Guía 4: Ej. 3

Hallar la función de Green ordenada temporalmente para el gas de electrones libres y no-interactuantes en el dominio espacio-tiempo, G(**r**t, **r**'t').

El hamiltoniano del sistema es

$$H=H_0=T.$$

Como no hay interacción (V=0) el picture de Hiesenberg y el de interacción es el mimso, esto nos permite expresar la función de Green de la siguiente manera:

$$iG_{\alpha,\beta}(rt, r't') = \langle\phi_0| T\{\psi_\alpha(\mathbf{r}t)_I \psi^\dagger_\beta(\mathbf{r}'t')_I\} |\phi_0\rangle \tag{1}$$

Recordando que T es el producto ordenado temporalmente y $\{\alpha, \beta\}$ son las proyecciones del spines de los electrones. Además, para este caso el estado fundamental $|\phi_0\rangle$ es la esfera de Fermi.

Para trabajar me conviene tener todo en la res presentación de Schrodinger, entonces retomando la definición normalizanda de los operadores de campo:

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\mathbf{r}t)_I &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{k\alpha}(t)_I \\ \psi^\dagger_\beta(\mathbf{r}'t')_I &= \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} c^\dagger_{\mathbf{k}'\beta}(t')_I \end{aligned} \tag{2}$$

Uso las siguentes propiedades (demostración en el Gross):

$$\begin{aligned} c_{k\alpha}(t)_I &= e^{-i\epsilon_k t} c_{k\alpha}(t)_S \\ c^\dagger_{\mathbf{k}'\beta}(t')_I &= e^{i\epsilon_{k'} t} c^\dagger_{k'\beta}(t')_S \end{aligned} \tag{3}$$

Donde $\boxed{\epsilon_k = \frac{k^2}{2m}}$, la energía cinética de los electrones. Tomando esto en cuenta los operadores de campo quedan:

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\mathbf{r}t)_I &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\epsilon_k t} c_{k\alpha}(t)_S \\ \psi^\dagger_\beta(\mathbf{r}'t')_I &= \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} e^{i\epsilon_{k'} t} c^\dagger_{k'\beta}(t')_S \end{aligned} \tag{4}$$

Reemplazando los operadores de campo en la función de Green (1) y desarrollando la función T (recordando que estamos trabajando con electrones):

$$iG_{\alpha\beta}(rt, r't') = \sum_{kk'} \frac{1}{V} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}')} e^{-i(\epsilon_k t - \epsilon_{k'} t')} \left(\theta(t-t') \underbrace{\langle\phi_0| c_{\mathbf{k}\alpha} c^\dagger_{\mathbf{k}'\beta} |\phi_0\rangle}_{\text{(I)}} - \theta(t'-t) \underbrace{\langle\phi_0| c^\dagger_{\mathbf{k}'\beta} c_{\mathbf{k}\alpha} |\phi_0\rangle}_{\text{(II)}} \right) \tag{5}$$

Como $|\phi_0\rangle$ es un determinante de slatter de ondas planas con momento dentro de la esfera de Fermi, entonces los elementos de matriz se anulan salvo en los casos en que (k,α) sea idéntico a (k', β). A continuación analizo cada elemento de matriz por separado:

I $\langle\phi_0| c_{\mathbf{k}\alpha} c^{\dagger}_{\mathbf{k}'\beta} |\phi_0\rangle \longrightarrow$ destruye una partícula en el esfera de Fermi con estado (k',β) entonces cuando se quiere construir una partícula en usando el operador de creación por el principio de exclusión solo esta disponible el estado (k,α) .

II $\langle\phi_0| c^{\dagger}_{\mathbf{k}'\beta} c_{\mathbf{k}\alpha} |\phi_0\rangle \longrightarrow$ análogo al (1)

Entonces por dicha razón para que los elementos de matriz (1) y (2) sean no nulos hay que pedir

$$(k,\alpha) = (k',\beta)$$

.

