

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE CIENCIAS



EL USO DE LA FUNCION
DE GREEN A TEMPERATURA CERO

T E S I S
Que Para Obtener el Título de
F I S I C O
P r e s e n t a:

AUGUSTO CABRERA MANUEL

México, D. F.

6689

1979



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE DE CONTENIDO

	Página
INTRODUCCION	1
Agradecimientos	6
 CAPITULO 1: EL METODO HARTREE-FOCK	
Introducción	7
Descripción del método	8
 CAPITULO 2: SEGUNDA CUANTIZACION	
Introducción	15
Espacio de número de ocupación	16
Operadores de creación y aniquilación para fermiones	17
Operadores de una y dos partículas para fermiones en segunda cuantización	21
 CAPITULO 3: FUNCIONES DE GREEN	
Introducción	27
Definición de la función de Green de una partícula	29
Interpretación física de la función de Green	33
Representación espectral o de Lehman, para la función de Green	34
Comportamiento asintótico de la función de Green	36

Relaciones de simetría de la función de Green	37
Ecuación de movimiento de la función de Green	38
Relación de la función de Green con cantidades físicas	42
Desacoplamiento de la ecuación de movimiento	48
CAPITULO 4: APLICACION DEL FORMALISMO DE LA FUNCION DE GREEN, A UN PROBLEMA SOLUBLE	
Introducción	53
Solución exacta del problema	54
Aplicación de la función de Green	56
CONCLUSIONES	64
APENDICES	
APENDICE A: CALCULO DEL FACTOR (2.13), ASOCIADO A OPERADORES DE CREACION Y ANIQUILACION	67
APENDICE B: OPERADORES DE UNA PARTICULA EN SEGUNDA CUANTIZACION	69
APENDICE C: OPERADORES DE DOS PARTICULAS EN SEGUNDA CUANTIZACION	72

APENDICE D:	CALCULO DEL CONMUTADOR $[\hat{H}, \hat{a}_k]$	75
APENDICE E:	CALCULO DE ϵ_k	77
APENDICE F:	CALCULO DE LAS INTEGRALES H_{kk}^0, V_{jkk} y V_{jkkj}	79
	BIBLIOGRAFIA	92

INTRODUCCION

La función de Green, es un método general útil para la construcción de soluciones de ecuaciones diferenciales lineales no-homogéneas, tanto en derivadas ordinarias como en derivadas parciales. En física, las ecuaciones diferenciales no-homogéneas, surgen cuando se tienen problemas en los que se tienen que considerar fuentes. Ejemplos de estas ecuaciones son: La ecuación de Poisson, ecuación de difusión y la ecuación de onda no-homogéneas; las cuales aparecen en varias áreas de la física como; electromagnetismo, conducción de calor, teoría de fluidos, teoría de ondas, mecánica cuántica de una partícula, etc.

En todos esos casos, las ecuaciones diferenciales necesitan completarse con condiciones de frontera y/o iniciales, para tener la solución única de la ecuación correspondiente. Las condiciones de frontera son sugeridas por el problema físico y pueden caer en cualquiera de las tres clases siguientes: condiciones de Cauchy, condiciones de Dirichlet y condiciones de Neuman. En las primeras se da el valor de una función y su derivada normal sobre la frontera. En las segundas se da el valor de una función sobre la frontera. En las terceras se da la derivada normal de una función sobre la frontera.

La función de Green de un problema físico determinado, satisface una ecuación diferencial del mismo tipo que la que satisface la solución total del problema, pero el término que contiene la inhomogeneidad, es regularmente una delta de Dirac. Las condiciones de frontera y/o iniciales que se imponen a la solución total,

se relacionan también a la función de Green correspondiente. La solución total se construye como una ecuación integral mediante la función de Green.¹

En la mecánica cuántica de muchas partículas idénticas, la función de onda que describe al sistema, es simétrica o antisimétrica, dependiendo de que las partículas obedezcan la estadística de Bose-Einstein o Fermi-Dirac respectivamente. Las partículas idénticas son aquellas que muestran propiedades idénticas (masa, carga, espín, etc.) bajo las mismas condiciones (campo externo, presencia de otras partículas, temperatura, etc.).

Para un sistema de N partículas idénticas que interactúan solo por pares, con potenciales $\hat{V}(x, x')$ y están sometidos a un potencial externo $\hat{U}(x)$, el Hamiltoniano exacto es

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k^2 + \hat{U}_k(x) \right] + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l}^N \hat{V}(x_k, x_l) \quad (0.1)$$

donde m es la masa de cada partícula y x_k , $k=1, 2, 3, \dots, N$, denota las coordenadas espaciales y de espín para cada partícula.

El Hamiltoniano (0.1) puede utilizarse en la ecuación de Schrödinger

$$H \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t) = i \hbar \frac{\partial \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t)}{\partial t} \quad (0.2)$$

para obtener la función de onda que contiene la información sobre el sistema. Para la mayoría de los sistemas reales de muchas

¹Esta construcción, así como un tratamiento más amplio de las propiedades de las funciones de Green y sus aplicaciones en problemas de calor, ondas, fluidos, mecánica cuántica de una partícula, etc., pueda verse en: Arfken (2), pp. 412-418, 446-447; Wylie (7), pp. 188-184; Sommerfeld (8) y Davidov (9), pp. 374-381.

partículas, hasta el momento, no ha sido posible dar métodos de solución exactos para la ecuación de Schrödinger. En cambio, se han desarrollado métodos de aproximación para atacar el problema de muchos cuerpos. Entre estos métodos se tienen: Hartree, Hartree-Fock, cálculo de energía de correlación de Wigner, métodos que se basan en la introducción explícita de coordenadas colectivas, para describir modos colectivos del sistema,² teoría de perturbación, teoría semi-fenomenológica para fermiones normales de Landau³, función de Green, etc.

La función de Green que aparece en teoría de muchos cuerpos tiene comportamientos similares a los de las funciones de Green que aparecen en otros campos de la física; por ejemplo, es necesario imponerle condiciones de frontera y/o iniciales, cumple con relaciones de simetría. Pero también tiene grandes diferencias; por ejemplo, la función de onda exacta del problema puede ponerse en términos de la función de Green a través de una ecuación integral que es acoplada ya que contiene a la solución en la integral; es discontinua; se define como valor esperado de operadores expresados en segunda cuantización y ordenados cronológicamente, entre estados exactos del sistema; satisface una ecuación acoplada no lineal en operadores de creación y aniquilación y da origen a un conjunto infinito de ecuaciones diferenciales acopladas en funciones de Green de ordenes superiores; da información sobre (directamente): la energía del estado base del sistema; el espectro de energías de excitación; el valor esperado del operador de número de ocupación y de número total de partículas; calor específico; conductividad; viscosidad, etc.

² Vense por ejemplo: Tomonaga S., Proc. Theoret. Phys. (Kyoto), 13, 467 (1955). Bogoljubov, N.N. and Zubarev, N., Soviet Phys. JETP, 1, 83 (1955). Bohm, D. and D. Pines, Phys. Rev., 92, 1099 (1953). Este último artículo se encuentra reproducido en Pines (20).

³ L.D. Landau, "The Theory of a Fermi liquid", Soviet Phys. JETP, 3, 920 (1957). L.D. Landau, "Oscillations in a Fermi liquid", Soviet Phys. JETP, 5, 101 (1957).

Existen varios tipos de funciones de Green, dependiendo de la naturaleza de las funciones de estado que se usan para construir el valor esperado mediante el cual se definen y del argumento del cual dependen.

Si el valor esperado se toma entre el estado vacío, se tiene la función de Green de teoría de campo cuántico. Si se toma entre un ensamble estadístico, se tienen funciones de Green termodinámicas.

Si las funciones de Green tienen explícitamente el tiempo como argumento, se llaman dependientes del tiempo. Estas pueden depender de dos o más tiempos. Si dependen explícitamente de la temperatura sin depender del tiempo, se llaman funciones de Green de Matsubara⁵ ya que él fué quien las introdujo.

Atendiendo a la relación entre los tiempos de los que dependen las funciones de Green, doblemente dependientes del tiempo, estas pueden ser de tres tipos: retardada, avanzada y causal. La retardada es cero si $t < t'$ (t y t' son los tiempos que contiene la función como argumento); por lo tanto solo propaga excitaciones para $t > t'$. La avanzada es cero si $t > t'$, por lo que solo propaga excitaciones si $t < t'$. La causal propaga excitaciones tanto para $t < t'$ como para $t > t'$.

El presente trabajo es una monografía en la que se incluye el siguiente material: una somera descripción del método Hartree-Fock, en el capítulo 1, que se incluye debido a que conduce a ecuaciones para la energía de un sistema de N fermiones, que interactúan solo por pares, del mismo tipo de las que se encuentran al desacoplar

⁴Un tratamiento para expresar la ecuación de Schrödinger a través de una ecuación integral acoplada a partir de la función de Green, puede verse en: A.B. Migdal, Theory of Finite Fermi Systems with Applications to Atomic Nuclei, vol. XIX, pp. 29-34, Interscience Publishers John Wiley and Sons, 1967. También en W.A. Harrison, Solid State Theory, McGraw-Hill Book company, 1970, pp. 217-218.

⁵T. Matsubara, Prog. Theoret. Phys. (Kyoto) 14, 351 (1955).

a primer orden, las ecuaciones de movimiento de la función de Green.

En el capítulo 2 se describe el formalismo de segunda cuantización, en el que se reformulan operadores de una y dos partículas, en términos de operadores de creación y aniquilación; este formalismo facilita el tratamiento del problema de muchas partículas idénticas y se aplica en los capítulos 3 y 4 en los cuales, se utiliza el Hamiltoniano reformulado en segunda cuantización.

En el capítulo 3 se describe el método de la función de Green, estableciendo algunas propiedades matemáticas y su relación con cantidades físicas.

En el capítulo 4, se incluye un bosquejo de como se construye la función de Green para un sistema de N fermiones que interactúan solo por pares mediante potenciales tipo oscilador armónico se encuentran sometidos a un potencial externo tipo oscilador armónico. La construcción se hace, utilizando la ecuación de movimiento de la función de Green (que se describe en el capítulo 3) y la aproximación Hartree-Fock para linealizar dicha ecuación (esto también se describe en el capítulo 3). La función de Green que se obtiene, tiene polos que están relacionados con el espectro de energías de excitación del sistema. Los polos se expresan en términos de coeficientes Clebsch-Gordan, coeficientes de Wigner-Eckart y funciones Gamma. Se dan además referencias de donde encontrar esos coeficientes y funciones.

El problema con que se trabaja en el capítulo 4, es un modelo teórico que tiene solución exacta y puede usarse si se desea, para obtener el intervalo de validez, del método de la función de Green que como ya se mencionó antes, es un método que da una solución aproximada solamente (al menos por ahora).

El trabajo está restringido a sistemas que se encuentran a temperatura cero y formado por fermiones. Que se trabaja a temperatura $T=0$, se refleja en el hecho de que se utiliza una función de onda que no depende de la temperatura para definir la función de Green. Cuando se quiere el formalismo a temperaturas diferentes de cero, se utiliza, para definir la función de Green, una función que corresponde a un ensamble estadístico gran canónico⁶.

El trabajo se desarrolló con la finalidad de familiarizarse con el formalismo de la función de Green para aplicarlo más adelante a problemas físicos reales, especialmente del área de estado sólido.

AGRADECIMIENTOS.

A lo largo de mi carrera hubo numerosas personas de quienes recibí ayuda, a todas ellas muchas gracias. Merecen especial mención las familias: Santiago Yee, Montalvo Escobar, Chacon Uribe y Becerril González, por su meritorio apoyo.

Agradezco al Dr. Alipio Calles por su valiosa dirección, su paciencia, sus comentarios y consejos.

⁶ Para un desarrollo del formalismo de la función de Green a $T=0$, puede verse: A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov y I.E. Shchinski, (1), pp. 97-153. D.N. Zubarev, (30).

CAPITULO 1

EL METODO HARTREE-FOCK

INTRODUCCION

El método Hartree-Fock que se describe en este capítulo es un método de aproximación útil para la obtención teórica de algunas propiedades físicas asociadas con un sistema de muchos fermiones.

El método Hartree-Fock es una generalización del método de Hartree (campo autoconsistente), el cual tiene como piedra angular la hipótesis de que cuando se tiene un sistema de N fermiones sometidos a un potencial común y con interacción entre pares, cada partícula puede tratarse como si estuviera sometida a un potencial efectivo, que consiste del potencial común, más un potencial promedio debido a la presencia de los $N-1$ fermiones restantes. Matemáticamente, eso se logra aproximando la función de onda exacta del sistema, por un producto de funciones de onda ortonormales, de partícula independiente; el cual se conoce como "producto de Hartree". Después se utiliza un principio variacional para optimizar la energía, calculada como valor esperado del Hamiltoniano entre productos de Hartree. Como resultado se obtiene un conjunto de N ecuaciones integrodiferenciales, acopladas en las funciones de onda de partícula independiente, que se resuelve en forma autoconsistente para obtener la energía y la función de onda del sistema, aproximadas.

La generalización de lo anterior y que conduce al método

Hartree-Fock, consiste en usar en lugar de un producto de Hartree, un determinante formado con funciones de onda ortonormales de partícula independiente. Esto se hace con el fin de tomar en cuenta la indistinguibilidad y la estadística de las partículas y por lo tanto, el principio de exclusión.

DESCRIPCION DEL METODO

Supóngase que se tiene un sistema de N fermiones que interaccionan solo por pares. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este sistema es

$$\hat{H} \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (1.1)$$

donde

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \hat{H}^0(x_k) + \sum_{j>k}^N \sum_{k=1}^N \hat{V}(x_k, x_j) \quad (1.2)$$

es el Hamiltoniano del sistema, $\hat{H}(x)$ representa el Hamiltoniano de una partícula dentro de un campo externo $\hat{U}(x)$, $\hat{V}(x_i, x_j)$ representa el potencial de interacción entre pares de partículas y x representa el conjunto de coordenadas para caracterizar a una partícula, incluye por lo tanto coordenadas espaciales y de espín. La función $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ es la función de onda exacta del sistema y E es la energía exacta total para los N fermiones.

En Hartree-Fock se aproxima $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ por una función $\Phi(x_1, \dots, x_N)$ dada por el determinante

$$\Phi(x_1, x_2, \dots, x_N) \equiv \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) \phi_2(x_2) \dots \phi_N(x_N) \\ \phi_1(x_2) \phi_2(x_1) \dots \phi_N(x_2) \\ \vdots \\ \phi_1(x_N) \phi_2(x_N) \dots \phi_N(x_N) \end{vmatrix} = \hat{A}[\phi_1(x_1) \phi_2(x_2) \dots \phi_N(x_N)] \quad (1.3)$$

donde las funciones $\phi_k(x_j)$, con $j, k = 1, 2, 3, \dots, N$, son funciones de onda ortonormales de partícula independiente que se conocen como "espín-orbitales"; k y j simbolizan el conjunto de números cuánticos necesarios para caracterizar el estado de una partícula. El operador \hat{A} es un operador de antisimetrización definido por

$$\hat{A} \equiv (N!)^{1/2} \sum_{r, \dots, i} (-1)^r P_r \quad (1.4)$$

de P_r indica las permutaciones de los índices $1, 2, 3, \dots, N$. El operador \hat{A} tiene las siguientes propiedades⁷

$$\hat{A}^2 = (N!)^{1/2} \hat{A} \quad (1.5)$$

$$\hat{A} = \hat{A}^* \quad (1.6)$$

$$\hat{A} \hat{B} = \hat{B} \hat{A} \quad (1.7)$$

donde \hat{B} es un operador completamente simétrico.

⁷La demostración de estas propiedades se obtiene fácilmente usando la definición de \hat{A} , la definición de operador hermitiano y de completamente simétrico. Si se desea puede verse la demostración en S.M. Blinder (5).

Después, se toma el valor esperado del Hamiltoniano entre las funciones $\Phi^*(x_1, \dots, x_N)$ y $\Phi(x_1, \dots, x_N)$ y con ayuda de las relaciones (1.5), (1.6) y (1.7) se obtiene

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{\kappa=1}^N H_{\kappa\kappa}^{\circ} + \sum_{j>\kappa}^N \sum_{\kappa=1}^N (J_{\kappa j \kappa j} - K_{\kappa j \kappa j}) \quad (1.8)$$

donde,

$$H_{\kappa\kappa}^{\circ} \equiv \int dx \phi_{\kappa}^*(x) H^{\circ}(x) \phi_{\kappa}(x) \quad (1.9)$$

$$J_{\kappa j \kappa j} \equiv \int dx dx' \phi_{\kappa}^*(x) \phi_j^*(x') V(x, x') \phi_{\kappa}(x) \phi_j(x') \quad (1.10)$$

$$K_{\kappa j \kappa j} \equiv \int dx dx' \phi_{\kappa}^*(x) \phi_j^*(x') V(x, x') \phi_j(x) \phi_{\kappa}(x') \quad (1.11)$$

Las integrales sobre las variables x y x' incluyen integración sobre coordenadas espaciales y suma sobre coordenadas de espín. Las integrales $J_{\kappa j \kappa j}$ se conocen como integrales directas y representan energías de interacción entre pares de partículas debido a la naturaleza de las partículas sin tomar en cuenta el espín. Las integrales $K_{\kappa j \kappa j}$ se llaman integrales de intercambio y miden la energía de repulsión entre dos partículas, debido a que tienen el mismo valor de espín.

La energía dada por (1.8) depende del conjunto de funciones espín-orbitales que se usen. De acuerdo a un principio variacional el mejor conjunto de espín-orbitales es el que minimiza la expresión (1.8) para la energía.

