b_n^\dagger b_{n'} : b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle \langle b_m^\dagger b_{m'} \rangle + \\ & - \langle \Phi_0 | b_j b_i : b_m^\dagger b_{n'} : b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle \langle b_n^\dagger b_{m'} \rangle + \\ & - \langle \Phi_0 | b_j b_i : b_n^\dagger b_{m'} : b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle \langle b_m^\dagger b_{n'} \rangle + \\ & \left. + \langle \Phi_0 | b_j b_i b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle (\langle b_m^\dagger b_{m'} \rangle \langle b_n^\dagger b_{n'} \rangle - \langle b_n^\dagger b_{m'} \rangle \langle b_m^\dagger b_{n'} \rangle) \right]. \end{aligned}$$

Fazendo uso novamente do teorema de Wick, com um raciocínio semelhante ao utilizando para o termo cinético, vemos que os vários termos entre colchetes cancelam todas as possíveis contribuições nas quais estão contraídos entre si operadores internos ao produto normal, restando somente as possibilidades de contração de operadores internos com operadores externos ao produto normal. É claro, portanto, que temos somente quatro possibilidades de contração. Deste modo, obtemos

$$\langle \Phi_0 | b_j b_i : b_m^\dagger b_n^\dagger b_{n'} b_{m'} : b_k^\dagger b_l^\dagger | \Phi_0 \rangle = (\delta_{mi} \delta_{nj} - \delta_{mj} \delta_{ni}) (\delta_{m'k} \delta_{n'l} - \delta_{m'l} \delta_{n'k}). \quad (\text{IV.26})$$

Assim o termo de potencial em (IV.23) fica escrito como

$$\frac{1}{4} \sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} (V_{ijkl} - V_{ijlk} - V_{jikl} + V_{jilk}) x_{kl}^* = \sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} V_{ijkl} x_{kl}^*, \quad (\text{IV.27})$$

onde utilizamos a antissimetrização de V . Com os resultados (IV.25) e (IV.27) substituídos em (IV.23), obtemos finalmente

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{kl} | \Phi_0 \rangle = E_0^{(HF)} \sum_{i < j} x_{ij} x_{ij}^* + \sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} \{ (\varepsilon_i + \varepsilon_j) \delta_{ik} \delta_{jl} + V_{ijkl} \} x_{kl}^*. \quad (\text{IV.28.a})$$

De modo completamente análogo, obtemos para os outros termos em (IV.21),

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\gamma\delta} | \Phi_0 \rangle = E_0^{(HF)} \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} y_{\alpha\beta}^* + \sum_{\alpha < \beta} \sum_{\gamma < \delta} y_{\alpha\beta} \{ -(\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + V_{\alpha\beta\gamma\delta}^* \} y_{\gamma\delta}^*; \quad (\text{IV.28.b})$$

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha i}^\dagger \mathbf{H} \Sigma'_{\beta j} | \Phi_0 \rangle = E_0^{(HF)} \sum_{\alpha i} z_{\alpha i} z_{\beta j}^* + \sum_{\alpha i} \sum_{\beta j} z_{\alpha i} \{ (\varepsilon_i - \varepsilon_\alpha) \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} + V_{i\beta\alpha j} \} z_{\beta j}^*; \quad (\text{IV.28.c})$$

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{ij}^\dagger \Sigma_{\alpha\beta}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle = \sum_{i < j} \sum_{\alpha\beta} x_{ij} V_{ij\alpha\beta} y_{\alpha\beta}; \quad (\text{IV.28.d})$$

$$\langle \Phi_0 | \Sigma_{\alpha i}^\dagger \Sigma_{\beta j}^\dagger \mathbf{H} | \Phi_0 \rangle = \sum_{\alpha i} \sum_{\beta j} z_{\alpha i} V_{\alpha\beta ij}^* z_{\beta j}. \quad (\text{IV.28.e})$$

Substituindo os resultados (IV.28) na expressão (IV.21), obtemos

$$\langle \Phi(x, y, z) | \mathbf{H} | \Phi(x', y', z') \rangle \simeq E_0^{(HF)} \left(1 + \sum_{i < j} x_{ij} x_{ij}^* + \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} y_{\alpha\beta}^* + \sum_{\alpha, i} z_{\alpha i} z_{\alpha i}^* \right) +$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} A_{ij,kl} x'_{kl} + \\
& + \sum_{\alpha < \beta} \sum_{\gamma < \delta} y_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta,\gamma\delta} y'_{\gamma\delta} + \tag{IV.29} \\
& + \sum_{i < j} \sum_{\alpha < \beta} [x'_{ij} B_{ij,\alpha\beta} y'_{\alpha\beta} + x_{ij} B_{ij,\alpha\beta} y_{\alpha\beta}] + \\
& + \sum_{\alpha i} \sum_{\beta j} [z_{\alpha i} D_{\alpha i,\beta j} z'_{\beta j} + \frac{1}{2} z'_{\alpha i} E_{\alpha i,\beta j} z'_{\beta j} + \frac{1}{2} z_{\alpha i} E_{\alpha i,\beta j} z_{\beta j}].
\end{aligned}$$

onde fizemos as seguintes definições:

$$\begin{aligned}
A_{ij,kl} &= (\varepsilon_i + \varepsilon_j) \delta_{ik} \delta_{jl} + V_{ijkl}; \\
B_{ij,\alpha\beta} &= V_{ij\alpha\beta}; \\
C_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= -(\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + V_{\alpha\beta\gamma\delta}; \tag{IV.30} \\
D_{\alpha i,\beta j} &= (\varepsilon_i - \varepsilon_\alpha) \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} + V_{i\beta\alpha j}; \\
E_{\alpha i,\beta j} &= V_{ij\alpha\beta}.
\end{aligned}$$

Com um procedimento análogo ao feito para a parte cinética do Hamiltoniano, obtemos

$$\begin{aligned}
\langle \Phi(x, y, z) | \mathbf{N} | \Phi(x', y', z') \rangle &\simeq n_0 \left(1 + \sum_{i < j} x_{ij} x'_{ij} + \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} y'_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha, i} z_{\alpha i} z'_{\alpha i} \right) \\
& + \sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} (2\delta_{ik} \delta_{jl}) x'_{kl} - \sum_{\alpha < \beta} \sum_{\gamma < \delta} y_{\alpha\beta} (2\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}) y'_{\gamma\delta}, \tag{IV.31}
\end{aligned}$$

onde $n_0 = \langle \Phi_0 | \mathbf{N} | \Phi_0 \rangle$ com $\mathbf{N} = \sum_m b_m^\dagger b_m$. Tendo os resultados (IV.18), (IV.29) e (IV.31) em mãos e levando em conta que estamos considerando os termos válidos até a ordem quadrática nos coeficientes x, y e z encontramos

$$\begin{aligned}
\frac{\langle \Phi(x, y, z) | (\mathbf{H} - \lambda \mathbf{N}) | \Phi(x', y', z') \rangle}{\langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle} &\simeq E_0^{(HF)} - \lambda n_0 + \\
& + \sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} (A_{ij,kl} - 2\lambda \delta_{i,k} \delta_{j,l}) x'_{kl} + \\
& + \sum_{\alpha < \beta} \sum_{\gamma < \delta} y_{\alpha\beta} (C_{\alpha\beta,\gamma\delta} + 2\lambda \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}) y'_{\gamma\delta} + \tag{IV.32.a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i < j} \sum_{\alpha < \beta} [x'_{ij} B_{ij, \alpha \beta}^* y'_{\alpha \beta} + x_{ij} B_{ij, \alpha \beta} y_{\alpha \beta}] + \\
& + \sum_{\alpha i} \sum_{\beta j} [z_{\alpha i} D_{\alpha i, \beta j} z'_{\beta j} + \frac{1}{2} z'_{\alpha i} E_{\alpha i, \beta j}^* z'_{\beta j} + \frac{1}{2} z_{\alpha i} E_{\alpha i, \beta j} z_{\beta j}],
\end{aligned}$$

onde utilizamos a aproximação $\frac{1}{(1+x)} \simeq (1-x)$ para x pequeno.

Voltando, agora, à expressão (IV.18), vemos que ela pode ser reescrita como

$$\langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle \simeq \exp \left\{ \sum_{i < j} x_{ij} x'_{ij} + \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha \beta} y'_{\alpha \beta} + \sum_{\alpha, i} z_{\alpha i} z'_{\alpha i} \right\}, \quad (\text{IV.32.b})$$

onde consideramos uma expansão até a ordem quadrática nos coeficientes x, y e z . Uma justificativa física para (IV.32.b), seria a aproximação do *quasi-boson*, onde os produtos dos operadores $b_i^\dagger b_j^\dagger, b_\beta b_\alpha$ e $b_\alpha b_i^\dagger$ em (IV.16) são tratados como operadores de criação de bósons. Feito isso, a equação (IV.32.b) segue naturalmente. Na verdade a motivação que nos levou a escrever a aproximação (IV.32.b) é que, como veremos a seguir, feitas as substituições de (IV.32.a) e (IV.32.b) em (IV.12), obtemos uma equação para osciladores harmônicos acoplados. Assim forçamos o aparecimento de uma forma gaussiana para trabalharmos no espaço de Bargmann, que é, como vimos no capítulo II, bem adaptado ao problema do oscilador.

Substituindo os resultados (IV.32.a) e (IV.32.b) em (IV.12), obtemos para a equação de Hill-Wheeler na aproximação quadrática (pequenas amplitudes):

$$\begin{aligned}
& \int dx' dy' dz' \left\{ \sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} (A_{ij, kl} - 2\lambda \delta_{ik} \delta_{jl}) x'_{kl} + \right. \\
& + \sum_{\alpha < \beta} \sum_{\gamma < \delta} y_{\alpha \beta} (C_{\alpha \beta, \gamma \delta} + 2\lambda \delta_{\alpha \gamma} \delta_{\beta \delta}) y'_{\gamma \delta} + \\
& + \sum_{i < j} \sum_{\alpha < \beta} [x'_{ij} B_{ij, \alpha \beta}^* y'_{\alpha \beta} + x_{ij} B_{ij, \alpha \beta} y_{\alpha \beta}] + \\
& + \sum_{\alpha i} \sum_{\beta j} [z_{\alpha i} D_{\alpha i, \beta j} z'_{\beta j} + \frac{1}{2} z'_{\alpha i} E_{\alpha i, \beta j}^* z'_{\beta j} + \frac{1}{2} z_{\alpha i} E_{\alpha i, \beta j} z_{\beta j}] + \\
& \left. - (E - E_0^{(HF)}) + \lambda(n - n_0) \right\} \\
& \times \exp \left\{ \sum_{i < j} x_{ij} x'_{ij} + \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha \beta} y'_{\alpha \beta} + \sum_{\alpha, i} z_{\alpha i} z'_{\alpha i} \right\} f(x', y', z') = 0.
\end{aligned} \quad (\text{IV.33})$$

IV-4) Transformação da Equação Hill-Wheeler numa Equação Diferencial

Para resolvermos a equação de Hill-Wheeler (IV.33), primeiramente definimos a função transformada

$$G(x, y, z) = \int dx' dy' dz' \exp \left\{ \sum_{i < j} x_{ij} x'_{ij} + \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} y'_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha, i} z_{\alpha i} z'_{\alpha i} \right\} f(x', y', z'). \quad (\text{IV.34})$$

$G(x, y, z)$ é uma função analítica de x, y e z sempre que a integral convergir. Agora, já que

$$\frac{\partial G(x, y, z)}{\partial x_{kl}} = \int dx' dy' dz' x'_{kl} \exp \left\{ \sum_{i < j} x_{ij} x'_{ij} + \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} y'_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha, i} z_{\alpha i} z'_{\alpha i} \right\} f(x', y', z'),$$

$$\frac{\partial G(x, y, z)}{\partial y_{\gamma\delta}} = \int dx' dy' dz' y'_{\gamma\delta} \exp \left\{ \sum_{i < j} x_{ij} x'_{ij} + \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} y'_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha, i} z_{\alpha i} z'_{\alpha i} \right\} f(x', y', z'),$$

$$\frac{\partial G(x, y, z)}{\partial z_{\beta j}} = \int dx' dy' dz' z'_{\beta j} \exp \left\{ \sum_{i < j} x_{ij} x'_{ij} + \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} y'_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha, i} z_{\alpha i} z'_{\alpha i} \right\} f(x', y', z'),$$

a equação (IV.33) pode ser transformada na seguinte equação diferencial parcial para G :

$$\begin{aligned} & \left\{ \sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} (A_{ij,kl} - 2\lambda \delta_{i,k} \delta_{j,l}) \frac{\partial}{\partial x_{kl}} + \right. \\ & + \sum_{\alpha < \beta} \sum_{\gamma < \delta} y_{\alpha\beta} (C_{\alpha\beta,\gamma\delta} + 2\lambda \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}) \frac{\partial}{\partial y_{\gamma\delta}} + \\ & + \sum_{i < j} \sum_{\alpha < \beta} \left[\frac{\partial}{\partial x_{ij}} B_{ij,\alpha\beta}^* \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}} + x_{ij} B_{ij,\alpha\beta} y_{\alpha\beta} \right] + \\ & + \sum_{\alpha i} \sum_{\beta j} \left[z_{\alpha i} D_{\alpha i, \beta j} \frac{\partial}{\partial z_{\beta j}} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z_{\alpha i}} E_{\alpha i, \beta j}^* \frac{\partial}{\partial z_{\beta j}} + \frac{1}{2} z_{\alpha i} E_{\alpha i, \beta j} z_{\beta j} \right] + \\ & \left. - (E - E_0^{(HF)}) + \lambda(n - n_0) \right\} G(x, y, z) = 0. \end{aligned} \quad (\text{IV.35})$$

Para entender melhor o significado da transformada (IV.34), calculemos o produto escalar de dois estados escritos na forma (IV.1), o qual é dado por

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int dx dy dz \int dx' dy' dz' f_1^*(x, y, z) f_2(x', y', z') \langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle,$$

ou, usando (IV.32.b), isto é, na aproximação quadrática,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle &= \int dx dy dz \int dx' dy' dz' f_1^*(x, y, z) f_2(x', y', z') \\ &\times \exp \left\{ \sum_{i < j} x_{ij} x'_{ij} + \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} y'_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha, i} z_{\alpha i} z'_{\alpha i} \right\}. \end{aligned}$$

Então, tendo em vista (IV.34), obtemos

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int dx dy dz f_1^*(x, y, z) G_2(x, y, z). \quad (\text{IV.36})$$

Usando, agora, (II.29) generalizada para M variáveis complexas, onde M é o número total de configurações $ij, \alpha\beta$ e αi , temos

$$G_2(x, y, z) = \frac{1}{\pi^M} \int dx' dy' dz' \exp \left\{ \sum_{i < j} \left(x_{ij} x'_{ij}{}^* - |x'_{ij}|^2 \right) + \sum_{\alpha < \beta} \left(y_{\alpha\beta} y'_{\alpha\beta}{}^* - |y'_{\alpha\beta}|^2 \right) + \sum_{\alpha, i} \left(z_{\alpha i} z'_{\alpha i}{}^* - |z'_{\alpha i}|^2 \right) \right\} G_2(x', y', z'). \quad (\text{IV.37})$$

Introduzindo-se esta expressão em (IV.36) e usando-se o complexo conjugado de (IV.34), obtemos

$$\begin{aligned} \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle &= \frac{1}{\pi^M} \int dx' dy' dz' \exp \left\{ - \sum_{i < j} |x'_{ij}|^2 - \sum_{\alpha < \beta} |y'_{\alpha\beta}|^2 - \sum_{\alpha, i} |z'_{\alpha i}|^2 \right\} \\ &\quad \times G_1^*(x', y', z') G_2(x', y', z') \\ &= (G_1, G_2)_B, \end{aligned} \quad (\text{IV.38})$$

conforme (II.22) e (II.26). Isso mostra que a transformada (IV.34) nos leva para o espaço de Bargmann.

Comparando (IV.35.a) com a expressão (II.5), devidamente estendida para várias variáveis complexas, vemos que a equação (IV.35.a) é uma equação de Schrödinger para osciladores harmônicos acoplados na representação de Bargmann. Como sabemos do capítulo II, nesta representação os operadores x, y, z e $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$ se comportam como operadores de criação e aniquilação de bósons, respectivamente (ver eq. (II.20)).

Uma vez achada uma solução $G(x, y, z)$ de (IV.35), a função peso $f(x, y, z)$ não fica univocamente determinada por (IV.34). Isto é, a função peso $f(x, y, z)$, não pode ser univocamente determinada para um dado $|\Psi\rangle$ em (IV.1), o que é uma consequência do fato de $|\Phi(x, y, z)\rangle$ formar um conjunto supercompleto. No entanto, podemos tirar proveito desta indeterminação para escolher $f(x, y, z)$ de um modo conveniente. Usando a identidade (IV.37),

podemos “inverter” (IV.34), obtendo

$$f(x, y, z) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^M \exp\left\{-\sum_{i<j} |x_{ij}|^2 - \sum_{\alpha<\beta} |y_{\alpha\beta}|^2 - \sum_{\alpha i} |z_{\alpha i}|^2\right\} G(x, y, z). \quad (\text{IV.39})$$

Usando esta expressão e (III.16) em (IV.1), obtemos

$$\begin{aligned} |\Psi[G]\rangle = \left(\frac{1}{\pi}\right)^M \int dx' dy' dz' \exp\left\{\sum_{i<j} x'_{ij}{}^* b_i^\dagger b_j^\dagger + \sum_{\alpha<\beta} y'_{\alpha\beta}{}^* b_\beta b_\alpha + \sum_{\alpha, i} z'_{\alpha i}{}^* b_\alpha b_i^\dagger + \right. \\ \left. - \sum_{i<j} |x'_{ij}|^2 - \sum_{\alpha<\beta} |y'_{\alpha\beta}|^2 - \sum_{\alpha i} |z'_{\alpha i}|^2\right\} G(x', y', z') |\Phi_0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{IV.40})$$

Comparado esta expressão com a identidade (IV.37), vemos que

$$|\Psi[G(x, y, z)]\rangle = G(b_i^\dagger b_j^\dagger, b_\beta b_\alpha, b_\alpha b_i^\dagger) |\Phi_0\rangle. \quad (\text{IV.41})$$

O significado das equações (IV.38), (IV.40) e (IV.41) é que existe um homomorfismo entre o espaço de Bargmann das funções analíticas de M variáveis $G(x, y, z)$ e o subespaço varrido pelos estados da forma (IV.1). Notemos, no entanto, que para estabelecer esse homomorfismo foi essencial adotarmos a aproximação de pequenas amplitudes (ou aproximação quadrática) da seção IV-3.

