

# Clase 11

Martes 13/10/2020

La clase pasada vimos:

Relación de la **función de Green** de una partícula con observables físicos: 2. La energía del estado fundamental

Hoy veremos:

Algo que quedó pendiente: Demostración de la forma de operadores de una partícula en segunda cuantización

El espectro de excitación del sistema: Representación de Lehmann

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

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

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

REPASO

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

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

Vimos: cambio de base en el espacio de Hilbert de una partícula:

$$\begin{array}{l}
 C_{\alpha}^{\dagger}|0\rangle = |\alpha\rangle \longleftrightarrow \phi_{\alpha}(\mathbf{x}) \quad \{\phi_{\alpha}(\mathbf{x})\} \\
 b_j^{\dagger}|0\rangle = |j\rangle \longleftrightarrow f_j(\mathbf{x}) \quad \{f_j(\mathbf{x})\}
 \end{array}
 \left. \vphantom{\begin{array}{l} \\ \\ \end{array}} \right\} \text{Dos bases completas y ortonormales}$$

$$|j\rangle = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha|j\rangle \longrightarrow f_j(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(\mathbf{x}) \langle \alpha|j\rangle$$

$$b_j^{\dagger}|0\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{\dagger}|0\rangle \langle \alpha|j\rangle$$

Momentum

$$\sum_{i=1}^n \mathbf{P}_i$$

Kinetic energy

$$\sum_{i=1}^n -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_i^2$$

External potential

$$\sum_{i=1}^n W(\mathbf{x}_i)$$

General form

$$R = \sum_{i=1}^n R_i$$

En primera cuantización

$$R = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \langle \phi_{\alpha} | R_1 | \phi_{\beta} \rangle C_{\alpha}^{\dagger} C_{\beta}$$

En segunda cuantización

## Demostración: Operadores de partícula única en segunda cuantización

$$(I) \quad R = \sum_{i=1}^n R_i \quad \xleftrightarrow{\text{EQUIVALENTES}} \quad (II) \quad R = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \langle \phi_{\alpha} | R_1 | \phi_{\beta} \rangle C_{\alpha}^{\dagger} C_{\beta}$$

Demostrar que tienen los mismos elementos de matriz entre dos estados cualesquiera de N partículas.

Veamos que la forma (II) es invariante frente a un cambio de base.

Escribimos en la nueva base el operador  $R'$  :

$$R' = \sum_j \sum_k \langle f_j | R_1 | f_k \rangle b_j^{\dagger} b_k$$

## Demostración: Operadores de partícula única en segunda cuantización

$$R = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \langle \phi_{\alpha} | R_1 | \phi_{\beta} \rangle C_{\alpha}^{\dagger} C_{\beta}$$

Escribimos en la nueva base el operador  $R'$  :

$$R' = \sum_j \sum_k \langle f_j | R_1 | f_k \rangle b_j^{\dagger} b_k$$

Recordemos que:

$$b_j^{\dagger} |0\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{\dagger} |0\rangle \langle \alpha | j \rangle$$

$$R' = \sum_j \sum_k \sum_{\alpha} \sum_{\beta} C_{\alpha}^{\dagger} \langle \phi_{\alpha} | f_j \rangle \langle f_j | R_1 | f_k \rangle \langle f_k | \phi_{\beta} \rangle C_{\beta}$$

$$= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \langle \phi_{\alpha} | R_1 | \phi_{\beta} \rangle C_{\alpha}^{\dagger} C_{\beta} = R. \quad \text{Es el mismo operador} \quad \text{😊}$$

Podemos trabajar en cualquier base  $\{|f_k\rangle\} \longrightarrow R_1 |f_k\rangle = r_k |f_k\rangle$  diagonal

$$\longrightarrow R = \sum_k r_k b_k^{\dagger} b_k$$

## Demostración: Operadores de partícula única en segunda cuantización

Los determinantes de Slater formados con orbitales  $|f_j\rangle$ , tales que  $R_1|f_j\rangle = r_j|f_j\rangle$ , son autoestados del operador  $R$ .

Comprobemos esto para la expresión de  $R$  en primera cuantización y para la expresión propuesta en segunda cuantización.