Así, el siguiente paso consiste en determinar el conjunto de funciones $\phi_k(x)$ ($k=1,2,\dots,N$) que minimizan (1.8), sujeta a las restricciones

$$\int \phi_k^*(x) \phi_j(x) dx = \delta_{kj} \quad (1.12)$$

Para ello se utiliza el método de multiplicadores de Lagrange, haciendo variar la función auxiliar $F(\phi_k, \phi_k^*)$ construida como sigue

$$F(\phi_k, \phi_k^*) \equiv \sum_{k=1}^N H_{kk}^0 + \sum_{j>k}^N \sum_{k=1}^N (J_{kj} - K_{kj}) - \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_{kj} \int dx \phi_k^*(x) \phi_j(x) \quad (1.13)$$

Pidiendo que $\delta F=0$ y tomando en cuenta que $\delta\phi^*$ y $\delta\phi$ son independientes, se obtiene un sistema de N ecuaciones integrodiferenciales acopladas en las funciones $\phi_k(x)$. Para sistemas de capas cerradas, la matriz asociada con los multiplicadores de Lagrange, puede diagonalizarse y entonces el sistema de N ecuaciones es

$$\widehat{H}_k^{ef} \phi_k(x) = \epsilon_k \phi_k(x) \quad \text{con } \lambda_{kk} \equiv \epsilon_k \text{ y } k=1,2,\dots,N. \quad (1.14)$$

y

$$\widehat{H}_k^{ef} \equiv \widehat{H}^0(x) + \sum_{j \neq k, 1}^N \int dx' \phi_j^*(x') \widehat{V}(x, x') (\widehat{I} - \widehat{P}_{kj}) \phi_j(x') \quad (1.15)$$

En (1.15), \widehat{P}_{kj} es un operador que intercambia los índices k y j de las funciones que aparecen a su derecha, esto es

$$\hat{P}_{kj} \Phi_j(x') \Phi_k(x) = \Phi_k(x') \Phi_j(x) \quad (1.15a)$$

Multiplicando (1.14) por $\Phi_k^*(x)$, por la izquierda e integrando sobre x se tiene

$$\epsilon_k = H_{kk} + \sum_{j \neq k, 1}^N (J_{kj} - K_{kj}) \quad ; \quad k = 1, 2, 3, \dots, N. \quad (1.16)$$

La interpretación física de la cantidad ϵ_k , se obtiene utilizando el teorema de Koopmans⁸. Este teorema puede enunciarse en los siguientes términos: si se calculan las energías totales de N y $N-1$ fermiones, utilizando determinantes de Slater de N y $N-1$ funciones de una partícula independiente (respectivamente) y se supone que las funciones de una partícula son las mismas en ambos casos, la diferencia entre esas dos energías totales, es el parámetro de Hartree-ock ϵ_k , para el estado que ha sido omitido.

De esta manera, bajo las condiciones de validez del teorema de Koopmans, ϵ_k es una aproximación a la energía o potencial de ionización del sistema de N fermiones.

En física atómica el teorema es válido para capas cerradas⁹. En estado sólido, el teorema es válido siempre que las funciones espín-orbitales Φ_k sean funciones extendidas o de tipo Bloch y que el sistema electrónico sea muy grande¹⁰. Para un sistema como el que se considera en el capítulo 4, en el que los fermiones están dentro de un pozo de potencial tipo oscilador armónico atractivo e infinito, el teorema no es válido ya que al arrancar un fermión del sistema, las funciones de onda de una partícula, se modifican considerablemente.

⁸T.A. Koopmans, Physica 1, 104 (1933).

⁹Vease Blinder (5), p.436.

¹⁰Vease, C. Kittel, Quantum Theory of Solids, p.83.

(John Wiley and Sons, Inc. 1962).

Nótese que (1.14) es la ecuación de Schrödinger para un fermión que se mueve en el campo producido por el potencial externo (contenido en $\hat{H}(x)$), y el potencial promedio

$$\hat{V}_p \equiv \sum_{j \neq k}^N \int dx' \phi_j^*(x') \hat{V}(x, x') (\hat{I} - \hat{P}_{jk}) \phi_j(x') \quad (1.17)$$

debido a los $N-1$ fermiones restantes. Así, el problema de N partículas acopladas por la interacción, se transforma en N problemas de una partícula, cada una de las cuales se mueve en un potencial común determinado por el resto de las partículas.

Las ecuaciones de Hartree-Fock (1.14) son ecuaciones integrodiferenciales acopladas en las funciones de onda $\phi_k(x)$: ya que en el Hamiltoniano, el término (1.17) depende de la solución. El sistema (1.14) se resuelve en forma autoconsistente de la siguiente forma: se calcula (1.17) con un conjunto de funciones $\phi_k(x)$ de prueba, conocidas; con esto queda determinado (1.15) y se utiliza en (1.14) para obtener un nuevo conjunto de funciones: con el nuevo conjunto, se repite el ciclo anterior y así sucesivamente hasta que las funciones que se utilizan para calcular (1.17) difieran de las nuevas funciones que se obtienen con (1.14), en menos de una cantidad previamente establecida.

Una vez que se ha determinado el conjunto de funciones espín-orbitales deseadas

$$\phi_k^{HF}(x) \equiv \xi_k(x) \quad ; \quad k=1, 2, 3, \dots, N. \quad (1.18)$$

se pueden calcular; las integrales directas (1.10) y de intercambio (1.11), los elementos de matriz del Hamiltoniano sin interacción entre espín-orbitales, la energía total (1.8), el potencial de ionización (1.16) siempre que se pueda hablar de ionización del sistema y la función de onda total del sistema (1.3).

El método Hartree-Fock no da una solución exacta del problema de muchos fermiones, sino únicamente una de las mejores soluciones aproximadas en forma de determinante, que garantiza que la aproximación a la energía del sistema sea la óptima. En general pueden existir funciones de onda que representan una mejor aproximación a la función de onda exacta del sistema, comparadas con la función de onda Hartree-Fock, pero que conducen a una aproximación para la energía, más mala que la que proporciona este método. Por otra parte, no existen teoremas que garanticen la unicidad de las soluciones Hartree-Fock, por lo que desde este punto de vista, este método es aun un problema abierto.

La diferencia entre la solución exacta y la de Hartree-Fock se llama correlación y está asociada con el hecho de que en este método, las interacciones entre pares de partículas se toman en cuenta solo a través de un campo promedio. En este método, el sistema de N partículas con interacción se trata como un sistema de N cuasipartículas independientes, como se refleja de la ecuación (1.3) calculada con las funciones (1.18). Por cuasipartícula se entiende una partícula cuyo comportamiento se modifica, respecto de cuando es independiente, por la interacción con otras partículas.

CAPITULO 2

SEGUNDA CUANTIZACION

INTRODUCCION

En las últimas décadas, los métodos de teoría de campo han llegado a jugar un papel importante en el problema de muchos cuerpos, no relativista. Estos métodos, entre los que se encuentra el método de función de Green o propagador, utilizan la formulación de segunda cuantización de la mecánica cuántica. La formulación de segunda cuantización fué introducida primero por Dirac¹¹ para un sistema de bosones sin interacción. Después Jordan¹² y Klein y Jordan¹³ extendieron este trabajo a sistemas de bosones con interacción. La segunda cuantización para sistemas de fermiones fué desarrollada por Jordan¹⁴ y Jordan y Wigner¹⁵. Fock¹⁶ ha demostrado la equivalencia de la formulación de segunda cuantización con la mecánica cuántica de muchas partículas, introduciendo lo que se ha llamado "espacio de Fock", que es una representación en la que el operador de número de ocupación¹⁷, es diagonal.

En este capítulo, se desarrolla el formalismo de segunda cuantización comenzando con la introducción de vectores de estado en el espacio de número de ocupación; después se introducen operadores de creación y aniquilación para fermiones; finalmente, se da un bosquejo de como expresar operadores de una y dos partículas en el formalismo de segunda cuantización. Estos resultados seran

¹¹ P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. (London) A114, 243 (1927)

¹² P. Jordan, Z. Physik 45, 756 (1927).

¹³ P. Jordan y O. Klein, Z. Physik 45, 751 (1927).

¹⁴ P. Jordan, Z. Physik 45, 870 (1927).

¹⁵ P. Jordan y E. Wigner, Z. Physik 47, 631 (1928).

usados en los capítulos 3 y 4 en los que se utiliza el Hamiltoniano expresado en segunda cuantización.

ESPACIO DE NUMERO DE OCUPACION

Supóngase que se tiene un sistema de N fermiones sin interacción. El comportamiento del sistema puede ser descrito en principio dando los estados en que se encuentra cada partícula que la forma. Debido a que las partículas son indistinguibles, en lugar de decir en qué estado está cada partícula, se puede decir cuántas partículas están en un estado determinado. De esta manera se postula que los estados de un sistema, como el que se mencionó al principio de esta sección, quedan caracterizados por vectores en el espacio de Hilbert, de la forma:

$$|n_1, n_2, n_3, \dots, n_p, \dots\rangle \quad (2.1)$$

donde n_p es el número de partículas que se encuentran en el estado p , y p es el conjunto de números cuánticos necesarios para caracterizar el p -ésimo estado de una partícula. De esta manera, el conjunto de números de ocupación n pasan a ser las nuevas variables en esta representación.

Para ser consistentes con la mecánica cuántica, se necesita que los vectores (2.1) sean ortonormales y formen un conjunto completo; esto es

¹⁶ V. Fock, Z. Physik 75, 622 (1932).

¹⁷ El operador de número de ocupación se define en la página 18, ecuación (2.7).

$$\langle n_1, n_2, \dots | n'_1, n'_2, \dots \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \dots \quad (2.2)$$

y

$$\hat{I} \equiv \sum_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots| \quad (2.3)$$

el vector que describe el estado que no tiene partículas se representa por

$$|0, 0, 0, \dots\rangle \quad (2.4)$$

Para ser consistente con el principio de exclusión, se necesita que cada número n_i solo tenga dos valores, uno o cero; lo cual significa que los estados solo pueden estar ocupados por una partícula o no estar ocupados. Así, se necesitan operadores que contengan al principio de exclusión y que al operar sobre los vectores de estado (2.1), hagan variar el número de ocupación de cada estado de una partícula, los cuales son las variables en este formalismo.

OPERADORES DE CREACION Y ANIQUILACION PARA FERMIONES

En esta sección se introducen operadores de creación y aniquilación que contienen la estadística asociada a fermiones y operan sobre estados de una partícula. La importancia de estos operadores se verá más adelante cuando se exprese el Hamiltoniano en términos de segunda cuantización.

Sean \hat{a}_r y \hat{a}_r^\dagger operadores de aniquilación y creación respectivamente, que operan sobre el estado r de una partícula. Jordan y Wigner¹⁸, demostraron que esos operadores cumplen con las siguientes relaciones de anticonmutación

$$\{\hat{a}_r, \hat{a}_s^\dagger\} \equiv \hat{a}_r \hat{a}_s^\dagger + \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_r = \delta_{sr} \quad (2.5)$$

$$\{\hat{a}_r, \hat{a}_s\} \equiv \{\hat{a}_r^\dagger, \hat{a}_s^\dagger\} = 0 \quad (2.6)$$

El operador de número de ocupación se define como

$$\hat{N}_r \equiv \hat{a}_r^\dagger \hat{a}_r \quad (2.7)$$

se construye de tal manera que tenga eigenvalor n_r y einvector $|n_r\rangle$: esto es

$$\hat{N}_r |n_r\rangle = n_r |n_r\rangle \quad (2.8)$$

Puede demostrarse fácilmente, usando la definición del operador de número y las relaciones de anticonmutación, que el operador de número es un operador idempotente¹⁹ y por lo tanto sus eigenvalores son cero o uno, lo cual demuestra que los operadores de creación y aniquilación que cumplen con las relaciones (2.5) y (2.6) contienen la estadística asociada con los fermiones.

¹⁸ Véase la demostración en la obra citada en la nota 1^a, que aparece en la página 15 de éste trabajo.

¹⁹ Un operador lineal \hat{N} , se dice que es idempotente si y solo si cumple con $\hat{N}^2 = \hat{N}$, para todo vector sobre el cual opera.

Las reglas de operación de los operadores de creación y aniquilación pueden obtenerse usando las relaciones de anticonmutación y aplicando el operador de número a las funciones $\hat{a}_r^\dagger |n_r\rangle$ y $\hat{a}_r |n_r\rangle$; estas reglas son:

$$\hat{a}_r^\dagger |n_r\rangle = \sqrt{n_r+1} \delta_{n_r,0} |n_r+1\rangle \quad (2.10)$$

$$\hat{a}_r |n_r\rangle = \sqrt{n_r} \delta_{n_r,1} |n_r-1\rangle \quad (2.11)$$

donde $\delta_{n_r,0}$ y $\delta_{n_r,1}$ son deltas de Kronecker.

Los vectores de estado, tipo (2.1), se pueden construir a partir del estado vacío (2.4), aplicando sucesivamente operadores de creación: esto es

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{a}_k^\dagger)^{n_k} \dots |0, 0, \dots, 0, \dots\rangle \quad (2.12)$$

En el caso de fermiones, cuando un operador de creación y/o aniquilación actúa sobre un vector de estado $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$ es necesario considerar un factor que aparece dependiendo del número de permutaciones que es necesario hacer para llevar a los operadores \hat{a}_r y \hat{a}_r^\dagger al lugar (r-ésimo) que les corresponde. Puede demostrarse²⁰ usando las relaciones de anticonmutación y (2.12) que el factor es

$$(-1)^{S_r}, \text{ donde } S_r = n_1 + n_2 + n_3 + \dots + n_{r-1} \quad (2.13)$$

²⁰ Los detalles de la demostración se dan en el apéndice

por lo que la forma como actúan \hat{a}_r , \hat{a}_r^\dagger y \hat{N}_r sobre $|n_1, n_2, \dots\rangle$ es

$$\hat{a}_r |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle = \sqrt{n_r} (-1)^{S_r} \delta_{n_r, 1} |n_1, n_2, \dots, n_r - 1, \dots\rangle, \quad (2.14)$$

$$\hat{a}_r^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle = \sqrt{n_r + 1} (-1)^{S_r} \delta_{n_r, 0} |n_1, n_2, \dots, n_r + 1, \dots\rangle, \quad (2.15)$$

$$\hat{N}_r |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle = n_r |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle. \quad (2.16)$$

El estado base para un sistema de N fermiones sin interacción está representado por el vector

$$\Phi_B = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \dots \hat{a}_{f,1}^\dagger \hat{a}_{f,2}^\dagger |0_1, 0_2, \dots, 0_f, 0_f\rangle; \quad (2.17)$$

es un estado en que los f estados, de una partícula, de menor energía, están ocupados, mientras que los restantes están desocupados. La energía máxima ϵ_f de los niveles de energía de una partícula, ocupados en el estado base, se conoce como energía de Fermi.

Para bosones sin interacción, el formalismo es similar, solo que los operadores de creación y aniquilación cumplen con reglas de conmutación y los números de ocupación de los vectores de estado, no tienen restricción en cuanto al valor que puedan tomar. Un tratamiento para bosones en segunda cuantización puede verse en Fetter y Walecka (10), Ziman (29) y Davidov (9).

A continuación se dan solo un resumen de las relaciones que satisfacen los operadores de bosones

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_j^\dagger] = \hat{b}_k \hat{b}_j^\dagger - \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k = \delta_{kj} \quad (2.18)$$

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_j] = [\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0 \quad (2.19)$$

$$\hat{b}_k |n_k\rangle = \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle \quad (2.20)$$

$$\hat{b}_k^\dagger |n_k\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle \quad (2.21)$$

donde \hat{b}_k^\dagger y \hat{b}_j son operadores de creación y aniquilación para bosones.

En la siguiente sección se procede a expresar operadores de una y dos partículas en términos de operadores de creación y aniquilación para fermiones.

OPERADORES DE UNA Y DOS PARTICULAS
PARA FERMIONES CON INTERACCION EN
SEGUNDA CUANTIZACION

En general, para un sistema de N fermiones con interacción la función de onda que describe al sistema, en el formalismo de Schrödinger, no es un determinante de funciones de onda de una

partícula, sino un desarrollo en términos de dichos determinantes, esto es

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t) = \sum_{n_1, n_2, \dots} C(n_1, n_2, \dots, t) \Phi_{n_1, n_2, \dots}(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (2.22)$$

$$\text{donde } \Phi_{n_1, n_2, \dots}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \dots & \phi_N(x_N) \\ \phi_2(x_1) & \dots & \phi_N(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_N(x_1) & \dots & \phi_N(x_N) \end{vmatrix} = \hat{A}[\phi_1(x_1) \dots \phi_N(x_N)] \quad (2.23)$$

y $\{\phi_i(x_k) | i, k = 1, 2, \dots, N\}$, es un conjunto completo de funciones de onda ortonormales de una partícula. Los números $1, 2, 3, \dots, N$, como subíndices de funciones de una partícula, denotan el conjunto de números cuánticos necesarios para describir el estado correspondiente. \hat{A} está definido por (1.4). Los conjuntos de números cuánticos se supone que están ordenados según el número cuántico asociado a la energía; esto es, si E_k es el número cuántico de energía asociado al estado k , ($k=1, 2, 3, \dots$), de tal forma que $E_1 < E_2 < E_3 < \dots$ entonces $1 < 2 < 3 < \dots$. Las funciones (2.23) forman un conjunto completo de funciones de onda de muchas partículas. Estas funciones son ortonormales, antisimétricas e independientes del tiempo. Se conocen como determinantes de Slater ya que Slater²¹ lo utilizó por primera vez para atacar el problema de muchos cuerpos.

El espacio formado por funciones de onda de N fermiones se llama espacio de configuración mientras que se llama espacio de número de ocupación al que está formado por funciones cuyas variables son los números de ocupación de los diferentes estados de una partícula.

Puede construirse un isomorfismo entre el espacio de configuración y el espacio de número de ocupación, de tal manera que si \mathcal{T} define el isomorfismo, se tenga

$$\mathcal{T} \Phi(x_1, x_2, \dots, x_N) = |n_1, n_2, \dots, n_1, \dots, n_i, \dots, n_k\rangle \quad (2.24)$$

\mathcal{T} define un isomorfismo puesto que preserva el producto interno y transforma una base ortonormal en el espacio de configuración en alguna base ortonormal en el espacio de número de ocupación.

