

Class 18

Viernes 6/11/2020

La clase pasada vimos:

* Función de Green de 2 y n partículas

16 The polarization propagator, the two-particle Green's function and the hierarchy of equations of motion

** Ecuación de evolución de la función de Green

*** Aplicación del teorema de Gell-Mann y Low :
desarrollo en serie de la función de Green

Chapter 18

Time-dependent perturbation theory with adiabatic turning-on of the interaction

Hoy vemos :

i) Partículas, huecos, vacío

ii) Orden normal de operadores

iii) Pairing de operadores

iv) Teorema de Wick con productos
de operadores

Chapter 19

Particle and hole operators and Wick's theorem



Gian Carlo Wick

Turín 1909-1992

Ecuación de evolución de la Función de Green de una partícula

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla_r^2}{2m} \right] G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \delta(t - t') \delta_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} - i \int dy v(\mathbf{x}, y) G(\mathbf{x}t, yt, yt^+, \mathbf{x}'t')$$

En presencia de un potencial externo hay que hacer :

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla_r^2}{2m} \right] \rightarrow \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla_r^2}{2m} - u(\mathbf{x}) \right]$$

Expansión de la Función de Green con encendido adiabático

$$\begin{aligned}
 iG_{\alpha\beta}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') &= \frac{\langle \Psi_0 | \mathcal{T} \left[\psi_{\alpha}(\mathbf{r}t)_H \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}'t')_H \right] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\langle \Phi_0 | S_{\epsilon} | \Phi_0 \rangle} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \\
 &\quad e^{-\epsilon(|t_1| + \cdots + |t_n|)} \langle \Phi_0 | \mathcal{T} \left[V(t_1)_I \cdots V(t_n)_I \psi_{\alpha}(\mathbf{r}t)_I \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}'t')_I \right] | \Phi_0 \rangle
 \end{aligned}$$

Operadores de partícula y hueco

Tenemos que calcular $\langle \Phi_0 | T[\dots] | \Phi_0 \rangle$

$\psi^\dagger \psi^\dagger \dots \psi \psi \psi_a \psi_b^\dagger$

$$H_0 = \sum_{i=1}^N h(i) \rightarrow h \psi_v = \epsilon_v \psi_v, \quad |\Phi_0\rangle \text{ orbitales llenos hasta } \epsilon_F$$

$$c_i^\dagger, c_i \leftrightarrow \psi_i$$

para $\epsilon_i > \epsilon_F$

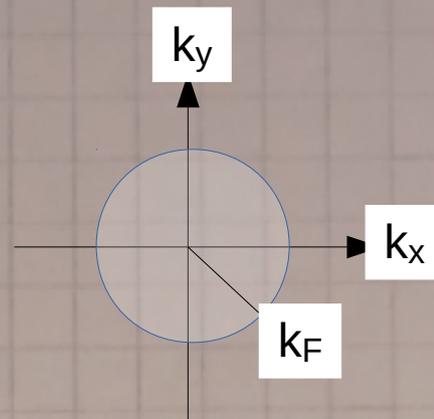
$$\begin{cases} a_i^\dagger \equiv c_i^\dagger \\ a_i \equiv c_i \end{cases}$$

partículas

$\epsilon_i \leq \epsilon_F$

$$\begin{cases} b_i^\dagger \equiv c_i \\ b_i \equiv c_i^\dagger \end{cases}$$

huecos



Esfera de Fermi: $|F\rangle$

$$\begin{cases} c_i(t)_I = c_i e^{-i\epsilon_i t} \\ c_i^\dagger(t)_I = c_i^\dagger e^{i\epsilon_i t} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_i(t)_I = a_i e^{-i\epsilon_i t} \\ a_i^\dagger(t)_I = a_i^\dagger e^{i\epsilon_i t} \end{cases} \quad \text{y} \quad \begin{cases} b_i(t)_I = b_i e^{i\epsilon_i t} = b_i e^{-i(-\epsilon_i)t} \\ b_i^\dagger(t)_I = b_i^\dagger e^{-i\epsilon_i t} \end{cases}$$

$$\{c_i, c_k^\dagger\} = \delta_{ik} \Rightarrow \{a_i, a_k\} = \delta_{ik}$$

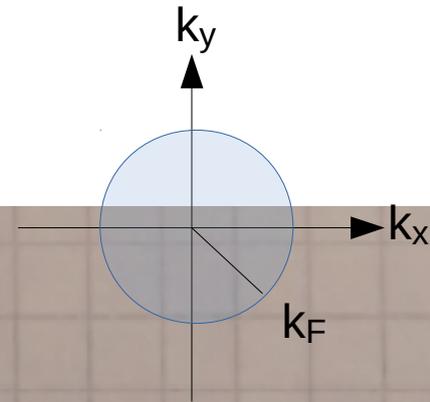
$$\{b_i^\dagger, b_k\} = \delta_{ik}$$

$$\{a_s, b_s\} = 0$$

El nuevo vacío ...