Para finalizarmos este capítulo vamos obter duas importantes propriedades desse homomorfismo. Primeiramente, decorre imediatamente de (IV.41) que

$$|\Psi[x_{ij}G]\rangle = b_i^\dagger b_j^\dagger |\Psi[G]\rangle, \quad (\text{IV.42.a})$$

$$|\Psi[y_{\alpha\beta}G]\rangle = b_\beta b_\alpha |\Psi[G]\rangle, \quad (\text{IV.42.b})$$

$$|\Psi[z_{\alpha i}G]\rangle = b_\alpha b_i^\dagger |\Psi[G]\rangle. \quad (\text{IV.42.c})$$

Por outro lado, temos, de (IV.38), (II.23) e (IV.41), que

$$\begin{aligned} \langle\Psi[G_1] | \Psi\left[\frac{\partial}{\partial x_{ij}} G_2\right]\rangle &= (G_1, \frac{\partial}{\partial x_{ij}} G_2)_B = (x_{ij} G_1, G_2)_B \\ &= \langle\Psi[x_{ij}G_1] | \Psi[G_2]\rangle \\ &= \langle\Psi[G_1] | b_j b_i | \Psi[G_2]\rangle. \end{aligned} \quad (\text{IV.43})$$

Como essa relação vale para quaisquer funções analíticas G_1 e G_2 , concluímos que, no subespaço varrido pelos estados da forma (IV.1) e dentro da aproximação de pequenas amplitudes, temos

$$| \Psi[\frac{\partial}{\partial x_{ij}} G] \rangle = b_j b_i | \Psi[G] \rangle. \quad (\text{IV.44.a})$$

Por um raciocínio completamente análogo, obtemos, também,

$$| \Psi[\frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}} G] \rangle = b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger | \Psi[G] \rangle, \quad (\text{IV.44.b})$$

$$| \Psi[\frac{\partial}{\partial z_{\alpha i}} G] \rangle = b_i b_\alpha^\dagger | \Psi[G] \rangle. \quad (\text{IV.44.c})$$

CAPÍTULO V

OBTENÇÃO DAS EQUAÇÕES da RPA

V-1) Introdução

Passaremos neste capítulo à obtenção das equações da RPA. Primeiramente devemos diagonalizar a equação (IV.35), ou melhor, encontrar uma base onde o primeiro membro dessa equação assuma uma forma diagonal. As equações da RPA surgem, por esse processo, a partir das condições que os coeficientes da transformação de mudança de base devem obedecer.

A equação (IV.35) contém três tipos de modos vibracionais, a saber, partícula-partícula (pp), buraco-buraco (hh) e partícula-buraco (ph), sendo que este último tipo se desacopla dos dois primeiros. Assim é possível tratar os modos ph separadamente dos modos pp e hh, o que é feito nas seções seguintes. Na seção V-2 é tratado o modo ph. Os modos restantes, pp e hh, são tratados na seção V-3. Na seção V-4, é feita uma análise da energia e do número de transferência. Na seção V-5 é feito o estudo do estado fundamental. Finalmente na seção V-6, talvez a parte mais relevante desta dissertação, é feita a análise dos estados excitados.

V-2) Diagonalização do Termo de Partícula-Buraco

Como dissemos na introdução, na equação (IV.35) notamos que os osciladores associados a z e $\frac{\partial}{\partial z}$ se desacoplam do restante. Assim, o operador

$$\mathcal{D} = \sum_{\alpha i} \sum_{\beta j} [z_{\alpha i} D_{\alpha i, \beta j} \frac{\partial}{\partial z_{\beta j}} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z_{\alpha i}} E_{\alpha i, \beta j}^* \frac{\partial}{\partial z_{\beta j}} + \frac{1}{2} z_{\alpha i} E_{\alpha i, \beta j} z_{\beta j}] \quad (\text{V.1})$$

pode ser tratado separadamente. Começemos lembrando que, conforme vimos no capítulo II, na representação de Bargmann, isto é, com o produto escalar definido como na equação (IV.38), os operadores z e $\frac{\partial}{\partial z}$ são conjugados hermitianos. Como, além disso, eles satisfazem as relações de comutação

$$\left[\frac{\partial}{\partial z_{\alpha i}}, z_{\beta j} \right] = \delta_{(\alpha i), (\beta j)}, \quad (\text{V.2.a})$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial z_{\alpha i}}, \frac{\partial}{\partial z_{\beta j}} \right] = [z_{\alpha i}, z_{\beta j}] = 0, \quad (\text{V.2.b})$$

eles estão associados à criação e destruição de bósons, respectivamente. Além disso, de (IV.30), é fácil ver que

$$\begin{cases} D_{\alpha i, \beta j} = D_{\beta j, \alpha i}^* \\ E_{\alpha i, \beta j} = E_{\beta j, \alpha i} \end{cases} \quad (\text{V.3})$$

Diagonalizar o operador \mathcal{D} em (V.1), consiste em descobrir novos operadores¹

$$\zeta_N^\dagger = \sum_{\alpha i} \left[R_{\alpha i}^N z_{\alpha i} - S_{\alpha i}^N \frac{\partial}{\partial z_{\alpha i}} \right], \quad (\text{V.4})$$

em termos dos quais ele possa ser escrito como

$$\mathcal{D} = \sum_N \Omega_N \zeta_N^\dagger \zeta_N + \text{cte.} \quad (\text{V.5})$$

Além disso, queremos que os novos operadores continuem sendo bósons, isto é,

$$[\zeta_N, \zeta_{N'}] = [\zeta_N^\dagger, \zeta_{N'}^\dagger] = 0, \quad (\text{V.6.a})$$

$$[\zeta_N, \zeta_{N'}^\dagger] = \delta_{NN'}, \quad (\text{V.6.b})$$

sendo necessário para isso que os coeficientes em (V.4) satisfaçam as relações de ortogonalidade

$$\sum_{\alpha i} \left(R_{\alpha i}^N S_{\alpha i}^{N'} - S_{\alpha i}^N R_{\alpha i}^{N'} \right) = 0, \quad (\text{V.7.a})$$

$$\sum_{\alpha i} \left(R_{\alpha i}^{N*} R_{\alpha i}^{N'} - S_{\alpha i}^{N*} S_{\alpha i}^{N'} \right) = \delta_{NN'}, \quad (\text{V.7.b})$$

como é fácil mostrar usando (V.2).

Para obtermos as equações que R e S devem satisfazer para termos (V.5), comecemos por calcular

$$\begin{aligned} \sum_N \Omega_N \zeta_N^\dagger \zeta_N &= \sum_N \Omega_N \sum_{\alpha i} \left[R_{\alpha i}^N z_{\alpha i} - S_{\alpha i}^N \frac{\partial}{\partial z_{\alpha i}} \right] \sum_{\beta j} \left[R_{\beta j}^{N*} \frac{\partial}{\partial z_{\beta j}} - S_{\beta j}^{N*} z_{\beta j} \right] = \\ &= \sum_N \Omega_N \sum_{\alpha i, \beta j} \left\{ R_{\alpha i}^N R_{\beta j}^{N*} z_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial z_{\beta j}} + S_{\alpha i}^N S_{\beta j}^{N*} \frac{\partial}{\partial z_{\alpha i}} z_{\beta j} + \right. \\ &\quad \left. - R_{\alpha i}^N S_{\beta j}^{N*} z_{\alpha i} z_{\beta j} - S_{\alpha i}^N R_{\beta j}^{N*} \frac{\partial}{\partial z_{\alpha i}} \frac{\partial}{\partial z_{\beta j}} \right\}. \end{aligned}$$

¹ O sinal menos em (V.4) é introduzido por conveniência, isto é, para que a equação (V.12) tome a forma padrão.

Equivalentemente, podemos usar (V.2.a) para escrever

$$\begin{aligned}
\sum_N \Omega_N \zeta_N^\dagger \zeta_N = & \sum_{\alpha i, \beta j} \left\{ \sum_N \Omega_N \left(R_{\alpha i}^N R_{\beta j}^{N*} + S_{\alpha i}^{N*} S_{\beta j}^N \right) z_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial z_{\beta j}} + \right. \\
& - \frac{1}{2} \sum_N \Omega_N \left(R_{\alpha i}^N S_{\beta j}^{N*} + S_{\alpha i}^{N*} R_{\beta j}^N \right) z_{\alpha i} z_{\beta j} + \\
& \left. - \frac{1}{2} \sum_N \Omega_N \left(S_{\alpha i}^N R_{\beta j}^{N*} + R_{\alpha i}^{N*} S_{\beta j}^N \right) \frac{\partial}{\partial z_{\alpha i}} \frac{\partial}{\partial z_{\beta j}} \right\} + \\
& + \sum_N \Omega_N \sum_{\alpha i} S_{\alpha i}^{N*} S_{\alpha i}^N. \tag{V.8}
\end{aligned}$$

Comparando (V.8) com (V.1), concluímos que, para valer (V.5), deve-se ter

$$D_{\alpha i, \beta j} = \sum_N \Omega_N \left(R_{\alpha i}^N R_{\beta j}^{N*} + S_{\alpha i}^{N*} S_{\beta j}^N \right), \tag{V.9.a}$$

$$E_{\alpha i, \beta j} = - \sum_N \Omega_N \left(R_{\alpha i}^N S_{\beta j}^{N*} + S_{\alpha i}^{N*} R_{\beta j}^N \right), \tag{V.9.b}$$

$$E_{\alpha i, \beta j}^* = - \sum_N \Omega_N \left(R_{\alpha i}^{N*} S_{\beta j}^N + S_{\alpha i}^N R_{\beta j}^{N*} \right). \tag{V.9.c}$$

Notemos que estas são equações quadráticas nos coeficientes R e S . Podemos, agora, fazer uso das equações (V.7) para obter equações lineares para R e S . Para isso, multipliquemos (V.9.a) por $R_{\beta j}^{N'}$ e somemos em (βj) , obtendo

$$\sum_{\beta j} D_{\alpha i, \beta j} R_{\beta j}^{N'} = \sum_N \Omega_N R_{\alpha i}^N \sum_{\beta j} R_{\beta j}^{N*} R_{\beta j}^{N'} + \sum_N \Omega_N S_{\alpha i}^{N*} \sum_{\beta j} S_{\beta j}^N R_{\beta j}^{N'}. \tag{V.10.a}$$

Analogamente, multipliquemos (V.9.b) por $S_{\beta j}^{N'}$ e somemos em (βj) , para obter

$$\sum_{\beta j} E_{\alpha i, \beta j} S_{\beta j}^{N'} = - \sum_N \Omega_N R_{\alpha i}^N \sum_{\beta j} S_{\beta j}^{N*} S_{\beta j}^{N'} + \sum_N \Omega_N S_{\alpha i}^{N*} \sum_{\beta j} R_{\beta j}^N S_{\beta j}^{N'}. \tag{V.10.b}$$

Somando (V.10.a) e (V.10.b), obtemos

$$\begin{aligned}
\sum_{\beta j} D_{\alpha i, \beta j} R_{\beta j}^{N'} + E_{\alpha i, \beta j} S_{\beta j}^{N'} = & \sum_N \Omega_N R_{\alpha i}^N \sum_{\beta j} (R_{\beta j}^{N*} R_{\beta j}^{N'} - S_{\beta j}^{N*} S_{\beta j}^{N'}) + \\
& + \sum_N \Omega_N S_{\alpha i}^{N*} \sum_{\beta j} (S_{\beta j}^N R_{\beta j}^{N'} - R_{\beta j}^N S_{\beta j}^{N'}).
\end{aligned}$$

Usando, agora, (V.7) nessa última equação, obtemos

$$\sum_{\beta j} \left(D_{\alpha i, \beta j} R_{\beta j}^{N'} + E_{\alpha i, \beta j} S_{\beta j}^{N'} \right) = \Omega_{N'} R_{\alpha i}^{N'}. \quad (\text{V.11.a})$$

Alternativamente, podemos multiplicar (V.9.a) por $S_{\alpha i}^{N'}$ e (V.9.c) por $R_{\alpha i}^{N'}$ e somar em (αi) .

Desta forma, obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha i} D_{\alpha i, \beta j} S_{\alpha i}^{N'} &= \sum_N \Omega_N R_{\beta j}^{N*} \sum_{\alpha i} R_{\alpha i}^N S_{\alpha i}^{N'} + \sum_N \Omega_N S_{\beta j}^N \sum_{\alpha i} S_{\alpha i}^{N*} S_{\alpha i}^{N'}, \\ \sum_{\alpha i} E_{\alpha i, \beta j}^* R_{\alpha i}^{N'} &= - \sum_N \Omega_N S_{\beta j}^N \sum_{\alpha i} R_{\alpha i}^{N*} R_{\alpha i}^{N'} - \sum_N \Omega_N R_{\beta j}^{N*} \sum_{\alpha i} S_{\alpha i}^{N*} R_{\alpha i}^{N'}. \end{aligned}$$

Somando as duas, encontramos

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha i} D_{\alpha i, \beta j} S_{\alpha i}^{N'} + E_{\alpha i, \beta j}^* R_{\alpha i}^{N'} &= \sum_N \Omega_N R_{\beta j}^{N*} \sum_{\alpha i} \left(R_{\alpha i}^N S_{\alpha i}^{N'} - S_{\alpha i}^{N*} R_{\alpha i}^{N'} \right) + \\ &+ \sum_N \Omega_N S_{\beta j}^N \sum_{\alpha i} \left(S_{\alpha i}^{N*} S_{\alpha i}^{N'} - R_{\alpha i}^{N*} R_{\alpha i}^{N'} \right) \end{aligned}$$

e, novamente fazendo uso de (V.7), obtemos

$$\sum_{\alpha i} \left(D_{\alpha i, \beta j} S_{\alpha i}^{N'} + E_{\alpha i, \beta j}^* R_{\alpha i}^{N'} \right) = -\Omega_{N'} S_{\beta j}^{N'}.$$

Equivalentemente, trocando a notação $\alpha i \rightleftharpoons \beta j$ e $N' \rightarrow N$ e lembrando as propriedades (V.3), obtemos

$$\sum_{\beta j} \left(D_{\alpha i, \beta j}^* S_{\beta j}^N + E_{\alpha i, \beta j}^* R_{\beta j}^N \right) = -\Omega_N S_{\alpha i}^N. \quad (\text{V.11.b})$$

As equações (V.11.a) e (V.11.b) podem ser escritas em notação matricial como

$$\begin{pmatrix} D & E \\ E^* & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ S \end{pmatrix}_N = \Omega_N \begin{pmatrix} R \\ -S \end{pmatrix}_N. \quad (\text{V.12})$$

As equações (V.11) ou, equivalentemente, (V.12) são as bem conhecidas equações da RPA partícula-buraco (ph). Pode-se mostrar (Tho 61) que essas equações (Equações da RPA) admitem soluções satisfazendo (V.7) sempre que o estado de Hartree-Fock $|\Phi_0\rangle$ é estável, ou seja, $E_0^{(HF)}$ é um mínimo. Mostra-se também que os autovalores Ω_N são reais e não-negativos. Os casos com $\Omega_N = 0$ correspondem a estados espúrios.

Escolhendo R, S como as soluções de (V.12) normalizadas conforme (V.7), temos, de (V.1), (V.8) e (V.9),

$$\mathcal{D} = \sum_N \Omega_N \zeta_N^\dagger \zeta_N - \sum_N \sum_{\alpha i} \Omega_N S_{\alpha i}^{N*} S_{\alpha i}^N. \quad (\text{V.13})$$

Podemos, ainda, escrever

$$\sum_N \Omega_N \sum_{\alpha i} S_{\alpha i}^{N*} S_{\alpha i}^N = \sum_N \sum_{\alpha i} \Omega_N \left[\frac{1}{2} \left(S_{\alpha i}^{N*} S_{\alpha i}^N + R_{\alpha i}^{N*} R_{\alpha i}^N \right) + \frac{1}{2} \left(S_{\alpha i}^{N*} S_{\alpha i}^N - R_{\alpha i}^{N*} R_{\alpha i}^N \right) \right],$$

ou, usando (V.7.b) e (V.9.a)

$$\sum_N \sum_{\alpha i} S_{\alpha i}^{N*} S_{\alpha i}^N = \frac{1}{2} \sum_{\alpha i} D_{\alpha i, \alpha i} - \frac{1}{2} \sum_N \Omega_N. \quad (\text{V.14})$$

Levando (V.14) em (V.13), obtemos finalmente

$$\mathcal{D} = \sum_N \Omega_N \left(\zeta_N^\dagger \zeta_N + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \sum_{\alpha i} D_{\alpha i, \alpha i}. \quad (\text{V.15})$$

V-3) Diagonalização dos Termos de Partícula-Partícula e Buraco-Buraco

Nesta seção trataremos o restante da equação (IV.35). Claramente vemos que, subtraindo-se do primeiro membro dessa equação o operador \mathcal{D} definido em (V.1), obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{A} - \lambda \mathcal{N} = & \left\{ \sum_{i < j} \sum_{k < l} x_{ij} (A_{ij, kl} - 2\lambda \delta_{i, k} \delta_{j, l}) \frac{\partial}{\partial x_{kl}} + \right. \\ & + \sum_{\alpha < \beta} \sum_{\gamma < \delta} y_{\alpha\beta} (C_{\alpha\beta, \gamma\delta} + 2\lambda \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}) \frac{\partial}{\partial y_{\gamma\delta}} \\ & \left. + \sum_{i < j} \sum_{\alpha < \beta} \left[\frac{\partial}{\partial x_{ij}} B_{ij, \alpha\beta}^* \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}} + x_{ij} B_{ij, \alpha\beta} y_{\alpha\beta} \right] \right\}, \quad (\text{V.16}) \end{aligned}$$

onde introduzimos os operadores \mathcal{A} e \mathcal{N} , este último dado por

$$\mathcal{N} = 2 \left(\sum_{i < j} x_{ij} \frac{\partial}{\partial x_{ij}} - \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}} \right). \quad (\text{V.17})$$

Antes de prosseguir, relembremos as relações de comutação

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_{ij}}, x_{kl} \right] = \delta_{(ij), (kl)}, \quad [x_{ij}, x_{kl}] = \left[\frac{\partial}{\partial x_{ij}}, \frac{\partial}{\partial x_{kl}} \right] = 0, \quad (\text{V.18.a})$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}}, y_{\gamma\delta}\right] = \delta_{(\alpha\beta),(\gamma\delta)}, \quad [y_{\alpha\beta}, y_{\gamma\delta}] = \left[\frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}}, \frac{\partial}{\partial y_{\gamma\delta}}\right] = 0, \quad (\text{V.18.b})$$

$$[x_{ij}, y_{\alpha\beta}] = \left[\frac{\partial}{\partial x_{ij}}, \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}}\right] = [x_{ij}, \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}}] = \left[\frac{\partial}{\partial x_{ij}}, y_{\alpha\beta}\right] = 0. \quad (\text{V.18.c})$$

Notemos, ainda, que decorrem de (IV.30) as seguintes propriedades:

$$\begin{cases} A_{ij,kl} = A_{kl,ij}^* \\ C_{\alpha\beta,\gamma\delta} = C_{\gamma\delta,\alpha\beta}^* \end{cases}. \quad (\text{V.19})$$

Em analogia ao caso anterior, com a diferença que neste caso nós temos dois tipos de modos de vibração, a saber, partícula-partícula e buraco-buraco, para diagonalizarmos \mathcal{A} em (V.16), nós devemos descobrir novos operadores,

$$\xi_P^\dagger = \sum_{i<j} X_{ij}^P x_{ij} - \sum_{\alpha<\beta} Y_{\alpha\beta}^P \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}} \quad (\text{V.20.a})$$

e

$$\eta_H = \sum_{\alpha<\beta} X_{\alpha\beta}^H \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}} - \sum_{i<j} Y_{ij}^H x_{ij}, \quad (\text{V.20.b})$$

tais que o operador \mathcal{A} possa ser escrito como

$$\mathcal{A} = \sum_P \Omega_P \xi_P^\dagger \xi_P + \sum_H \Omega_H \eta_H^\dagger \eta_H + cte. \quad (\text{V.21})$$