Supóngase que se tienen operadores de una y dos partículas en el espacio de configuración definidos por

$$\hat{Q}(x) = \sum_{i=1}^N \hat{u}(x_i) \quad (2.25)$$

$$\hat{V}(x, x') = \frac{1}{2} \sum_{i \neq k}^N \hat{v}(x_i, x_k) \quad (2.26)$$

Para obtener las expresiones correspondientes en el espacio de número de ocupación, primero se encuentra como $\hat{u}(x)$ y $\hat{v}(x, x')$ actúan sobre las funciones (2.23) y después se aplica la transformación \mathcal{T} . En los apéndices B y C se dan un poco más de detalles de este proceso que conduce a la siguiente forma para los operadores, en segunda cuantización

$$\hat{Q} = \sum_{i,k} M_{ik} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k \quad (2.27)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{lmi\kappa} v_{lmi\kappa} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_\kappa \hat{a}_i \quad , \quad (2.28)$$

donde

$$\mu_{\kappa i} \equiv \int dx \phi_\kappa^*(x) \hat{U}(x) \phi_i(x) \quad (2.27a)$$

y

$$v_{lmi\kappa} \equiv \int dx dx' \phi_l^*(x) \phi_m^*(x') \hat{V}(x, x') \phi_i(x) \phi_\kappa(x') \quad . \quad (2.28a)$$

Con esto se está en condiciones de escribir cualquier operador, que pueda ser expresado en términos de operadores de una y dos partículas, en el lenguaje de segunda cuantización. En particular, el Hamiltoniano para un sistema de N fermiones que interaccionan solo por pares y que viene dado por (0.8) o (1.2), está en función de operadores de una y dos partículas y por lo tanto su expresión en segunda cuantización es

$$\hat{H} = \sum_{\kappa i} \hat{H}_{\kappa i}^\circ \hat{a}_\kappa^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \sum_{lmi\kappa} v_{lmi\kappa} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_\kappa \hat{a}_i \quad (2.29)$$

donde

$$\hat{H}_{\kappa i}^\circ \equiv \int \phi_\kappa^*(x) \hat{H}^\circ \phi_i(x) dx \quad (2.29a)$$

son los elementos de matriz del Hamiltoniano sin interacción entre los estados $\phi_\kappa(x)$ y $\phi_i(x)$ de una partícula, y

$$\hat{V}_{lmi\kappa} \equiv \int \phi_l^*(x) \phi_m^*(x') \hat{V}(x, x') \phi_i(x) \phi_\kappa(x') dx dx' \quad (2.29b)$$

con los elementos de matriz del operador asociado a la interacción entre pares de partículas.

Las integrales en x y x' incluyen suma sobre variables discretas e integración sobre variables continuas de las que dependen las funciones $\phi(x)$ de una partícula.

La función de onda exacta del sistema con interacción tiene en segunda cuantización, la siguiente representación

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{n_1, n_2, \dots} f(n_1, n_2, \dots) |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \quad (2.30)$$

donde $f(n_1, n_2, \dots)$ se comporta como un número ante los operadores de creación y aniquilación.

Para bosones, en líneas generales, lo que se ha dicho en esta sección es aplicable aunque los detalles del tratamiento son diferentes. Para un tratamiento de operadores de una y dos partículas, de bosones, en segunda cuantización puede verse: Fetter y Walecka (10) y Davidov (11).

El método de segunda cuantización reformula el problema de N cuerpos pero no intenta resolverlo (no es un método de solución); la ventaja de esta reformulación es que el manejo del problema es más cómodo y que los operadores de creación y aniquilación - en término de los cuales se expresan los operadores en segunda cuantización - contienen la estadística asociada a las partículas que forman el sistema.

Para resolver el problema, aun cuando ya haya sido

formulado en términos de segunda cuantización, se necesita calcular los elementos de matriz del Hamiltoniano entre vectores $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$, y después diagonalizar la matriz infinita resultante, para conocer la energía del sistema. Un proceso similar debe seguirse con otros operadores, asociados a otras cantidades físicas que definan al sistema (momento angular, espín, número de partículas en un estado, etc.). Hacer este cálculo es tan complicado como resolver la ecuación de Schrödinger y por lo tanto, se hace necesario tener y usar métodos de solución que permitan obtener los eigenvalores de los operadores en forma más directa. Por otra parte cuando en física se tiene un problema, existen dos alternativas para intentar resolverlo: una es buscar o crear métodos que resuelvan ese problema en particular; la otra es buscar o crear métodos generales que resuelvan un gran número de problemas similares al que se tiene, del área que se esté atado o de otras muchas áreas.

La función de Green es un método que da en forma más o menos directa la diferencia de los eigenvalores del Hamiltoniano para N y $N \pm 1$ partículas. Además los eigenvalores del operador de número, y de otras cantidades físicas. Este método es aplicable a muchos problemas que están relacionados con la teoría de muchos cuerpos, teoría de campo, etc. De aquí que junto con la formulación de segunda cuantización sea una herramienta útil para atacar problemas de muchos cuerpos. Este método se describe en el siguiente capítulo.

CAPITULO 3

FUNCIONES DE GREEN

INTRODUCCION

La teoría de muchos cuerpos es el estudio de la forma en que la interacción entre partículas, en un sistema denso, altera el comportamiento de las partículas sin interacción. Las propiedades de esos sistemas que pueden determinarse experimentalmente y que por lo tanto son de interés desde el punto de vista teórico, son las siguientes:

1.- La energía del estado base.

2.- El espectro de excitaciones elementales. En general, hay dos clases de estados excitados para sistemas de muchos cuerpos: cuasipartículas, las cuales son excitaciones modificadas de una partícula; y modos colectivos, los cuales surgen de las correlaciones en los movimientos de las partículas, producidos por la interacción entre estas.

3.- Fenómenos dependientes de la temperatura y propiedades termodinámicas; calor específico, transición de fases, conductividad, viscosidad, etc.

Para un sistema sin interacción, la energía de una partícula con momento p y masa m es $E(p) = \frac{p^2}{m}$. Como consecuencia de la interacción entre las partículas, el movimiento de una partícula libre, se modifica considerablemente. Cuando una partícula con

interacción, se mueve, empuja a otras partículas fuera de su camino, arrastra consigo partículas, etc. Se puede hablar de la partícula modificada como una cuasipartícula; ésta puede tener una relación E vs. p muy diferente de la de partícula libre. A bajas temperaturas, el sistema puede tratarse como constituido por cuasipartículas independientes.

La noción de cuasipartícula puede ponerse en un lenguaje matemático, usando el concepto de propagador también conocido con el nombre de función de Green. Las funciones de Green dan una descripción completa de los estados que se alcanzan alterando los niveles de una y dos partículas y están relacionadas con cantidades físicas tales como: la energía del estado base, espectro de energías de excitación, el potencial químico, densidad de partículas en los diferentes estados de una partícula, calor específico, conductividad, viscosidad, etc.

En este capítulo se define la función de Green causal para una partícula, que es la que se usará en el capítulo 4 porque es la más general, las funciones retardada y avanzada pueden obtenerse a partir de la causal.²² Se da la interpretación de la función de Green como propagador de información. Se mencionan algunas propiedades matemáticas de la función de Green. Se establecen relaciones entre la función de Green con cantidades físicas. Se obtienen las ecuaciones diferenciales que cumplen las funciones de Green, llamadas "ecuaciones de movimiento". En vista de que las ecuaciones de movimiento son un conjunto infinito de ecuaciones acopladas

²² Para la definición de las funciones de Green retardada y avanzada véase Zubarev (20). La relación entre las funciones de Green retardada y avanzada con la función de Green causal puede verse en Aronsonov (1) p.57, Thouless (21) p. . En estas referencias puede encontrarse la definición de las funciones de Green causales.

en las funciones de Green de diferentes ordenes. Para hallar la función de Green de una partícula es necesario desacoplar el conjunto de ecuaciones de movimiento mediante aproximaciones. Por lo que se incluye la descripción de las aproximaciones R.P.A. y R.P.A. generalizada que forman parte del método de linealización²³ para desacoplar ecuaciones de movimiento de la función de Green.

Todo el capítulo se desarrolla para funciones de Green que no dependan de la temperatura, lo cual se refleja en el hecho de que la función que se utiliza para definir la función de Green, es el estado base exacto del sistema a temperatura cero ya que no tiene como argumento la temperatura. Para un desarrollo de la función de Green a temperatura finita diferente de cero, se usa un ensamble estadístico, regularmente "Gran canónico"²⁴.

DEFINICION DE LA FUNCION DE GREEN DE UNA PARTICULA.

Considérese un sistema de N fermiones que interaccionan únicamente por pares. Sean: \hat{H} el Hamiltoniano exacto, $\hat{\Psi}_0$ el estado base exacto y E_0 la energía del estado base exacto del sistema. Por lo tanto se cumple

$$\hat{H}\Psi_0 = E_0\Psi_0 \quad (3.1)$$

Supóngase que \hat{a}_p^\dagger y \hat{a}_p son operadores de creación y aniquilación

²³El método de linealización también se describe en este capítulo.

²⁴Veáse Zubarev (30), Abrikosov (1) pp. 97-153. Además en éste capítulo sólo se trata la función de Green para una partícula. Para un tratamiento de funciones de Green para dos partículas puede verse: Kittel (14) p. 399; Ziman (29) p. 112.

para fermiones; los índices incluyen el espín de los fermiones correspondientes. Como se vió en el capítulo 2, los operadores de creación y aniquilación, operan sobre estados de partículas sin interacción y cumplen con relaciones de anticonmutación (2.5) y (2.6).

Los operadores de creación y aniquilación cumplen con las ecuaciones de movimiento:

$$\frac{d\hat{a}_p}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}_p] \equiv \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{a}_p - \hat{a}_p\hat{H}) \quad (3.2)$$

y

$$\frac{d\hat{a}_p^\dagger}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}_p^\dagger] \equiv \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{a}_p^\dagger - \hat{a}_p^\dagger\hat{H}) \quad (3.3)$$

La función de Green causal doblemente dependiente del tiempo, a temperatura cero, para una partícula, se define como el elemento de matriz

$$G_{\alpha\beta}^c(t, t') \equiv \langle\langle \hat{a}_\alpha(t); \hat{a}_\beta^\dagger(t') \rangle\rangle \equiv \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi_0 | T(\hat{a}_\alpha(t) \hat{a}_\beta^\dagger(t')) | \Psi_0 \rangle \quad (3.4)$$

como puede verse, por cada par de operadores se define una función de Green. En (3.4) el doble paréntesis es una notación que utiliza Zubarev (30) para designar la función de Green.

A continuación se identifican y definen los diferentes elementos que aparecen en la función de Green.

$$T(\hat{a}_\alpha(t) \hat{a}_\beta^\dagger(t')) \equiv \theta(t-t') \hat{a}_\alpha(t) \hat{a}_\beta^\dagger(t') - \theta(t'-t) \hat{a}_\beta^\dagger(t') \hat{a}_\alpha(t), \quad (3.5)$$

es el producto cronológico de los operadores $\hat{a}_\alpha(t)$ y $\hat{a}_\beta^\dagger(t')$; el

transformador T ordena los operadores con los tiempos menores a la derecha.

Los operadores $\hat{a}_\alpha(t)$ y $\hat{a}_\alpha^\dagger(t)$ son los correspondientes de aniquilación y creación en el esquema de Heisenberg,²⁵ definidos por

$$\hat{a}_\alpha(t) \equiv e^{i\hat{H}t} \hat{a}_\alpha e^{-i\hat{H}t} \quad (3.6)$$

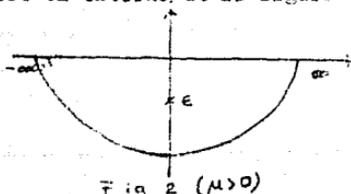
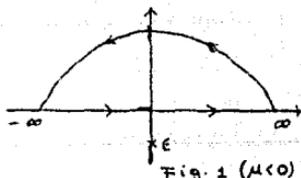
y

$$\hat{a}_\alpha^\dagger(t) \equiv e^{i\hat{H}t} \hat{a}_\alpha^\dagger e^{-i\hat{H}t} \quad (3.7)$$

donde \hat{H} es el Hamiltoniano exacto del sistema y \hat{a}_α y \hat{a}_α^\dagger son los operadores de aniquilación y creación en el esquema de Schrödinger. $\theta(\mu)$ es la función escalón que toma los siguientes valores: uno $\mu > 0$, cero si $\mu < 0$ y no está definida para $\mu = 0$. Esta función puede representarse por la relación siguiente

$$\theta(\mu) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ix\mu}}{x + i\epsilon} dx \quad (3.8)$$

Puede verificarse que la función así definida tiene las propiedades requeridas para la función $\theta(\mu)$. Considérese x como variable compleja; para $\mu > 0$ puede integrarse sobre el entorno de la figura 2.



²⁵ Para un tratamiento y descripción de los esquemas de Schrödinger, Heisenberg y de interacción, puede verse: *Butter y Walucka* (10), pp.53-59; *Ziman* (29), pp.56-62.

En este caso, el integrando tiene un polo en $-i\epsilon$ y por lo tanto usando el teorema de la integral de Cauchy se tiene

$$\theta(\mu) = - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{2\pi i^2}{2\pi} e^{-i(-i\epsilon)\mu} = 1 .$$

Cuando $\mu < 0$, se integra sobre el contorno de la figura 1 y en ese caso el integrando no tiene discontinuidades, por lo tanto usando el teorema de Cauchy-Goursat, se tiene

$$\theta(\mu) = 0$$

con lo que (3.8) representa a la función escalón.

La función escalón está relacionada con la función delta de Dirac,²⁶ a través de las expresiones

$$\theta(\mu) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\mu} e^{\epsilon \xi} \delta(\xi) d\xi ; \text{ con } \epsilon > 0 , \quad (3.9)$$

$$\frac{d\theta(\mu)}{d\mu} = \delta(\mu) , \quad (3.10)$$

$$\text{y } \frac{d\theta(\mu)}{d\mu} = -\delta(\mu) . \quad (3.11)$$

Donde la función delta de Dirac puede representarse por la función

²⁶ Un tratamiento riguroso de la función delta de Dirac puede verse en Lighthill .M.J., Introduction to Fourier Analysis Generalised Functions, Cambridge University Press (1958).

$$\delta(\sigma) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\sigma k} dk \quad (3.12)$$

Un operador $\hat{A}(t)$ en el esquema de Heisenberg, cumple con la siguiente ecuación de movimiento

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}(t)] \quad (3.13)$$

que se obtiene directamente de (3.6) y (3.7) y usando el hecho de que $[\hat{H}, e^{\pm i\hat{H}t/\hbar}] = 0$.

INTERPRETACION FISICA DE LA FUNCION DE GREEN.

Usando (3.4) y (3.5), la función de Green puede escribirse

$$G_{kl}^c(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \theta(t-t') \langle \psi_0 | \hat{a}_k(t) \hat{a}_l^\dagger(t') | \psi_0 \rangle - \frac{1}{i\hbar} \theta(t'-t) \langle \psi_0 | \hat{a}_l^\dagger(t') \hat{a}_k(t) | \psi_0 \rangle \quad (3.14)$$

Cuando $t > t'$, el segundo término de (3.14) es cero y solo queda el primero. En este caso, al tiempo t' se crea o se suma una partícula al estado base ψ_0 del sistema, formando el estado excitado ψ_{k+1} . Se deja evolucionar este estado de $N+1$ partículas hasta que al tiempo t se destruye una partícula en el estado ψ_{k+1} obteniendo con esto el estado ψ_k de N partículas. La proyección de éste estado sobre el estado base es proporcional a la función de Green. Pero por otra parte

La proyección es la probabilidad de que estando el sistema en el estado base en el tiempo t se encuentre en el estado ψ_{k_1} al tiempo t' . Cuando $t < t'$, se aniquila al tiempo t' una partícula en el estado base, el estado de $N-1$ partículas así formado se deja evolucionar hasta el tiempo t en que se crea una partícula, formando así, el estado ψ_{k_1} ; por lo tanto, la función de Green es proporcional a la probabilidad de que, estando el sistema en el estado base al tiempo t' se encuentre en el estado ψ_{k_1} al tiempo t . De esta manera, la función de Green tiene el efecto de transportar una excitación de un sistema de N fermiones en el tiempo.

REPRESENTACION ESPECTRAL O DE LEHMAN, PARA LA FUNCION DE GREEN.

Esta representación es importante porque permite establecer la relación entre la función de Green y el espectro de energías del sistema.

Considérese la componente de Fourier de la función de Green causal

$$G_{k_1}^c(\Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{k_1}^c(\tau) e^{i\Omega\tau} d\tau \quad (3.15)$$

Usando (3.6) y (3.7) en (3.14), se tiene la siguiente expresión para la función de Green

$$G_{k_1}^c(\tau) = \frac{1}{i\hbar} \theta(\tau) \mathcal{F}_{k_1}(\tau) - \frac{1}{i\hbar} \theta(-\tau) \mathcal{F}_{k_1}(-\tau) \quad (3.16)$$

donde

$$\mathcal{F}_{k_1}(\tau) = \sum_n \langle \psi_0 | \hat{a}_k | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{a}_1^\dagger | \psi_0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_n^N - E_0^N)\tau} \quad (3.17)$$

y

$$\mathcal{F}_{k_1}(-\tau) = \sum_n \langle \psi_0 | \hat{a}_1^\dagger | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{a}_k | \psi_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n^N - E_0^N)\tau} \quad (3.18)$$

En las expresiones (3.17) y (3.18) se usó la propiedad de completéz de las eingenfunciones del sistema de N partículas. Debido a que la función de Green depende de la diferencia $t-t'$ solamente, se puede trabajar con coordenadas relativas, introduciendo la definición

$$\mathcal{T} \equiv t - t' \quad ; \quad \mathcal{T} \in \langle -\infty, \infty \rangle \quad (3.19)$$

Introduciendo las siguientes definiciones

$$J_{k_1}(\xi) \equiv \sum_n \langle \psi_0 | \hat{a}_k | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{a}_1^\dagger | \psi_0 \rangle \delta\left(\frac{E_n^N - E_0^N}{\hbar} - \xi\right) \quad (3.20)$$

$$J_{k_1}(\xi) \equiv \sum_n \langle \psi_0 | \hat{a}_1^\dagger | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{a}_k | \psi_0 \rangle \delta\left(\frac{E_n^N - E_0^N}{\hbar} + \xi\right) \quad (3.21)$$

las funciones $\mathcal{F}_{k_1}(\tau)$ y $\mathcal{F}_{k_1}(-\tau)$ pueden escribirse como integrales de Fourier

$$\mathcal{F}_{k_1}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} J_{k_1}(\xi) e^{-i\xi\tau} d\xi \quad (3.22)$$

$$\overline{J}_{1k}(-\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} J_{1k}(z) e^{-iz\tau} dz \quad (3.23)$$

Sustituyendo (3.22) y (3.23) en (3.16) y el resultado en (3.15) se tiene

$$G_{k,j}^c(\Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{i\hbar} \theta(\tau) \int_{-\infty}^{\infty} J_{k_0}(z) e^{iz\tau} dz e^{i\Omega\tau} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{i\hbar} \theta(-\tau) \left(\int_{-\infty}^{\infty} J_{k_0}(z) e^{iz\tau} dz \right) e^{i\Omega\tau} e^{i\tau} d\tau \quad (3.24)$$

Usando (3.8) e integrando primero sobre τ y después, usando (3.12) e integrando sobre x se tiene.

$$G_{k,j}^c(\Omega) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{J_{k_0}(z) dz}{\Omega - z + i\epsilon} + \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{J_{k_0}(z) dz}{\Omega - z - i\epsilon} \quad (3.25)$$

que es la representación de Lehman para la función de Green.