Entonces $a_i |\Phi_0\rangle = 0$, $b_i |\Phi_0\rangle = 0$
 $|\Phi_0\rangle$ no tiene "partículas" ni "huecos" $\rightarrow |\Phi_0\rangle$: vacío (relativo a la rep. part.-huecos)

Reescribimos el H_0 en la representación de partículas y huecos :



$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i = \sum_{\epsilon_i \leq \epsilon_F} \epsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{\epsilon_i > \epsilon_F} \epsilon_i c_i^\dagger c_i \\ &= \sum_{\epsilon_i \leq \epsilon_F} \epsilon_i b_i b_i^\dagger + \sum_{\epsilon_i > \epsilon_F} \epsilon_i a_i^\dagger a_i \\ &= \sum_{\epsilon_i \leq \epsilon_F} \epsilon_i + \sum_{\epsilon_i \leq \epsilon_F} (-\epsilon_i) b_i^\dagger b_i + \sum_{\epsilon_i > \epsilon_F} \epsilon_i a_i^\dagger a_i \\ &= W_0 + \sum_h \epsilon_h \hat{n}_h + \sum_p \epsilon_p \hat{n}_p \end{aligned}$$

Operadores de campo en la representación de partículas y huecos :

Destrucción de un electrón en x

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{\epsilon_i \leq \epsilon_F} \psi_i(x) c_i + \sum_{\epsilon_i > \epsilon_F} \psi_i(x) c_i \\ &= \sum_{\epsilon_i \leq \epsilon_F} \psi_i(x) b_i^\dagger + \sum_{\epsilon_i > \epsilon_F} \psi_i(x) a_i \equiv \psi_h^\dagger(x) + \psi_p(x) \\ & \qquad \qquad \qquad \psi_+(x) + \psi_-(x) \end{aligned}$$

Creación de huecos

Destrucción de partículas

Creación de un electrón en x

$$\begin{aligned} \psi^\dagger(x) &= \sum_{\epsilon_i \leq \epsilon_F} \psi_i^\dagger(x) c_i^\dagger + \sum_{\epsilon_i > \epsilon_F} \psi_i^\dagger(x) c_i^\dagger \\ &= \sum_{\epsilon_i \leq \epsilon_F} \psi_i^\dagger(x) b_i + \sum_{\epsilon_i > \epsilon_F} \psi_i^\dagger(x) a_i^\dagger \\ &\equiv \psi_h(x) + \psi_p^\dagger(x) \\ &= (\psi^\dagger)_-(x) + (\psi^\dagger)_+(x) \end{aligned}$$

Destrucción de huecos
Creación de huecos

$$\psi_- |\Phi_0\rangle = 0 = (\psi^\dagger)_- |\Phi_0\rangle \qquad \psi_p |\Phi_0\rangle = 0 = \psi_h |\Phi_0\rangle$$

Signo + : creación

Signo - : destrucción

Orden normal N

Llevar ops. de destrucción (de partículas y huecos) a la derecha.

Por cada transposición poner un (-1) , como si anticonmutaran:

$$N[\psi_p(x_1) \psi_h^\dagger(x_2) \psi_h(x_3)] = -\psi_h^\dagger(x_2) \psi_p(x_1) \psi_h(x_3)$$

$$\begin{aligned} N[\psi^\dagger(x) \psi(y)] &= N[(\psi_h(x) + \psi_p^\dagger(x)) (\psi_h^\dagger(y) + \psi_p(y))] \\ &= N[\psi_h(x) \psi_h^\dagger(y) + \psi_h(x) \psi_p(y) + \psi_p^\dagger(x) \psi_h^\dagger(y) + \psi_p^\dagger(x) \psi_p(y)] \\ &= -\psi_h^\dagger(y) \psi_h(x) + \psi_h(x) \psi_p(y) + \psi_p^\dagger(x) \psi_h^\dagger(y) + \psi_p^\dagger(x) \psi_p(y) \end{aligned}$$

Usé que:

$$N\left(\sum_i \alpha_i A_i + \sum_j \beta_j B_j\right) = \sum_{ij} \alpha_i \beta_j N(A_i B_j)$$

donde A_i y B_j son cualquiera de los $a_m, a_m^\dagger, b_n, b_n^\dagger$

$$\Rightarrow \text{Um } N[\dots] \text{ siempre da } \langle \Phi_0 | N[\dots] | \Phi_0 \rangle = 0 \Leftarrow$$

Importante!

