Clase 10

Viernes 09/10/2020

La clase pasada vimos:

Relación de la **función de Green** de una partícula con observables físicos: 1. El valor esperado de cualquier operador de una partícula en el estado fundamental. Ejemplos.

Ejemplo de aplicación: cálculo de la energía del gas de **fermiones libres y no-interactuantes** planteado con la función de Green.

REPASO

Relación con observables físicos

La función de Green permite calcular:

1. El valor esperado de cualquier operador de una partícula en el estado fundamental.

2. La energía del estado fundamental. $\longleftarrow$ para hoy

3. El espectro de excitación del sistema.

Funciones de Green

Valor esperado de operador de una partícula en el estado fundamental ahora en la representación de spin-posición

REPASO

En una base genérica – números cuánticos: i

$$\boxed{\langle \hat{A}(t)\rangle = -i\mathrm{Tr}[\,\hat{a}\,G(t,t^+)]}$$

$$\langle \hat{A}(t)\rangle = -i \lim_{t'\to t^+} \sum_{i,j} a_{ij} G_{ji}(t,t') = -i \lim_{t'\to t^+} \mathrm{Tr}[\,\hat{a}\,G(t,t')]$$

Traza sobre todos los números cuánticos de la base de partícula única.

En la base de espín-posición

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= -i\int \mathrm{d}^3r \lim_{\mathbf{r}'\to\mathbf{r}} \lim_{t'\to t^+} \left[\sum_{\alpha\beta} A_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t')\right] \\ &= -i\int \mathrm{d}^3r \lim_{\mathbf{r}'\to\mathbf{r}} \mathrm{Tr}\left(A(\mathbf{r})G(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t^+)\right).\end{aligned}$$

Traza en el spin

Funciones de Green

EJEMPLOS

REPASO

(1) Energía cinética

$$T = \sum_{i=1}^{N} -\frac{\nabla_i^2}{2m} \qquad \langle T\rangle = -i \int \mathrm{d}^3 r \lim_{\mathbf{r}'\to\mathbf{r}} \left(-\frac{\nabla_r^2}{2m}\right) \mathrm{Tr}\left(G(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t^+)\right)$$

(2) Operador densidad

$$\hat{\rho}(\mathbf{R}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\mathbf{R}-\mathbf{r}_i)$$

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{R}) = \langle\hat{\rho}(\mathbf{R})\rangle &= -i \int \mathrm{d}^3 r \lim_{\mathbf{r}'\to\mathbf{r}} \delta(\mathbf{R}-\mathbf{r}) \mathrm{Tr}\left(G(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t^+)\right) \\ &= -i \int \mathrm{d}^3 r\, \delta(\mathbf{R}-\mathbf{r}) \mathrm{Tr}\left(G(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t^+)\right) \\ &= -i \mathrm{Tr}\left(G(\mathbf{R}t, \mathbf{R}t^+)\right). \end{aligned}$$

(4) Densidad de spin

$$\vec{\sigma}(\mathbf{R}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\mathbf{R}-\mathbf{r}_i)\vec{\bar{\sigma}}_i \longrightarrow \langle\vec{\sigma}(\mathbf{R})\rangle = -i \mathrm{Tr}\left(\vec{\sigma} G(\mathbf{R}t, \mathbf{R}t^+)\right)$$

$$\langle\sigma_x\rangle(\mathbf{R},t) = -\frac{i\hbar}{2}\left[G_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{R}t, \mathbf{R}t^+) + G_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{R}t, \mathbf{R}t^+)\right]$$

Funciones de Green

REPASO

Energía cinética del gas de electrones libres

$$\left\{\begin{array}{l} iG^{(0)}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t-t') = \delta_{\alpha\beta} e^{-i\epsilon_k(t-t')}\left[\theta(t-t')\theta(k-k_F) - \theta(t'-t)\theta(k_F-k)\right] \\[2ex] \langle A \rangle = -i \lim_{t'\to t^+} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'\beta,\mathbf{k}\alpha} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}t, \mathbf{k}'t') \\[2ex] a_{\mathbf{k}\alpha,\mathbf{k}\alpha} = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{array}\right.$$

$$\longrightarrow \quad \langle A \rangle = -i \lim_{t'\to t^+} \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\alpha,\mathbf{k}\alpha} G_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, t-t')$$

$$\longrightarrow \quad \langle A \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\theta(k_F - k) = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

Funciones de Green

$$\langle A \rangle = 2\sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\theta(k_F - k) = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

Pasaje de suma a integral en **k**

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}$$

condiciones periódicas de contorno:

$$\begin{cases} \psi(x+L) = \psi(x) \\ \psi(y+L) = \psi(y) \\ \psi(z+L) = \psi(z) \end{cases}$$