Más adelante cuando se tenga que hacer la conexión de la función de Green con cantidades físicas, se calculará explícitamente la expresión (3.25).

COMPORTAMIENTO ASINTOTICO DE LA FUNCION DE GREEN

De (3.25), cuando Ω es muy grande comparado con ξ se tiene

$$G_{\kappa_1}^c(\Omega) \approx \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{J_{\kappa_1}(\xi) + J_{\kappa_2}(\xi)}{\Omega} d\xi \quad (3.26)$$

Usando (3.20) y (3.21) y las propiedades de la delta de Dirac se tiene

$$G_{\kappa_1}^c(\Omega) \approx \frac{1}{\hbar \Omega} \left\{ \sum_n \langle \psi_0 | \hat{a}_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{a}_1^\dagger | \psi_0 \rangle + \sum_n \langle \psi_0 | \hat{a}_1^\dagger | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{a}_n | \psi_0 \rangle \right\};$$

que usando la completéz de las funciones $\{\psi_n\}$ y las relaciones de anticonmutación de los operadores, toma la forma

$$G_{\kappa_1}^c(\Omega) \approx \delta_{\kappa_1} \frac{1}{\hbar \Omega} \quad (3.27)$$

para Ω muy grandes.

RELACIONES DE SIMETRIA DE LA FUNCION DE GREEN.

Intercambiando los operadores con que se define la función de Green (3.4), se tiene

$$G_{\kappa_2}^c(t, t) = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_0 | T(\hat{a}_1^\dagger(t) \hat{a}_2(t)) | \psi_0 \rangle \quad (3.28)$$

Usando (3.5) y comparando con (3.4) se obtiene

$$G_{ki}^c(t, t') = -G_{ik}^c(t', t) \quad (3.29)$$

que es la relación de simetría de la función de Green. En términos de la transformada de Fourier, esta relación toma la forma

$$G_{ki}^c(\Omega) = -G_{ik}^c(\Omega) \quad (3.30)$$

En otros campos de la física también aparecen funciones de Green con relaciones de simetría, aunque diferentes en cada caso²⁷.

ECUACION DE MOVIMIENTO DE LA FUNCION DE GREEN.

La ecuación de movimiento que cumple la función de Green de una partícula, es importante porque es una forma de calcular dicha función, aunque como se verá más adelante, en la mayoría de los casos solo puede resolverse haciendo aproximaciones.

Para obtener la ecuación de movimiento, se deriva (3.14) y se usan (3.10) y (3.11) junto con la definición de la función de Green para tener

$$\frac{d G_{ij}^c(t, t')}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \delta(t-t') \langle \psi_0 | \{ \hat{a}_i(t), \hat{a}_j^\dagger(t') \} | \psi_0 \rangle + G_{ij}^c(t, t') \quad (3.31)$$

²⁷ Veáse por ejemplo, Wyld (27), pp. 258-334.

donde

$$G_{k,t}^c(t, t' | 1) \equiv \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_0 | T \left(\frac{d\hat{a}_k(t)}{dt} \hat{a}_t^\dagger(t') \right) | \psi_0 \rangle \quad (3.32)$$

es una función de Green de orden uno, en la derivada del operador $\hat{Q}_k(t)$. El orden se denotará con el número entero que aparece en el argumento de la función de Green correspondiente.

En general, se puede definir una función de Green de orden n como

$$G_{k,t}^c(t, t' | n) \equiv \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_0 | T \left(\frac{d^n \hat{a}_k(t)}{dt^n} \hat{a}_t^\dagger(t') \right) | \psi_0 \rangle \quad (3.33)$$

donde

$$\frac{d^n \hat{a}_k(t)}{dt^n} = \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \underbrace{[A, [A, [A, \dots, [A, \hat{a}_k(t)]]]}_{n \text{ veces}} \dots \quad (3.34)$$

La ecuación (3.31) es la ecuación de movimiento de la función de Green $G_{k,t}^c(t, t')$. Esta ecuación contiene una función de Green de orden mayor en una unidad, en el segundo miembro. Para la nueva función $G_{k,t}^c(t, t' | 1)$ también se puede escribir una ecuación de movimiento tipo (3.31). El proceso puede seguirse con cada función de Green de orden mayor que vaya apareciendo; con lo cual se obtiene un conjunto infinito y acoplado, en las funciones de Green de diferentes ordenes, de ecuaciones de movimiento, al cual es necesario sumarle condiciones de frontera para resolverlo. En general, no es posible resolver dicho sistema de ecuaciones en forma exacta.

Solo haciendo aproximaciones es posible hacer avances y obtener la función de Green a partir de la ecuación de movimiento.

A continuación se escriben algunas ecuaciones de movimiento para funciones de diferentes ordenes

$$\begin{aligned} \frac{d G_{\alpha}^c(t, t' | 1)}{d t} &= \frac{1}{i\hbar} \delta(t-t') \langle \psi_0 | \left\{ \frac{d \hat{a}_{\alpha}(t)}{d t}, \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}(t') \right\} | \psi_0 \rangle + G_{\alpha}^c(t, t' | 2) \\ \frac{d G_{\alpha}^c(t, t' | 2)}{d t} &= \frac{1}{i\hbar} \delta(t-t') \langle \psi_0 | \left\{ \frac{d^2 \hat{a}_{\alpha}(t)}{d t^2}, \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}(t') \right\} | \psi_0 \rangle + G_{\alpha}^c(t, t' | 3) \\ &\vdots \\ \frac{d G_{\alpha}^c(t, t' | n)}{d t} &= \frac{1}{i\hbar} \delta(t-t') \langle \psi_0 | \left\{ \frac{d^n \hat{a}_{\alpha}(t)}{d t^n}, \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}(t') \right\} | \psi_0 \rangle + G_{\alpha}^c(t, t' | n+1) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Las ecuaciones (3.31) y (3.35), son ecuaciones de movimiento para las funciones de Green en términos del tiempo o de coordenadas relativas temporales τ . Estas ecuaciones pueden ponerse en términos de la frecuencia Ω mediante la transformada de Fourier. Es conveniente tener esas ecuaciones en términos de Ω , porque los métodos para desacoplar las ecuaciones, generalmente están referidos a la representación Ω y por otra parte, como se verá más adelante, varias cantidades físicas pueden obtenerse a partir de la función de Green dependiente de Ω .

Tomando la transformada de Fourier miembro a miembro en (3.31) y escribiéndola en términos de coordenadas relativas, se

tiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dG_{k_1}^c(\tau)}{d\tau} e^{i\alpha\tau} d\tau = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\tau) \langle \psi_0 | \{ \hat{a}_k(\tau), \hat{a}_1^\dagger \} | \psi_0 \rangle d\tau + \int_{-\infty}^{\infty} G_{k_1}^c(\tau|1) e^{i\alpha\tau} d\tau$$

o bien

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dG_{k_1}^c(\tau)}{d\tau} e^{i\alpha\tau} d\tau = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_0 | \{ \hat{a}_k, \hat{a}_1^\dagger \} | \psi_0 \rangle + G_{k_1}^c(\Omega|1) \quad (3.36)$$

Se integra el miembro izquierdo por partes y se exige que para $|\tau|$ muy grande la función de Green tienda a cero. Esto es equivalente a pedir que la propagación de una excitación en el sistema esté localizada en un intervalo finito de tiempo, esto es, que tenga vida media finita. De esta manera se tiene

$$G_{k_1}^c(\Omega) = \frac{1}{i\hbar\Omega} \langle \psi_0 | \{ \hat{a}_k, \hat{a}_1^\dagger \} | \psi_0 \rangle - \frac{1}{i\Omega} G_{k_1}^c(\Omega|1) \quad (3.37)$$

y similarmente para las ecuaciones (3.35)

$$G_{k_1}^c(\Omega|1) = \frac{1}{i\hbar\Omega} \langle \psi_0 | \{ \frac{d\hat{a}_k}{dt}, \hat{a}_1^\dagger \} | \psi_0 \rangle - \frac{1}{i\Omega} G_{k_1}^c(\Omega|2)$$

$$G_{k_1}^c(\Omega|2) = \frac{1}{i\hbar\Omega} \langle \psi_0 | \{ \frac{d^2\hat{a}_k}{dt^2}, \hat{a}_1^\dagger \} | \psi_0 \rangle - \frac{1}{i\Omega} G_{k_1}^c(\Omega|3) \quad (3.38)$$

$$G_{k_1}^c(\Omega|n) = \frac{1}{i\hbar\Omega} \langle \psi_0 | \{ \frac{d^n\hat{a}_k}{dt^n}, \hat{a}_1^\dagger \} | \psi_0 \rangle - \frac{1}{i\Omega} G_{k_1}^c(\Omega|n+1)$$

donde,

$$G_{k_1}^c(\Omega|n) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} G_{k_1}^c(\tau|n) e^{i\Omega\tau} d\tau \quad ; \quad n=1,2,3, \quad (3.39)$$

y $G_{k_1}^c(\tau|n)$ está dada por (3.33).

Debido a que las derivadas de los operadores se obtienen como conmutadores del operador correspondiente con el Hamiltoniano y dado que en la función de Green se utiliza el Hamiltoniano en términos de operadores de creación y aniquilación, las ecuaciones de movimiento de los operadores de creación y aniquilación son no lineales en dichos operadores. Como consecuencia de lo anterior se tiene un conjunto de ecuaciones de movimiento acopladas y no-lineales para las funciones de Green.

Las dos características que se mencionan en el párrafo anterior, marcan una fuerte diferencia entre las funciones de Green que se utilizan en teoría de muchos cuerpos y las que aparecen en otros campos de la física tales como electromagnetismo, teoría de calor, teoría de ondas, mecánica cuántica de una partícula, etc., en las que puede haber funciones de Green retardadas y avanzadas, que cumplen con ecuaciones diferenciales lineales y no-acopladas.

RELACION DE LA FUNCION DE GREEN CON CANTIDADES FISICAS

VALOR ESPERADO DEL OPERADOR DE NUMERO

De (3.14), tomando el límite cuando t' tiende a t por la derecha ($t' \rightarrow t^+$ o $\tau \rightarrow 0^+$), se tiene el valor esperado del operador $\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k$; esto es

$$\lim_{t' \rightarrow t^+} G_{\alpha\beta}^c(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \langle \psi_0 | \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k | \psi_0 \rangle \quad (3.45)$$

por lo tanto, el valor esperado del operador de número asociado con estados de una partícula $\hat{N}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$, es

$$\langle \hat{N}_k \rangle = -i\hbar \lim_{t' \rightarrow t^{(+)}} G_{kk}^c(t, t') \quad (3.41)$$

Sumando sobre todos los estados se tiene

$$\langle \hat{N} \rangle = \sum_k \langle \hat{N}_k \rangle = -i\hbar \sum_k \lim_{t' \rightarrow t^{(+)}} G_{kk}^c(t, t') \quad (3.42)$$

que es el valor esperado del operador de número total.

Poniendo $G_{kk}^c(t, t')$ en términos de su transformada de Fourier (3.41) toma la forma

$$\langle \hat{N}_k \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_C G_{kk}(\omega) d\omega \quad (3.43)$$

donde el contorno C consiste del eje real y un semicírculo de radio infinito en el semiplano superior.

Así puede verse que los elementos diagonales de la matriz de Green, dan el valor esperado del operador de número de partículas en cada estado de una partícula.

Para un sistema sin interacción, el valor esperado $\langle \hat{N}_k \rangle$ es uno o cero; es uno si k está abajo del nivel de Fermi y cero si está sobre este nivel. Cuando se trata un sistema con interacción, el valor esperado $\langle \hat{N}_k \rangle$, en general es menor que uno ya que las partículas están oscilando entre dos o más estados de una partícula,

Aún cuando el sistema esté en equilibrio; esto significa que los estados de una partícula no están bien definidos. Esto es una de las causas que impiden obtener la función de Green en forma exacta, como se verá más adelante, cuando se trate el desacoplamiento de las ecuaciones de movimiento de las funciones de Green.

ESPECTRO DE ENERGÍAS

Usando (3.20) y (3.21) en (3.25) e integrando sobre ξ se obtiene

$$G_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_n \frac{\langle \psi_a | \hat{a}_\alpha | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{a}_\beta^\dagger | \psi_a \rangle}{\Omega - \frac{E_n^N - E_a^N}{\hbar} + i\epsilon} + \frac{1}{\hbar} \sum_n \frac{\langle \psi_a | \hat{a}_\beta^\dagger | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{a}_\alpha | \psi_b \rangle}{\Omega + \frac{E_n^{N+1} - E_b^N}{\hbar} - i\epsilon} \quad (3.44)$$

Los polos en cada sumatoria contienen información sobre el espectro de energías del sistema. El segundo sumando en cada denominador de (3.44), puede escribirse en la forma siguiente:

En el primero

$$E_n^{N+1} - E_b^N = E_{1n} + M_1 \quad (3.45)$$

donde $E_{1n} = E_n^{N+1} - E_b^N \quad (3.46)$

y $M_1 = E_b^{N+1} - E_b^N \quad (3.47)$

En el segundo

$$E_n^{N+1} - E_b^N = E_{2n} + M_2 \quad (3.48)$$

$$\epsilon_{2N} = E_n^{N+1} - E_n^{N+1} \quad (3.49)$$

$$\mu_2 = E_n^{N+1} - E_n^N \quad (3.50)$$

Las cantidades μ_1 y μ_2 son los potenciales químicos del sistema. Representan la energía que es necesario invertir para hacer variar el número de partículas de un sistema de N partículas, en una unidad; esto es, representan la energía necesaria para pasar de un sistema de N partículas a uno de $N-1$ o de $N+1$ partículas. Naturalmente, existen sistemas cuyo número de partículas no puede variar-se.

Con la ayuda de las relaciones (3.45) y (3.48), (3.44) puede expresarse como

$$G_{\epsilon, \epsilon'}^c(\Omega) = \sum_n \frac{\langle \psi_n | \hat{a}_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{a}_n^\dagger | \psi_0 \rangle}{\hbar \Omega - \epsilon_n - \mu_1 + i\hbar \epsilon} + \sum_n \frac{\langle \psi_n | \hat{a}_n^\dagger | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{a}_n | \psi_0 \rangle}{\hbar \Omega + \epsilon_n + \mu_2 - i\hbar \epsilon} \quad (3.51)$$

De aquí puede observarse que los polos de la función de Green en la representación de energía Ω , dan los espectros de energía para sistemas con $N-1$ y $N+1$ partículas, además de dar información sobre el potencial químico o energía de ionización de los sistemas mencionados. Los polos son

$$\hbar \Omega = \epsilon_n + \mu_1, \quad \text{en la primera sumatoria;} \quad (3.52)$$

$$\hbar \Omega = -\epsilon_n - \mu_2, \quad \text{en la segunda sumatoria.} \quad (3.53)$$

De esta manera, si de alguna manera se obtiene la función de Green de un sistema de N partículas, se calcula la transformada de Fourier de esta función y de los polos de esta se obtienen directamente los espectros de energías de excitación y las energías de ionización de sistemas de $N-1$ y $N+1$ partículas.

Puede observarse en otras áreas de la física, donde aparecen funciones de Green asociadas a problemas de eigenvalores, que los polos de dicha función, dan los eigenvalores del problema,²⁸ similarmente a lo que se encuentra con las funciones de Green de teoría de muchos cuerpos, donde los eigenvalores son las energías de excitación.

