**Ejercicio.** Considere un sistema físico formado por fermiones que pueden ocupar dos orbitales. El hamiltoniano está dado por

$$\hat{H} = E_1\ \hat{c}_1^\dagger\ \hat{c}_1 + E_2\ \hat{c}_2^\dagger\ \hat{c}_2 + t\ \hat{c}_1^\dagger\ \hat{c}_2 + t^*\ \hat{c}_2^\dagger\ \hat{c}_1.$$

Encuentre la función de Green $G^R(ij,\omega)$, donde $i$ y $j$ pueden valer 1 o 2 y donde

$$i\ G^R(ij,t-t') = \theta(t-t')\ \langle\Phi_0|\left\{\hat{c}_i(t), \hat{c}_j^\dagger(t')\right\}|\Phi_0\rangle.$$

Usar el método de la ecuación de movimiento. No olvide interpretar los resultados.

**Solución.** Teniendo en cuenta que $|\Phi_0\rangle$ está en la representación de Heisenberg y por ende no depende del tiempo se tiene que

$$\begin{aligned}
i\ \partial_t G^R(ij,t-t') &= \partial_t\theta(t-t')\ \langle\Phi_0|\left\{\hat{c}_i(t), \hat{c}_j^\dagger(t')\right\}|\Phi_0\rangle + \theta(t-t')\ \langle\Phi_0|\left\{\partial_t\hat{c}_i(t), \hat{c}_j^\dagger(t')\right\}|\Phi_0\rangle \\
&= \delta(t-t')\ \langle\Phi_0|\left\{\hat{c}_i(t), \hat{c}_j^\dagger(t')\right\}|\Phi_0\rangle + \theta(t-t')\ \langle\Phi_0|\left\{\partial_t\hat{c}_i(t), \hat{c}_j^\dagger(t')\right\}|\Phi_0\rangle \\
&\delta(t-t')\ \delta_{ij} + \theta(t-t')\ \langle\Phi_0|\left\{\partial_t\hat{c}_i(t), \hat{c}_j^\dagger(t')\right\}|\Phi_0\rangle,
\end{aligned}$$

donde se ha usado que

$$\partial_t\theta(t-t') = \delta(t-t')$$

y que

$$\begin{aligned}
&\left\{\hat{c}_i(t), \hat{c}_j^\dagger(t)\right\} = \hat{c}_i(t)\ \hat{c}_j^\dagger(t) + \hat{c}_j(t)\ \hat{c}_i^\dagger(t) \\
&= \hat{U}^\dagger(t,t_0)\ \hat{c}_i\ \hat{U}(t,t_0)\ \hat{U}^\dagger(t,t_0)\ \hat{c}_j^\dagger\ \hat{U}(t,t_0) + \hat{U}^\dagger(t,t_0)\ \hat{c}_j\ \hat{U}(t,t_0)\ \hat{U}^\dagger(t,t_0)\ \hat{c}_i^\dagger\ \hat{U}(t,t_0) \\
&= \hat{U}^\dagger(t,t_0)\ \hat{c}_i\ \hat{c}_j^\dagger\ \hat{U}(t,t_0) + \hat{U}^\dagger(t,t_0)\ \hat{c}_j\ \hat{c}_i^\dagger\ \hat{U}(t,t_0) = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\ \left\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\right\}\ \hat{U}(t,t_0) = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\ \delta_{ij}\ \hat{U}(t,t_0) = \delta_{ij}.
\end{aligned}$$

Por otro lado, como estamos en la representación de Heisenberg

$$\partial_t\hat{c}_i(t) = \frac{1}{i\ \hbar}\ \left[\hat{c}_i(t), \hat{H}\right].$$

Este conmutador es fácil de hallar en el caso en el que

$$\hat{H} = \hat{H}_0 = \sum_{jk} t_{jk}\ \hat{c}_j^\dagger\ \hat{c}_k,$$

es decir, cuando el hamiltoniano solo tiene términos de un cuerpo y no hay interacción.