Sea  $|\Phi_c\rangle$  un determinante de Slater con índices  $c = (c_1, \dots, c_N)$  que denotan una lista de  $N$  orbitales  $|f_j\rangle$ .

En primera cuantización:

$$R|\Phi_c\rangle = \sum_{i=1}^N R_i|\Phi_c\rangle = \left( \sum_i r_{c_i} \right) |\Phi_c\rangle$$

## Demostración: Operadores en segunda cuantización

En primera cuantización: 
$$R|\Phi_c\rangle = \sum_{i=1}^N R_i|\Phi_c\rangle = \left(\sum_i r_{c_i}\right)|\Phi_c\rangle$$

Ejemplo:  $|\Phi_c\rangle$ ,  $c = (c_1, c_2) = (4, 7)$

$$|\Phi_{(4,7)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 : f_4\rangle \otimes |2 : f_7\rangle - |1 : f_7\rangle \otimes |2 : f_4\rangle)$$

$$R_1|\Phi_{(4,7)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(r_4|1 : f_4\rangle \otimes |2 : f_7\rangle - r_7|1 : f_7\rangle \otimes |2 : f_4\rangle)$$

$$R_2|\Phi_{(4,7)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(r_7|1 : f_4\rangle \otimes |2 : f_7\rangle - r_4|1 : f_7\rangle \otimes |2 : f_4\rangle)$$



## Demostración: Operadores en segunda cuantización

En primera cuantización: 
$$R|\Phi_c\rangle = \sum_{i=1}^N R_i|\Phi_c\rangle = \left(\sum_i r_{c_i}\right)|\Phi_c\rangle$$

$$\begin{aligned}(R_1 + R_2)|\Phi_{(4,7)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}((r_4 + r_7)|1 : f_4\rangle \otimes |2 : f_7\rangle - (r_7 + r_4)|1 : f_7\rangle \otimes |2 : f_4\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(r_4 + r_7)(|1 : f_4\rangle \otimes |2 : f_7\rangle - |1 : f_7\rangle \otimes |2 : f_4\rangle) \\ &= (r_4 + r_7)|\Phi_{(4,7)}\rangle \\ &= (r_{c_1} + r_{c_2})|\Phi_{(4,7)}\rangle\end{aligned}$$

# Demostración: Operadores en segunda cuantización

En primera cuantización: 
$$R|\Phi_c\rangle = \sum_{i=1}^N R_i|\Phi_c\rangle = \left(\sum_i r_{c_i}\right)|\Phi_c\rangle$$

Sea  $|\Phi_b\rangle$  otro determinante de Slater.

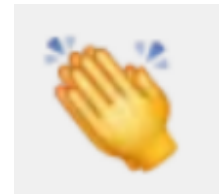
Vale  $\langle\Phi_b|\Phi_c\rangle = \delta_{b,c}$  y entonces

$$\langle\Phi_b|R|\Phi_c\rangle = \langle\Phi_b|\sum_{i=1}^N R_i|\Phi_c\rangle = \left(\sum_i r_{c_i}\right)\langle\Phi_b|\Phi_c\rangle = \delta_{b,c}\sum_i r_{c_i}$$

Elementos de matriz en (II)

$$R = \sum_k r_k b_k^\dagger b_k$$

$$\langle\Phi_b|R|\Phi_c\rangle = \langle\Phi_b|\sum_k r_k \hat{n}_k|\Phi_c\rangle = \delta_{b,c}\sum_k r_k n_k^{(c)}$$



## Representación de Lehmann

time-independent, translationally invariant

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k}, t-t') = \delta_{\alpha\beta} G(\vec{k}, t-t')$$

$$i G(\vec{k}, t-t') = \langle \Phi_{IH}^0 | T [c_{\vec{k}}(t)_H c_{\vec{k}}^\dagger(t')_H] | \Phi_{IH}^0 \rangle$$

$$= \theta(t-t') \langle c_{\vec{k}}(t)_H c_{\vec{k}}^\dagger(t')_H \rangle_H - \theta(t'-t) \langle c_{\vec{k}}^\dagger(t')_H c_{\vec{k}}(t)_H \rangle_H$$