ENERGIA DEL ESTADO BASE

Si se toma el límite cuando t' tiende a t por la derecha ($t' \rightarrow t^{(+)}$), en (3.29), considerando solo los elementos diagonales, se tiene

$$\lim_{t' \rightarrow t^{(+)}} G_{\kappa\kappa}(t, t') = -\frac{1}{\hbar^2} \langle \Psi_0 | \hat{a}_\kappa^\dagger [\hat{H}, \hat{a}_\kappa] | \Psi_0 \rangle \quad (3.54)$$

que usando (D.7) del apéndice D, puede escribirse como

$$\lim_{t' \rightarrow t^{(+)}} G_{\kappa\kappa}(t, t') = -\frac{1}{\hbar^2} \langle \hat{H} \rangle + \frac{2}{\hbar^2} \langle \hat{v} \rangle \quad (3.55)$$

donde

$$\langle \hat{H} \rangle \equiv \langle \Psi_0 | \sum_{\kappa, \eta} H_{\kappa\eta} \hat{a}_\kappa^\dagger \hat{a}_\eta | \Psi_0 \rangle \quad (3.56)$$

²⁸ Véase: Wyld (27), p.271; Davidov (9) pp. 373-371.

$$\langle \hat{V} \rangle \equiv \langle \Psi_0 | \sum_{\kappa \mu \nu} V_{\kappa \nu \mu} \hat{a}_\kappa^\dagger \hat{a}_\mu^\dagger \alpha_\nu | \Psi_0 \rangle \quad (3.57)$$

Despejando $\langle \hat{V} \rangle$ de (3.55) y sumándole $\langle \hat{H} \rangle$ a ambos miembros de la ecuación resultante, se tiene la energía del estado base

$$E_0 = \lim_{t' \rightarrow t^+} \frac{1}{2} \sum_{\kappa} \hbar^2 G_{\kappa\kappa}(t, t' | 1) + \frac{1}{2} \sum_{\kappa} H_{\kappa\kappa}^0 \lim_{t' \rightarrow t^+} G_{\kappa\kappa}(t, t'). \quad (3.58)$$

Esta expresión puede expresarse en términos de Ω , expresando $G_{\kappa\kappa}^c(t, t' | 1)$ y $G_{\kappa\kappa}^c(t, t')$ en términos de $G(\Omega | 1)$ y $G(\Omega)$ e integrando sobre un contorno C , formado por el eje real y un semicírculo de radio infinito en el semiplano superior; así se tiene

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\kappa} (H_{\kappa\kappa}^0 - i\frac{1}{\hbar}\Omega) \int_C G_{\kappa\kappa}^c(\Omega) d\Omega \quad (3.59)$$

Hemos visto a lo largo de los tres apartados de esta sección, que la función de Green está relacionada con el valor esperado del operador de número de ocupación de partículas en un estado de una partícula, el valor esperado del operador de número total de partículas, el espectro de energías de excitación, la energía de ionización y el estado base del sistema.

Naturalmente las expresiones (3.42), (3.43), (3.51), (3.58) y (3.59), son exactas y son útiles solo cuando la función de Green exacta ha sido encontrada.

En general no es posible (al menos hasta ahora) encontrar la función de Green en forma exacta, por lo que es necesario

ocurrir a aproximaciones. Los métodos de aproximación para evaluar funciones de Green caen en dos categorías; los que se basan en la teoría de perturbaciones los cuales utilizan diagramas de Feynman²⁹ y los que se basan en el desacoplamiento de las ecuaciones de movimiento. Esta última alternativa resulta conveniente en algunos sistemas magnéticos para los cuales el método de diagramas resulta complicado de utilizar. Además es ésta alternativa la que se sigue en el capítulo cuatro. Por esto, en la siguiente sección se describen algunas aproximaciones que pueden utilizarse para desacoplar las ecuaciones de movimiento de las funciones de Green.

DESACOPLAMIENTO DE LA ECUACION DE MOVIMIENTO

Existen varios procedimientos para desacoplar ecuaciones de movimiento de la función de Green, basados en diferentes formalismos. Jørgensen (13), discute un procedimiento basado en el formalismo de superoperadores de Goscinski y Luckman (10). Roth (10), discute el método de linealización, fundamentado en un principio variacional. Tahir-Kehli y Harret (17), expresan una función de Green de orden superior en términos de una de orden inferior e imponen la conservación de momentos de frecuencias de la función espectral de la función de Green.

Varios de esos procedimientos forman parte de una clase general conocida en la literatura como linealización. El método de

²⁹ Un tratamiento del método de perturbaciones con diagramas de Feynman y su uso para calcular funciones de Green, puede verse en: Fetter y Walecka (10) pp. 92-116, Ziman (11) capítulos 3 y 4, Abrikosov (2) pp. 68-96 y Kittel (12) p. 415.

linealización consiste en lo siguiente: Supóngase que se tiene un sistema con Hamiltoniano \hat{H} y sea \hat{Q} un operador asociado al sistema, se exige que \hat{Q} satisfaga una ecuación de movimiento²⁹ lineal, en el sentido de que el conmutador de \hat{H} con \hat{Q} sea proporcional a \hat{Q} ; esto es,

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = \beta \hat{Q} \quad (3.60)$$

Si esto se cumple, $\hat{Q}\psi_0$ es un eigenestado del sistema con energía de excitación β sobre la energía del estado base E_0 , como puede verse de lo siguiente

$$[\hat{H}, \hat{Q}]\psi_0 = \hat{H}\hat{Q}\psi_0 - \hat{Q}E_0\psi_0 = \beta\hat{Q}\psi_0 \Rightarrow \hat{H}\hat{Q}\psi_0 = (\beta + E_0)\psi_0 \quad (3.61)$$

En general, no existen sistemas en los que la ecuación (3.60) se cumpla en forma exacta, de tal manera que se hace necesario introducir aproximaciones para obtener una relación lineal de este tipo.

A continuación se describen las aproximaciones Hartree-Fock, R.P.A. (Random Phase Aproximation) y R.P.A. generalizada, para un sistema de N fermiones. En el caso de que el Hamiltoniano esté en función de operadores de creación y aniquilación, como en la ecuación (2.29), y si $\hat{Q} \equiv \hat{Q}_k$, la ecuación (3.60) no se cumple como puede verse de la ecuación (D.7) en el apéndice D. En esa relación el primer término es una superposición de términos proporcionales a operadores de aniquilación \hat{Q}_k , pero el segundo término es una superposición de términos proporcionales a un producto de tres operadores, dos de los cuales son de aniquilación y uno de creación.

²⁹

Se supone que en el tratamiento del sistema, se trabaja con la ecuación de movimiento de \hat{Q} , ($\frac{1}{i}\hbar[\hat{H}, \hat{Q}] = \frac{d\hat{Q}}{dt}$). Por ejemplo, en este trabajo $\hat{Q} = \hat{Q}_k$ y la ecuación de movimiento aparece en (3.32) y (3.34). Linealizar el conmutador $[\hat{H}, \hat{Q}_k]$ que aparece en la función de Green $G^{(1)}$ de primer orden, permite encontrar $G^{(1)}$ en términos de $G^{(1)}$.

En la aproximación Hartree-Fock se procede a retener del término con tres operadores, solo aquellos que pueden linealizarse, esto es, aquellos para los cuales el subíndice del estado de uno de los operadores de aniquilación coincide con el correspondiente del de creación. La combinación se sustituye por su valor de espectación en el estado base, con lo cual se llega a tener

$$[\hat{H}, \hat{a}_\mu] \approx - \sum_q H_{\mu q}^0 \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{\mu q} (V_{\mu\mu q} - V_{\mu q \mu}) \langle \psi_0 | \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu | \psi_0 \rangle \hat{a}_q \quad (3.62)$$

En general, el valor de espectación $\langle \psi_0 | \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu | \psi_0 \rangle$ no se conoce.³⁰ Puede entonces hacerse una aproximación adicional, consistente en reemplazar el valor esperado por sus valores apropiados para un sistema sin interacción, esto es, cero sobre el nivel de Fermi y uno debajo.

En la aproximación R.P.A. el procedimiento que se sigue es similar al de la aproximación Hartree-Fock, solo que el operador \hat{Q} es un operador de partícula-agujero ($\hat{Q} = \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu$) a diferencia de la aproximación Hartree-Fock, en la que \hat{Q} es operador de una partícula. En este caso se tiene

$$[\hat{H}, \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu] \approx \sum_p H_{p\nu}^0 \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_\nu - \sum_q H_{\mu q}^0 \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} (V_{\mu\nu\mu} - V_{\mu\nu\nu}) \hat{a}_\mu^\dagger \langle \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu \rangle \hat{a}_\nu \quad (3.63)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} (V_{\mu\nu\nu} - V_{\mu\nu\mu}) \hat{a}_\mu^\dagger \langle \psi_0 | \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu | \psi_0 \rangle \hat{a}_\nu$$

³⁰ Ver comentario sobre el valor esperado $\langle \hat{N}_\mu \rangle$ en la páginas 43-44.

En estas dos aproximaciones, el procedimiento seguido para eliminar términos cuyos subíndices corresponden a estados diferentes, puede justificarse mediante el siguiente argumento de "fases al azar": En una suma muy grande de términos del tipo $\langle \psi_s | \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_\mu | \psi_s \rangle$, aquellos para los cuales $s \neq \mu$, se suman con fases al azar, mientras que los términos tales que $s = \mu$, se suman en fase puesto que son positivos definidos. De esta manera, muchos términos para los cuales $s \neq \mu$, se cancelan, o su suma es pequeña respecto de $\sum_s \langle \psi_s | \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s | \psi_s \rangle$, esto es

$$\sum_{s, \mu} \langle \psi_s | \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_\mu | \psi_s \rangle = \sum_s \langle \psi_s | \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s | \psi_s \rangle + \sum_{s \neq \mu} \langle \psi_s | \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_\mu | \psi_s \rangle \approx \sum_s \langle \psi_s | \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s | \psi_s \rangle \quad (3.64)$$

Suhl y Werthamer, han usado una segunda aproximación que consiste en retener no solo los términos que interesan en Hartree-Fock o R.P.A., sino también algunos términos residuales. Tómese el caso en que \hat{Q} es el operador de aniquilación de una partícula. En este caso, uno de los términos contiene operadores de tres partículas de la forma

$$\hat{B} \equiv \hat{a}_s^\dagger a_\mu a_\nu \quad (3.65)$$

Se toma el conmutador de \hat{H} con \hat{B} y se exige la condición de linealización

$$[\hat{H}, \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu] = \beta \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \quad (3.66)$$

El término del conmutador del operador de una partícula es proporcional a \hat{B} , pero el conmutador con el operador de dos partículas, conduce a la superposición de términos de la forma $\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}$. De estos términos, se retienen las siguientes dos clases:

I.- Términos en los que el índice de uno de los \hat{a}^\dagger 's coincide con uno de los de los \hat{a} 's, reemplazando la combinación, por su valor esperado en el estado base.

II.- Términos en los que el momento total (suma de índices), de dos operadores de creación \hat{a}^\dagger , sea igual a la suma de los índices de los operadores de aniquilación \hat{a} . Cualquier combinación $\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}$, tendrá en general, un valor de expectación diferente de cero en el estado base, ya que lleva momento neto cero.

Todos los términos quintuples que no cumplen con I y/o II, no se toman en cuenta.

La validéz de las aproximaciones que aquí se han descrito, no han sido encontradas en general, por lo que es necesario investigarlas en cada problema concreto.

CAPITULO 4

APLICACION DEL FORMALISMO DE LA FUNCION DE GREEN A UN PROBLEMA SOLUBLE.

INTRODUCCION.

En este capítulo, se da un bosquejo de como se puede aplicar la herramienta desarrollada en el capítulo 3, a un problema concreto.^{30*}

El problema con el que se trabajará en este capítulo, consiste de N fermiones que se encuentran sometidos a un potencial común, tipo oscilador armónico atractivo y que interaccionan solo por pares, mediante potenciales atractivos, tipo oscilador armónico. Por la forma de los potenciales que aparecen en éste problema, es imposible arrancar o agregarle partículas al sistema. Por lo tanto, para este sistema, el teorema de Koopmans, mencionado en el capítulo 1, no tiene sentido.

Este problema tiene la característica de que es soluble exactamente mediante una transformación de coordenadas conocida como "coordenadas de Jacobi" y resulta útil comparar los resultados que se obtienen con la función de Green con los resultados exactos. Este modelo teórico no ha sido usado aún, para describir sistemas reales.

^{30*} La aplicación se reduce a construir la función de Green para dicho problema y expresar sus polos en términos de cantidades algebraicas como coeficientes Clebsch-Gordan, Moshinsky-Brody, y funciones Gamma.

SOLUCION EXACTA DEL PROBLEMA

En el esquema de Schrödinger, el Hamiltoniano para este sistema es

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \left(\frac{\bar{p}_i^2}{m} + m\omega^2 \bar{r}_i^2 \right) + \sum_{i < j}^N \frac{m\mu^2}{2} (\bar{r}_i - \bar{r}_j)^2 \quad (4.1)$$

donde ω es la frecuencia de oscilación de cada partícula en el campo externo y μ es la frecuencia de oscilación de la interacción entre pares de partículas. El Hamiltoniano (4.1) en coordenadas \bar{r} y \bar{p} no es separable debido a que la interacción depende de las dos coordenadas.

Las coordenadas de Jacobi se definen por las relaciones

$$\bar{R}_i \equiv \frac{1}{\sqrt{i(i+1)}} \left[\sum_{j=1}^i \bar{r}_j - i\bar{r}_{i+1} \right] ; \quad \bar{R}_N \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \bar{r}_i \quad (4.2)$$

$i = 1, 2, \dots, N-1$

$$\bar{P}_i \equiv \frac{1}{\sqrt{i(i+1)}} \left[\sum_{j=1}^i \bar{p}_j - i\bar{p}_{i+1} \right] , \quad \bar{P}_N \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \bar{p}_i \quad (4.3)$$

$i = 1, 2, \dots, N-1$

En términos de coordenadas de Jacobi, el Hamiltoniano (4.1) toma la forma

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2} \left[\frac{\bar{P}_i^2}{m} + (m\omega^2 + Nm\mu^2) \bar{R}_i^2 \right] + \frac{1}{2} \left(\frac{\bar{P}_N^2}{m} + m\omega^2 \bar{R}_N^2 \right) \quad (4.4)$$

Puede verse que en coordenadas de Jacobi, el Hamiltoniano es

separable en $N-1$ osciladores armónicos con frecuencias $\sqrt{\omega^2 + N\nu^2}$ y un oscilador armónico con frecuencia ω .

El problema de un oscilador armónico cuántico es soluble,³¹ por lo tanto, el problema que aquí interesa, es completamente soluble. La solución viene dada por un producto antisimetrizado de funciones de onda de oscilador armónico de una partícula, esto es

$$\Psi_{\substack{\uparrow \\ n_1 \uparrow m}}(\rho, \theta, \varphi) \equiv \hat{A}[\phi_1(\rho_1, \theta_1, \varphi_1) \dots \phi_{N-1}(\rho_{N-1}, \theta_{N-1}, \varphi_{N-1}) \phi_N(\rho_N, \theta_N, \varphi_N)] \quad (4.5)$$

donde N es el número de partículas, \hat{A} está definido por (1.4), los subíndices de las funciones de onda de una partícula, $1, 2, \dots, N$, representan un conjunto de números cuánticos que caracterizan estados de oscilador armónico, esto es, $k = \{n_k, l_k, m_k\}$; para $k=1, 2, \dots, N$.

Los subíndices de la función total representan un conjunto de números cuánticos, esto es, $n = \{n_1, n_2, \dots, n_N\}$, $l = \{l_1, l_2, \dots, l_N\}$, $m = \{m_1, m_2, \dots, m_N\}$. Las funciones de una partícula $\phi_i(\rho_i, \theta_i, \varphi_i)$, están definidas³² por

$$\phi_i(\rho_i, \theta_i, \varphi_i) = R_{n_i}(\rho_i) Y_{l_i, m_i}(\theta_i, \varphi_i) \quad (4.6)$$

donde

$$R_{n_i}(\rho_i) = \rho_i^l e^{-\frac{1}{2}\rho_i^2} \sum_{\alpha=0}^{n_i} a_{n_i, l, \alpha} \rho_i^{2\alpha} \quad (4.7)$$

$$\rho_i \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} r_i \quad (4.8)$$

³¹ Véase, Beard, D.B., y G.B. Beard, Quantum Mechanics with applications, Allyn and Bacon, Inc., Boston, 1970, pp.114-115.

³² Ver, Ter Haar, D., Selected problems in Quantum Mechanics, Academic Press, Inc., New York, 1964.

Las funciones $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$, son los armónicos esféricos. Los coeficientes en la sumatoria de (4.7), vienen dados por³³

$$\alpha_{n, \ell, \alpha} = \frac{(-1)^\alpha}{\alpha!} \left[\frac{(2n_\ell)!}{\Gamma(n_\ell + \ell + \frac{3}{2})} \right] \frac{\Gamma(n_\ell + \ell + \frac{3}{2})}{(n_\ell - \alpha)! \Gamma(\alpha + \ell + \frac{3}{2})} \quad (4.9)$$

Las primeras $N-1$ funciones en (4.5), tienen frecuencia $\sqrt{\omega^2 + N\nu^2}$ mientras la función $\phi_N(\rho_N, \theta_N, \varphi_N)$ tiene frecuencia ω . La energía exacta del sistema es

$$E_{N, \nu, N} = \frac{1}{2} (\omega^2 + N\nu^2)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{3}{2}(N-1) + \sum_{i=1}^{N-1} (2n_i + \ell_i) \right] + \frac{1}{2} \omega \left[\frac{3}{2} + 2n_N + \ell_N \right] \quad (4.10)$$

lo cual se encuentra en forma directa, como consecuencia de la separación del Hamiltoniano. La importancia del resultado es que permite tener un marco de referencia, para comparar resultados que obtienen con métodos de aproximación, en particular, los resultados que se obtienen con la función de Green.

APLICACION DE LA FUNCION DE GREEN

En esta sección, se procede a hacer la aplicación de la función de Green al problema. Se utiliza el método de la ecuación de movimiento y la aproximación Hartree-Fock para desacoplar dicha ecuación, con el fin de evaluar la función de Green.

El Hamiltoniano en segunda cuantización, para este problema es

$$\hat{H} = \sum_{i, k} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i H_{ki}^0 + \frac{1}{2} \sum_{l, m, i, k} V_{lmik} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_i \quad (4.11)$$

³³ Ver, M. Moshinsky (19), p. 5.

donde

$$H_{k_i}^0 \equiv \int \Phi_k^*(x) \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{p}^2}{m} + \omega^2 m \vec{r}^2 \right) \Phi_k(x) dx ; x \equiv (\vec{r}, \sigma) \quad (4.12)$$

$$V_{l_m i_k} \equiv \int \Phi_l^*(x) \Phi_m^*(x') \frac{m \omega^2}{2} (\vec{r} - \vec{r}')^2 \Phi_l(x) \Phi_k(x') dx dx' \quad (4.13)$$

y

$$\int dx \equiv \sum_{\sigma} \int d^3 \vec{r} ; \sigma \text{ es la variable de espín.} \quad (4.14)$$

Las funciones $\Phi_k(x)$, que aparecen en las integrales (4.12) y (4.13), son funciones de onda de una partícula.