Podemos facilmente ver, usando as relações (V.18), que

$$[\mathcal{N}, \xi_P^\dagger] = 2\xi_P^\dagger, \quad (\text{V.22.a})$$

$$[\mathcal{N}, \eta_H^\dagger] = -2\eta_H^\dagger. \quad (\text{V.22.b})$$

Com estes resultados, obtemos

$$[\mathcal{N}, \xi_P^\dagger \xi_P] = [\mathcal{N}, \eta_H^\dagger \eta_H] = 0. \quad (\text{V.22.c})$$

Está claro que os operadores ξ_P , ξ_P^\dagger e η_H , η_H^\dagger estão associados aos modos normais partícula-partícula e buraco-buraco, respectivamente. Agora, requeremos que estes operadores sejam bosônicos e independentes, ou seja, que satisfaçam as seguintes regras de comutação :

$$[\xi_P^\dagger, \xi_{P'}^\dagger] = 0, \quad (\text{V.23.a})$$

$$[\xi_P, \xi_{P'}^\dagger] = \delta_{PP'}, \quad (\text{V.23.b})$$

$$[\eta_H^\dagger, \eta_{H'}^\dagger] = 0, \quad (\text{V.23.c})$$

$$[\eta_H, \eta_{H'}^\dagger] = \delta_{HH'}, \quad (\text{V.23.d})$$

$$[\xi_P^\dagger, \eta_H^\dagger] = 0, \quad (\text{V.23.e})$$

$$[\xi_P, \eta_H^\dagger] = 0. \quad (\text{V.23.f})$$

Essas regras de comutação impõem as seguintes relações entre os coeficientes em (V.20):

$$\sum_{i < j} X_{ij}^{P*} X_{ij}^{P'} - \sum_{\alpha < \beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\alpha\beta}^{P'} = \delta_{PP'}, \quad (\text{V.24.a})$$

$$\sum_{\alpha < \beta} X_{\alpha\beta}^H X_{\alpha\beta}^{H'*} - \sum_{i < j} Y_{ij}^H Y_{ij}^{H'*} = \delta_{HH'}, \quad (\text{V.24.b})$$

$$\sum_{i < j} X_{ij}^{P*} Y_{ij}^H - \sum_{\alpha < \beta} X_{\alpha\beta}^H Y_{\alpha\beta}^{P*} = 0, \quad (\text{V.24.c})$$

onde usamos (V.18). Do mesmo modo que na seção anterior, para obtermos as condições que devem ser satisfeitas pelos coeficientes em (V.20) para que se tenha (V.21), vamos calcular

$$\begin{aligned} & \sum_P \Omega_P \xi_P^\dagger \xi_P + \sum_H \Omega_H \eta_H^\dagger \eta_H = \\ &= \sum_P \Omega_P \left(\sum_{i < j} X_{ij}^P x_{ij} - \sum_{\alpha < \beta} Y_{\alpha\beta}^P \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}} \right) \left(\sum_{i < j} X_{ij}^{P*} \frac{\partial}{\partial x_{ij}} - \sum_{\alpha < \beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} y_{\alpha\beta} \right) + \\ &+ \sum_H \Omega_H \left(\sum_{\alpha < \beta} X_{\alpha\beta}^{H*} y_{\alpha\beta} - \sum_{i < j} Y_{ij}^{H*} \frac{\partial}{\partial x_{ij}} \right) \left(\sum_{\alpha < \beta} X_{\alpha\beta}^H \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}} - \sum_{i < j} Y_{ij}^H x_{ij} \right) \\ &= \sum_{i < j} \sum_{k < l} \left\{ \left(\sum_P \Omega_P X_{ij}^P X_{kl}^{P*} \right) x_{ij} \frac{\partial}{\partial x_{kl}} + \left(\sum_H \Omega_H Y_{ij}^H Y_{kl}^{H*} \right) \frac{\partial}{\partial x_{kl}} x_{ij} \right\} + \\ &+ \sum_{\alpha < \beta} \sum_{\gamma < \delta} \left\{ \left(\sum_H \Omega_H X_{\alpha\beta}^{H*} X_{\gamma\delta}^H \right) y_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial y_{\gamma\delta}} + \left(\sum_P \Omega_P Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\gamma\delta}^P \right) \frac{\partial}{\partial y_{\gamma\delta}} y_{\alpha\beta} \right\} + \\ &- \sum_{i < j} \sum_{\alpha < \beta} \left\{ \left(\sum_P \Omega_P X_{ij}^P Y_{\alpha\beta}^{P*} \right) x_{ij} y_{\alpha\beta} + \left(\sum_H \Omega_H X_{\alpha\beta}^{H*} Y_{ij}^H \right) y_{\alpha\beta} x_{ij} \right\} + \\ &- \sum_{k < l} \sum_{\gamma < \delta} \left\{ \left(\sum_P \Omega_P Y_{\gamma\delta}^P X_{kl}^{P*} \right) \frac{\partial}{\partial y_{\gamma\delta}} \frac{\partial}{\partial x_{kl}} + \left(\sum_H \Omega_H Y_{kl}^{H*} X_{\gamma\delta}^H \right) \frac{\partial}{\partial x_{kl}} \frac{\partial}{\partial y_{\gamma\delta}} \right\}. \end{aligned}$$

Usando as regras de comutação (V.18), podemos reescrever o resultado acima na forma

$$\begin{aligned}
\sum_P \Omega_P \xi_P^\dagger \xi_P + \sum_H \Omega_H \eta_H^\dagger \eta_H &= \sum_{i < j} \sum_{k < l} \left(\sum_P \Omega_P X_{ij}^P X_{kl}^{P*} + \sum_H \Omega_H Y_{ij}^H Y_{kl}^{H*} \right) x_{ij} \frac{\partial}{\partial x_{kl}} + \\
&+ \sum_{\alpha < \beta} \sum_{\gamma < \delta} \left(\sum_H \Omega_H X_{\alpha\beta}^{H*} X_{\gamma\delta}^H + \sum_P \Omega_P Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\gamma\delta}^P \right) y_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial y_{\gamma\delta}} + \\
&- \sum_{i < j} \sum_{\alpha < \beta} \left(\sum_H \Omega_H Y_{ij}^H X_{\alpha\beta}^{H*} + \sum_P \Omega_P X_{ij}^P Y_{\alpha\beta}^{P*} \right) x_{ij} y_{\alpha\beta} + \\
&- \sum_{i < j} \sum_{\alpha < \beta} \left(\sum_H \Omega_H Y_{ij}^{H*} X_{\alpha\beta}^H + \sum_P \Omega_P X_{ij}^{P*} Y_{\alpha\beta}^P \right) \frac{\partial}{\partial x_{ij}} \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}} + \\
&+ \sum_H \Omega_H \sum_{i < j} Y_{ij}^H Y_{ij}^{H*} + \sum_P \Omega_P \sum_{\alpha < \beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\alpha\beta}^P. \tag{V.25}
\end{aligned}$$

Para que os 4 primeiros termos de (V.25) coincidam com os termos correspondentes em (V.16), basta que

$$A_{ij,kl} = \sum_P \Omega_P X_{ij}^P X_{kl}^{P*} + \sum_H \Omega_H Y_{ij}^H Y_{kl}^{H*}, \tag{V.26.a}$$

$$C_{\alpha\beta,\gamma\delta} = + \sum_H \Omega_H X_{\alpha\beta}^{H*} X_{\gamma\delta}^H + \sum_P \Omega_P Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\gamma\delta}^P, \tag{V.26.b}$$

$$B_{ij,\alpha\beta} = - \sum_H \Omega_H Y_{ij}^H X_{\alpha\beta}^{H*} - \sum_P \Omega_P X_{ij}^P Y_{\alpha\beta}^{P*}, \tag{V.26.c}$$

$$B_{ij,\alpha\beta}^* = - \sum_H \Omega_H Y_{ij}^{H*} X_{\alpha\beta}^H - \sum_P \Omega_P X_{ij}^{P*} Y_{\alpha\beta}^P. \tag{V.26.d}$$

Para obtermos equações lineares a serem satisfeitas pelos coeficientes X e Y , procedemos em analogia à seção anterior. Multiplicando (V.26.a) por $X_{kl}^{P'}$ e somando sobre $k < l$, obtemos

$$\sum_{k < l} A_{ij,kl} X_{kl}^{P'} = \sum_P \Omega_P X_{ij}^P \sum_{k < l} X_{kl}^{P*} X_{kl}^{P'} + \sum_H \Omega_H Y_{ij}^H \sum_{k < l} Y_{kl}^{H*} X_{kl}^{P'}.$$

Também, multiplicando (V.26.c) por $Y_{\alpha\beta}^{P'}$ e somando sobre $\alpha < \beta$, obtemos

$$\sum_{\alpha < \beta} B_{ij,\alpha\beta} Y_{\alpha\beta}^{P'} = - \sum_H \Omega_H Y_{ij}^H \sum_{\alpha < \beta} X_{\alpha\beta}^{H*} Y_{\alpha\beta}^{P'} - \sum_P \Omega_P X_{ij}^P \sum_{\alpha < \beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\alpha\beta}^{P'}.$$

Somando essas duas equações membro a membro, obtemos

$$\begin{aligned}
\sum_{k < l} A_{ij,kl} X_{kl}^{P'} + \sum_{\alpha < \beta} B_{ij,\alpha\beta} Y_{\alpha\beta}^{P'} &= \sum_P \Omega_P X_{ij}^P \left(\sum_{k < l} X_{kl}^{P*} X_{kl}^{P'} - \sum_{\alpha < \beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\alpha\beta}^{P'} \right) + \\
&- \sum_H \Omega_H Y_{ij}^H \left(\sum_{\alpha < \beta} X_{\alpha\beta}^{H*} Y_{\alpha\beta}^{P'} - \sum_{k < l} Y_{kl}^{H*} X_{kl}^{P'} \right),
\end{aligned}$$

ou ainda, usando (V.24.a) e (V.24.c) e trocando $(\alpha\beta) \rightarrow (\gamma\delta)$,

$$\sum_{k<l} A_{ij,kl} X_{kl}^{P'} + \sum_{\gamma<\delta} B_{ij,\gamma\delta} Y_{\gamma\delta}^{P'} = \Omega_{P'} X_{ij}^{P'}. \quad (\text{V.27.a})$$

Prosseguindo, vamos multiplicar (V.26.d) (com $(ij) \rightarrow (kl)$) por $X_{kl}^{P'}$ e somar sobre $(k < l)$.

Obtém-se

$$\sum_{kl} B_{kl,\alpha\beta}^* X_{kl}^{P'} = - \sum_H \Omega_H X_{\alpha\beta}^H \sum_{kl} Y_{kl}^{H*} X_{kl}^{P'} - \sum_P \Omega_P Y_{\alpha\beta}^P \sum_{kl} X_{kl}^{P*} X_{kl}^{P'}.$$

Por outro lado, multiplicando (V.26.b) (com $\alpha\beta \Rightarrow \gamma\delta$) por $Y_{\gamma\delta}^{P'}$ e somando sobre $(\gamma < \delta)$, obtemos

$$\sum_{\gamma<\delta} C_{\gamma\delta,\alpha\beta} Y_{\gamma\delta}^{P'} = \sum_H \Omega_H X_{\alpha\beta}^H \sum_{\gamma<\delta} X_{\gamma\delta}^{H*} Y_{\gamma\delta}^{P'} + \sum_P \Omega_P Y_{\alpha\beta}^P \sum_{\gamma<\delta} Y_{\gamma\delta}^{P*} Y_{\gamma\delta}^{P'}.$$

Somando membro a membro essas duas equações, obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{kl} B_{kl,\alpha\beta}^* X_{kl}^{P'} + \sum_{\gamma<\delta} C_{\gamma\delta,\alpha\beta} Y_{\gamma\delta}^{P'} &= - \sum_H \Omega_H X_{\alpha\beta}^H \left(\sum_{kl} Y_{kl}^{H*} X_{kl}^{P'} - \sum_{\gamma<\delta} X_{\gamma\delta}^{H*} Y_{\gamma\delta}^{P'} \right) \\ &\quad - \sum_P \Omega_P Y_{\alpha\beta}^P \left(\sum_{kl} X_{kl}^{P*} X_{kl}^{P'} - \sum_{\gamma<\delta} Y_{\gamma\delta}^{P*} Y_{\gamma\delta}^{P'} \right), \end{aligned}$$

ou ainda, usando (V.24.a) e (V.24.c),

$$\sum_{kl} B_{kl,\alpha\beta}^* X_{kl}^{P'} + \sum_{\gamma<\delta} C_{\gamma\delta,\alpha\beta} Y_{\gamma\delta}^{P'} = -\Omega_{P'} Y_{\alpha\beta}^{P'}. \quad (\text{V.27.b})$$

Passemos, agora, às equações lineares que devem ser satisfeitas pelos demais coeficientes, isto é, os coeficientes do tipo $X_{\alpha\beta}^H$ e Y_{ij}^H . Para obtê-las, comecemos por multiplicar a equação (V.26.b) por $X_{\gamma\delta}^{H'*}$ e somar sobre $\gamma < \delta$. Obtemos

$$\sum_{\gamma<\delta} C_{\alpha\beta,\gamma\delta} X_{\gamma\delta}^{H'*} = \sum_H \Omega_H X_{\alpha\beta}^{H*} \sum_{\gamma<\delta} X_{\gamma\delta}^H X_{\gamma\delta}^{H'*} + \sum_P \Omega_P Y_{\alpha\beta}^{P*} \sum_{\gamma<\delta} Y_{\gamma\delta}^P X_{\gamma\delta}^{H'*}.$$

Multiplicando, agora, (V.26.c) por $Y_{ij}^{H'*}$ e somando em $(i < j)$, obtemos

$$\sum_{i<j} B_{ij,\alpha\beta} Y_{ij}^{H'*} = - \sum_H \Omega_H X_{\alpha\beta}^{H*} \sum_{i<j} Y_{ij}^H Y_{ij}^{H'*} - \sum_P \Omega_P Y_{\alpha\beta}^{P*} \sum_{i<j} X_{ij}^P Y_{ij}^{H'*}.$$

Somando membro a membro essas duas equações , obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma < \delta} C_{\alpha\beta, \gamma\delta} X_{\gamma\delta}^{H'*} + \sum_{i < j} B_{ij, \alpha\beta} Y_{ij}^{H'*} = & + \sum_H \Omega_H X_{\alpha\beta}^{H*} \left(\sum_{\gamma < \delta} X_{\gamma\delta}^H X_{\gamma\delta}^{H'*} - \sum_{i < j} Y_{ij}^H Y_{ij}^{H'*} \right) + \\ & + \sum_P \Omega_P Y_{\alpha\beta}^{P*} \left(\sum_{\gamma < \delta} Y_{\gamma\delta}^P X_{\gamma\delta}^{H'*} - \sum_{i < j} X_{ij}^P Y_{ij}^{H'*} \right), \end{aligned}$$

ou ainda, usando (V.24.b) e (V.24.c),

$$\sum_{\gamma < \delta} C_{\alpha\beta, \gamma\delta} X_{\gamma\delta}^{H'*} + \sum_{i < j} B_{ij, \alpha\beta} Y_{ij}^{H'*} = \Omega_{H'} X_{\alpha\beta}^{H'*}. \quad (\text{V.28.a})$$

Continuando, multipliquemos (V.26.d) (com $(\alpha\beta) \rightarrow (\gamma\delta)$) por $X_{\gamma\delta}^{H'*}$ e somemos sobre $(\gamma < \delta)$. Obtemos,

$$\sum_{\gamma < \delta} B_{ij, \gamma\delta}^* X_{\gamma\delta}^{H'*} = - \sum_H \Omega_H Y_{ij}^{H*} \sum_{\gamma < \delta} X_{\gamma\delta}^H X_{\gamma\delta}^{H'*} - \sum_P \Omega_P X_{ij}^{P*} \sum_{\gamma < \delta} Y_{\gamma\delta}^P X_{\gamma\delta}^{H'*}$$

Finalmente, multiplicando (V.26.a) (com $(ij) \Rightarrow (kl)$) por $Y_{kl}^{H'*}$ e somando sobre $(k < l)$, obtemos

$$\sum_{k < l} A_{kl, ij} Y_{kl}^{H'*} = \sum_P \Omega_P X_{ij}^{P*} \sum_{k < l} X_{kl}^P Y_{kl}^{H'*} + \sum_H \Omega_H Y_{ij}^{H*} \sum_{k < l} Y_{kl}^H Y_{kl}^{H'*}.$$

Somando membro a membro essas duas equações , obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma < \delta} B_{ij, \gamma\delta}^* X_{\gamma\delta}^{H'*} + \sum_{k < l} A_{kl, ij} Y_{kl}^{H'*} = & + \sum_P \Omega_P X_{ij}^{P*} \left(\sum_{k < l} X_{kl}^P Y_{kl}^{H'*} - \sum_{\gamma < \delta} Y_{\gamma\delta}^P X_{\gamma\delta}^{H'*} \right) + \\ & - \sum_H \Omega_H Y_{ij}^{H*} \left(\sum_{\gamma < \delta} X_{\gamma\delta}^H X_{\gamma\delta}^{H'*} - \sum_{k < l} Y_{kl}^H Y_{kl}^{H'*} \right), \end{aligned}$$

ou ainda, usando (V.24.b) e (V.24.c),

$$\sum_{\gamma < \delta} B_{ij, \gamma\delta}^* X_{\gamma\delta}^{H'*} + \sum_{k < l} A_{kl, ij} Y_{kl}^{H'*} = -\Omega_{H'} Y_{ij}^{H'*}. \quad (\text{V.28.b})$$

Para o que segue é conveniente reescrevermos as equações (V.27) e (V.28) numa forma ligeiramente diferente. Para isso, usando (V.19) e substituindo P' por P , podemos reescrever as equações (V.27) na forma

$$\sum_{k < l} A_{ij, kl} X_{kl}^P + \sum_{\gamma < \delta} B_{ij, \gamma\delta} Y_{\gamma\delta}^P = \Omega_P X_{ij}^P, \quad (\text{V.29.a})$$

$$\sum_{k < l} B_{kl, \alpha\beta}^* X_{kl}^P + \sum_{\gamma < \delta} C_{\alpha\beta, \gamma\delta}^* Y_{\gamma\delta}^P = -\Omega_P Y_{\alpha\beta}^P. \quad (\text{V.29.b})$$

Enquanto isso, tomando os complexos conjugados de (V.28.a) e (V.28.b) e, novamente, usando (V.19) e substituindo H' por H , podemos escrever aquelas equações na forma

$$\sum_{k<l} A_{ij,kl} Y_{kl}^H + \sum_{\gamma<\delta} B_{ij,\gamma\delta} X_{\gamma\delta}^H = -\Omega_H^* Y_{ij}^H \quad (\text{V.29'.a})$$

$$\sum_{i<j} B_{ij,\alpha\beta}^* Y_{ij}^H + \sum_{\gamma<\delta} C_{\alpha\beta,\gamma\delta}^* X_{\gamma\delta}^H = +\Omega_H^* X_{\alpha\beta}^H. \quad (\text{V.29'.b})$$

Devido a similaridade com o sistema (V.11), os sistemas de equações (V.29) e (V.29') são conhecidos como equações da RPA partícula-partícula (pp) e RPA buraco-buraco (hh), respectivamente. Chamando

$$N_{hh} = \text{número de índices do tipo } (\alpha\beta)$$

$$N_{pp} = \text{número de índices do tipo } (ij)$$

vemos que temos $N_{pp} + N_{hh}$ equações lineares homogêneas em (V.29.a). Essas equações têm como incógnitas, com P fixo, N_{pp} coeficientes do tipo X_{ij}^P e N_{hh} coeficientes do tipo $Y_{\alpha\beta}^P$. Temos, portanto, (com P fixo) um total de $N_{pp} + N_{hh}$ incógnitas. Suporemos que as equações (V.29) admitam N_P soluções linearmente independente que possam ser normalizadas conforme (V.24.a), ou seja,

$$N_P = \text{número de índices do tipo } P.$$

Diremos então, neste caso, que o sistema admite N_P modos normais independentes do tipo partícula-partícula. Podemos fazer o mesmo tipo de análise com as equações (V.29'). Novamente temos $N_{pp} + N_{hh}$ equações lineares homogêneas. Essas equações têm como incógnitas, com H fixo, N_{pp} coeficientes do tipo Y_{ij}^H e N_{hh} coeficientes do tipo $X_{\alpha\beta}^H$. Temos, portanto, (com H fixo) um total de $N_{pp} + N_{hh}$ incógnitas. Suporemos que as equações (V.29') admitam N_H soluções que possam ser normalizadas conforme (V.24.b), ou seja,

$$N_H = \text{número de índices do tipo } H.$$

Diremos então, neste caso, que o sistema admite N_H modos normais independentes do tipo buraco-buraco.