Aplicando lo anterior en la función de green (5) queda:

$$iG_{\alpha\beta}(rt,r't') = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V}\sum_{k} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}e^{-i\epsilon_k(t-t')}\left(\theta(t-t')\underbrace{\langle\phi_0| c_{\mathbf{k}\alpha}c^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}|\phi_0\rangle}_{\text{(I)}} - \theta(t'-t)\underbrace{\langle\phi_0| c^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}c_{\mathbf{k}\alpha}|\phi_0\rangle}_{\text{(II)}}\right) \tag{6}$$

Nuevamente analizando cada elemento de matriz (última vez, lo prometo):

I $\langle\phi_0| c_{\mathbf{k}\alpha}c^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}|\phi_0\rangle = \theta(k-k_F)$ dado que primero construyo una partícula en el estado (k,α) que solo puedo hacer si estoy por afuera de la esfera de Fermi, dado que adentro todos los estados están ocupados

II $\langle\phi_0| c^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}c_{\mathbf{k}\alpha}|\phi_0\rangle = \theta(k_F-k)$ dado que primero destruyo una partícula en el estado (k,α) que solo puedo hacer si estoy por adentro de la esfera de Fermi, dado que adentro todos los estados están ocupados

Usando lo anterior en la ecuación (6) queda:

$$iG_{\alpha\beta}(rt,r't') = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V}\sum_{k} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}e^{-i\epsilon_k(t-t')}\left(\theta(t-t')\theta(k-k_F) - \theta(t'-t)\theta(k_F-k)\right) \tag{7}$$

Multiplicando y dividiendo por $\Delta k = \frac{(2\pi)^3}{V}$ y aplicando el limite termodinámico

$$V \longrightarrow \infty \Rightarrow \Delta k \longrightarrow 0$$

se puede pasa al límite continuo;

$$\sum_{\mathbf{k}} \Delta k \longrightarrow \int d^3k.$$

Finalmente la función de Green (7) queda:

$$iG_{\alpha\beta}(rt,r't') = \delta_{\alpha\beta}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}e^{-i\epsilon_k(t-t')}\left(\theta(t-t')\theta(k-k_F) - \theta(t'-t)\theta(k_F-k)\right) \tag{8}$$

Solo queda integrar $\mathbf{k}$, sobre un espacio restringido de $\mathbb{R}^3$ debido a las thetas de Heaviside. Para eso separo las integrales en dos:

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{-i\epsilon_k(t-t')}\theta(t-t')\theta(k-k_F) \longrightarrow \text{Integro } \textbf{afuera} \text{ de la esfera de Fermi}$$
$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{-i\epsilon_k(t-t')}\theta(t'-t)\theta(k_F-k) \longrightarrow \text{Integro } \textbf{adentro} \text{ de la esfera de Fermi}$$

Para no repetir las cuentas, calculo aparte:

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{-i\epsilon_k(t-t')} \tag{9}$$

Teniendo cuidado de no integrar sobre k, dado que al final voy a querer en espacios diferentes. Cambio de nombres:

$$\boxed{\mathbf{R} = (\mathbf{r}-\mathbf{r}')}$$

$$\boxed{T = (t-t')}$$

(*) aclaración: todo lo que sigue es asumiendo $t \neq t'$ y $r \neq \mathbf{r}'$

Además tomo

$$k = k\left(\cos(\phi)\cos(\theta)\hat{x} + \sin(\phi)\cos(\theta)\hat{y} - \sin\theta\hat{z}\right)$$

Defino $\hat{z}$ tal que $\hat{z} = \frac{\mathbf{R}}{R}$

Con lo anterior, la integral (9) queda:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin(\theta)d\theta \int dk k^2 e^{-ikR\sin(\theta)} e^{-i\frac{k^2}{2m}T} = 2\pi \int dk k^2 \left[\int_0^{\pi} d\theta \sin(\theta) e^{-ikR\sin(\theta)}\right] e^{-i\frac{k^2}{2m}T} \tag{10}$$

Ahora solo analizo la integral respecto de θ. Tomo el cambio de variable $\theta = \alpha - \pi/2$

$$\begin{aligned} \int_0^{\pi} d\theta \sin(\theta) e^{ikR\sin(\theta)} &= -\int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\alpha \cos(\alpha) e^{ikR\cos(\theta)} \\ &= -i\pi\left(-J_1(kR) + iH_{-1}(kR)\right) \end{aligned} \tag{11}$$

Siendo $J_1(z)$ la *función de Bessel de primera especie* y $H_{-1}(z)$ la *función de Struve*. Además, defino $\boxed{a = \frac{1}{2m}T}$. Reemplazando esto en la integral (10),

$$-2\pi^2 i \int dk\, k^2 \left[-\underbrace{J_1(kR)}_{\text{(I)}} + i\underbrace{H_{-1}(kR)}_{\text{(II)}}\right] e^{-iak^2} \tag{12}$$

Calculo las integrales desarollando en serie cada una de las funciones anteriores:

I $J_1(kR) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l\,(kR)^{1+2l}}{l!\,\Gamma(2+l)}$
(https://mathworld.wolfram.com/BesselFunctionoftheFirstKind.html)
Juntando con la ecuación (12) solo basta con integrar sobre la dependencia de k:

$$\int dk\, k^2 k^{2s+1} e^{-k^2 a} = \frac{-1}{2a^{2+s}} \Gamma(s+2, k^2 a) \tag{13}$$