La ecuación de movimiento para la función de Green causal

es

$$G_{k_i}^c(\Omega) = \frac{1}{\hbar \Omega} \langle \Psi_0 | \{ \hat{a}_k, \hat{a}_i^\dagger \} | \Psi_0 \rangle - \frac{1}{i \Omega} G_{k_i}(\Omega | 1) \quad (4.15)$$

La función de Green de primer orden $G_{k_i}(\Omega | 1)$, contiene el operador $[\hat{H}, \hat{a}_k]$, como puede verse de las ecuaciones (3.34), (3.32) y (3.2). Por esto se analiza a continuación dicho conmutador.

Según el método de linealización, cuando se ha hecho lineal el conmutador \hat{H} con el operador de aniquilación, se tiene la energía ϵ_k sobre el estado base, esto es

$$[\hat{H}, \hat{a}_k] \approx \epsilon_k \hat{a}_k \quad (4.16)$$

Tomando el anticonmutador con \hat{a}_i^\dagger en ambos miembros de la ecuación

(4.16) se tiene

$$\{[\hat{H}, \hat{a}_\mu], \hat{a}_\mu^\dagger\} \approx \epsilon_\mu \delta_{\mu\nu} \quad (4.17)$$

Tomando el valor esperado de (4.17) en el estado base, se tiene

$$\langle \Psi_0 | \{[\hat{H}, \hat{a}_\mu], \hat{a}_\mu^\dagger\} | \Psi_0 \rangle = \epsilon_\mu \delta_{\mu\nu}, \quad (4.18)$$

lo cual permite calcular ϵ_μ . Los detalles de este cálculo se dan en el apéndice D; el resultado es

$$\epsilon_\mu = - \left[H_{\mu\mu}^0 + \sum_{\mu} (V_{\mu\mu\mu\mu} - V_{\mu\mu\mu\mu}) \langle \Psi_0 | \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu | \Psi_0 \rangle \right] \quad (4.19)$$

donde se ha usado el argumento de la aproximación Hartree-Fock

para eliminar términos para los cuales el estado del operador de creación es diferente del de aniquilación. Aún el término $\langle \Psi_0 | \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu | \Psi_0 \rangle$ no se conoce, por lo que se volverá más tarde a tratar sobre él.

Conocido ϵ_μ , se está en condiciones de utilizar (4.16) en la función de Green de primer orden, para tener

$$\begin{aligned} G_{\mu,1}(\omega|1) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi_0 | \frac{i}{\hbar} T([\hat{H}, \hat{a}_\mu] a_\mu^\dagger(t')) | \Psi_0 \rangle e^{i\omega\tau} d\tau \\ \Rightarrow G_{\mu,1}(\omega|1) &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i}{\hbar} \epsilon_\mu \langle \Psi_0 | T(a_\mu(t) a_\mu^\dagger(t')) | \Psi_0 \rangle e^{i\omega\tau} d\tau \\ \Rightarrow G_{\mu,1}(\omega|1) &\approx \frac{i}{\hbar} \epsilon_\mu G_{\mu,1}(\omega^2) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Puede verse que con esto, la ecuación de movimiento queda desacoplada, esto es

$$G_{\kappa_f}(\Omega) = \frac{1}{\hbar\Omega} \langle \psi_B | \{ \hat{a}_\kappa, \hat{a}_\kappa^\dagger \} | \psi_B \rangle - \frac{i}{\Omega\hbar} \varepsilon_\kappa G_{\kappa_f}(\Omega) \quad (4.21)$$

$$\Rightarrow G_{\kappa_f}(\Omega) = \frac{\delta_{\kappa_f}}{\hbar\Omega + \varepsilon_\kappa}$$

Como puede verse, esta función es diagonal y sus polos dan las energías de excitación del sistema.

La ecuación (4.21) es una ecuación acoplada, ya que la energía ε_κ depende del valor esperado del operador de número y éste se puede obtener solo si se conoce la función de Green, como puede verse de la ecuación (3.43).

La función de Green puede evaluarse completamente, siguiendo cualquiera de las siguientes alternativas:

(a) Aproximando la función del estado base ψ_B , por una función de onda que tenga los estados de una partícula bien definidos, de tal manera que $\langle N_\mu \rangle$ sea cero si $u < f$ y uno si $u > f$, siendo f el índice que indica el estado que corresponde al nivel de Fermi. Una función que puede servir para este propósito es la que corresponde al estado base del sistema sin interacción; otra puede ser la que corresponde al estado base de Hartree-Fock, dado por la ecuación (1.22). Naturalmente, pueden encontrarse más funciones que puedan utilizarse.

En el caso de utilizar la función de onda del estado base

del sistema con N fermiones sin interacción, la energía (4.19) es una energía tipo Hartree-Fock, ecuación (1.16), a primer orden de aproximación o primer paso de autoconsistencia. No coincide con la energía de Hartree-Fock, ya que (1.16) se obtiene después de realizar varios pasos para lograr la autoconsistencia y por lo tanto, las integrales que allí aparecen, se calculan con funciones espín-orbitales de una partícula, tipo (1.18); mientras las integrales que aparecen en (4.19), se calculan con funciones de una partícula de oscilador armónico

$$\phi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = \rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho^2} \sum_{\alpha=0}^n a_{n,l,\alpha} \rho^{2\alpha} Y_{lm}(\theta,\varphi) ; \quad \rho \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} r \quad (4.22)$$

En el caso de que se utilice la función de estado base de Hartree-Fock, (4.19) coincide con la energía de Hartree-Fock.

(b). Si se calcula $\langle \hat{N}_\mu \rangle$ mediante la expresión (3.43) se tiene

$$\epsilon_k = - \left[H_{kk}^0 + \sum_{\mu} (V_{k\mu k\mu} - V_{\mu k \mu k}) \int_C G_{\mu\mu}(\omega) d\omega \right] \quad (4.23)$$

con lo cual se tiene, que la función de Green y la energía ϵ_k , se determinan en forma autoconsistente, en el sentido de que para obtener $G_{\mu\mu}(\omega)$ es necesario conocer ϵ_k y para calcular ϵ_k se usa $G_{\mu\mu}(\omega)$. En este proceso se puede comenzar con la energía

$$\epsilon_k = - \left[H_{kk}^0 + \sum_{\mu} (V_{k\mu k\mu} - V_{\mu k \mu k}) \right] \quad (4.24)$$

obtener a primer orden $G_{\kappa}^{(1)}$; luego utilizar esa función en (4.23) para calcular una segunda aproximación para \mathcal{E}_{κ} . Nuevamente, sustituir esto en (4.21), obtener una nueva función de Green y seguir así el proceso hasta que se le logre la autoconsistencia. Puede notarse que la alternativa (a) es el primer paso de la alternativa (b).

En este trabajo, se ha optado por quedarse en el primer paso del proceso de autoconsistencia o dicho de otra forma, con la alternativa (a), utilizando como función para calcular la función de Green, la del estado base del sistema sin interacción. En este caso

$$\mathcal{E}_{\kappa} = \sum_{\sigma} H_{\kappa\kappa}^{\circ}(\bar{r}) + \sum_{\mu} \sum_{\sigma_{\mu}} (V_{\kappa\mu\kappa\mu}(\bar{r}, \bar{r}') - V_{\kappa\mu\mu\kappa}(\bar{r}, \bar{r}')) \quad (4.25)$$

donde se ha hecho uso de que, los operadores del Hamiltoniano (4.1), no dependen del espín y que por lo tanto, las integrales que aparecen en (4.23) para \mathcal{E}_{κ} , pueden separarse en dos términos: uno que depende de coordenadas espaciales solamente y otro que contiene la dependencia en el espín. Además se ha usado el hecho de que las funciones que dependen del espín son ortonormales.

Las integrales $H_{\kappa\kappa}^{\circ}$, $V_{\kappa\mu\kappa\mu}$ y $V_{\kappa\mu\mu\kappa}$ se calculan en el apéndice E y están dadas por

$$H_{\kappa\kappa}^{\circ} = \hbar \omega (l_{\kappa} + 2n_{\kappa} + \frac{3}{2}) \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned}
 V_{j_1 j_2 j_3} = & \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3 \sum_{\beta_1, \beta_2} \sum_{\beta_3}^{l_1, l_2, l_3} B(n_1, l_1; n_2, l_2; \beta_1) B(n_2, l_2; n_3, l_3; \beta_2) \left\{ \frac{\Gamma(\beta_1 + \frac{\epsilon}{2})}{\Gamma(\beta_1 + \frac{\epsilon}{2})} + \frac{\Gamma(\beta_2 + \frac{\epsilon}{2})}{\Gamma(\beta_2 + \frac{\epsilon}{2})} \right. \\
 & + 2 \frac{\Gamma(\beta_1 + 2) \Gamma(\beta_2 + 2)}{\Gamma(\beta_1 + \frac{\epsilon}{2}) \Gamma(\beta_2 + \frac{\epsilon}{2})} C(l_1, l_2; 0, m_1, m_2) C(l_1, l_2; 0, m_1, m_2) C(l_1, l_2; 0, 0, 0) C(l_1, l_2; 0, 0, 0) + \\
 & + (-2\pi) \frac{\Gamma(\beta_1 + 2) \Gamma(\beta_2 + 2)}{\Gamma(\beta_1 + \frac{\epsilon}{2}) \Gamma(\beta_2 + \frac{\epsilon}{2})} [C(l_1, l_2; (+) m_1, m_2) C(l_1, l_2; \pm m_1, m_2) + C(l_1, l_2; \pm m_1, m_2) C(l_1, l_2; (-) m_1, m_2)] \\
 & \left. \cdot C(l_1, l_2; 0, 0, 0) C(l_1, l_2; 0, 0, 0) \right\} \frac{m\omega^2}{2} \quad (4.27)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 V_{j_1 n_2 j_3} = & \frac{m\omega^2}{2} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^4 \sum_{\beta_1, \beta_2} B(n_1, l_1; n_2, l_2; \beta_1) B(n_2, l_2; n_3, l_3; \beta_2) \left\{ \delta_{\beta_1} \frac{\Gamma(\beta_1 + \frac{\epsilon}{2})}{\Gamma(\beta_1 + \frac{\epsilon}{2})} + \delta_{\beta_2} \frac{\Gamma(\beta_2 + \frac{\epsilon}{2})}{\Gamma(\beta_2 + \frac{\epsilon}{2})} \right. \\
 & + 2 \frac{\Gamma(\beta_1 + 2) \Gamma(\beta_2 + 2)}{\Gamma(\beta_1 + \frac{\epsilon}{2}) \Gamma(\beta_2 + \frac{\epsilon}{2})} [C(l_1, l_2; 0, m_1, m_2) C(l_1, l_2; 0, m_1, m_2) + 3C(l_1, l_2; \pm m_1, m_2) C(l_1, l_2; \pm m_1, m_2)] \\
 & - \frac{1}{2} (-1)^{j_1 - l_1 + 1} \left(\frac{2j_1 + 1}{2l_1 + 1}\right)^{\frac{1}{2}} C^2(l_1, l_2; \pm m_1, m_2) - \frac{1}{2} (-1)^{j_2 - l_2 + 1} \left(\frac{2l_2 + 1}{2j_2 + 1}\right)^{\frac{1}{2}} C^2(l_1, l_2; \pm m_1, m_2) \\
 & \left. \cdot C(l_1, l_2; 0, 0, 0) C(l_1, l_2; 0, 0, 0) \right\} \quad (4.28)
 \end{aligned}$$

$\beta_1, \beta_2 \in \left[\frac{1}{2}(l_1 + l_2), \frac{1}{2}(l_1 + l_2) + l_3, \frac{1}{2}l_1 + l_2 \right]$
 donde $\Gamma(p + y)$, son funciones Gamma,³⁵ $B(n_1, n_2, p)$ son coeficientes
 dados por Brody y Moshinsky³⁵ y estan definidos por la relación
 (E.16). Los coeficientes $C(l_1, l_2, l_3, m_1, m_2, m_3)$ son los llamados coefi-
 cientes de Clebsch-Gordan³⁶. La parte de estas integrales que está
 en términos de la función Gamma, puede evaluarse, si se conoce el
 argumento, utilizando propiedades de ésta función y buscando los
 valores en tablas.³⁷ Para evaluar los coeficientes de Clebsch-Gor-
 dan puede utilizarse una expresión hallada por Wigner³⁸, que es
 la siguiente

$$\begin{aligned}
 C(l_1, l_2, l_3; m_1, m_2, m_3) = & \sum_{m_3} \frac{\Gamma(2j_1 + 1) \Gamma(l_2 + l_3 - l_1) \Gamma(l_2 - l_1 + l_3) \Gamma(l_1 + l_2 - l_3) \Gamma(l_3 + m_3) \Gamma(l_1 - m_3)}{\Gamma(l_1 + l_2 + l_3 + 1) \Gamma(l_1 - m_1) \Gamma(l_1 + m_1) \Gamma(l_2 - m_2) \Gamma(l_2 + m_2)} \\
 & \cdot \sum_{\omega} \frac{(-1)^{\omega + l_2 + m_2}}{\omega!} \frac{l_2 + l_3 + m_1 - \omega \Gamma(l_1 - m_1 + \omega)}{(l_2 - l_1 + l_3 - \omega) \Gamma(l_3 + m_3 - \omega) \Gamma(\omega + l_1 - l_2 - m_3)} \quad (4.29)
 \end{aligned}$$

34

Un tratamiento de la función Gamma, puede verse en
 Arfken (), pp.450-455; Erwin Kreyszig, Advanced Engineering Ma-
thematics, John Wiley and Sons, Inc., 1972, pp.928-930. En ésta
 última referencia aparecen tabulados algunos valores de la función
 Gamma en la página 935.

onde ν , puede tomar valores para los cuales ninguno de los argumentos factoriales sea negativo. Además, existen algunas relaciones de simetría de los coeficientes, que se pueden utilizar.³⁹

De esta forma las integrales $H_{\nu, \mu}^{\circ}$, directas y de intercambio han sido calculadas en principio, ya que han sido reducidas a expresiones algebraicas, las cuales pueden evaluarse completamente cuando se requiera, como se mencionó en los párrafos precedentes. Sin embargo, no se puede cuantificar cual es la exactitud de los resultados obtenidos con la aproximación Hartree-Fock de la función de Green, respecto de los exactos, tal como están los resultados por el momento en este trabajo.

³⁵ Brody, T.A. y M. Moshinsky (8) pp. 16-17; T.A. Brody, G. Jacob and M. Moshinsky, Nuclear Physics 17, 16 (1960). En la primera de estas referencias, se dan tablas de valores de los coeficientes $B(n, l, n', l', p)$, pp. 125-175.

³⁶ Para un tratamiento de los coeficiente Clebsch-Gordan en cuanto su definición, propiedades y referencias sobre tablas de estos coeficientes, ver M.E. Rose, (21) pp. 32-47.

³⁷ Valores de la función Gamma pueden encontrarse en: M. Abramowitz and I.A. Stegun, Handbook of Mathematical functions, Dover Publications, Inc., New York, 1968, pp. 255-287.

CONCLUSIONES

Utilizando la función de Green se puede obtener la energía de excitación de un sistema de N fermiones que interactúan por pares solamente.

Utilizando el método de linealización, se encuentra en forma aproximada, la función de Green.

Con la función de Green, se reproduce el resultado que se obtiene con el método de Hartree-Fock (en un sistema de fermiones con interacción por pares), a un orden que depende de la función de onda (del estado base) que se usa para calcular la función de Green.

El grado de validez o exactitud de la aproximación usada para linealizar la ecuación de movimiento de la función de Green del problema que se atacó, no se cuantifica en este trabajo pero están dadas las condiciones para hacerlo.

Lo que se menciona en el párrafo anterior, se piensa hacer al atacar problemas físicos reales, especialmente del área de estado sólido, que es donde se piensa trabajar aplicando el método de la función de Green.

Han surgido problemas tales como: investigar si existen relaciones de "suma" para la función de Green causal, similares a las que existen para las funciones de Green retardada y avanzada. Investigar si la aproximación a la función de onda del estado base exacto está contenida implícitamente en la linealización de las ecuaciones de movimiento (de los operadores de creación y aniquilación que definen la función de Green) o por el contrario es necesario

³⁸ E.P. Wigner, Gruppentheorie, Friedrich Vieweg und Sohn, Braunschweig, 1931. (Tomada de M.E. Rose (21) p. 39).

³⁹ Para más detalles respecto a las relaciones de simetría ver, M.E. Rose (21).

hacer una aproximación adicional, para evaluar la función de Green. Investigar la posibilidad de dar una justificación física a las aproximaciones, para desacoplar ecuaciones de movimiento de la función de Green, que se basan en argumentos pragmáticos, por el momento.

De esta manera, se vislumbra un amplio campo de acción, en el cual trabajar, para continuar con la actividad que se ha comenzado con este trabajo.

APENDICES

APENDICE A

CALCULO DEL FACTOR DE FASE (2.13), ASOCIADO
A OPERADORES DE CREACION Y ANIQUILACION.

De (2.12) se sabe que

$$\hat{\alpha}_r |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle = \hat{\alpha}_r (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{a}_r^\dagger)^{n_r} |0, 0, 0, \dots\rangle \quad (A.1)$$

pero debido a que r está bien determinado y $r \neq 1$, se tiene

$$\hat{\alpha}_r \hat{a}_1^\dagger (\hat{a}_1^\dagger)^{n-1} = (\delta_{r1} - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1) (\hat{a}_1^\dagger)^{n-1} = (-1) \hat{a}_1^\dagger \hat{\alpha}_r (\hat{a}_1^\dagger)^{n-1} \quad (A.2)$$

por lo tanto se tiene

$$\hat{\alpha}_r \hat{a}_1^\dagger (\hat{a}_1^\dagger)^{n-1} = (-1) \hat{a}_1^\dagger (-\hat{a}_1^\dagger \hat{\alpha}_r) (\hat{a}_1^\dagger)^{n-2} = (-1)^2 (\hat{a}_1^\dagger)^2 \hat{\alpha}_r (\hat{a}_1^\dagger)^{n-2} \quad (A.3)$$

De aquí se ve, que por cada lugar que $\hat{\alpha}_r$ pasa hacia la derecha, aparece un signo menos, por lo tanto

$$\hat{\alpha}_r (\hat{a}_1^\dagger)^n = (-1)^{n-1} (\hat{a}_1^\dagger)^{n-1} \hat{\alpha}_r (\hat{a}_1^\dagger)^{n, n+1} = (-1)^n (\hat{a}_1^\dagger)^n \hat{\alpha}_r \quad (A.4)$$

La ecuación (A.4), es válida para cada índice $1, 2, 3, \dots$, que sea diferente de r ; como existen $r-1$ de esos símbolos, se puede

escribir

$$\hat{Q}_r |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle = (-1)^{n_1 + n_2 + \dots + n_r - 1} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{a}_{r-1}^\dagger)^{n_{r-1}} \hat{a}_r (\hat{a}_r^\dagger)^{n_r} |0\rangle \quad (A.5)$$

por lo que, el factor de fase está dado por la ecuación (2.13).