L

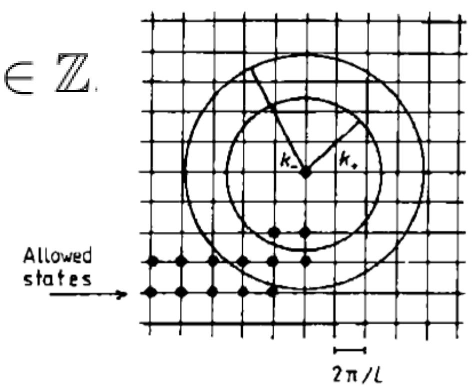
L

Clases Teóricas de

Estructura de la materia 2

Pablo I. Tamborenea

$$\longrightarrow \quad k_x = \frac{2\pi}{L} n_x \qquad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y \qquad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z \qquad n_i \in \mathbb{Z}$$



Entonces $\Delta k = \dfrac{2\pi}{L} \longrightarrow \Delta k^3 = \left(\dfrac{2\pi}{L}\right)^3$

$$\boxed{\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Delta k^3} \sum_{\mathbf{k}} \Delta k^3 f(\mathbf{k}) \to \frac{V}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3\mathbf{k}\, f(\mathbf{k})}$$

2. Energía del estado fundamental (valor de expectación de H en el GS)

$$E_0 = -\frac{i}{2}\int d^3r \lim_{t'\to t}\lim_{\mathbf{r}'\to\mathbf{r}}\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\nabla_r^2}{2m}\right)\mathrm{Tr}\left[G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t')\right]. \qquad (15.20)$$

Demostración

Consideraremos un Hamiltoniano independiente del tiempo de la forma:

$$H = T + V = \sum_\alpha \int d^3r\, \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r})\left(-\frac{\nabla^2}{2m}\right)\psi_\alpha(\mathbf{r})$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'}\int\int d^3r\, d^3r'\, \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r})\psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}')\underline{V_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(\mathbf{r},\mathbf{r}')}\psi_{\beta'}(\mathbf{r}')\psi_{\alpha'}(\mathbf{r})$$

Permitimos una dependencia no-diagonal en spin. Notar el elemento de matriz:

$$\langle \mathbf{r}\alpha,\mathbf{r}'\beta|\hat{v}|\mathbf{r}''\alpha',\mathbf{r}'''\beta'\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}''')\langle \mathbf{r}\alpha,\mathbf{r}'\beta|\hat{v}|\mathbf{r}\alpha',\mathbf{r}'\beta'\rangle$$
$$= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}''')\underline{V_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(\mathbf{r},\mathbf{r}')}$$

Habría que demostrar el siguiente conmutador (estamos en Schrödinger todavía):

$$[\psi_\alpha(\mathbf{r}), H] = -\frac{\nabla_r^2}{2m}\psi_\alpha(\mathbf{r}) + \sum_{\alpha'\beta\beta'} \int d^3y\, \psi_\beta^\dagger(\mathbf{y}) V_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(\mathbf{r},\mathbf{y})\psi_{\beta'}(\mathbf{y})\psi_{\alpha'}(\mathbf{r})$$

que nos permite obtener la ecuación de movimiento de Heisenberg del operador de campo :

$$\begin{aligned}
i\frac{\partial}{\partial t}\psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H &= [\psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H, H] \\
&= \psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H H - H\psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H \\
&= e^{iHt}\psi_\alpha(\mathbf{r})_S e^{-iHt} e^{iHt} H e^{-iHt} - e^{iHt} H e^{-iHt} e^{iHt}\psi_\alpha(\mathbf{r})_S e^{-iHt} \\
&= e^{iHt}\left[\psi_\alpha(\mathbf{r})_S, H\right] e^{-iHt}
\end{aligned}$$

Notar que: $H_H = e^{iH_St} H_S e^{-iH_St} = H_S = H$

Funciones de Green

$$[\psi_\alpha(\mathbf{r}), H] = -\frac{\nabla_r^2}{2m}\psi_\alpha(\mathbf{r}) + \sum_{\alpha'\beta\beta'} \int d^3y\, \psi_\beta^\dagger(\mathbf{y}) V_{\substack{\alpha\alpha' \\ \beta\beta'}}(\mathbf{r},\mathbf{y}) \psi_{\beta'}(\mathbf{y}) \psi_{\alpha'}(\mathbf{r})$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H = e^{iHt}\left[\psi_\alpha(\mathbf{r})_S, H\right] e^{-iHt}$$

Veamos el primer término:

$$\begin{aligned}
i\frac{\partial}{\partial t}\psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H &= e^{iHt}\left(-\frac{\nabla^2}{2m}\right)\psi_\alpha(\mathbf{r})e^{-iHt} \\
&= -e^{iHt}\left(\frac{\nabla^2}{2m}\right)\left(\sum_i \langle \mathbf{r}\alpha | u_i\rangle \hat{c}_i\right)e^{-iHt} \\
&= -e^{iHt}\left(\frac{\nabla^2}{2m}\right)\left(\sum_i u_i(\mathbf{r},\alpha)\hat{c}_i\right)e^{-iHt} \\
&= -\left(\frac{\nabla^2}{2m}\right)e^{iHt}\left(\sum_i u_i(\mathbf{r},\alpha)\hat{c}_i\right)e^{-iHt} \\
&= -\left(\frac{\nabla^2}{2m}\right)e^{iHt}\psi_\alpha(\mathbf{r})e^{-iHt} \\
&= -\left(\frac{\nabla^2}{2m}\right)\psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H
\end{aligned}$$