En efecto, en primer lugar se tiene que

$$\left[\hat{c}_i(t), \hat{H}_0\right] = \left[\hat{c}_i(t), \sum_{jk} t_{jk}\ \hat{c}_j^\dagger(t)\ \hat{c}_k(t)\right] = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\ \sum_{jk} t_{jk}\ \left[\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\ \hat{c}_k\right]\ \hat{U}(t,t_0).$$

En segundo lugar,

$$\left[\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\ \hat{c}_k\right] = \left[\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\right]\ \hat{c}_k + \hat{c}_j^\dagger\ \left[\hat{c}_i, \hat{c}_k\right] = \left(\hat{c}_i\ \hat{c}_j^\dagger - \hat{c}_j^\dagger\ \hat{c}_i\right)\ \hat{c}_k + \hat{c}_j^\dagger\ \left(\hat{c}_i\ \hat{c}_k - \hat{c}_k\ \hat{c}_i\right).$$

Como

$$\hat{c}_k\ \hat{c}_i = -\hat{c}_i\ \hat{c}_k$$

se llega a

$$\left[\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\ \hat{c}_k\right] = \left(\hat{c}_i\ \hat{c}_j^\dagger - \hat{c}_j^\dagger\ \hat{c}_i\right)\ \hat{c}_k + 2\ \hat{c}_j^\dagger\ \hat{c}_i\ \hat{c}_k = \hat{c}_i\ \hat{c}_j^\dagger\ \hat{c}_k + \hat{c}_j^\dagger\ \hat{c}_i\ \hat{c}_k = \left\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\right\}\ \hat{c}_k = \delta_{ij}\ \hat{c}_k.$$

Por lo tanto,

$$\left[\hat{c}_i(t), \hat{H}_0\right] = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\ \sum_{jk} t_{jk}\ \delta_{ij}\ \hat{c}_k\ \hat{U}(t,t_0) = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\ \sum_{k} t_{ik}\ \hat{c}_k\ \hat{U}(t,t_0) = \sum_{k} t_{ik}\ \hat{c}_k(t).$$

Luego, queda finalmente

$$\partial_t\hat{c}_i(t) = \frac{1}{i\ \hbar}\ \left[\hat{c}_i(t), \hat{H}_0\right] = \frac{1}{i\ \hbar}\ \sum_{k} t_{ik}\ \hat{c}_k(t).$$

Reemplazando se obtiene entonces

$$i\ \partial_t G^R\left(ij,t-t'\right)=\delta\left(t-t'\right)\ \delta_{ij}+\theta\left(t-t'\right)\ \left\langle\Phi_0\right|\left\{\tfrac{1}{i\ \hbar}\ \sum_k t_{ik}\ \hat{c}_k\left(t\right),\hat{c}_j^\dagger\left(t'\right)\right\}\left|\Phi_0\right\rangle$$

$$=\delta\left(t-t'\right)\ \delta_{ij}+\tfrac{1}{i\ \hbar}\ \theta\left(t-t'\right)\ \sum_k t_{ik}\ \left\langle\Phi_0\right|\left\{\hat{c}_k\left(t\right),\hat{c}_j^\dagger\left(t'\right)\right\}\left|\Phi_0\right\rangle=\delta\left(t-t'\right)\ \delta_{ij}+\tfrac{1}{\hbar}\ \sum_k t_{ik}\ G^R\left(kj,t-t'\right).$$

Transformando Fourier

$$G^R\left(ij,t-t'\right)=\frac{1}{\sqrt{2\ \pi}}\ \lim_{\eta\to 0}\int G^R\left(ij,\omega\right)\ e^{-i\ (\omega+i\ \eta)\ \left(t-t'\right)}\ d\omega,$$

$$\delta\left(t-t'\right)=\frac{1}{\sqrt{2\ \pi}}\ \lim_{\eta\to 0}\int e^{-i\ (\omega+i\ \eta)\ \left(t-t'\right)}\ d\omega$$

se llega a la siguiente expresión

$$\left(\omega+i\ \eta\right)\ G^R\left(ij,\omega\right)-\frac{1}{\hbar}\ \sum_k t_{ik}\ G^R\left(kj,\omega\right)=\delta_{ij},$$

donde $\eta\to 0$.