Para un operador de creación, se obtiene el resultado de forma más directa, utilizando la relación de anticonmutación (2.6) y siguiendo un proceso similar al seguido para el operador de aniquilación.

APENDICE B

OPERADORES DE UNA PARTICULA
EN SEGUNDA CUANTIZACION.

Primero se va a obtener la forma de operar de un operador de una partícula $\mathcal{M}(x)$, sobre las funciones $\phi_i(x)$, de partícula independiente, utilizando el hecho de que éstas funciones forman una base completa para funciones de una partícula. Esta forma de operar puede representarse por

$$\mathcal{M}(x) \phi_i(x) = \sum_k C_k(i) \phi_k(x) \quad (\text{B.1})$$

Multiplicando por la izquierda por $\phi_i^*(x)$ e integrando sobre x , se tiene

$$\int \phi_i^*(x) \mathcal{M}(x) \phi_i(x) dx = \sum_k C_k(i) \delta_{ki} = C_i(i) \equiv \mu_i \quad (\text{B.2})$$

de donde se tiene

$$\mathcal{M}(x) \phi_i(x) = \sum_k \mu_{ki} \phi_k(x) \quad (\text{B.3})$$

Aplicando (2.25) a (2.23), se tiene

$$\int \prod_{i=1}^N \phi(x_i) dx_i = \sum_{i \neq k}^N \hat{A}[\phi(x_1) \dots \phi(x_{i-1}) \phi(x_{i+1}) \dots \phi(x_{k-1}) \phi(x_{k+1}) \dots \phi(x_N)] \mu_{ki} \quad (\text{B.4})$$

Como los subíndices están ordenados, por cada permutación de éstos símbolos, que se haga, aparece un signo menos. Así, para colocar la función con subíndice k , en el lugar que le corresponde, aparece un factor

$$(-1)^{S_i - S_k - n_i} \quad , \quad \text{si } i > k \quad , \quad (\text{B.5})$$

$$(-1)^{S_k - S_i - n_i} \quad , \quad \text{si } k > i \quad , \quad (\text{B.6})$$

$$\text{y } 1 \quad \text{si } k=i \quad . \quad (\text{B.7})$$

En el primer caso se tiene

$$\prod_{n_1, \dots, n_k, \dots} \Phi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i \neq k} M_{n_i} \Phi_{n_i, \dots, n_k, \dots}(x_1, x_2, \dots, x_N) (-1)^{S_i} (-1)^{S_k} \quad (\text{B.8})$$

término $(-1)^{n_k}$ no cuenta, porque para que el estado k aparezca una vez más, se necesita que $n_k=0$.

En el segundo caso se tiene

$$\prod_{n_1, \dots, n_i, \dots, n_k, \dots} \Phi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i \neq k} M_{n_i} (-1)^{S_k} (-1)^{S_i} (-1) \Phi_{n_1, \dots, n_i-1, \dots, n_k+1, \dots}(x_1, \dots, x_N) \quad (\text{B.9})$$

aquí el factor $(-1)^{n_i}$ se convierte en (-1) , porque $n_i=1$ para que aparezca una vez menos.

En el tercer caso se tiene

$$\prod_{n_1, \dots, n_i, \dots, n_k, \dots} \Phi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i=k} M_{n_i} \Phi_{n_1, \dots, n_i, \dots}(x_1, \dots, x_N) \quad (\text{B.10})$$

Aplicando la transformación \mathbb{T} a (B.8), (B.9) y (B.10), se tiene

$$\mathbb{T}[U\Phi(x_1, \dots, x_N)] = \sum_{\substack{i \neq k \\ n_1, \dots, n_i, \dots, n_k, \dots}} \mu_{ki} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_k, \dots\rangle; (k < i) \quad (\text{B.11})$$

donde se ha usado (2.14) y (2.15). Además

$$\mathbb{T}[U\Phi(x_1, \dots, x_N)] = \sum_{\substack{i \neq k \\ n_1, \dots, n_i, \dots, n_k, \dots}} \mu_{ki} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_k, \dots\rangle; (k > i) \quad (\text{B.12})$$

y

$$\mathbb{T}[U\Phi(x_1, \dots, x_N)] = \sum_i \mu_{ii} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle; (i = k) \quad (\text{B.13})$$

forma de operar de $U(x)$ sobre $\Phi(x_1, \dots, x_N)$, se puede escribir como

$$\mathbb{T}[U\Phi(x_1, \dots, x_N)] = \begin{cases} [\sum_{i \neq k} \mu_{ki} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i + \sum_i \mu_{ii} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i] |n_1, \dots, n_i, \dots, n_k, \dots\rangle \\ [\sum_{i \neq k} \mu_{ki} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i + \sum_i \mu_{ii} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i] |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \end{cases}$$

y entonces, la forma del operador $U(x)$ en segunda cuantización es

$$U = \sum_{\substack{i, k \\ i \neq k}} \mu_{ki} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i \quad (\text{B.14})$$

APENDICE C

OPERADORES DE DOS PARTICULAS
EN SEGUNDA CUANTIZACION

Las funciones

$$\Phi_{i\kappa}(x_i, x_\kappa) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_i(x_i)\phi_\kappa(x_\kappa) - \phi_\kappa(x_i)\phi_i(x_\kappa)] \quad (C.1)$$

forman una base ortonormal, para el espacio de funciones de dos partículas. Sea $\hat{U}(x_i, x_\kappa)$ un operador de dos partículas, el efecto de este operador, sobre un producto de funciones de una partícula $\phi_i(x_i)\phi_\kappa(x_\kappa)$, puede expresarse como

$$\hat{U}(x_i, x_\kappa) \phi_i(x_i)\phi_\kappa(x_\kappa) = \sum_{l,m} C_{lm}^{(i,\kappa)} \Phi_{lm}(x_i, x_\kappa) \quad (C.2)$$

Multiplicando (C.1) por $\Phi_{lr}^*(x_i, x_\kappa)$ por la izquierda e integrando sobre x_i y x_κ , se tiene

$$\int \Phi_{lr}^*(x_i, x_\kappa) \hat{U}(x_i, x_\kappa) \phi_i(x_i)\phi_\kappa(x_\kappa) dx_i dx_\kappa = \sum_{lm} C_{lm}^{(i,\kappa)} (\delta_{il} \delta_{m\kappa} - \delta_{m\kappa} \delta_{lr}) = C_{lr}^{(i,\kappa)} - C_{lr}^{(i,\kappa)}$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} \int \Phi_{lr}^*(x_i)\phi_l^*(x_\kappa) \hat{U}(x_i, x_\kappa) \phi_i(x_i)\phi_\kappa(x_\kappa) dx_i dx_\kappa - \frac{1}{\sqrt{2}} \int \Phi_{lr}^*(x_i)\phi_l^*(x_\kappa) \hat{U}(x_i, x_\kappa) \phi_\kappa(x_i)\phi_l(x_\kappa) dx_i dx_\kappa = \\ & = C_{lr}^{(i,\kappa)} - C_{r\bar{l}}^{(i,\kappa)} \end{aligned}$$

y por lo tanto

$$\frac{1}{\sqrt{2}} U_{lr\bar{i}\kappa} = C_{lr}^{(i,\kappa)} \quad) \quad \frac{1}{\sqrt{2}} U_{r\bar{l}i\kappa} = C_{r\bar{l}}^{(i,\kappa)} \quad (C.3)$$

De aquí se puede pasar a lo siguiente

$$\begin{aligned} \hat{U}(i, k) \phi_i(x_i) \phi_k(x_k) &= \sum_{l \neq m} \frac{1}{\sqrt{2}} v_{lmik} \Phi_{lm}(x_i, x_k) = \\ &= \sum_{l \neq m} \frac{1}{2} v_{lmik} \phi_l(x_i) \phi_m(x_k) - \sum_{l \neq m} \frac{1}{2} v_{lmik} \phi_m(x_i) \phi_l(x_k) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l \neq m} (v_{lmik} - v_{mlik}) \phi_l(x_i) \phi_m(x_k) \end{aligned}$$

para tener finalmente

$$\hat{U}(i, k) \phi_i(x_i) \phi_k(x_k) = \frac{1}{2} \sum_{l \neq m} (v_{lmik} - v_{mlik}) \phi_l(x_i) \phi_m(x_k) \quad (C.4)$$

Aplicando el operador $\hat{V}(x, x')$, a la función $\Phi_{n_1 n_2 \dots}(x_1, \dots, x_N)$, se

tiene

$$\hat{V}(x, x') \Phi_{n_1 n_2 \dots n_N}(x_1, \dots, x_N) = \sum_{l \neq k} \frac{1}{4} (v_{lmik} - v_{mlik}) (-1)^{s_i s_j} \hat{A}[\phi_l(x_i) \phi_m(x_j) \dots \phi_l(x_i) \phi_m(x_k)] \quad (C.5)$$

$$\hat{V}(x, x') \Phi_{n_1 n_2 \dots n_N}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{4} \sum_{l \neq k} (v_{lmik} - v_{mlik}) (-1)^{s_i s_j} (-1)^{s_m} (-1)^{s_k} \Phi_{n_1 n_2 \dots n_N}(x_1, \dots, x_N)$$

donde se usó el hecho de que $n_l=1$, $n_k=0$ y $n_m=0$.

Aplicando la transformación: η a lo anterior, se tiene

$$\begin{aligned} \pi[\hat{V}(x, x') \Phi_{n_1 n_2 \dots n_N}(x_1, \dots, x_N)] &= \frac{1}{4} \sum_{l \neq k} (v_{lmik} - v_{mlik}) (-1)^{s_i s_j} (-1)^{s_m} (-1)^{s_k} |n_1 \dots n_{l+1} \dots n_{m+1} \dots n_{l-1} \dots n_{m-1} \dots\rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{l \neq k} (v_{lmik} \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger a_l a_m - v_{mlik} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m) |n_1 \dots n_l \dots n_m \dots n_k \dots\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \pi[\hat{V}(x, x') \Phi(x_1, \dots, x_N)] = \frac{1}{4} \sum_{i, k, l, m} (v_{i, m, i, k} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_i + v_{l, m, i, k} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_k) |n_1, \dots, n_i, \dots, n_m, \dots, n_k, \dots\rangle$$

$$\Rightarrow \pi[\hat{V}(x, x') \Phi(x_1, \dots, x_N)] = \frac{1}{2} \sum_{i, k, l, m} v_{i, m, i, k} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_i |n_1, \dots, n_1, \dots, n_m, \dots, n_i, \dots, n_k, \dots\rangle$$

por lo tanto se tiene

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i, k, l, m} v_{i, m, i, k} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_i \quad (C.6)$$

que es la forma del operador, en segunda cuantización.

APENDICE D

CALCULO DEL CONMUTADOR $[\hat{H}, \hat{a}_n]$.

Usando la expresión (2.29) para el Hamiltoniano en segunda cuantización, se tiene

$$[\hat{H}, \hat{a}_n] = \sum_{r \neq q} H_{r,q}^i [\hat{a}_r^\dagger \hat{a}_q, \hat{a}_n] + \frac{1}{2} \sum_{s,t,\mu,\nu} V_{s,t,\mu,\nu} [\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu, \hat{a}_n] \quad (D.1)$$

El conmutador que aparece en el primer término del segundo miembro es

$$\begin{aligned} [\hat{a}_r^\dagger \hat{a}_q, \hat{a}_n] &= \hat{a}_r^\dagger [\hat{a}_q, \hat{a}_n] + [\hat{a}_r^\dagger, \hat{a}_n] \hat{a}_q = \hat{a}_r^\dagger (\hat{a}_q \hat{a}_n - \hat{a}_n \hat{a}_q) + (\hat{a}_r^\dagger \hat{a}_n - \hat{a}_n \hat{a}_r^\dagger) \hat{a}_q \\ &= 2\hat{a}_r^\dagger \hat{a}_q \hat{a}_n + \hat{a}_q \delta_{r,n} - 2\hat{a}_n \hat{a}_r^\dagger \hat{a}_q \\ &= -2\hat{a}_r^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_q + \hat{a}_q \delta_{r,n} - 2\hat{a}_n \hat{a}_r^\dagger \hat{a}_q \\ &= -2\{\hat{a}_n, \hat{a}_r^\dagger\} \hat{a}_q + \hat{a}_q \delta_{r,n} = -2\delta_{n,r} \hat{a}_q + \hat{a}_q \delta_{r,n} \end{aligned} \quad (D.2)$$

$$\Rightarrow [\hat{a}_r^\dagger \hat{a}_q, \hat{a}_n] = -\delta_{n,r} \hat{a}_q$$

Para el conmutador en el segundo término del segundo miembro, en (D.1), se tiene

$$[\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu, \hat{a}_n] = \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\nu [\hat{a}_\mu, \hat{a}_n] + \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_t^\dagger [\hat{a}_\mu, \hat{a}_n] \hat{a}_\nu + \hat{a}_s^\dagger [\hat{a}_t^\dagger, \hat{a}_n] \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu + [\hat{a}_s^\dagger, \hat{a}_n] \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \quad (D.3)$$

$$\text{pero } , [\hat{a}_m^\dagger, \hat{a}_n] = \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n - \hat{a}_n \hat{a}_m^\dagger = \delta_{m,n} - 2\hat{a}_n \hat{a}_m^\dagger \quad (D.4)$$

$$\text{y } , [\hat{a}_m, \hat{a}_n] = \hat{a}_m \hat{a}_n - \hat{a}_n \hat{a}_m = 2\hat{a}_m \hat{a}_n \quad (D.5)$$

usando (D.4) y (D.5) en (D.3), se tiene

$$\begin{aligned} [\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu, \hat{a}_\kappa] &= 2\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \hat{a}_\kappa + 2\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \hat{a}_\kappa + \hat{a}_s^\dagger (\delta_{t\kappa} - 2\hat{a}_\mu \hat{a}_\kappa^\dagger) \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu + \\ &+ (\delta_{s\kappa} - 2\hat{a}_\mu \hat{a}_\kappa^\dagger) \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \\ &= 2\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\mu \{\hat{a}_\nu, \hat{a}_\kappa\} + \hat{a}_s \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \delta_{t\kappa} + \delta_{s\kappa} \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu - 2\{\hat{a}_\mu, \hat{a}_t^\dagger\} \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \end{aligned}$$

$$\Rightarrow [\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu, \hat{a}_\kappa] = \hat{a}_s \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \delta_{t\kappa} - \delta_{s\kappa} \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \quad (D.6)$$

Sustituyendo (D.2) y (D.6) en (D.1), se tiene

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{a}_r] &= -\sum_{p,q} H_{pq}^\circ \delta_{rp} \hat{a}_q + \frac{1}{2} \left(\sum_{\kappa,\mu,\nu} V_{\kappa\mu\nu} \hat{a}_\kappa^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu - \sum_{s,\kappa,\nu} V_{s\kappa\nu} \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_\kappa \hat{a}_\nu \right) \\ &= -\sum_{p,q} H_{pq}^\circ \delta_{rp} \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{\kappa,\mu,\nu} V_{\kappa\mu\nu} \hat{a}_\kappa^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu - \frac{1}{2} \sum_{s,\kappa,\nu} V_{s\kappa\nu} \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_\kappa \hat{a}_\nu \end{aligned}$$

$$\Rightarrow [\hat{H}, \hat{a}_r] = -\sum_p H_{rp}^\circ \hat{a}_p + \frac{1}{2} \sum_{s,\kappa,\nu} (V_{s\kappa\nu} - V_{\kappa s\nu}) \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_\kappa \hat{a}_\nu \quad (D.7)$$

donde se usó el hecho de que s y t son índices mudos.

APENDICE E

CALCULO DE ϵ_k .