Pode-se mostrar (veja Apêndice A) que essas equações realmente admitem soluções satisfazendo (V.24), sempre que o estado de Hartree-Fock $|\Phi_0\rangle$ é estritamente estável, ou seja, sempre que $E_0^{(HF)}$ é um mínimo, agora em relação à formação de pares pp e hh com a mesma

intensidade, isto é, mantendo $\langle \mathbf{N} \rangle = n_0$. Mostra-se também que os autovalores Ω_P e Ω_H são reais e $\Omega_P + \Omega_H$ é sempre positivo. Os casos com $\Omega = 0$ não serão considerados¹.

É interessante observar que os sistemas (V.29) e (V.29') são idênticos, tendo ambos a forma

$$\sum_{k < l} A_{ij,kl} R_{kl}^Q + \sum_{\gamma < \delta} B_{ij,\gamma\delta} S_{\gamma\delta}^Q = \Omega_Q R_{ij}^Q, \quad (\text{V.30.a})$$

$$\sum_{k < l} B_{kl,\alpha\beta}^* R_{kl}^Q + \sum_{\gamma < \delta} C_{\alpha\beta,\gamma\delta}^* S_{\gamma\delta}^Q = -\Omega_Q S_{\alpha\beta}^Q, \quad (\text{V.30.b})$$

ou ainda, em notação matricial,

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & C^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ S \end{pmatrix}_Q = \Omega_Q \begin{pmatrix} R \\ -S \end{pmatrix}_Q, \quad (\text{V.30}')$$

onde o índice Q representa, tanto os bósons do tipo partícula-partícula (tipo P), como os bósons do tipo buraco-buraco (tipo H). Claramente, quando o índice Q corresponde a um bóson do tipo P, comparando (V.30) com (V.29) vemos que R_{ij}^Q representa X_{ij}^P e $S_{\alpha\beta}^Q$ representa $Y_{\alpha\beta}^P$ e Ω_Q representa Ω_P . No outro caso, quando Q corresponde a um bóson do tipo H, se compararmos (V.30) com (V.29'), vemos que R_{ij}^Q representa Y_{ij}^H e $S_{\alpha\beta}^Q$ representa $X_{\alpha\beta}^H$ e Ω_Q representa $-\Omega_H$. Em vista disso e com as relações (V.24.a) e (V.24.b) em mente, definimos o indicador

$$I_Q = \sum_{i < j} |R_{ij}^Q|^2 - \sum_{\alpha < \beta} |S_{\alpha\beta}^Q|^2. \quad (\text{V.31})$$

Claramente I_Q assume sinal positivo quando Q corresponde a estados do tipo P e sinal negativo quando Q corresponde a estados do tipo H . Isto nos fornece um critério de escolha para as soluções do sistema (V.30) ou, equivalentemente, (V.30'). Encontradas todas as suas soluções independentes, calculamos o indicador (V.31). As soluções que puderem ser normalizadas com

$$I_Q = +1 \quad (\text{V.32.a})$$

¹ Se a equação (V.30') admite soluções com $\Omega = 0$, isso significa que o vácuo de H.F. é instável por formação de pares (ver Apêndice A). Nesse caso o procedimento correto seria partir do vácuo de Hartree-Fock-Bogoliubov (ver seção III-3) e obteríamos as equações da RPA para quasipartículas (QRPA).

correspondem aos modos normais tipo pp. Já as que puderem ser normalizadas segundo

$$I_Q = -1 \quad (\text{V.32.b})$$

correspondem aos modos normais tipo hh.

Obtidos R e S normalizados de acordo com (V.32.a) ou (V.32.b), conforme o caso, temos, de (V.16), (V.25) e (V.26),

$$\mathcal{A} = \sum_P \Omega_P \xi_P^\dagger \xi_P + \sum_H \Omega_H \eta_H^\dagger \eta_H - \sum_H \Omega_H \sum_{i<j} Y_{ij}^H Y_{ij}^{H*} - \sum_P \Omega_P \sum_{\alpha<\beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\alpha\beta}^P. \quad (\text{V.33})$$

Por outro lado, podemos escrever

$$\begin{aligned} - \sum_H \Omega_H \sum_{i<j} Y_{ij}^H Y_{ij}^{H*} - \sum_P \Omega_P \sum_{\alpha<\beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\alpha\beta}^P &= \\ &= - \sum_H \Omega_H \sum_{i<j} Y_{ij}^H Y_{ij}^{H*} - \frac{1}{2} \sum_P \Omega_P \sum_{i<j} X_{ij}^P X_{ij}^{P*} + \frac{1}{2} \sum_P \Omega_P \sum_{i<j} X_{ij}^P X_{ij}^{P*} + \\ &\quad - \sum_P \Omega_P \sum_{\alpha<\beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\alpha\beta}^P + \frac{1}{2} \sum_H \Omega_H \sum_{\alpha<\beta} X_{\alpha\beta}^{H*} X_{\alpha\beta}^H - \frac{1}{2} \sum_H \Omega_H \sum_{\alpha<\beta} X_{\alpha\beta}^{H*} X_{\alpha\beta}^H = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i<j} \left(- \sum_H \Omega_H Y_{ij}^H Y_{ij}^{H*} - \sum_P \Omega_P X_{ij}^P X_{ij}^{P*} \right) + \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_H \Omega_H \left(\sum_{i<j} Y_{ij}^H Y_{ij}^{H*} - \sum_{\alpha<\beta} X_{\alpha\beta}^{H*} X_{\alpha\beta}^H \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\alpha<\beta} \left(- \sum_H \Omega_H X_{\alpha\beta}^{H*} X_{\alpha\beta}^H - \sum_P \Omega_P Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\alpha\beta}^P \right) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_P \Omega_P \left(\sum_{i<j} X_{ij}^P X_{ij}^{P*} - \sum_{\alpha<\beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\alpha\beta}^P \right), \end{aligned}$$

ou então, usando (V.26.a,b) e (V.24.a,b),

$$\begin{aligned} - \sum_H \Omega_H \sum_{i<j} Y_{ij}^H Y_{ij}^{H*} - \sum_P \Omega_P \sum_{\alpha<\beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\alpha\beta}^P &= \\ &= - \frac{1}{2} \sum_{i<j} A_{ij,ij} + \frac{1}{2} \sum_H \Omega_H - \frac{1}{2} \sum_{\alpha<\beta} C_{\alpha\beta,\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_P \Omega_P. \quad (\text{V.34}) \end{aligned}$$

Introduzindo (V.34) em (V.33), temos, finalmente,

$$\mathcal{A} = \sum_P \Omega_P \left(\xi_P^\dagger \xi_P + \frac{1}{2} \right) + \sum_H \Omega_H \left(\eta_H^\dagger \eta_H + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \text{Tr} A - \frac{1}{2} \text{Tr} C. \quad (\text{V.35})$$

Agora, é fácil ver que

$$\mathcal{N} = 2 \left(\sum_P \xi_P^\dagger \xi_P - \sum_H \eta_H^\dagger \eta_H \right), \quad (\text{V.36})$$

bastando para isso substituímos na equação (V.17) os operadores x_{ij} , $y_{\alpha\beta}$ e seus hermitianos conjugados $\frac{\partial}{\partial x_{ij}}$ e $\frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}}$ pelas respectivas expressões (A.16.a) e (A.16.b), encontradas no apêndice A. Deste modo, fica claro que conseguimos diagonalizar simultaneamente os operadores \mathcal{A} e \mathcal{N} .

V-4) Interpretação dos Resultados

Nas seções anteriores acabamos por diagonalizar todos os termos na equação (IV.35). Assim, coletando os resultados (V.15) e (V.35) e fazendo uso de (V.1) e (V.16), vemos que a equação (IV.35) toma a seguinte forma

$$\left\{ \mathcal{H} + \lambda(n - n_0 - \mathcal{N}) - (E - E_0^{RPA}) \right\} G = 0, \quad (\text{V.37})$$

onde introduzimos as grandezas

$$\mathcal{H} = \sum_P \Omega_P \xi_P^\dagger \xi_P + \sum_H \Omega_H \eta_H^\dagger \eta_H + \sum_N \Omega_N \zeta_N^\dagger \zeta_N \quad (\text{V.38})$$

e

$$E_0^{RPA} = E_0^{HF} + \frac{1}{2} \left(\sum_P \Omega_P - \sum_{i < j} A_{ij, ij} \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_H \Omega_H - \sum_{\alpha < \beta} C_{\alpha\beta, \alpha\beta} \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_N \Omega_N - \sum_{\alpha i} D_{\alpha i, \alpha i} \right). \quad (\text{V.39})$$

Tendo em mente (V.22.c) e notando que, pelo fato de x , y e z serem variáveis independentes,

$$[\mathcal{N}, \zeta_N] = [\mathcal{N}, \zeta_N^\dagger] = 0, \quad (\text{V.40})$$

concluimos que

$$[\mathcal{N}, \mathcal{H}] = 0. \quad (\text{V.41})$$

Por outro lado, (V.37) é uma equação de autovalores para o operador hermitiano $\mathcal{H} - \lambda\mathcal{N}$. Devido a (V.41), sabemos que G pode ser escolhida como autofunção simultânea de \mathcal{H} e \mathcal{N} , isto é, satisfazendo as equações

$$\mathcal{H}G = (E - E_0^{RPA})G, \quad (\text{V.42.a})$$

$$\mathcal{N}G = \alpha G. \quad (V.42.b)$$

São essas as equações que devemos resolver para, através de (IV.40) ou (IV.41), construirmos o estado correlacionado $|\Psi\rangle$.

Para entender melhor o significado do operador \mathcal{N} e seu autovalor α em (V.42.b), vamos calcular, usando (IV.1),

$$\langle \Psi | N | \Psi \rangle = \int dx dy dz dx' dy' dz' f(x', y', z') f^*(x, y, z) \langle \Phi(x, y, z) | N | \Phi(x', y', z') \rangle. \quad (V.43)$$

As equações (IV.18) e (IV.31) nos permitem escrever, na aproximação quadrática,

$$\langle \Phi(x, y, z) | N | \Phi(x', y', z') \rangle = \left[n_0 + 2 \left(\sum_{i < j} x_{ij} x_{ij}^* - \sum_{\alpha < \beta} y_{\alpha\beta} y_{\alpha\beta}^* \right) \right] \langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle,$$

ou ainda, tendo em vista (IV.32.b) e a definição (V.17),

$$\langle \Phi(x, y, z) | N | \Phi(x', y', z') \rangle = (n_0 + \mathcal{N}) \langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle, \quad (V.44)$$

onde o operador \mathcal{N} age sobre as variáveis sem linha. Também devido a (IV.32.b), a transformada (IV.34) se escreve, na aproximação quadrática,

$$G(x, y, z) = \int dx' dy' dz' f(x', y', z') \langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle, \quad (V.45)$$

de modo que, introduzindo-se esses dois últimos resultados em (V.43), obtemos

$$\langle \Psi | N | \Psi \rangle = \int dx dy dz f^*(x, y, z) (n_0 + \mathcal{N}) G(x, y, z). \quad (V.46)$$

Então, repetindo os mesmos passos utilizados para chegarmos a (IV.38) a partir de (IV.36), vemos que

$$\langle \Psi | N | \Psi \rangle = (G, (n_0 + \mathcal{N})G)_B, \quad (V.47)$$

ou seja,

$$\frac{\langle \Psi | N | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{(G, (n_0 + \mathcal{N})G)_B}{(G, G)_B},$$

em cujos segundos membros aparece o produto escalar no espaço de Bargmann definido pelas equações (II.22) e (II.26) extendidas para M variáveis complexas. Portanto, se G satisfaz (V.42.b), temos

$$\alpha = n - n_0, \quad (V.48)$$

onde usamos (IV.3). Concluimos, portanto, que α é o número quântico de transferência ao qual nos referimos no capítulo I, ou seja, a diferença entre o número de partículas no estado $|\Psi\rangle$ e número de partículas no estado $|\Phi_0\rangle$, podendo tomar os valores $0, \pm 2, \pm 4$, etc.

Calculemos, agora,

$$\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle = \int dx dy dz dx' dy' dz' f(x', y', z') f^*(x, y, z) \langle \Phi(x, y, z) | \mathbf{H} | \Phi(x', y', z') \rangle. \quad (V.49)$$

Então, usando (IV.32.a) com $\lambda = 0$ e seguindo os mesmos passos que nos levaram a (IV.33) e (IV.35), obtemos, na aproximação quadrática,

$$\langle \Phi(x, y, z) | \mathbf{H} | \Phi(x', y', z') \rangle = (E_0^{HF} + \mathcal{A} + \mathcal{D}) \langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle, \quad (V.50)$$

onde usamos as definições (V.1) e (V.16). Equivalentemente, usando (V.15), (V.35), (V.38) e (V.39), podemos escrever

$$\langle \Phi(x, y, z) | \mathbf{H} | \Phi(x', y', z') \rangle = (E_0^{RPA} + \mathcal{H}) \langle \Phi(x, y, z) | \Phi(x', y', z') \rangle. \quad (V.51)$$

Introduzindo esse resultado em (V.49) e procedendo analogamente ao que fizemos no parágrafo anterior, obtemos, sempre na aproximação quadrática,

$$\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle = (G, (E_0^{RPA} + \mathcal{H})G)_B, \quad (V.52)$$

ou seja,

$$\frac{\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{(G, (E_0^{RPA} + \mathcal{H})G)_B}{(G, G)_B}.$$

Desse modo, se G satisfaz (V.42.a), temos

$$E = \frac{\langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (V.53)$$

mostrando que E tem realmente o significado de energia associada ao estado nuclear aproximado por $|\Psi\rangle$.

V-5) Estado Fundamental

Sabemos que o estado fundamental, deve ter energia mínima e em nosso caso também deve corresponder a $\alpha = 0$, isto é deve satisfazer

$$\mathcal{N}G = 0. \quad (\text{V.54})$$

Consideremos um estado G_0 dado pelas equações

$$\xi_P G_0 = \eta_H G_0 = \zeta_N G_0 = 0. \quad (\text{V.55})$$

Está claro, em vista de (V.36) e (V.38) que G_0 é um auto-estado simultâneo das equações (V.42) com autovalores nulos, ou seja

$$E = E_0^{RPA} \quad (\text{V.56.a})$$

e

$$\alpha = 0. \quad (\text{V.56.b})$$

De acordo com (V.55), G_0 é o vácuo dos três tipos de bósons. Suporemos, então, que qualquer estado de interesse possa ser obtido a partir de G_0 com o uso dos operadores ξ_P^\dagger , η_H^\dagger e ζ_N^\dagger . Assim, procurando manter a condição $\alpha = 0$, consideremos primeiramente estados do tipo

$$\zeta_N^\dagger G_0. \quad (\text{V.57.a})$$

Claramente, temos

$$\mathcal{N}\zeta_N^\dagger G_0 = \zeta_N^\dagger \mathcal{N}G_0 = 0,$$

onde usamos (V.40) e (V.42.b). Além destes, podemos construir estados do tipo

$$\xi_P^\dagger \eta_H^\dagger G_0, \quad (\text{V.57.b})$$

que, facilmente vemos, tendo em conta (V.22), também satisfazem a condição $\alpha = 0$. Analisemos agora os autovalores dos estados (V.57) relativos ao operador \mathcal{H} . Usando (V.38), temos

$$\mathcal{H}\zeta_N^\dagger G_0 = \Omega_N \zeta_N^\dagger G_0$$

ou, usando (V.42.a),

$$E = E_0^{RPA} + \Omega_N. \quad (V.58)$$

Por outro lado,

$$\mathcal{H}\xi_P^\dagger \eta_H^\dagger G_0 = (\Omega_P + \Omega_H)\xi_P^\dagger \eta_H^\dagger G_0$$

ou, novamente usando (V.42),

$$E = E_0^{RPA} + (\Omega_P + \Omega_H) \quad (V.59)$$

Como sabemos (Tho 61), os Ω_N são todos positivos e de acordo com o resultado (A.23) do Apêndice A, os $\Omega_P + \Omega_H$ também são positivos. Deste modo, as energias obtidas em (V.58) e (V.59) são sempre superiores à obtida em (V.55.a). Concluimos, portanto, que G_0 é o estado fundamental procurado.