Siendo $\Gamma(l+2, k^2a)$ la *función gamma incompleta* (https://reference.wolfram.com/language/ref/Gamma.html). Recordando que estábamos analizando las dos regiones de integración por separado (por adentro y por afuera de la esfera de Fermi) evalúo en dichos límites:

$$\begin{aligned} &\text{integral de afuera}: \left[\frac{-1}{2a^{2+s}}\Gamma(s+2,k^2a)\right]\Big|_{k_F}^{\infty} = \frac{-1}{2a^{2+s}}\left(0-\Gamma(s+2,k_F^2a)\right)(*) \\ &\text{integral de adentro}: \left[\frac{-1}{2a^{2+s}}\Gamma(s+2,k^2a)\right]\Big|_{0}^{k_F} = \frac{-1}{2a^{2+s}}\left(\Gamma(s+2,k_F^2a)-\Gamma(s+2)\right) \end{aligned} \tag{14}$$

II $H_{-1}(kR) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (\frac{1}{2}kR)^{2m}}{\Gamma(m+\frac{3}{2})\Gamma(m+\frac{1}{2})}$
(https://mathworld.wolfram.com/StruveFunction.html)
Nuevamente reemplazando en la ecuación (12);

$$\int dk\, k^2 k^{2s} e^{-k^2 a} = \frac{-1}{2a^{(s+3/2)}} \Gamma(s+\frac{3}{2}, k^2 a) \tag{15}$$

Nuevamente evaluando en los límites correspondientes:

$$\begin{aligned} &\text{integral de afuera}: \left[\frac{-1}{2a^{(s+3/2)}}\Gamma(s+\frac{3}{2},k^2a)\right]\Big|_{k_F}^{\infty} = \frac{-1}{2a^{(s+3/2)}}\left(0-\Gamma(s+\frac{3}{2},k_F^2a)\right) \\ &\text{integral de adentro}: \left[\frac{-1}{2a^{(s+3/2)}}\Gamma(s+\frac{3}{2},k^2a)\right]\Big|_{0}^{k_F} = \frac{-1}{2a^{(s+3/2)}}\left(\Gamma(s+\frac{3}{2},k_F^2a)-\Gamma(s+\frac{3}{2})\right) \end{aligned} \tag{16}$$

(*) comentario sobre el siguiente límite:

$$\lim_{k\to-\infty} \Gamma(\sigma, k^2 a) = \text{indet.} \tag{17}$$

Pero se puede hacer una expansión de Taylor el el infinito que da:

$$e^{-ax^2} x^{2\sigma} \left(\frac{a^{\sigma-1}}{x^2} + \frac{a^{\sigma-2}(\sigma-1)}{x^4} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{x^6}\right)\right) \tag{18}$$

Donde el término e^{-ax^2} decae lo más rápdio haciendo que el límite de cero.

Con lo anterior, la integral (12) queda:

$$\begin{aligned}
\text{integral de afuera} &= -2\pi i \Bigg[-\sum_l \frac{(-1)^l R^{1+2l}}{l!\,\Gamma(2+l)} \frac{1}{(2a^{2+l})} \Gamma(l+2, k_F^2 a) \\
&+ i \sum_m \frac{(-1)^m (1/2R)^{2m}}{\Gamma(m\frac{3}{2})\Gamma(m+\frac{1}{2})} \frac{1}{2a^{m+3/2}} \left(\Gamma(m+\frac{3}{2}, k_F^2 a) \right) \theta(t-t') \\
\text{integral de adentro} &= -2\pi i \Bigg[-\sum_l \frac{(-1)^l R^{1+2l}}{l!\,\Gamma(2+l)} \frac{1}{(2a^{2+l})} \big(\Gamma(l+2, k_F^2 a) - \Gamma(l+2) \big) \\
&+ i \sum_m \frac{(-1)^m (1/2R)^{2m}}{\Gamma(m\frac{3}{2})\Gamma(m+\frac{1}{2})} \frac{-1}{2a^{m+3/2}} \left(\Gamma(m+\frac{3}{2}, k_F^2 a) - \Gamma(m+\frac{3}{2}) \right) \theta(t'-t)
\end{aligned} \tag{19}$$

Finalmente, sumando retomando los cambios de nombre y multiplicando por el $\frac{\delta_{\alpha\beta}}{(2\pi)^3}$ olvidado bien arriba se obtiene la función de Green para un gas de electrones libres.