Funciones de Green

Análogamente se pasa el término de interacción a la rep. de Heisenberg:

$$
\begin{aligned}
i\frac{\partial}{\partial t}\psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H &= [\psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H, H] = e^{iHt}[\psi_\alpha(\mathbf{r})_S, H]\,e^{-iHt} \\
&= \left[-\frac{\nabla_r^2}{2m}\right]\psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H \\
&\quad + \sum_{\alpha'\beta\beta'}\int d^3y\,\psi^\dagger_\beta(\mathbf{y}t)_H V_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}}(\mathbf{r},\mathbf{y})\psi_{\beta'}(\mathbf{y}t)_H\psi_{\alpha'}(\mathbf{r}t)_H
\end{aligned}
$$

Aplicamos $\psi^\dagger_\alpha(\mathbf{r}'t')_H$ a izquierda y hacemos $\frac{1}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}\langle\Psi_0|\ldots|\Psi_0\rangle$

$$
\begin{aligned}
\longrightarrow\quad \left[i\frac{\partial}{\partial t} - \left(-\frac{\nabla_r^2}{2m}\right)\right]\frac{\langle\Psi_0|\psi^\dagger_\alpha(\mathbf{r}'t')_H\psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} \\
= \sum_{\alpha'\beta\beta'}\int d^3y\,\frac{1}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} \\
\times\langle\Psi_0|\psi^\dagger_\alpha(\mathbf{r}'t')_H\psi^\dagger_\beta(\mathbf{y}t)_H V_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}}(\mathbf{r},\mathbf{y})\psi_{\beta'}(\mathbf{y}t)_H\psi_{\alpha'}(\mathbf{r}t)_H|\Psi_0\rangle
\end{aligned}
$$

Funciones de Green

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} - \left(-\frac{\nabla_r^2}{2m}\right)\right] \frac{\langle\Psi_0 \mid \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}'t')_H \psi_\alpha(\mathbf{r}t)_H \mid \Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0 \mid \Psi_0\rangle}$$

$$= \sum_{\alpha'\beta\beta'} \int d^3y \frac{1}{\langle\Psi_0 \mid \Psi_0\rangle}$$

$$\times \langle\Psi_0 \mid \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}'t')_H \psi_\beta^\dagger(\mathbf{y}t)_H V_{\substack{\alpha\alpha' \\ \beta\beta'}}(\mathbf{r},\mathbf{y}) \psi_{\beta'}(\mathbf{y}t)_H \psi_{\alpha'}(\mathbf{r}t)_H \mid \Psi_0\rangle$$

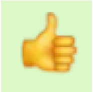
En el lado derecho podemos hacer aparecer $\langle\Psi_0 \mid V \mid \Psi_0\rangle$ si hacemos:

$$\mathbf{r}' \to \mathbf{r} \qquad t' \to t \qquad \int d^3r \qquad \sum_\alpha$$

Hacemos eso en ambos lados de la igualdad:

$$\int d^3r \lim_{t'\to t^+} \lim_{\mathbf{r}'\to\mathbf{r}} \left(i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla_r^2}{2m}\right) \mathrm{Tr}\left[-iG_{\alpha\beta}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t')\right] = 2\langle\Psi_0 \mid V \mid \Psi_0\rangle$$

En el lado izquierdo nos apareció la función de Green!



Entonces tenemos:

$$\int \mathrm{d}^3r \lim_{t'\to t^+} \lim_{\mathbf{r}'\to\mathbf{r}} \left(i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla_r^2}{2m} \right) \mathrm{Tr}\left[-iG_{\alpha\beta}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') \right] = 2\langle \Psi_0 \,|\, V | \,\Psi_0 \rangle$$

La energía total está dada por:

$$E_0 = \langle \Psi_0 \,|\, T | \,\Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 \,|\, V | \,\Psi_0 \rangle$$

Y ya habíamos calculado el valor medio de la energía cinética:

$$\langle T \rangle = -i \int \mathrm{d}^3r \lim_{\mathbf{r}'\to\mathbf{r}} \left(-\frac{\nabla_r^2}{2m} \right) \mathrm{Tr}\left(G(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t^+) \right)$$

Despejando obtenemos:

$$\boxed{E_0 = -\frac{i}{2} \int \mathrm{d}^3r \lim_{t'\to t} \lim_{\mathbf{r}'\to\mathbf{r}} \left(i\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\nabla_r^2}{2m} \right) \mathrm{Tr}\left[G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') \right]}$$