Para obtermos uma expressão para o estado fundamental G_0 , tentemos o *ansatz*

$$G_0(x, y, z) = \exp\left\{\sum_{i<j} \sum_{\alpha<\beta} x_{ij} y_{\alpha\beta} U_{ij,\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha i} \sum_{\beta j} z_{\alpha i} z_{\beta j} W_{\alpha i, \beta j}\right\}. \quad (V.60)$$

Claramente, podemos sempre escolher a matriz W simétrica. Substituindo, então, o hermitiano conjugado do operador ξ_P^\dagger , definido em (V.20.a), e o *ansatz* (V.60) em (V.54), obtemos

$$\left[\sum_{i<j} X_{ij}^{P*} \frac{\partial}{\partial x_{ij}} - \sum_{\alpha<\beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} y_{\alpha\beta}\right] \exp\left\{\sum_{i<j} \sum_{\alpha<\beta} x_{ij} y_{\alpha\beta} U_{ij,\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha i} \sum_{\beta j} z_{\alpha i} z_{\beta j} W_{\alpha i, \beta j}\right\} = 0,$$

ou

$$\left[\sum_{i<j} X_{ij}^{P*} \sum_{\alpha<\beta} y_{\alpha\beta} U_{ij,\alpha\beta} - \sum_{\alpha<\beta} Y_{\alpha\beta}^{P*} y_{\alpha\beta}\right] = 0,$$

ou ainda,

$$\left[\sum_{\alpha<\beta} \left(\sum_{i<j} X_{ij}^{P*} U_{ij,\alpha\beta} - Y_{\alpha\beta}^{P*}\right) y_{\alpha\beta}\right] G_0 = 0,$$

que implica em

$$Y_{\alpha\beta}^{P*} = \sum_{i<j} X_{ij}^{P*} U_{ij,\alpha\beta}. \quad (\text{V.61.a})$$

Atuando de modo analogo, substituímos η_H , dado em (V.20.b), obtendo

$$Y_{ij}^H = \sum_{\alpha<\beta} U_{ij,\alpha\beta} X_{\alpha\beta}^H. \quad (\text{V.61.b})$$

Finalmente, substituindo-se o hermitiano de ζ_N^\dagger , dado em (V.4), obtemos

$$S_{\beta j}^{N*} = \sum_{\alpha i} R_{\alpha i}^{N*} W_{\alpha i,\beta j}. \quad (\text{V.61.c})$$

As matrizes U e W podem, então, ser determinadas, uma vez resolvidos completamente os problemas de autovalores (V.12) e (V.30'). Obtidas U e W , encontramos, a partir de (V.60), $G_0(x, y, z)$, com a qual, utilizando (IV.41), chegamos ao estado fundamental correlacionado

$$|\Psi_0\rangle = \exp \left\{ \sum_{i<j} \sum_{\alpha<\beta} b_i^\dagger b_j^\dagger b_\beta b_\alpha U_{ij,\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha i} \sum_{\beta j} b_\alpha b_i^\dagger b_\beta b_j^\dagger W_{\alpha i,\beta j} \right\} |\Phi_0\rangle. \quad (\text{V.62})$$

Deste resultado observamos que o estado fundamental correlacionado conserva o mesmo número de partículas do estado fundamental de Hartree-Fock, como era de se esperar. A expansão da exponencial (V.62) nos mostra a estrutura desse estado em termos de configurações 2p-2h, 4p-4h, etc. sobrepostas ao estado fundamental de Hartree-Fock $|\Phi_0\rangle$. Observamos também que existe uma dupla contagem de configurações do tipo $p_1 p_2 - h_1 h_2$ e $p_1 h_1 - p_2 h_2$. Claramente este fato está ligado à aproximação de quasi-boson, onde tratamos como se fossem bósons independentes os operadores dos tipos pp ($b_i^\dagger b_j^\dagger$), hh ($b_\beta b_\alpha$) e ph ($b_\alpha b_i^\dagger$). Agora, se nos limitarmos aos estados mais baixos em energia, é razoável supor que eles sejam compostos pelo estado $|\Psi_0\rangle$ acrescido de um par ph (se $\alpha = 0$), pp (se $\alpha = +2$), ou hh (se $\alpha = -2$). Então para grandezas relativas, isto é, medidas em relação ao estado fundamental $|\Psi_0\rangle$, tais como energias de excitação e taxas de transição, a contribuição dominante se deve a esse par adicional. É claro que no caso de apenas um par a aproximação de quasi-bóson funciona

bem. Portanto, do que foi discutido acima, concluímos que os valores obtidos pela RPA para grandezas absolutas podem apresentar grandes erros, enquanto que os valores obtidos para grandezas relativas têm boa confiabilidade. Na verdade, nós estamos no caso em que dois erros semelhantes praticamente se cancelam.

V-6) Excitações Partícula-Buraco

Vimos na seção anterior que, obtida a função $G_0(x, y, z)$, solução simultânea das equações (V.42) com autovalores nulos, podemos construir o estado

$$|\Psi_0\rangle = |\Psi[G_0]\rangle, \quad (\text{V.63})$$

na notação da seção IV-4, que é uma representação aproximada, no sentido de RPA, para o estado fundamental do sistema de A nucleons. Isso, desde que o vácuo de Hartree-Fock $|\Phi_0\rangle$ seja uma aproximação razoável para esse estado. A forma explícita de $|\Psi_0\rangle$ está dada em (V.62), onde fica claro que ele inclui correlações tanto partícula-buraco ($ph - ph$) como partícula-partícula e buraco-buraco ($pp - hh$). Por esse motivo, chamamos $|\Psi_0\rangle$ de estado fundamental correlacionado. Por construção, ele é o vácuo dos bósons ζ_N , ξ_P e η_H . Apesar da violação do princípio de Pauli associada à aproximação de quasi-bóson que comentamos no final da seção anterior, $|\Psi_0\rangle$ deve ser uma aproximação melhor para o estado fundamental do que o vácuo de Hartree-Fock $|\Phi_0\rangle$, que não inclui correlações. Esse, no entanto, não é o único nem mesmo o principal¹ resultado da RPA. Uma vez resolvidas as equações da RPA partícula-buraco (V.12) podemos construir as funções $\zeta_N^\dagger G_0$ que são, como já vimos, soluções de (V.42) com $\alpha = 0$, isto é,

$$\mathcal{H}\zeta_N^\dagger G_0 = \Omega_N \zeta_N^\dagger G_0, \quad (\text{V.64.a})$$

$$\mathcal{N}\zeta_N^\dagger G_0 = 0. \quad (\text{V.64.b})$$

Com essas funções podemos construir os seguintes estados excitados do sistema de A nucleons

$$\begin{aligned} |\Psi_N\rangle &= |\Psi[\zeta_N^\dagger G_0]\rangle \\ &= \sum_{\alpha i} \left(R_{\alpha i}^N b_\alpha b_i^\dagger - S_{\alpha i}^N b_i b_\alpha^\dagger \right) |\Psi_0\rangle, \end{aligned} \quad (\text{V.65})$$

¹ Na verdade, devido à dupla contagem mencionada no final da seção V-5, a RPA pode não ser uma boa maneira para calcular propriedades estáticas do estado fundamental.

onde usamos (V.4), (IV.42.c) e (IV.44.c). Vemos claramente nessa equação que esses estados correspondem a excitações partícula-buraco do estado fundamental correlacionado $|\Psi_0\rangle$. Os autovalores Ω_N em (V.64.a) são as energias de excitação correspondentes, isto é,

$$\Omega_N = E_N - E_0^{RPA}. \quad (V.66)$$

É fácil mostrar, usando o homomorfismo mencionado na seção IV-4, em particular a equação (IV.38), que os estado obtidos em (V.65) são ortogonais entre si e ao estado fundamental correlacionado $|\Psi_0\rangle$. Com efeito,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_N | \Psi_{N'} \rangle &= (\zeta_N^\dagger G_0, \zeta_{N'}^\dagger G_0)_B \\ &= (G_0, \zeta_N \zeta_{N'}^\dagger G_0)_B \\ &= (G_0, [\zeta_N, \zeta_{N'}^\dagger] G_0)_B \\ &= \delta_{NN'} (G_0, G_0)_B \\ &= \delta_{NN'} \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (V.67.a)$$

e

$$\begin{aligned} \langle \Psi_N | \Psi_0 \rangle &= (\zeta_N^\dagger G_0, G_0)_B \\ &= (G_0, \zeta_N G_0)_B \\ &= 0, \end{aligned} \quad (V.67.b)$$

onde usamos (V.6.b) e (V.55).

V-7) Excitações Partícula-Partícula ($\alpha = +2$) e Buraco-Buraco ($\alpha = -2$)

Procedendo analogamente ao que fizemos na seção anterior, podemos, resolvida a equação da RPA partícula-partícula e buraco-buraco, isto é, a equação (V.30'), construir os operadores bosônicos ξ_P^\dagger e η_H^\dagger e com eles as funções $\xi_P^\dagger G_0$ e $\eta_H^\dagger G_0$ que serão soluções da (V.42) com $\alpha = +2$ e $\alpha = -2$, respectivamente. Temos, portanto,

$$\mathcal{H} \xi_P^\dagger G_0 = \Omega_P \xi_P^\dagger G_0, \quad (V.68.a)$$

$$\mathcal{N}\xi_P^\dagger G_0 = +2\xi_P^\dagger G_0, \quad (V.68.b)$$

e

$$\mathcal{H}\eta_H^\dagger G_0 = \Omega_H \eta_H^\dagger G_0, \quad (V.69.a)$$

$$\mathcal{N}\eta_H^\dagger G_0 = -2\eta_H^\dagger G_0. \quad (V.69.b)$$

Com as soluções de (V.68) podemos construir os seguintes estados do sistema de A+2 nucleons:

$$\begin{aligned} |\Psi_P\rangle &= |\Psi[\xi_P^\dagger G_0]\rangle \\ &= \left(\sum_{i<j} X_{ij}^P b_i^\dagger b_j^\dagger - \sum_{\alpha<\beta} Y_{\alpha\beta}^P b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger \right) |\Psi_0\rangle \end{aligned} \quad (V.70)$$

onde usamos (V.20.a), (IV.42.a) e (IV.44.b). Trata-se, portanto, de excitações partícula-partícula de $|\Psi_0\rangle$. Os autovalores em (V.68.a) são as correspondentes energias de excitação, isto é,

$$\Omega_P = E_P - E_0^{RPA}. \quad (V.71)$$

Por outro lado, com as soluções de (V.69) construímos os seguintes estados do sistema de A-2 nucleons:

$$\begin{aligned} |\Psi_H\rangle &= |\Psi[\eta_H^\dagger G_0]\rangle \\ &= \left(\sum_{\alpha<\beta} X_{\alpha\beta}^{H*} b_\beta b_\alpha - \sum_{i<j} Y_{ij}^{H*} b_j b_i \right) |\Psi_0\rangle, \end{aligned} \quad (V.72)$$

onde usamos (V.20.b), (IV.42.b) e (IV.44.a). Vemos, portanto, que se trata de excitações buraco-buraco de $|\Psi_0\rangle$. Os autovalores em (V.69.a) são as energias de excitação correspondentes, isto é,

$$\Omega_H = E_H - E_0^{RPA}. \quad (V.73)$$

De modo análogo ao utilizado na seção anterior é fácil demonstrar a ortogonalidade desses estados, isto é,

$$\langle \Psi_P | \Psi_{P'} \rangle = \delta_{PP'} \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle, \quad (V.74.a)$$

$$\langle \Psi_H | \Psi_{H'} \rangle = \delta_{HH'} \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle, \quad (\text{V.74.b})$$

$$\langle \Psi_P | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_H | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (\text{V.74.c})$$

$$\langle \Psi_P | \Psi_H \rangle = \langle \Psi_P | \Psi_N \rangle = \langle \Psi_H | \Psi_N \rangle = 0. \quad (\text{V.74.d})$$

CAPÍTULO VI

APLICAÇÃO NUMÉRICA DAS EQUAÇÕES DA RPA $pp + hh$

VI-1) Introdução

Passaremos neste capítulo a uma aplicação numérica das equações da RPA nos canais pp e hh . Como ilustração, efetuamos os cálculos para os casos do ^{210}Pb (canal pp) e ^{206}Pb (canal hh) usando duas interações efetivas distintas: a primeira, mais simples, uma interação gaussiana, e a segunda, mais sofisticada, devida a Gogny (Gog 75).

Na seção VI-2 identificamos o espaço modelo utilizado. Na seção VI-3 apresentamos as interações efetivas escolhidas. Na seção VI-4 introduzimos a base de estados de duas partículas que é utilizada, na seção VI-5, para o cálculo dos elementos de matriz das interações. Finalizamos este capítulo apresentando, na seção VI-6, os resultados numéricos obtidos.

V-2) Espaço Modelo

Para todos os cálculos aqui realizados o espaço modelo escolhido é o apresentado na figura 1. Os valores das energias de partícula única são tirados da experiência. Consideramos o ^{208}Pb como um caroço inerte correlacionado no sentido da RPA. Lidamos apenas com os nêutrons (ou buracos de nêutrons) de valência. Para as funções de onda radiais tomamos as de um oscilador harmônico com parâmetro de comprimento $b=2.45$ fm.

VI-3) Interações Efetivas

Sempre que desejamos realizar um cálculo de estrutura nuclear se faz necessário escolher uma interação efetiva. O procedimento mais satisfatório do ponto de vista teórico seria deduzí-la a partir da interação nucleon-nucleon livre, para a qual existem diversas versões na literatura que conseguem reproduzir as propriedades do dêuteron e o espalhamento nucleon-nucleon com energia incidente abaixo do limiar para criação de píons. Tal procedimento pode ser implementado através da teoria de Brueckner (matriz G). Essas interações efetivas realísticas, além de envolverem um esforço computacional considerável, não reproduzem muito bem os dados experimentais. Alternativamente, podem ser usadas as interações efetivas fenomenológicas, para as quais se assume uma forma funcional conveniente, com

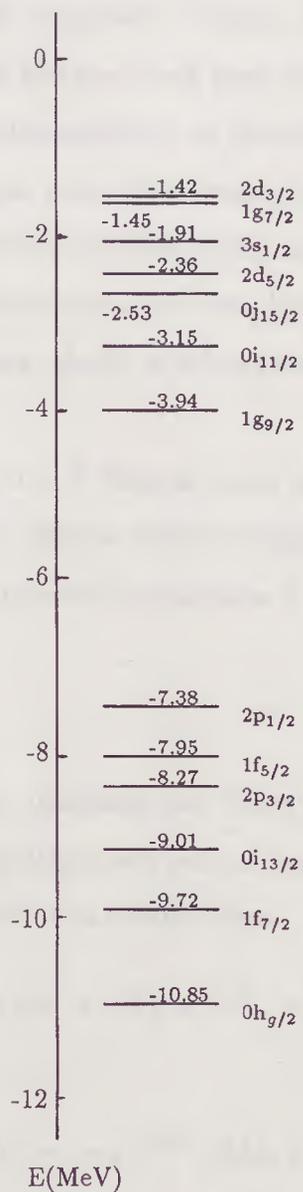


Fig. 1. Níveis de partícula única para nêutrons na vizinhança do ^{208}Pb .

parâmetros livres a serem determinados de modo a reproduzir certos dados experimentais. Essas parametrizações podem ser diferentes para diferentes autores. Alguns introduzem dependências explícitas na velocidade e na densidade. Outros incluem forças de três corpos de alcance nulo, as quais, em um cálculo de Hartree-Fock para núcleos par-par, pode-se mostrar (VaB-72) que são equivalentes a uma dependência na densidade. As vantagens dessas interações efetivas fenomenológicas são que, além de reproduzirem bem um grande número de dados experimentais, tornam os exaustivos cálculos computacionais, até certo ponto, mais simples. A grande desvantagem é a inexistência de uma ligação com algum tipo de teoria mais fundamental da força nuclear. Resta, ainda, a arbitrariedade de sua escolha, que, como dissemos, depende de cada autor.

Neste capítulo, cujo principal objetivo é ilustrar uma aplicação das equações da RPA pp+hh, nos restringiremos a interações efetivas fenomenológicas. Vamos escolher duas interações distintas: primeiramente, uma interação gaussiana e, posteriormente, a interação de Gogny, as quais passamos a descrever.

a) Interação Gaussiana

A primeira interação aqui adotada, utilizada por Vary e Ginocchio (VaG 71), é dada simplesmente por uma forma gaussiana multiplicada por termos que incluem todos os possíveis tipos de troca. Desta maneira, o potencial fica escrito como

$$V_{Gauss}(r) = f(r/\mu)[W + BP_\sigma - HP_\tau - MP_\sigma P_\tau] \quad (VI.1)$$

onde

$$P_\sigma | SM_S \rangle = (-1)^{1+S} | SM_S \rangle$$

$$P_\tau | TM_T \rangle = (-1)^{1+T} | TM_T \rangle$$

são operadores de troca de spin e isospin, respectivamente, $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ e

$$f(r/\mu) = e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2/\mu^2},$$

sendo \vec{r}_1 e \vec{r}_2 as posições dos dois nucleons que estão interagindo e os parâmetros da interação são dados na tabela 1.

Uma gaussiana simula a parte de curto alcance e a outra a de alcance intermediário da força nuclear.

A parte de spin-órbita é mantida a mesma que a dada por Skyrme (Sky 56,59), a saber,

$$V_{LS} = ix_0(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \vec{k} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} \quad (\text{VI.4})$$

Para vermos que esse é efetivamente um termo spin-órbita notemos que ele pode ser reescrito da seguinte forma:

$$V_{LS} = 2ix_0 \vec{S} \cdot \vec{p} \times V(\vec{r}) \vec{p},$$

onde utilizamos $\vec{p} = \vec{k}$ ($\hbar = 1$), $\vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)$ e $V(\vec{r}) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Agora somando o termo identicamente nulo $-2ix_0 \vec{S} \cdot V(\vec{r}) \vec{p} \times \vec{p}$ e posteriormente multiplicando e dividindo por r^2 , obtemos

$$\begin{aligned} V_{LS} &= 2ix_0 \vec{S} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \left(\vec{r} \cdot \vec{r} \vec{p} \times V(\vec{r}) \vec{p} - \vec{r} \cdot V(\vec{r}) \vec{r} \vec{p} \times \vec{p} \right) \right] \\ &= 2ix_0 \vec{S} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \left(\vec{r} \cdot \vec{p} \vec{r} \times V(\vec{r}) \vec{p} - \vec{r} \cdot V(\vec{r}) \vec{p} \vec{r} \times \vec{p} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + i\vec{r} \cdot \mathbf{1} \times V(\vec{r}) \vec{p} - i\vec{r} \cdot V(\vec{r}) \mathbf{1} \times \vec{p} \right) \right], \end{aligned}$$

onde usamos ($\hbar = 1$)

$$\vec{r} \vec{p} - \vec{p} \vec{r} = i(\vec{e}_x \vec{e}_x + \vec{e}_y \vec{e}_y + \vec{e}_z \vec{e}_z) = i\mathbf{1}.$$

Continuando, temos,

$$\begin{aligned} V_{LS} &= 2x_0 \vec{S} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \left(\vec{r} \cdot i[\vec{p}, V(\vec{r})] \vec{r} \times \vec{p} \right) \right] \\ &= 2x_0 \vec{S} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \left(\vec{r} \cdot \nabla V(\vec{r}) \vec{r} \times \vec{p} \right) \right] \\ &= 2x_0 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (\vec{L} \cdot \vec{S}), \end{aligned} \quad (\text{VI.5})$$

que é a forma usual de um termo de spin-órbita.