PAIRING

$$\underline{AB} \equiv AB - N(AB)$$

se ve que $\sum_i \alpha_i A_i \sum_j \beta_j B_j = \sum_i \alpha_i \beta_j \underline{A_i B_j}$

Vemos el pairing de las posibles combinaciones de operadores de partículas y huecos:

$$\begin{aligned} \underline{a_i(t) a_j^\dagger(t')} &= a_i(t) a_j^\dagger(t') - N [a_i(t) a_j^\dagger(t')] \\ &= a_i(t) a_j^\dagger(t') + a_j^\dagger(t') a_i(t) \\ &= e^{i(\epsilon_j t' - \epsilon_i t)} (a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i) \\ &= e^{i\epsilon_j(t' - t)} \delta_{ij}, \end{aligned}$$

Análogamente : $\underbrace{b_i(t)b_j^\dagger(t')} = e^{i\epsilon_j(t-t')}\delta_{ij}$

En todas las demás combinaciones los dos operadores anticonmutan y entonces el pairing da cero:

$$\underbrace{AB} = AB - N(AB) = AB - \left\{ \begin{array}{c} AB \\ -BA \end{array} \right\} = 0$$

O sea : $\{A, B\} = 0 \Rightarrow \underbrace{AB} = 0.$

Notar que todos los pairings son cero o un C-number,

→ Vemos que el pairing es útil para calcular:

mejor dicho, un
operador $\sim \mathbb{1}$

$$\begin{aligned}\langle \bar{\Phi}_0 | AB | \Phi_0 \rangle &= \langle \bar{\Phi}_0 | N(AB) + \underbrace{AB} | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \bar{\Phi}_0 | N(AB) | \Phi_0 \rangle + \langle \bar{\Phi}_0 | \underbrace{AB} | \Phi_0 \rangle \\ &\quad \parallel \\ &\quad 0 \\ &= \underbrace{AB}\end{aligned}$$

y el cálculo del valor de expectación en el vacío $|\Phi_0\rangle$

se reduce a calcular pairings.

Podemos ver fácilmente que dan los pairings de operadores de campo de partículas y huecos :

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\psi_h(xt) \psi_h^\dagger(yt')} &= \underbrace{\left[\sum_{\epsilon_i \leq \epsilon_F} \left\{ \varphi_i^*(x) b_i(t) \right\} \right]}_{\text{}} \underbrace{\left[\sum_{\epsilon_j \leq \epsilon_F} \varphi_j(y) b_j^\dagger(t') \right]}_{\text{}} \\
 &= \sum_{\epsilon_i, \epsilon_j \leq \epsilon_F} \varphi_i^*(x) \varphi_j(y) \underbrace{b_i(t) b_j^\dagger(t')}_{\text{}} \\
 &= \sum_{\epsilon_i, \epsilon_j \leq \epsilon_F} \varphi_i^*(x) \varphi_j(y) e^{i\epsilon_j(t-t')} \delta_{ij} \\
 &= \sum_{\epsilon_j \leq \epsilon_F} \varphi_j^*(x) \varphi_j(y) e^{i\epsilon_j(t-t')}
 \end{aligned}$$

Guia 6, ejercicio 2:

Demostrar que: $\underbrace{\hat{\psi}_p(xt) \hat{\psi}_p^\dagger(yt')} = \sum_{\epsilon_j > \epsilon_F} \varphi_j(x) \varphi_j^*(y) e^{i\epsilon_j(t'-t)}$

y se pueden ver las ~~contracciones~~ ^{pairings} de operadores de campo completos:

$$\underbrace{\psi(xt)} \underbrace{\psi^\dagger(Yt')} = \sum_{\epsilon_j > \epsilon_F} \psi_j(x) \psi_j^*(Y) e^{i\epsilon_j(t'-t)}$$

$$\underbrace{\psi^\dagger(xt)} \underbrace{\psi(Yt')} = \sum_{\epsilon_j \leq \epsilon_F} \psi_j^*(x) \psi_j(Y) e^{i\epsilon_j(t-t')}$$

$$\underbrace{\psi^\dagger(xt)} \underbrace{\psi^\dagger(Yt')} = \underbrace{\psi(xt) \psi(Yt')} = 0$$

Guia 6, Ejercicio 3: demostrar estas identidades

Podemos definir ~~orden normal~~ orden normal de operadores conteniendo

pairings:

$$N(\underbrace{A B C D E \dots X Y Z}_{\text{pairings}}) \equiv (-1)^q \underbrace{A D}_{\text{pairings}} \underbrace{C Y}_{\text{pairings}} N(B E \dots X Z)$$

donde q es el # de transposiciones necesarias para llevar los pares apareados a la izquierda del producto.

teorema de Wick para productos

$$A_1 A_2 \cdots A_n = N(A_1 \cdots A_n)$$

$$+ N(\underbrace{A_1 A_2}_{\text{pairing}} A_3 \cdots A_n) + N(A_1 \underbrace{A_2 A_3}_{\text{pairing}} \cdots A_n)$$

+ ... todos los casos con un pairing

$$+ N(\underbrace{A_1 A_2}_{\text{pairing}} \underbrace{A_3 A_4}_{\text{pairing}} \cdots A_n) + \dots$$

+ ... casos con dos pairings

+

⋮

+ términos completamente apareados (en el caso de n par)

Guia 6, Ejercicio 4: verificar el teorema con 2 y 3 operadores