En nuestro problema en particular, estas ecuaciones quedan

$$\left\{\begin{array}{c}\left[\left(\omega+i\ \eta\right)-\frac{E_1}{\hbar}\right]\ G^R\left(11,\omega\right)-\frac{t}{\hbar}\ G^R\left(21,\omega\right)=1\\ \left[\left(\omega+i\ \eta\right)-\frac{E_1}{\hbar}\right]\ G^R\left(12,\omega\right)-\frac{t}{\hbar}\ G^R\left(22,\omega\right)=0\\ \left[\left(\omega+i\ \eta\right)-\frac{E_2}{\hbar}\right]\ G^R\left(21,\omega\right)-\frac{t^*}{\hbar}\ G^R\left(11,\omega\right)=0\\ \left[\left(\omega+i\ \eta\right)-\frac{E_2}{\hbar}\right]\ G^R\left(22,\omega\right)-\frac{t^*}{\hbar}\ G^R\left(12,\omega\right)=1\end{array}\right. .$$

Llamando

$$A_{ij}=G^R\left(ij,\omega\right)$$

y

$$\Omega_k=\left(\omega+i\ \eta\right)-\frac{E_k}{\hbar}$$

se tiene

$$\left\{\begin{array}{c}\Omega_1\ A_{11}-\frac{t}{\hbar}\ A_{21}=1\\ \Omega_1\ A_{12}-\frac{t}{\hbar}\ A_{22}=0\\ \Omega_2\ A_{21}-\frac{t^*}{\hbar}\ A_{11}=0\\ \Omega_2\ A_{22}-\frac{t^*}{\hbar}\ A_{12}=1\end{array}\right. .$$

Despejando $A_{12}$ y $A_{21}$ de las dos ecuaciones del medio y reemplazando en las otras dos,

$$A_{11}=\frac{\Omega_2}{\Omega_1\ \Omega_2-\frac{|t|^2}{\hbar^2}},$$

$$A_{22}=\frac{\Omega_1}{\Omega_1\ \Omega_2-\frac{|t|^2}{\hbar^2}}.$$

Luego,

$$A_{12}=\frac{\frac{t}{\hbar}}{\Omega_1\ \Omega_2-\frac{|t|^2}{\hbar^2}},$$

$$A_{21}=\frac{\frac{t}{\hbar}^*}{\Omega_1\ \Omega_2-\frac{|t|^2}{\hbar^2}}.$$

La matriz se escribe entonces como

$$A=\frac{1}{\Omega_1\ \Omega_2-\frac{|t|^2}{\hbar^2}}\ \left(\begin{array}{cc}\Omega_2 & \frac{t}{\hbar}\\ \frac{t}{\hbar}^* & \Omega_1\end{array}\right).$$

En cuanto a la interpretación de resultados, en primer lugar notar que cuando $\eta\to 0$, la función de Green tiene un polo cuando

$$\Omega_1\ \Omega_2-\frac{|t|^2}{\hbar^2}=\left(\omega-\frac{E_1}{\hbar}\right)\ \left(\omega-\frac{E_2}{\hbar}\right)-\frac{|t|^2}{\hbar^2}=\frac{1}{\hbar^2}\ \left[\left(\hbar\ \omega-E_1\right)\ \left(\hbar\ \omega-E_2\right)-|t|^2\right]=-\frac{1}{\hbar^2}\ \det\left(H-\hbar\ \omega\ I\right)=0,$$

es decir, cuando $\hbar\,\omega$ es una energía de excitación.

En segundo lugar, si $t=0$, se llega a

$$G^R\left(ij,\omega\right)=\frac{1}{\Omega_i}\;\delta_{ij}=\frac{1}{\omega-\frac{E_i}{\hbar}+i\;\eta}\;\delta_{ij},$$

lo cual es de esperar.