Deste modo, a interação completa fica escrita como

$$\begin{aligned} V = \sum_{i=1}^2 e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2 / \mu_i^2} (W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau) + \\ + i x_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \vec{k} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} + \\ + t_0 (1 + P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho \left(\frac{1}{2} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \right), \end{aligned} \quad (\text{VI.6})$$

onde $\vec{k} = \frac{1}{2i} (\nabla_1 - \nabla_2)$. Além disso, $t_0, x_0, W_i, B_i, H_i, M_i$, e μ_i são parâmetros determinados a partir da experiência. Em primeiro lugar, é determinado x_0 do termo spin-órbita de maneira independente dos outros parâmetros pelo ajuste da separação ($\epsilon_{p_{3/2}} - \epsilon_{p_{1/2}}$) no ^{16}O . Em seguida, são determinados os demais parâmetros de modo a reproduzir certas propriedades dos núcleos esféricos ^{16}O e ^{90}Zr . O resultado final desse ajuste está dado na Tabela 2.

i	$\mu_i[\text{fm}]$	W_i	B_i	H_i	$M_i[\text{Mev}]$
1	0.7	-402.4	-100	-496.2	-23.56
2	1.2	-21.30	-11.77	37.27	-68.81

Tabela 2 - Parâmetros da interação de Cogeny.

Além disso, $x_0 = 115[\text{Mev fm}^5]$ e $t_0 = 1350[\text{Mev fm}^4]$.

Analisando os diversos termos do potencial acima, vemos que eles são invariantes por rotação (incluindo o spin), portanto conservam o momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. É fácil ver também que L^2 e S^2 são conservados.

VI-4) Base de Estados de Duas Partículas

Devido à invariância rotacional da interação efetiva é conveniente trabalharmos com estados com bom momento angular total. Como a interação efetiva não distingue prótons de nêutrons, podemos também escolher estados com bom isospin total $\vec{T} = \vec{t}_1 + \vec{t}_2$. Escolhemos então a base

$$|ab : JM; TM_T\rangle = |(n_a l_a j_a), (n_b l_b j_b) : JM; TM_T\rangle$$

$$= \sum_{m_a m_b} \begin{bmatrix} j_a & j_b & J \\ m_a & m_b & M \end{bmatrix} | n_a l_a j_a m_a, n_b l_b j_b m_b \rangle | TM_T \rangle, \quad (\text{VI.7.a})$$

onde o estado de isospin é dado por

$$| TM_T \rangle = \sum_{\mu_a \mu_b} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ \mu_a & \mu_b & M_T \end{bmatrix} | 1/2 \mu_a 1/2, \mu_b \rangle. \quad (\text{VI.7.b})$$

Os símbolos do tipo

$$\begin{bmatrix} j_a & j_b & J \\ m_a & m_b & M \end{bmatrix},$$

em nossa notação (Pal 83), representam coeficientes de Clebsh-Gordan. Levando ainda em conta a antissimetrização, vamos trabalhar com os estados

$$| a, b : JM; TM_T \rangle = \frac{1}{[2(1 + \delta_{n_a n_b} \delta_{l_a l_b} \delta_{j_a j_b})]^{1/2}} [| (n_a l_a j_a), (n_b, l_b, j_b) : JM; TM_T \rangle - (-1)^{j_a + j_b - J} (-1)^{1/2 + 1/2 - T} | (n_b, l_b, j_b), (n_a l_a j_a) : JM; TM_T \rangle] \quad (\text{VI.8})$$

onde $| \)$ indica estados antissimetrizados e $| \)$ estados não-antissimetrizados. Ambos são estados normalizados. Nas expressões acima $| nljm \rangle$ denota, em princípio, um estado de partícula-única na base de Hartree-Fock cujo campo médio estamos supondo esfericamente simétrico. Na prática, nos cálculos numéricos que realizaremos, vamos tomar auto-estados para um potencial de oscilador harmônico com parâmetro de comprimento $b=2.45$ fm, isto é,

$$\langle \vec{r} | nljm \rangle = R_{nl}(r) \sum_{m_l m_s} \begin{bmatrix} l & 1/2 & j \\ m_l & m_s & m \end{bmatrix} Y_{m_l}^l(\theta\phi) \chi_{m_s}^{1/2}, \quad (\text{VI.9})$$

onde $\chi_{m_s}^{1/2}$ é o estado de spin, $Y_{m_l}^l$ são os harmônicos esféricos e $R_{nl}(r)$ é a função radial dada por

$$R_{nl}(r) = b^{-(l+3/2)} \left[\frac{2\Gamma(n+l+3/2)}{n!} \right]^{1/2} r^{l+1} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{b}\right)^2\right] \sum_{k=0}^n (-1)^k \Gamma^{-1}(k+l+3/2) \binom{n}{k} \left(\frac{r}{b}\right)^{2k}. \quad (\text{VI.10})$$

VI-5) Cálculo dos Elementos de Matriz das Interações

a) Potencial Gaussiano

Com os resultados da seção 1 do apêndice B, vemos que os elementos de matriz do potencial gaussiano na base antissimetrizada (VI.8), são dados por

$$\begin{aligned}
 & (a'b' : JM; TM_T | V_{Gaus} | ab : JM; TM_T) = \\
 & = \frac{1}{2} [(1 + \delta_{ab})(1 + \delta_{a'b'})]^{-1/2} \sum_{L, L', S} \sum_{\mathcal{N}\mathcal{L}} \sum_{nl, n'l'} \sum_{\mathcal{J}} \begin{pmatrix} l_a & 1/2 & j_a \\ l_b & 1/2 & j_b \\ L & S & J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l'_a & 1/2 & j'_a \\ l'_b & 1/2 & j'_b \\ L & S & J \end{pmatrix} \\
 & \times \langle \mathcal{N}\mathcal{L}, nl : L || n_a l_a, n_b l_b : L \rangle \langle \mathcal{N}\mathcal{L}, n'l' : L' || n'_a l'_a, n'_b l'_b : L' \rangle \\
 & \times 2[1 - (-1)^{l+S+T}] U(\mathcal{L}lJS; L\mathcal{J}) U(\mathcal{L}'l'JS; L'\mathcal{J}) \\
 & \times \int_0^\infty r^2 R_{n'l'}(r) f(r/\mu) R_{nl}(r) dr
 \end{aligned} \tag{VI.11}$$

onde $f(r/\mu)$ é a função de forma do potencial, com μ sendo o alcance do potencial,

$$\begin{pmatrix} l_a & s_a & j_a \\ l_b & s_b & j_b \\ L & S & J \end{pmatrix}$$

é nossa notação (Pal 83) para símbolos $9j$, $\langle \mathcal{N}\mathcal{L}, nl : L || n_a l_a, n_b l_b : L \rangle$ é nossa notação (Pal 83) para coeficientes de Moshinsky e $U(\mathcal{L}lJS; L\mathcal{J})$ é nossa notação (Pal 83) para símbolos $6j$. Para o nosso caso em que a função de forma é dada por uma gaussiana, a integral anterior é proporcional às integrais de Talmi, as quais são dadas pela equação (B.6) do apêndice B.

b) Potencial de Gogny

Termos Gaussianos

Os termos gaussianos do potencial de Gogny são tratado da mesma maneira que no parágrafo anterior.

Termo dependente da densidade

Começamos efetuando uma análise qualitativa deste termo. Primeiramente vemos que a dependência espacial é na forma de uma delta de Dirac. Com isso a parte espacial da função

de onda deve ser simétrica para o elemento de matriz não se anular. Já devido a presença do operador $(1 + P_\sigma)$, o qual é não nulo somente se o spin total for igual a 1, implica que a parte de spin da função de onda também deve ser simétrica. Resta-nos analisar a parte de isospin da função de onda, que deve ser antissimétrica para que a função de onda total seja antissimétrica. Mas como nos restringiremos a tratar somente excitações nêutron-nêutron, cujo isospin total é igual a 1, e isto quer dizer uma função de onda de isospin simétrica, a função de onda total seria simétrica, o que não é permitido pelo princípio de Pauli. Assim o termo dependente da densidade, para o caso nêutron-nêutron, se anula.

Potencial Spin-Órbita

Os elementos de matriz do termo de spin-órbita do potencial de Gogny são calculados em detalhes no apêndice B seção 2. De acordo com aqueles resultados, temos

$$(12 : JM; TM_T | V_{LS} | 34 : JM; TM_T) = -32x_0[(1 + \delta_{1,2})(1 + \delta_{3,4})]^{-1/2} \\ \sum_L \sum_{L'} \begin{pmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ L & 1 & J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & 1/2 & j_3 \\ l_4 & 1/2 & j_4 \\ L' & 1 & J \end{pmatrix} \sum_{M_L(M_S)} \sum_{M'_L(M'_S)} \begin{bmatrix} L & 1 & J \\ M_L & M_S & M_J \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L' & 1 & J \\ M'_L & M'_S & M'_J \end{bmatrix} \\ \sum_{q,q'} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q & q' & q + q' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ M'_S & q' - q & M_S \end{bmatrix} \\ \left[\mathcal{R}' - (-1)^{l_1+l_2+L} \mathcal{R}'(1,2) - (-1)^{l_3+l_4+L} \mathcal{R}'(3,4) + (-1)^{l_1+l_2+l_3+l_4+L+L'} \mathcal{R}'(1,2;3,4) \right], \quad (VI.12)$$

com (1,2) significando as trocas $(n_1 \leftrightarrow n_2; l_1 \leftrightarrow l_2; m_1 \leftrightarrow m_2)$ e da mesma maneira para (3,4). Cada função \mathcal{R}' é dada por

$$\mathcal{R}' = I_r I'_\Omega(1) + I_r I'_\Omega(2) + I_r I'_\Omega(3) + I_r I'_\Omega(4), \quad (VI.13)$$

sendo

$$I_r = \int r^2 dr \left(O_{l_1} R_{n_1, l_1} \right) \left(O_{l_3} R_{n_3, l_3} \right) R_{n_2, l_2} R_{n_4, l_4} \quad (VI.14.a)$$

e

$$I'_\Omega = \frac{[l_1][l_3]}{4\pi} ([l_1 + 1][l_2][l_3 + 1][l_4])^{\frac{1}{2}} \sum_{L''} \frac{1}{[L'']} \begin{bmatrix} l_1 + 1 & l_2 & L'' \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & L'' & L \\ q & M'' & M \end{bmatrix}$$

$$\times \begin{bmatrix} l_3 + 1 & l_4 & L'' \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & L'' & L' \\ q & M'' & M' \end{bmatrix} U(1, l_1 + 1, L, l_2; l_1, L'') U(1, l_3 + 1, L', l_4; l_3, L''),$$

(VI.14.b)

onde $R_{n,l}$ é a função radial dada em (VI.10), $Y_{m_l}^l$ são os harmônicos esféricos e os operadores O_l e O'_l são dados por

$$O_l = \left(\frac{l+1}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right)$$

e

$$O'_l = \left(\frac{l}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{l+1}{r} \right).$$

Além disso, $I_r I'_\Omega(1) = I_r I'_\Omega$, $I_r I'_\Omega(2) = I_r I'_\Omega$ [com o operador O_{l_3} repassado para O'_{l_3} e $l_3 + 1$ em I'_Ω repassado para $l_3 - 1$.], $I_r I'_\Omega(3) = I_r I'_\Omega$ [com o operador O_{l_1} repassado para O'_{l_1} e $l_1 + 1$ em I'_Ω repassado para $l_1 - 1$.] e $I_r I'_\Omega(4) = I_r I'_\Omega$ [com os operadores O_{l_1} e O_{l_3} repassados para O'_{l_1} e O'_{l_3} , respectivamente e $l_1 + 1$ e $l_3 + 1$ em I'_Ω repassados para $l_1 - 1$ e $l_3 - 1$, respectivamente.].

VI-6) Resultados

Apresentamos a seguir os resultados numéricos obtidos utilizando ambas as interações (Gaussiano e de Gogny) apresentados anteriormente, além de uma comparação como os resultados experimentais (LeS 78).

Primeiramente, na figura 2, temos os espectros das energias de excitação observados (LeS 78) e calculados para o chumbo ^{210}Pb .

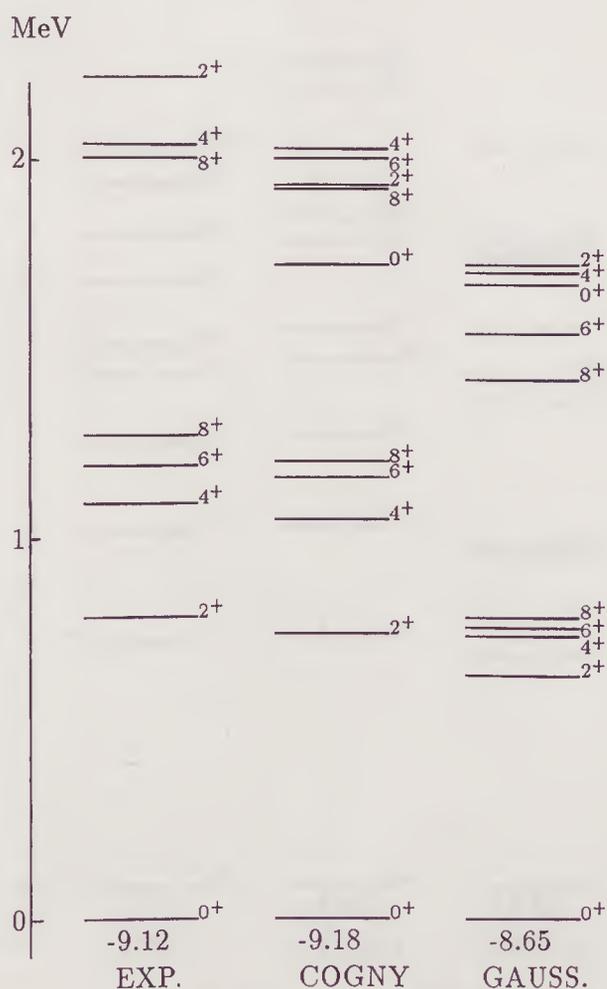


Fig. 2. Espectro do ^{210}Pb

Todos os níveis conhecidos com paridade positiva abaixo do mais alto desenhado em cada espectro foram incluídos. Abaixo de cada espectro está, em MeV, a energia do estado fundamental em relação ao ^{208}Pb .

Na figura 3, temos os espectros das energias de excitação observados (LeS 78) e calculados para o chumbo ^{206}Pb . Todos os níveis conhecidos com paridade positiva abaixo do mais alto desenhado em cada espectro foram incluídos. Abaixo de cada espectro está, em MeV, a energia do estado fundamental em relação ao ^{208}Pb .

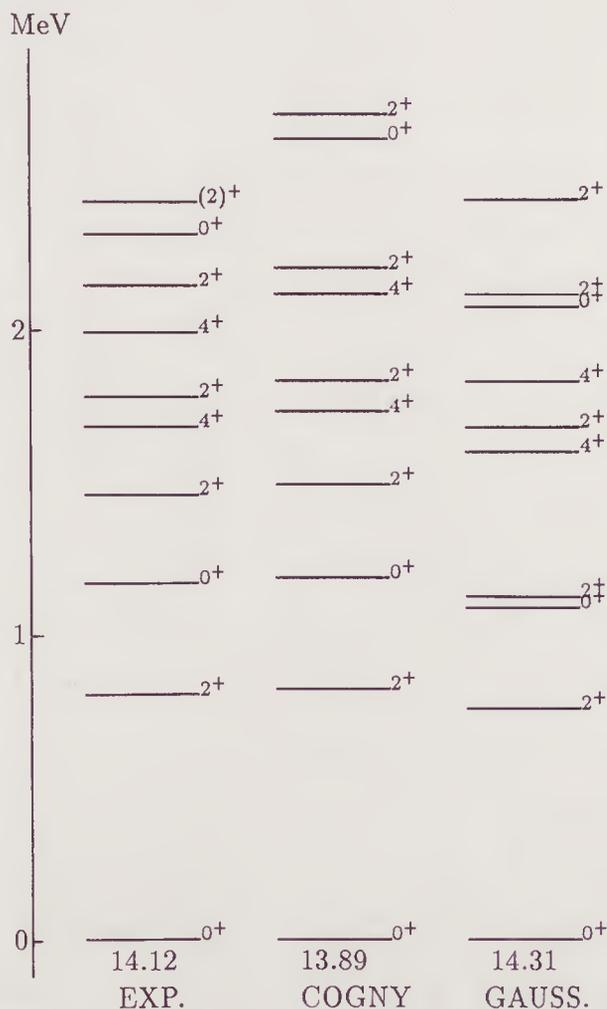


Fig. 3. Espectro do ^{206}Pb

Vemos que em ambos os casos a interação de Gogny dá resultados de qualidade superior aos da interação Gaussiana. Notamos ainda que o valor mínimo para a soma $\Omega_P + \Omega_H$ é positivo, sendo de 5.00 MeV, 4.71 MeV e 5.66 MeV nos caso experimental e teórico com as interações de Gogny e Gaussiana, respectivamente. Isso verifica, nesse caso particular, a propriedade geral (A.23) demonstrada no apêndice A.

CAPÍTULO VII

CONCLUSÃO

O objetivo desta dissertação foi um estudo unificado da teoria RPA nos canais partícula-buraco, partícula-partícula e buraco-buraco.

Utilizando o método de coordenadas geradoras com um estado de "teste" construído como uma superposição de todas as possíveis funções de onda produto na vizinhança do estado de Hartree-Fock, acabamos por obter, após alguma manipulação, uma equação para osciladores harmônicos acoplados na representação de Bargmann. Como condições para o desacoplamento destes osciladores, obtivemos, de maneira unificada, as equações da RPA ph , pp e hh . As equações da RPA ph se separam naturalmente das equações da RPA pp e hh . Além disso, é possível ver claramente uma analogia formal entre as vibrações normais (vibrações ph) e as vibrações de emparelhamento (vibrações pp e hh). Nota-se que o mesmo sistema de equações descreve as vibrações partícula-partícula (RPA pp) e buraco-buraco (RPA hh). Apresentamos um critério simples que permite distinguir quais de suas soluções correspondem a excitações partícula-partícula e quais correspondem a excitações buraco-buraco. Generalizando uma propriedade bem conhecida da RPA ph , provamos também que qualquer solução das equações da RPA $pp+hh$ deve ter norma não nula e que se somarmos um valor de energia associado a uma vibração pp com um valor de energia associado a uma vibração hh , sempre obtemos um valor positivo, bastando para isso que o estado de Hartree-Fock utilizado seja estritamente estável contra a formação de pares sem alteração do valor médio do número de partículas.

Passamos então a estudar o estado fundamental assim como os estados excitados destes osciladores. Primeiramente notamos que o estado fundamental apresenta o problema de sobrecontagem das configurações $p_1h_1 - p_2h_2$ e $p_1p_2 - h_1h_2$. Esse defeito, como vimos, é uma consequência clara da aproximação efetuada, que implica em tratarmos como bósons independentes os pares ph , pp e hh . Deste modo, a teoria da RPA não deve ser utilizada para o estudo de propriedades estáticas do estado fundamental e sim para propriedades dinâmicas, ou seja, grandezas relativas entre estados excitados e o estado fundamental. Quanto aos estados excitados, mostramos que cada excitação, a saber ph , pp e hh , está ligada à criação

de um tipo de bóson e, além disso, que as energias de excitação ph , assim como a soma de duas energias de excitação $pp + hh$, referidas acima, são sempre positivas (se o estado HF for estritamente estável não só contra excitações ph mas também contra a criação de pares pp e hh). Demonstramos ainda a ortogonalidade de todos esses estados entre si. Como ilustração das equações da RPA $pp + hh$ fazemos um cálculo numérico para o ^{210}Pb e o ^{206}Pb . Encontramos também em nossos resultados numéricos que apesar das energias de excitação pp serem negativas, a soma das energias de excitação $pp + hh$ são positivas, concordando com o resultado teórico.