$$= \theta(t-t') \langle e^{iHt} c_{\vec{k}} e^{-iHt} e^{iHt'} c_{\vec{k}}^\dagger e^{-iHt'} \rangle - \theta(t'-t) \langle e^{iHt'} c_{\vec{k}}^\dagger e^{-iHt'} e^{iHt} c_{\vec{k}} e^{-iHt} \rangle$$

$$= \theta(t-t') e^{iE_0^{(N)}(t-t')} \langle c_{\vec{k}} e^{-iH(t-t')} c_{\vec{k}}^\dagger \rangle - \theta(t'-t) e^{-iE_0^{(N)}(t-t')} \langle c_{\vec{k}}^\dagger e^{-iH(t-t')} c_{\vec{k}} \rangle$$

Insertamos la identidad en el espacio de Fock:

Insertamos la identidad en el espacio de Fock:

$$\mathbb{1} = |\text{vac}\rangle\langle\text{vac}| + \sum_n |\psi_n^{(1)}\rangle\langle\psi_n^{(1)}| + \dots + \sum_n |\psi_n^{(N)}\rangle\langle\psi_n^{(N)}| + \dots$$

donde  $|\psi_n^{(N)}\rangle$  son las autofunciones del Hamiltoniano de un sistema de  $N$  partículas.

$$\begin{aligned}
 &= \theta(t-t') e^{iE_0^N(t-t')} \sum_n c_k e^{-iH(t-t')} |\psi_n^{N+1}\rangle \langle\psi_n^{N+1}| c_k^+ |\Phi^0\rangle - \theta(t'-t) e^{-iE_0^N(t-t')} \\
 &\quad \times \sum_n \langle\Phi^0| c_k^+ e^{-iH(t'-t)} |\psi_n^{N-1}\rangle \langle\psi_n^{N-1}| c_k |\Phi^0\rangle \\
 &= \theta(t-t') \sum_n e^{i(E_0^N - E_n^{N+1})(t-t')} \langle\Phi^0| c_k |\psi_n^{N+1}\rangle \langle\psi_n^{N+1}| c_k^+ |\Phi^0\rangle - \theta(t'-t) \sum_n e^{-i(E_0^N - E_n^{N-1})(t-t')} \\
 &\quad \times \sum_n \langle\Phi^0| c_k^+ |\psi_n^{N-1}\rangle \langle\psi_n^{N-1}| c_k |\Phi^0\rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \theta(t-t') e^{iE_0^N(t-t')} \sum_n c_k e^{-iH(t-t')} |\psi_n^{N+1}\rangle \langle \psi_n^{N+1} | c_k^+ | \Phi^0 \rangle - \theta(t'-t) e^{-iE_0^N(t-t')} \\
&\quad \times \sum_n \langle \Phi^0 | c_k^+ e^{-iH(t'-t)} |\psi_n^{N-1}\rangle \langle \psi_n^{N-1} | c_k | \Phi^0 \rangle \\
&= \theta(t-t') \sum_n e^{i(E_0^N - E_n^{N+1})(t-t')} \langle \Phi^0 | c_k |\psi_n^{N+1}\rangle \langle \psi_n^{N+1} | c_k^+ | \Phi^0 \rangle - \theta(t'-t) \sum_n e^{-i(E_0^N - E_n^{N-1})(t-t')} \\
&\quad \times \sum_n \langle \Phi^0 | c_k^+ |\psi_n^{N-1}\rangle \langle \psi_n^{N-1} | c_k | \Phi^0 \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\theta(\tau) &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{-1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega\tau}}{\omega + i\eta}, \quad \theta(-\tau) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega\tau}}{\omega - i\eta} \\
iG(\vec{k}, t-t') &= i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sum_n \frac{e^{-i(\omega + E_n^{N+1} - E_0^N)(t-t')}}{\omega + i0^+} |\langle \psi_n^{N+1} | c_k^+ | \Phi^0 \rangle|^2 \\
&\quad + i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sum_n \frac{e^{-i(\omega + E_0^N - E_n^{N-1})(t-t')}}{\omega + i0^+} |\langle \psi_n^{N-1} | c_k | \Phi^0 \rangle|^2
\end{aligned}$$

Continuará ....