APÊNDICE A

Estabilidade da Solução de H.F. e suas Implicações

A-1) Existência das Soluções da RPA

Claramente, a equação (IV.32.a) reescrita em notação matricial assume a forma

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{H} - \lambda \mathbf{N} \rangle_{\Phi(x,y,z)} = E_0^{H.F.} - \lambda n_0 + \frac{1}{2} (z^T \quad z^\dagger) \begin{pmatrix} D & E \\ E^\dagger & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z^* \\ z \end{pmatrix} + \\ + (x^T \quad y^\dagger) \begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & C^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^* \\ y \end{pmatrix} + \\ - 2\lambda (x^T \quad y^\dagger) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^* \\ y \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (A.1)$$

onde também está claro que

$$\langle \mathbf{N} \rangle_{\Phi(x,y,z)} = n_0 + 2 (x^T \quad y^\dagger) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^* \\ y \end{pmatrix}, \quad (A.2)$$

sendo que T representa transposição matricial. Dessas duas equações notamos o seguinte:

1) Vem de (A.1) que efetivamente $\langle H - \lambda N \rangle_{\Phi(x,y,z)}$ é estacionário no ponto $(x, y, z) = (0, 0, 0)$, ou seja, no estado produto $|\Phi(0,0,0)\rangle = |\Phi_0\rangle$, o vácuo de H.F.. Isso decorre de nossa própria hipótese.

2) O ponto estacionário acima independe da escolha do multiplicador de Lagrange λ . Na verdade esse multiplicador de Lagrange fica indeterminado pela condição $\langle \mathbf{N} \rangle_{\Phi(0,0,0)} = n_0$ como mostra (A.2). Isso resulta do fato de o estado de H.F., $|\Phi_0\rangle$, ter número determinado de partículas, isto é,

$$\mathbf{N} |\Phi_0\rangle = n_0 |\Phi_0\rangle. \quad (A.3)$$

3) Notemos ainda que decorre de (A.2) que a condição

$$\langle \mathbf{N} \rangle_{\Phi(x,y,z)} = n_0 \quad (A.4)$$

permanece válida no entorno do ponto $(0,0,0)$, na aproximação quadrática, desde que

$$(x^T \quad y^\dagger) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^* \\ y \end{pmatrix} = 0 \quad (A.5)$$

Vemos que a condição necessária e suficiente para a que solução de H.F. seja estritamente estável, isto é, que o ponto (0,0,0) seja, não apenas um ponto estacionário, mas um mínimo de $\langle \mathbf{H} - \lambda \mathbf{N} \rangle_{\Phi(x,y,z)}$ para todos os valores de (x, y, z) na vizinhança de (0,0,0) satisfazendo a condição (A.4) é que

$$(z^T \quad z^\dagger) \begin{pmatrix} D & E \\ E^\dagger & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z^* \\ z \end{pmatrix} > 0, \quad (\text{A.6})$$

$$(x^T \quad y^\dagger) \begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & C^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^* \\ y \end{pmatrix} > 0, \quad (\text{A.7})$$

sendo que a primeira desigualdade deva valer para todo $z \neq 0$ e a última para todo $(x, y) \neq (0, 0)$ satisfazendo (A.5). A desigualdade (A.6) garante a estabilidade do estado de H.F. contra excitações partícula-buraco e nos leva a prever a ocorrência de vibrações normais no sistema. Já a desigualdade (A.7), com a condição (A.5), garante a estabilidade do estado de H.F. contra excitações partícula-partícula e buraco-buraco de mesma intensidade (no sentido de (A.5)) e nos leva a prever a ocorrência de vibrações de emparelhamento no sistema.

A relação entre a condição de estabilidade contra excitações partícula -buraco (A.6) e a existência de soluções aceitáveis da RPA ph são bem conhecidas (Tho 69). Vamos fazer uma discussão análoga para as consequências de (A.7).

Tomando o hermitiano conjugado de (V.30') e notando que a matriz no seu primeiro membro é hermitiana, achamos

$$(R^\dagger \quad S^\dagger)_Q \begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & C^* \end{pmatrix} = \Omega_Q^* (R^\dagger \quad -S^\dagger)_Q \quad (\text{A.8})$$

Multiplicando (V.30') a esquerda por $(R^\dagger \quad S^\dagger)_Q$ e (A.8) à direita por $\begin{pmatrix} R \\ S \end{pmatrix}_Q$ achamos

$$\begin{aligned} (R^\dagger \quad S^\dagger)_Q \begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & C^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ S \end{pmatrix}_Q &= \Omega_Q (R^\dagger \quad -S^\dagger)_Q \begin{pmatrix} R \\ S \end{pmatrix}_Q \\ &= \Omega_Q^* (R^\dagger \quad -S^\dagger)_Q \begin{pmatrix} R \\ S \end{pmatrix}_Q \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Do segundo ramo de (A.9) concluímos que, se

$$(R^\dagger \quad -S^\dagger)_Q \begin{pmatrix} R \\ S \end{pmatrix}_Q \neq 0, \quad (\text{A.10})$$

então

$$\Omega_Q^* = \Omega_Q. \quad (\text{A.11})$$

Por outro lado, se

$$(R^\dagger \quad -S^\dagger)_Q \begin{pmatrix} R \\ S \end{pmatrix}_Q = 0, \text{ com } \begin{pmatrix} R \\ S \end{pmatrix}_Q \neq 0, \quad (\text{A.12})$$

então o primeiro termo de (A.9) leva a um absurdo se o estado de H.F. é estável contra formação de pares conforme mostramos em (A.7). Concluimos, portanto, que, se o estado de H.F. for estritamente estável contra a formação de pares pp e hh de mesma intensidade, então nenhuma solução da equação da RPA partícula-partícula e buraco-buraco (V.30') poder ter norma nula, isto é, satisfazer (A.12). Em outras palavras, sempre que o estado de H.F. for estável por formação de pares temos que todas as soluções de (V.30') satisfazem (A.10) e, portanto, podem ser normalizadas conforme uma das duas escolhas abaixo:

$$(R^\dagger \quad -S^\dagger)_Q \begin{pmatrix} R \\ S \end{pmatrix}_Q = \pm 1. \quad (\text{A.13})$$

A-2) Relações de Completeza

Pode-se mostrar (RiP 69, Blo 64) que, satisfetias as condições da seção anterior, isto é, se nenhuma solução do sistema (V.30') tiver norma nula, ou seja, se todas elas puderem ser normalizadas conforme (A.13), então essas $N_{pp} + N_{hh} = N_P + N_H$ soluções (na notação da seção V-3) são linearmente independentes. Podemos então inverter as equações (V.20.a) e (V.20.b) escrevendo

$$x_{ij} = \sum_P K_{ij}^P \xi_P^\dagger + \sum_H M_{ij}^H \eta_H, \quad (\text{A.14.a})$$

$$\frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}} = \sum_H K_{\alpha\beta}^H \eta_H + \sum_P M_{\alpha\beta}^P \xi_P^\dagger. \quad (\text{A.14.b})$$

É facil ver que

$$[\xi_P, x_{ij}] = K_{ij}^P = X_{ij}^{P*}, \quad (\text{A.15.a})$$

onde, na primeira igualdade foi usada a equação (A.14.a) e as relações de comutação (V.23.b) e (V.23.e). Na segunda igualdade utilizamos o hermitano conjugado de (V.20.a) e as relações

de comutação (V.18). Assim, se primeiramente substituirmos as equações (A.14) e usarmos as relações (V.23) e posteriormente as equações (V.20) e as relações (V.18), acabamos por obter

$$[\eta_H^\dagger, x_{ij}] = -M_{ij}^H = -Y_{ij}^{H*}, \quad (\text{A.15.b})$$

$$[\xi_P, \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}}] = M_{\alpha\beta}^P = Y_{\alpha\beta}^{P*}, \quad (\text{A.15.c})$$

$$[\eta_H^\dagger, \frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}}] = -K_{\alpha\beta}^H = -X_{\alpha\beta}^{H*}, \quad (\text{A.15.d})$$

Substituindo os resultados (A.15) nas equações (A.14), encontramos

$$x_{ij} = \sum_P X_{ij}^{P*} \xi_P^\dagger + \sum_H Y_{ij}^{H*} \eta_H \quad (\text{A.16.a})$$

$$\frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}} = \sum_H X_{\alpha\beta}^{H*} \eta_H + \sum_P Y_{\alpha\beta}^{P*} \xi_P^\dagger \quad (\text{A.16.b})$$

As relações de comutação (V.18) impõem as seguintes restrições aos coeficientes:

$$\begin{aligned} [\frac{\partial}{\partial x_{ij}}, x_{kl}] &= \left[\left(\sum_P X_{ij}^P \xi_P + \sum_H Y_{ij}^H \eta_H^\dagger \right), \left(\sum_{P'} X_{kl}^{P'*} \xi_{P'}^\dagger + \sum_{H'} Y_{kl}^{H'*} \eta_{H'} \right) \right] = \\ &= \sum_P X_{ij}^P X_{kl}^{P*} - \sum_H Y_{ij}^H Y_{kl}^{H*} = \delta_{(ij),(kl)} \end{aligned} \quad (\text{A.17.a})$$

$$\begin{aligned} [\frac{\partial}{\partial y_{\alpha\beta}}, y_{\gamma\delta}] &= \left[\left(\sum_H X_{\alpha\beta}^{H*} \eta_H + \sum_P Y_{\alpha\beta}^{P*} \xi_P^\dagger \right), \left(\sum_{H'} X_{\gamma\delta}^{H'} \eta_{H'}^\dagger + \sum_{P'} Y_{\gamma\delta}^{P'} \xi_{P'} \right) \right] = \\ &= \sum_H X_{\alpha\beta}^{H*} X_{\gamma\delta}^H - \sum_P Y_{\alpha\beta}^{P*} Y_{\gamma\delta}^P = \delta_{(\alpha\beta),(\gamma\delta)} \end{aligned} \quad (\text{A.17.b})$$

$$\begin{aligned} [x_{ij}, y_{\alpha\beta}] &= \left[\left(\sum_P X_{ij}^{P*} \xi_P^\dagger + \sum_H Y_{ij}^{H*} \eta_H \right), \left(\sum_{H'} X_{\alpha\beta}^{H'} \eta_{H'}^\dagger + \sum_{P'} Y_{\alpha\beta}^{P'} \xi_{P'} \right) \right] = \\ &= \sum_H Y_{ij}^{H*} X_{\alpha\beta}^H - \sum_P X_{ij}^{P*} Y_{\alpha\beta}^P = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.17.c})$$

onde usamos as relações de comutação (V.23). As relações (A.17) podem ser postas em forma matricial da seguinte maneira:

$$\begin{pmatrix} \sum_P X^P X^{P\dagger} - \sum_H Y^H Y^{H\dagger} & \sum_P X^P Y^{P\dagger} - \sum_H Y^H X^{H\dagger} \\ \sum_P Y^P X^{P\dagger} - \sum_H X^H Y^{H\dagger} & -(\sum_H X^H X^{H\dagger} - \sum_P Y^P Y^{P\dagger}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ou então

$$\left\{ \sum_P \begin{pmatrix} X^P X^{P\dagger} & X^P Y^{P\dagger} \\ Y^P X^{P\dagger} & Y^P Y^{P\dagger} \end{pmatrix} - \sum_H \begin{pmatrix} Y^H Y^{H\dagger} & Y^H X^{H\dagger} \\ X^H Y^{H\dagger} & X^H X^{H\dagger} \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ou

$$\sum_P \begin{pmatrix} X^P \\ Y^P \end{pmatrix} (X^{P\dagger} \quad -Y^{P\dagger}) - \sum_H \begin{pmatrix} Y^H \\ X^H \end{pmatrix} (Y^{H\dagger} \quad -X^{H\dagger}) = I. \quad (\text{A.18})$$

Esta é uma relação inversa às dadas em (V.24) e é chamada relação de completeza.

Para finalizar, vamos usar a relação de completeza para obter uma importante propriedade das frequências Ω_P e Ω_H . Sabemos da seção anterior que quando a solução de H.F. é estritamente estável contra excitações pp e hh de mesma intensidade, temos a condição (A.7) sujeita à restrição (A.9). Introduzindo a relação (A.18) naquela condição, obtemos

$$(x^T \quad y^\dagger) \begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & C^* \end{pmatrix} \left\{ \sum_P \begin{pmatrix} X^P \\ Y^P \end{pmatrix} (X^{P\dagger} \quad -Y^{P\dagger}) + \right. \\ \left. - \sum_H \begin{pmatrix} Y^H \\ X^H \end{pmatrix} (Y^{H\dagger} \quad -X^{H\dagger}) \right\} \begin{pmatrix} x^* \\ y \end{pmatrix} > 0$$

ou usando (V.29.a) e (V.29.b),

$$(x^T \quad y^\dagger) \left\{ \sum_P \Omega_P \begin{pmatrix} X^P \\ -Y^P \end{pmatrix} (X^{P\dagger} \quad -Y^{P\dagger}) + \right. \\ \left. + \sum_H \Omega_H \begin{pmatrix} Y^H \\ -X^H \end{pmatrix} (Y^{H\dagger} \quad -X^{H\dagger}) \right\} \begin{pmatrix} x^* \\ y \end{pmatrix} > 0.$$

Esta expressão pode ser reescrita como

$$\sum_P \Omega_P |(x^T \quad y^\dagger) \begin{pmatrix} X^P \\ -Y^P \end{pmatrix}|^2 + \sum_H \Omega_H |(x^T \quad y^\dagger) \begin{pmatrix} Y^H \\ -X^H \end{pmatrix}|^2 > 0. \quad (\text{A.19})$$

O vetor $(x^T \quad y^\dagger)$ em (A.19) é arbitrário enquanto satisfizer (A.5). Um tal vetor é

$$(x^T \quad y^\dagger) = (X^{P'\dagger} \quad Y^{P'\dagger}) + (Y^{H'\dagger} \quad X^{H'\dagger}). \quad (\text{A.20})$$

Com efeito,

$$\begin{aligned} (x^T \quad y^\dagger) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^* \\ y \end{pmatrix} &= (X^{P'\dagger} \quad Y^{P'\dagger}) \begin{pmatrix} X^{P'} \\ -Y^{P'} \end{pmatrix} + (Y^{H'\dagger} \quad X^{H'\dagger}) \begin{pmatrix} Y^{H'} \\ -X^{H'} \end{pmatrix} \\ &= (X^{P'\dagger} \quad Y^{P'\dagger}) \begin{pmatrix} Y^{H'} \\ -X^{H'} \end{pmatrix} + (Y^{H'\dagger} \quad X^{H'\dagger}) \begin{pmatrix} X^{P'} \\ -Y^{P'} \end{pmatrix} \\ &= 1 - 1 + 0 + 0 = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

onde usamos as relações de ortogonalidade (V.24.a-c). Introduzindo, então, o vetor (A.20) em (A.19) achamos, usando mais uma vez (V.24),

$$\sum_{P'} \Omega_{P'} |\delta_{PP'}|^2 + \sum_{H'} \Omega_{H'} |\delta_{HH'}|^2 > 0, \quad (A.22)$$

ou seja,

$$\Omega_P + \Omega_H > 0. \quad (A.23)$$

APÊNDICE B

Detalhes de Cálculo dos Elementos de Matriz das Interações

B-1) Interação Gaussiana

Para facilidades de cálculo dos elementos de matriz da interação gaussiana, resultados estes que também servirão para o cálculo do termo gaussiano da interação de Gogny, devemos transformar o *acoplamento-jj*, usado na expressão (VI.8), para o chamado *acoplamento-LS*. Primeiramente (i) acoplamos l_a e l_b para produzir o momento angular total L , então (ii) acoplamos os spins individuais, para obter o spin total S , e finalmente (iii) acoplamos L e S para produzir o momento angular total J . Os coeficientes de transformação são os símbolos- $9j$. Deste modo,

$$|ab : JM; TM_T\rangle = \sum_{LS} \begin{pmatrix} l_a & 1/2 & j_a \\ l_b & 1/2 & j_b \\ L & S & J \end{pmatrix} | (n_a l_a, n_b l_b) L, (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) S : JM; TM_T\rangle, \quad (B.1)$$

e

$$\begin{aligned} (-1)^{j_a+j_b-J-T} |ba : JM; TM_T\rangle &= (-1)^{j_a+j_b-J-T} \sum_{LS} \begin{pmatrix} l_b & 1/2 & j_b \\ l_a & 1/2 & j_a \\ L & S & J \end{pmatrix} \\ &\times | (n_b l_b, n_a l_a) L, (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) S : JM; TM_T\rangle. \quad (B.2) \end{aligned}$$

De acordo com a propriedade de simetria do símbolo- $9j$ (Pal-83), podemos converter o símbolo- $9j$ de (B.2) no mesmo símbolo de (B.1) multiplicado pelo fator de fase $(-1)^\Sigma$, onde $\Sigma = l_a + l_b + 1 + j_a + j_b + J + L + S$. Substituindo, então em (VI.8), obtemos

$$\begin{aligned} |ab : JM; TM_T\rangle &= [2(1 + \delta_{ab})]^{-1/2} \sum_{LS} \begin{pmatrix} l_a & 1/2 & j_a \\ l_b & 1/2 & j_b \\ L & S & J \end{pmatrix} \left[| (n_a l_a, n_b l_b) L, (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) S : JM; TM_T\rangle + \right. \\ &\left. - (-1)^{l_a+l_b+L+S+T} | (n_b l_b, n_a l_a) L, (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) S : JM; TM_T\rangle \right]. \quad (B.3) \end{aligned}$$

Como o termo gaussiano depende somente da coordenada relativa dos dois nucleons, para escrevermos a parte espacial das funções de onda é vantajoso introduzir a conhecida transformação de Moshinsky (Pal-83), a qual transforma das coordenadas \vec{r}_1 e \vec{r}_2 das duas

partículas para as coordenadas relativa e de centro de massa, $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ e $\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$. Então, sabendo que os brakets de Moshinsky possuem a propriedade

$$\langle \mathcal{N}\mathcal{L}, nl : L \parallel n_a l_a, n_b l_b : L \rangle = (-1)^{l_a + l_b + l + L} \langle \mathcal{N}\mathcal{L}, nl : L \parallel n_b l_b, n_a l_a : L \rangle,$$

podemos reescrever (B.3) como

$$\begin{aligned} |ab : JM; TM_T\rangle &= [2(1 + \delta_{ab})]^{-1/2} \sum_{LS} \sum_{\mathcal{N}\mathcal{L}nl} \begin{pmatrix} l_a & 1/2 & j_a \\ l_b & 1/2 & j_b \\ L & S & J \end{pmatrix} \langle \mathcal{N}\mathcal{L}, nl : L \parallel n_a l_a, n_b l_b : L \rangle \\ &\times [1 - (-1)^{l+S+T}] |(\mathcal{N}\mathcal{L}, nl)L, (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})S : JM; TM_T\rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

onde \mathcal{N} e \mathcal{L} referem-se a \vec{R} e n e l a \vec{r} . No entanto, para simplificação de cálculo, devemos separar completamente a parte de centro de massa (\vec{R}) da parte relativa (\vec{r}). Ou seja, o estado do lado direito na expressão anterior contém o acoplamento de três momentos angulares na ordem (i) $\mathcal{L} + \mathbf{l} = \mathbf{L}$ e (ii) $\mathbf{L} + \mathbf{S} = \mathbf{J}$, o qual queremos passar para o esquema alternativo de acoplamento dado por: (i) $\mathbf{l} + \mathbf{S} = \mathcal{J}$, com \mathcal{J} sendo o momento angular total relativo e (ii) $\mathcal{L} + \mathcal{J} = \mathbf{J}$. Os coeficientes que fazem este reacoplamento são os coeficientes $6j$. Assim, finalmente (B.4) torna-se

$$\begin{aligned} |ab : JM; TM_T\rangle &= [2(1 + \delta_{ab})]^{-1/2} \sum_{LS} \sum_{\mathcal{N}\mathcal{L}nl} \begin{pmatrix} l_a & 1/2 & j_a \\ l_b & 1/2 & j_b \\ L & S & J \end{pmatrix} \langle \mathcal{N}\mathcal{L}, nl : L \parallel n_a l_a, n_b l_b : L \rangle \\ &\times [1 - (-1)^{l+S+T}] \sum_{\mathcal{J}} U(\mathcal{L}\mathbf{l}\mathbf{J}\mathbf{S}; L\mathbf{J}) |(\mathcal{N}\mathcal{L}, (nl, S)\mathcal{J} : JM; TM_T)\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Como V_{Gauss} atua somente na parte relativa, o elemento de matriz a ser efetivamente calculado é dado por

$$\begin{aligned} &\langle \mathcal{N}\mathcal{L}, (n'l', S)\mathcal{J} : JM; TM_T \mid V_{Gauss} \mid \mathcal{N}\mathcal{L}, (nl, S)\mathcal{J} : JM; TM_T \rangle = \\ &= \begin{bmatrix} J & 0 & J \\ M & 0 & M \end{bmatrix} U(\mathcal{L}\mathcal{J}J0; JJ) \frac{\langle (n'l', S)\mathcal{J}\mathcal{M} : TM_T \mid V_{Gauss} \mid (nl, S)\mathcal{J}\mathcal{M} TM_T \rangle}{\begin{bmatrix} J & 0 & J \\ M & 0 & M \end{bmatrix}}, \end{aligned}$$

onde usamos o teorema de Wigner-Eckart e alguns resultados dados por Pal (Pal-83). Tanto os coeficientes de Clebsh-Gordan como o coeficiente U são, neste caso, iguais a 1. A integral radial contida no elemento de matriz da expressão anterior, é dada por

$$\int_0^{\infty} r^2 R_{n'l'}(r) f(r/\mu) R_{nl}(r) dr$$

onde $f(r/\mu)$ é a função de forma do potencial, com μ sendo o alcance do potencial. No caso em que esta função de forma é dada por uma gaussiana, a integral anterior é proporcional às integrais de Talmi, as quais são dadas por

$$\int_0^{\infty} e^{-r^2/c^2} r^{2p+2} dr = \frac{1}{2} c^{2p+3} \Gamma(p + 3/2) \quad (\text{B.6})$$

onde $c^{-2} = \mu^{-2} + b^{-2}$ com b sendo o parâmetro do oscilador e p assumindo valores inteiros entre $\frac{1}{2}(l + l')$ e $\frac{1}{2}(l + l') + n + n'$. Como o potencial conserva paridade, $l + l'$ é sempre um número par.

B-2) Termo de Spin-Órbita

Para o cálculo do termo de spin-órbita, partimos da equação (B.3) e efetuamos o desacoplamento de todos os momentos angulares. Utilizando, então, as propriedades de simetria dos coeficientes de Clebsh-Gordan, obtemos

$$\begin{aligned} |ab : JM; TM_T\rangle &= [2(1 + \delta_{ab})]^{-1/2} \sum_{LS} \begin{pmatrix} l_a & 1/2 & j_a \\ l_b & 1/2 & j_b \\ L & S & J \end{pmatrix} \sum_{M_L(M_S)} \begin{bmatrix} L & S & J \\ M_L & M_S & M \end{bmatrix} \\ &\times \sum_{m_a(m_b)} \begin{bmatrix} l_a & l_b & l \\ m_a & m_b & M_L \end{bmatrix} \\ &\times \left[|n_a l_a m_a; n_b l_b m_b\rangle + (-1)^S |n_b l_b m_b; n_a l_a m_a\rangle \right] |(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) : SM_S\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Com este resultado, os elementos de matriz a serem calculados são

$$\begin{aligned} EM_{\text{total}} &= (12 : JM; TM_T | V_{LS} | 34 : JM; TM_T) \\ &= 2ix_0 [(1 + \delta_{1,2})(1 + \delta_{3,4})]^{-1/2} \sum_{LS} \sum_{L'S'} \begin{pmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ L & S & J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & 1/2 & j_3 \\ l_4 & 1/2 & j_4 \\ L' & S' & J \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{M_L(M_S)} \sum_{M'_L(M'_S)} \begin{bmatrix} L & S & J \\ M_L & M_S & M_J \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L' & S' & J \\ M'_L & M'_S & M'_J \end{bmatrix} \\
& \sum_{m_1(m_2)} \sum_{m_3(m_4)} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & M_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_3 & l_4 & L' \\ m_3 & m_4 & M'_L \end{bmatrix} \\
& \left[EM + (-1)^S EM(1,2) + (-1)^S EM(3,4) + EM(1,2;3,4) \right] \quad (B.8.a)
\end{aligned}$$

onde

$$EM = \underbrace{\langle n_1 l_1 m_1; n_2 l_2 m_2 | \vec{k}' \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} | n_3 l_3 m_3; n_4 l_4 m_4 \rangle}_{\vec{I}_{\text{espac}}} \cdot \underbrace{\langle (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) : SM_S | \vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2 | (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) : SM'_S \rangle}_{\vec{I}_{\text{spin}}} \quad (B.8.b)$$

com (1,2) significando as trocas ($n_1 \leftrightarrow n_2; l_1 \leftrightarrow l_2; m_1 \leftrightarrow m_2$).

A parte espacial fica escrita como

$$\begin{aligned}
\vec{I}_{\text{espac}} &= \int d\vec{r} [(\nabla R_{n_1, l_1}^* Y_{m_1}^{l_1*}) R_{n_2, l_2}^* Y_{m_2}^{l_2*} - R_{n_1, l_1}^* Y_{m_1}^{l_1*} \nabla R_{n_2, l_2}^* Y_{m_2}^{l_2*}] \times \\
& \quad [\nabla (R_{n_3, l_3} Y_{m_3}^{l_3}) R_{n_4, l_4} Y_{m_4}^{l_4} - R_{n_3, l_3} Y_{m_3}^{l_3} \nabla R_{n_4, l_4} Y_{m_4}^{l_4}] \\
&= \vec{I} - \vec{I}(1,2) - \vec{I}(3,4) + \vec{I}(1,2;3,4) \quad (B.9)
\end{aligned}$$

onde, novamente, temos as trocas (1,2) e (3,4). Além disso, \vec{I} , é dada por

$$\vec{I} = \int d\vec{r} \left(\nabla R_{n_1, l_1} Y_{m_1}^{l_1*} \right) \times \left(\nabla R_{n_3, l_3} Y_{m_3}^{l_3} \right) R_{n_2, l_2} Y_{m_2}^{l_2*} R_{n_4, l_4} Y_{m_4}^{l_4} \quad (B.10)$$

Visto isso, voltamos a (B.8.a), e vamos calcular $EM(1,2)$, $EM(3,4)$ e $EM(1,2;3,4)$ em termos de \vec{I}_{espac} e \vec{I}_{spin} . Assim,

$$\begin{aligned}
EM(1,2) &= \vec{I}_{\text{espac}}(1,2) \cdot \vec{I}_{\text{spin}} \\
&= \left[\vec{I}(1,2) - \vec{I} - \vec{I}(1,2;3,4) + \vec{I}(3,4) \right] \cdot \vec{I}_{\text{spin}} \\
&= -\vec{I}_{\text{espac}} \cdot \vec{I}_{\text{spin}}
\end{aligned}$$

Do mesmo modo, temos

$$EM(3,4) = -\vec{I}_{\text{espac}} \cdot \vec{I}_{\text{spin}}$$

e

$$EM(1, 2; 3, 4) = \vec{I}_{\text{espac}} \cdot \vec{I}_{\text{spin}}$$

Substituindo estes resultados, (B.8.a) fica reescrita como

$$\begin{aligned} EM_{\text{total}} = & 2ix_0[(1 + \delta_{1,2})(1 + \delta_{3,4})]^{-1/2} \sum_{LS} \sum_{L'S'} \begin{pmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ L & S & J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & 1/2 & j_3 \\ l_4 & 1/2 & j_4 \\ L' & S' & J \end{pmatrix} \\ & \sum_{M_L(M_S)} \sum_{M'_L(M'_S)} \begin{bmatrix} L & 1 & J \\ M_L & M_S & M_J \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L' & 1 & J \\ M'_L & M'_S & M'_J \end{bmatrix} \\ & \sum_{m_1(m_2)} \sum_{m_3(m_4)} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & M_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_3 & l_4 & L' \\ m_3 & m_4 & M'_L \end{bmatrix} 2(1 - (-1)^S) \vec{I}_{\text{espac}} \cdot \vec{I}_{\text{spin}} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Voltando a (B.10), para resolvermos a integral \vec{I} , primeiramente usamos o resultado (Edm 60)

$$\nabla R_{nl} Y_m^l = - \underbrace{\left(\frac{l+1}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right)}_{O_l} R_{nl} \vec{Y}_{l,l+1,m} + \underbrace{\left(\frac{l}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{l+1}{r} \right)}_{O'_l} R_{nl} \vec{Y}_{l,l-1,m}, \quad (\text{B.12})$$

onde aparecem os harmônicos esféricos vetoriais,

$$\vec{Y}_{J,l,M} = \sum_{m,q} Y_m^l \vec{e}_q \begin{bmatrix} l & 1 & J \\ m & q & M \end{bmatrix}$$

com $\vec{e}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x \pm \vec{e}_y)$ e $\vec{e}_0 = \vec{e}_z$. Com estes resultados, além do fato que,

$$\vec{e}_q \times \vec{e}_{q'} = i\sqrt{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q & q' & q+q' \end{bmatrix} \vec{e}_{q+q'},$$

obtemos para a integral (B.10),

$$\vec{I} = i\sqrt{2} \sum_{m,q} \sum_{m',q'} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q & q' & q+q' \end{bmatrix} \vec{e}_{q'-q} \left\{ I_r I_\Omega(1) + I_r I_\Omega(2) + I_r I_\Omega(3) + I_r I_\Omega(4) \right\}. \quad (\text{B.13})$$

Onde

$$I_r = \int r^2 dr \left(O_{l_1} R_{n_1, l_1} \right) \left(O_{l_3} R_{n_3, l_3} \right) R_{n_2, l_2} R_{n_4, l_4}$$

e

$$I_\Omega = \begin{bmatrix} l_1 + 1 & 1 & l_1 \\ m & q & m_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_3 + 1 & 1 & l_3 \\ m' & q' & m_3 \end{bmatrix} \int d\Omega Y_m^{l_1+1*} Y_{m'}^{l_3+1*} Y_{m_2}^{l_2} Y_{m_4}^{l_4}.$$

Além de, $I_r I_\Omega(2) = I_r I_\Omega(1)$ [com o operador O_{l_3} repassado para O'_{l_3} e $l_3 + 1$ em I_Ω repassado para $l_3 - 1$.], $I_r I_\Omega(3) = I_r I_\Omega(1)$ [com o operador O_{l_1} repassado para O'_{l_1} e $l_1 + 1$ em I_Ω repassado para $l_1 - 1$.] e $I_r I_\Omega(4) = I_r I_\Omega(1)$ [com os operadores O_{l_1} e O_{l_3} repassados para O'_{l_1} e O'_{l_3} , respectivamente e $l_1 + 1$ e $l_3 + 1$ em I_Ω repassados para $l_1 - 1$ e $l_3 - 1$, respectivamente.]. Onde os operadores O_l e O'_l foram definidos em (B.12).

A integral radial novamente recairá em uma integral de Talmi, como a dada em (B.6). Já a integral angular necessita um pouco mais de trabalho. Em lugar de calcular separadamente, vamos incluí-la na soma sobre $m_1(m_2)$ e $m_3(m_4)$, junto com os respectivos coeficientes de Clebsh-Gordan de (B.11) e também nas somas sobre m e m' de (B.13). Deste modo a integral angular a ser calculada fica escrita como

$$I'_\Omega = \sum_{m_1(m_2), m_3(m_4)} \sum_{m, m'} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_3 & l_4 & L' \\ m_3 & m_4 & M' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_1 + 1 & 1 & l_1 \\ m & q & m_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_3 + 1 & 1 & l_3 \\ m' & q' & m_3 \end{bmatrix} \int d\Omega Y_m^{l_1+1*} Y_{m'}^{l_3+1*} Y_{m_2}^{l_2} Y_{m_4}^{l_4}$$

Então usando as identidades

$$Y_m^l Y_{m'}^{l'} = \sum_L \begin{bmatrix} l & l' & L \\ m & m' & M \end{bmatrix} \left\{ \frac{[l][l']}{4\pi[L]} \right\}^{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} l & l' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} Y_M^L$$

e

$$\begin{aligned} & \sum_{m_2} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ m_1 & m_2 & m_1 + m_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_{12} & j_3 & j \\ m_1 + m_2 & m - m_1 - m_2 & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 & j_3 & j_{23} \\ m_2 & m - m_1 - m_2 & m - m_1 \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} j_1 & j_{23} & j \\ m_1 & m - m_1 & m \end{bmatrix} U(j_1 j_2 j j_3; j_{12} j_{23}) \end{aligned}$$

além da condição de ortogonalidade dos harmônicos esféricos, obtemos

$$\begin{aligned} I'_\Omega &= \frac{[l_1][l_3]}{4\pi} ([l_1 + 1][l_2][l_3 + 1][l_4])^{\frac{1}{2}} \sum_{L''} \frac{1}{[L'']} \begin{bmatrix} l_1 + 1 & l_2 & L'' \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & L'' & L \\ q & M'' & M \end{bmatrix} \\ & \times \begin{bmatrix} l_3 + 1 & l_4 & L'' \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & L'' & J' \\ q & M'' & M' \end{bmatrix} U(1, l_1 + 1, L, l_2; l_1, L'') U(1, l_3 + 1, L', l_4; l_3, L'') \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Assim, o que passamos a calcular é:

$$\vec{I}'_{\text{espac}} = \sum_{m_1, m_3} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_3 & l_4 & L' \\ m_3 & m_4 & M' \end{bmatrix} \vec{I}'_{\text{espac}} \quad (\text{B.15})$$

Ou usando a equação (B.9) além das propriedades de simetria dos coeficientes de Clebsh-Gordan, obtemos

$$\vec{I}'_{\text{espac}} = \vec{I}' - (-1)^{l_1+l_2+L} \vec{I}'(1, 2) - (-1)^{l_3+l_4+L} \vec{I}'(3, 4) + (-1)^{l_1+l_2+l_3+l_4+L+L'} \vec{I}'(1, 2; 3, 4)$$

Com I' dado por (B.13) sem a soma em m e m' e onde trocamos I_Ω por I'_Ω , dado em (B.14).

Deste modo, I'_{espac} fica escrito como

$$\vec{I}'_{\text{espac}} = i\sqrt{2} \sum_{q, q'} N_{q, q'} \vec{e}_{q' - q} \quad (\text{B.16.a})$$

onde $N_{q, q'}$ é dado por

$$N_{q, q'} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q & q' & q + q' \end{bmatrix} \left[\mathcal{R}' - (-1)^{l_1+l_2+L} \mathcal{R}'(1, 2) + \right. \\ \left. - (-1)^{l_3+l_4+L} \mathcal{R}'(3, 4) + (-1)^{l_1+l_2+l_3+l_4+L+L'} \mathcal{R}'(1, 2; 3, 4) \right] \quad (\text{B.16.b})$$

com

$$\mathcal{R}' = I_r I'_\Omega(1) + I_r I'_\Omega(2) + I_r I'_\Omega(3) + I_r I'_\Omega(4) \quad (\text{B.16.c})$$

com I_r sendo dado por integrais de Talmi e I'_Ω dado em (B.14).

Voltando, então, à expressão (B.11), observamos que ainda devemos calcular o produto escalar $\vec{I}'_{\text{espac}} \cdot \vec{I}'_{\text{spin}}$. Procedendo o cálculo, temos

$$\begin{aligned} \vec{I}'_{\text{espac}} \cdot \vec{I}'_{\text{spin}} &= i\sqrt{2} \sum_{q, q'} N_{q, q'} \vec{e}_{q' - q} \cdot \left\langle \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) : SM_S \mid \vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2 \mid \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) : SM'_S \right\rangle \\ &= 2\sqrt{2}i \sum_{q, q'} N_{q, q'} \left\langle \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) : SM_S \mid S_{q' - q} \mid \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) : SM'_S \right\rangle \\ &= 2\sqrt{2}i \sum_{q, q'} N_{q, q'} \begin{bmatrix} S & 1 & S \\ M'_S & q' - q & M_S \end{bmatrix} \sqrt{S(S+1)}, \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

onde usamos o teorema de Wigner-Eckart. Sabendo, então, que S assume valores 0 e 1, vemos que, devido ao coeficiente de Clebsh-Gordan, o produto escalar não se anula somente para $S=1$.

Assim, substituindo todos estes resultados em (B.11), vemos que ela fica reescrita como

$$\begin{aligned}
 EM_{\text{total}} = & -32x_0[(1 + \delta_{1,2})(1 + \delta_{3,4})]^{-1/2} \sum_L \sum_{L'} \begin{pmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ L & 1 & J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & 1/2 & j_3 \\ l_4 & 1/2 & j_4 \\ L' & 1 & J \end{pmatrix} \\
 & \sum_{M_L(M_S)} \sum_{M'_L(M'_S)} \begin{bmatrix} L & 1 & J \\ M_L & M_S & M_J \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L' & 1 & J \\ M'_L & M'_S & M'_J \end{bmatrix} \\
 & \sum_{q,q'} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q & q' & q + q' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ M'_S & q' - q & M_S \end{bmatrix} \\
 & \left[\mathcal{R}' - (-1)^{l_1+l_2+L} \mathcal{R}'(1,2) - (-1)^{l_3+l_4+L} \mathcal{R}'(3,4) + (-1)^{l_1+l_2+l_3+l_4+L+L'} \mathcal{R}'(1,2;3,4) \right],
 \end{aligned} \tag{B.17}$$

onde \mathcal{R}' é dado em (B.16.c).

ERRATA

Na página 62, tabela 1, colunas 4 e 5, onde se le -21.67, deve-se ler -16.25. Nesta mesma página, na equação (VI.3.b), além da soma em m nós temos uma soma em n .