De (4.18) y (D.7) se tiene

$$\begin{aligned} \epsilon_k &= \langle \psi_0 | \{ [\hat{H}, \hat{a}_k], \hat{a}_k^\dagger \} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \{ -\sum_q H_{kq}^0 \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{S, \mu, \nu} (V_{S, \mu, \nu} - V_{k, S, \mu, \nu}) \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \hat{a}_k^\dagger \} | \psi_0 \rangle \\ &= \langle \psi_0 | -\sum_q H_{kq}^0 \{ \hat{a}_q, \hat{a}_k^\dagger \} | \psi_0 \rangle + \frac{1}{2} \sum_{S, \mu, \nu} (V_{S, \mu, \nu} - V_{k, S, \mu, \nu}) \langle \psi_0 | \{ \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu, \hat{a}_k^\dagger \} | \psi_0 \rangle \end{aligned}$$

$$\epsilon_k = -\sum_q H_{kq}^0 \delta_{qk} + \frac{1}{2} \sum_{S, \mu, \nu} (V_{S, \mu, \nu} - V_{k, S, \mu, \nu}) \langle \psi_0 | \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu | \psi_0 \rangle \quad (E.1)$$

Trabajando con el anticonmutador del segundo término del segundo miembro se tiene

$$\begin{aligned} \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu &= \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu (\delta_{k\nu} - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_\nu) + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu = \\ &= \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \delta_{k\nu} - \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_\nu + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \\ &= \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \delta_{k\nu} - \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\nu \delta_{\mu k} + \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu \hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \hat{a}_\nu = \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu \delta_{k\nu} - \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\nu \delta_{\mu k} \quad (E.2)$$

Sustituyendo (E.2) en (E.1) se tiene

$$\epsilon_k = -H_{kk}^0 + \frac{1}{2} \sum_{S, \mu, \nu} (V_{S, \mu, \nu} - V_{k, S, \mu, \nu}) \langle \psi_0 | \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\mu | \psi_0 \rangle \delta_{k\nu} - \frac{1}{2} \sum_{S, \mu, \nu} (V_{S, \mu, \nu} - V_{k, S, \mu, \nu}) \langle \psi_0 | \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_\nu | \psi_0 \rangle \delta_{\mu k}$$

$$\mathcal{E}_K = -H_{KK}^0 + \frac{1}{2} \sum_{SM} (V_{SKKM} - V_{KSKM}) \langle \Psi_0 | \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_M | \Psi_0 \rangle - \frac{1}{2} \sum_{SU} (V_{SKUK} - V_{KUSK}) \langle \Psi_0 | \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_U | \Psi_0 \rangle$$

Siendo u y v índices mudos, se puede escribir

$$\mathcal{E}_K = -H_{KK}^0 + \frac{1}{2} \sum_{SM} (V_{SKKM} - V_{KSKM} - V_{SKMK} + V_{KSMK}) \langle \Psi_0 | \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_M | \Psi_0 \rangle$$

pero $V_{SKMK} = V_{KSMK}$ y $V_{SKKM} = V_{KSKM}$, entonces

$$\mathcal{E}_K = -H_{KK}^0 - \sum_{SM} (V_{KSKM} - V_{SKKM}) \langle \Psi_0 | \hat{a}_S^\dagger \hat{a}_M | \Psi_0 \rangle \quad (\text{E.3})$$

es la relación que se andaba buscando.

APENDICE F

CALCULO DE LAS INTEGRALES $H_{n_k}^0$, V Y V

Para calcular estas integrales se utilizan funciones de onda de una partícula, tipo oscilador armónico, dadas por (4.22).

LA INTEGRAL $H_{n_k}^0$

La integral $H_{n_k}^0$ se encuentra fácilmente, ya que (4.22) es eigenfunción del Hamiltoniano sin interacción $\tilde{H} = \frac{\tilde{p}^2}{2m} + \omega^2 \tilde{r}^2$, con eigenvalor $E_{n_k, j_k} \equiv \hbar \omega (l_k + 2n_k + \frac{3}{2})$, por lo tanto

$$H_{n_k}^0 = \hbar \omega (l_k + 2n_k + \frac{3}{2}) \quad (F.1)$$

de $n_k = 0, 1, 2, \dots$

y $l_k = 0, 1, 2, \dots, n_k - 1$.

INTEGRAL DIRECTA

La integral directa está definida como

$$V_{n_k, l_k} = \int \phi_j^*(\tilde{r}) \phi_{n_k}^*(\tilde{r}') \frac{m \omega^2}{2} (\tilde{r} - \tilde{r}')^2 \phi_j(\tilde{r}) \phi_k(\tilde{r}') d^3 \tilde{r} d^3 \tilde{r}' \quad (F.2)$$

puede quitarse la constante $\frac{m \omega^2}{2}$ y trabajar únicamente con la integral que queda. El cálculo se inicia escribiendo $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2$ en coordenadas esféricas

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad (F.3)$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi \quad (F.4)$$

$$z = r \cos \theta \quad (F.5)$$

sustituir esto en (F.2) para tener

$$V_{j_k j_k} = A + B + 2(C + D + E) \quad (\text{F.6})$$

donde

$$A \equiv \int \phi_j^*(\bar{r}) \phi_k^*(\bar{r}') r^2 \phi_j(\bar{r}) \phi_k(\bar{r}') r^2 dr r'^2 dr' d\xi d\xi' \quad (\text{F.7})$$

$$B \equiv \int \phi_j^*(\bar{r}) \phi_k^*(\bar{r}') r'^2 \phi_j(\bar{r}) \phi_k(\bar{r}') r^2 dr r'^2 dr' d\xi d\xi' \quad (\text{F.8})$$

$$C \equiv \int \phi_j^*(\bar{r}) \phi_k^*(\bar{r}') r r' \text{sen} \theta \text{sen} \theta' \cos \varphi (\cos \varphi' \phi_j(\bar{r}) \phi_k(\bar{r}') r^2 dr r'^2 dr' d\xi d\xi' d\varphi d\varphi') \quad (\text{F.9})$$

$$D \equiv \int \phi_j^*(\bar{r}) \phi_k^*(\bar{r}') r r' \text{sen} \theta \text{sen} \theta' \text{sen} \varphi \text{sen} \varphi' \phi_j(\bar{r}) \phi_k(\bar{r}') r^2 dr r'^2 dr' d\xi d\xi' d\varphi d\varphi' \quad (\text{F.10})$$

$$E \equiv \int \phi_j^*(\bar{r}) \phi_k^*(\bar{r}') r r' \cos \theta \cos \theta' \phi_j(\bar{r}) \phi_k(\bar{r}') r^2 dr r'^2 dr' d\xi d\xi' \quad (\text{F.11})$$

$$y \quad d^3 \bar{r} = r^2 dr d\xi = r^2 dr \text{sen} \theta d\theta d\varphi \quad (\text{F.12})$$

Antes de proseguir, se calculará un tipo de integral que servirá para evaluar las anteriores integrales. El calculo se realiza siguiendo el trabajo de Moshinsky³⁹

³⁹ M. Moshinsky (18), pp. 5-6.

De (4.22) se sabe que

$$R_{n_j}(p) = e^{-\frac{p^2}{2}} p^l \sum_{\alpha=0}^n a_{n, \alpha} p^{2\alpha}$$

entonces

$$\Delta \equiv \int_0^{\infty} R_{n_j}^*(p) g(p) R_{n_j}(p) p^2 dp = \sum_{\alpha=0}^n \sum_{\beta=0}^{n'} \int_0^{\infty} e^{-p^2} p^{l+l'+2\alpha+2\beta+2} g(p) dp$$

donde $g(p)$, es alguna función de p , completamente arbitraria.

Trabajando con lo anterior se tiene

$$\Delta = \sum_{\alpha=0}^n \sum_{\beta=0}^{n'} a_{n, \alpha} a_{n', \beta} \int_0^{\infty} e^{-p^2} p^{2\alpha+2} g(p) dp$$

$$\Delta = \sum_{\alpha=0}^n \sum_{\beta=i}^{\beta} a_{n, \alpha} a_{n', \beta} \int_0^{\infty} e^{-p^2} p^{2\beta+2} g(p) dp$$

donde

$$P \equiv \frac{1}{2} (l + l' + 2\alpha + 2\beta) \quad (\text{F.13})$$

$$i \equiv \frac{1}{2} (l + l') \quad (\text{F.14})$$

$$S \equiv \frac{1}{2} (l + l') + n' + n \quad (\text{F.15})$$

así se puede escribir

$$\int_0^{\infty} R_{n_j}^*(p) g(p) R_{n_j}(p) p^2 dp = \sum_{\beta=i}^{\beta} B(n, n', l, p) \frac{2}{\Gamma(P + \frac{1}{2})} \int_0^{\infty} e^{-p^2} p^{2\beta+2} g(p) dp \quad (\text{F.16})$$

onde

$$B(n_l, n_l', p) \equiv \frac{\Gamma(p + \frac{3}{2})}{2} \sum_{d=0}^n a_{d n_l} a_{n_l' d}(\rho) \quad (F.17)$$

La integral $I_r \equiv \int_0^{\infty} e^{-r^2} r^{2p+2} g(r) dr$, es una integral tipo Talmi.⁴⁰

La función Gamma y el número 2 en la relación (F.16), se escogen de tal manera que cuando $g(r)=1$, la integral sea uno.

En este trabajo, interesa un tipo de las integrales de Talmi, aquellas en que $g(r) = r^2$, por lo tanto

$$I_r(\lambda) = \int_0^{\infty} r^{2p+2} e^{-r^2} dr = \frac{\Gamma(p + \frac{3}{2} + \frac{1}{2})}{\Gamma(p + \frac{3}{2})}$$

$$\int_0^{\infty} R_{n_l}^*(r) r^{\lambda} R_{n_l'}(r) r^2 dr = \sum_{p=l}^s B(n_l, n_l', p) \frac{\Gamma(p + \frac{1}{2} + \frac{3}{2})}{\Gamma(p + \frac{3}{2})} \quad (F.18)$$

Sustituyendo (4.8) en (F.18) se tiene

$$\int_0^{\infty} R_{n_l}^*(r) r^{\lambda} R_{n_l'}(r) r^2 dr = \int_0^{\infty} R_{n_l}^*(r) \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{\lambda}{2}} r^{\lambda} R_{n_l'}(r) \frac{\hbar}{m\omega} r^2 dr \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}$$

⁴⁰I. Talmi, Helv. Phys. Acta 25, 185 (1952). Integrales de Talmi para cuatro tipos diferentes de funciones $g(r)$, se encuentran tabuladas en M. Moshinsky (18), p. 6.

$$\Rightarrow \int_0^{\infty} \tilde{R}_{n_l}^*(r) r^\lambda R_{n_l'}(r) r^2 dr = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{\lambda}{2} + \frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \tilde{R}_{n_l}^*(\rho) \rho^\lambda R_{n_l'}(\rho) \rho^2 d\rho$$

$$= \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{\lambda}{2} + \frac{3}{2}} \sum_{P=i}^5 B(n_l, n_l', P) \frac{\Gamma(P + \frac{\lambda}{2} + \frac{3}{2})}{\Gamma(P + \frac{3}{2})}$$

por lo tanto

$$\int_0^{\infty} \tilde{R}_{n_l}^*(r) r^\lambda R_{n_l'}(r) r^2 dr = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{\lambda}{2} + \frac{3}{2}} \sum_{P=i}^5 B(n_l, n_l', P) \frac{\Gamma(P + \frac{\lambda}{2} + \frac{3}{2})}{\Gamma(P + \frac{3}{2})} \quad (P.19)$$

Los operadores que aparecen en (P.6) a (P.11), son multiplicativos y por lo tanto, pueden ser separados en cuatro integrales: sobre r , r' , ξ y ξ' . Así se tiene

$$A = \int_0^{\infty} r^2 R_{n_l}^2(r) r^2 dr \int_0^{\infty} r'^2 R_{n_l'}^2(r') dr' \quad (P.20)$$

para lo cual se usó el hecho de la ortonormalidad de los armónicos esféricos. Utilizando (P.19) y tomando $\lambda=2$ en la integral sobre r y $\lambda=0$ en la integral sobre r' se tiene

$$A = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{5}{2}} \sum_{P_j=1_j}^{0_j+2n_j} B(n_l, n_l', P_j) \frac{\Gamma(P_j + \frac{5}{2})}{\Gamma(P_j + \frac{3}{2})} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} \sum_{P_n=0_n}^{1_n+2n_n} B(n_{l_n}, n_{l_n}', P_n) \frac{\Gamma(P_n + \frac{3}{2})}{\Gamma(P_n + \frac{3}{2})}$$

$$A = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^4 \sum_{l_j=0}^{l_j+2n_j} \sum_{l_n=0}^{l_n+2n_n} B(n_j, l_j, n_j, l_j, p_j) B(n_n, l_n, n_n, l_n, p_n) \frac{\Gamma(p_j + \frac{5}{2})}{\Gamma(p_j + \frac{3}{2})} \quad (F.21)$$

La integral B, es la misma que A solo que tiene intercambiadas r y r', por lo tanto

$$B = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^4 \sum_{l_j=0}^{l_j+2n_j} \sum_{l_n=0}^{l_n+2n_n} B(n_j, l_j, n_j, l_j, p_j) B(n_n, l_n, n_n, l_n, p_n) \frac{\Gamma(p_n + \frac{5}{2})}{\Gamma(p_n + \frac{3}{2})} \quad (F.22)$$

Para la integral C se tiene

$$C = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^4 \sum_{l_j=0}^{l_j+2n_j} \sum_{l_n=0}^{l_n+2n_n} B(n_j, l_j, n_j, l_j, p_j) B(n_n, l_n, n_n, l_n, p_n) \frac{\Gamma(p_j+2)}{\Gamma(p_j+\frac{3}{2})} \frac{\Gamma(p_n+2)}{\Gamma(p_n+\frac{3}{2})} \quad (F.23)$$

$$\cdot \int_{l_j, m_j}^* Y_{l_j, m_j}(\xi) \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \left[\frac{Y_{l_j, 0}(\xi)}{l_j} - Y_{l_j, 0}(\xi) \right] Y_{l_j, m_j}(\xi) d\xi \int_{l_n, m_n}^* Y_{l_n, m_n}(\xi') \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \left[\frac{Y_{l_n, 0}(\xi')}{l_n} - Y_{l_n, 0}(\xi') \right] Y_{l_n, m_n}(\xi') d\xi'$$

donde se usó (F.19) para la parte dependiente de r y r', y se expresaron las funciones trigonométricas en términos de armónicos esféricos, mediante la siguiente relación⁴¹

$$Y_{l, 0}(\xi) - Y_{l, 0}(\xi) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \theta \left[e^{-i\varphi} + e^{i\varphi} \right] = 2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \theta \cos \varphi \quad (F.24)$$

Por otra parte, los armónicos esféricos cumplen con la siguiente integral⁴²

$$\int_{l_1, m_1}^* Y_{l_1, m_1}(\xi) Y_{l_2, m_2}(\xi) Y_{l_3, m_3}(\xi) d\xi = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l_3+1)}} C(l_1, l_2, l_3; m_1, m_2, m_3) C(l_1, l_2, l_3; 0, 0, 0) \quad (F.25)$$

⁴¹ Véase, Arfken (2), p.571, en donde aparecen tabulados algunos armónicos esféricos.

⁴² Un análisis detallado para obtener ésta relación, puede verse en, M.E. Rose (21) op. 57-62.

onde los números $C(l, l_x, l_j; m, m_x, m_j)$, son coeficientes de Clebsch-Gordan.

Usando (P.25) en (P.23) se tiene

$$C = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^4 \sum_{l_j=1}^{l_j+2n_j} \sum_{l_x=1}^{l_x+2n_x} B(n_x, l_j, n_j; l_j, l_x) B(n_x, l_x, n_x; l_x, l_j) \frac{\Gamma(P_j+2)}{\Gamma(P_j+\frac{3}{2})} \frac{\Gamma(P_x+2)}{\Gamma(P_x+\frac{3}{2})} \cdot$$

$$\cdot \frac{\pi}{2} [C(l, l_j; (-1)^{m_j} m_j) - C(l, l_j; l_j, m_j)] C(l, l_j, l_j; 0, 0, 0) \cdot \quad (P.26)$$

$$\cdot [C(l, l_x, l_x; (-1)^{m_x} m_x) - C(l, l_x, l_x; l_x, m_x)] C(l, l_x, l_x; 0, 0, 0)$$

Para integrar D y E, nuevamente se expresan las funciones trigonométricas en términos de armónicos esféricos, usando las siguientes relaciones

$$\text{Sen } \theta \text{ Sen } \varphi = -\frac{1}{2i} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \left[Y_{11}(\xi) + Y_{1(-1)}(\xi) \right] \quad (P.27)$$

$$\text{Cos } \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\xi) \quad (P.28)$$

Así, se tiene

$$D = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^4 \sum_{l_j=1}^{l_j+2n_j} \sum_{l_x=1}^{l_x+2n_x} B(n_x, l_j, n_j; l_j, l_x) B(n_x, l_x, n_x; l_x, l_j) \frac{\Gamma(P_j+2)}{\Gamma(P_j+\frac{3}{2})} \frac{\Gamma(P_x+2)}{\Gamma(P_x+\frac{3}{2})} \cdot \quad (P.29)$$

$$\cdot \int_{j, m_j}^* Y_{11}(\xi) \left(-\frac{1}{2i}\right) \sqrt{\frac{8\pi}{3}} [Y_{11}(\xi) + Y_{1(-1)}(\xi)] d\xi \int_{l_x, m_x}^* Y_{1(-1)}(\xi) \left(-\frac{1}{2i}\right) \sqrt{\frac{8\pi}{3}} [Y_{11}(\xi) + Y_{1(-1)}(\xi)] Y_{10}(\xi) d\xi$$

$$\begin{aligned}
 \int E &= \left(\frac{h}{m\omega}\right)^{\uparrow} \sum_{\beta_j=1}^{l_j+2n_j} \sum_{p_k=1}^{l_k+2n_k} B(n_j l_j, n_j l_j, \beta_j) B(n_k l_k, n_k l_k, p_k) \frac{\Gamma(\beta_j+2)}{\Gamma(\beta_j+\frac{1}{2})} \frac{\Gamma(p_k+2)}{\Gamma(p_k+\frac{1}{2})} \\
 &\cdot \int \gamma_{l_j, n_j}^*(\xi) \sqrt{\frac{2l_j}{3}} \gamma_{l_j, n_j}(\xi) \gamma_{l_j, n_j}(\xi) d\xi \int \gamma_{l_k, n_k}^*(\xi') \sqrt{\frac{2l_k}{3}} \gamma_{l_k, n_k}(\xi') \gamma_{l_k, n_k}(\xi') d\xi' \quad (F.30)
 \end{aligned}$$

que usando (F.25) se transforma en

$$\begin{aligned}
 D &= \left(\frac{h}{m\omega}\right)^{\uparrow} \sum_{\beta_j=1}^{l_j+2n_j} \sum_{p_k=1}^{l_k+2n_k} B(n_j l_j, n_j l_j, \beta_j) B(n_k l_k, n_k l_k, p_k) \frac{\Gamma(\beta_j+2)}{\Gamma(\beta_j+\frac{1}{2})} \frac{\Gamma(p_k+2)}{\Gamma(p_k+\frac{1}{2})} \cdot (-\frac{1}{2}) \\
 &\cdot [C(l_j l_j, \beta_j; l_j n_j, m_j) + C(l_j l_j, \beta_j; (-1)^{m_j} m_j)] \cdot C(l_j l_j, \beta_j; 000) \quad (F.31) \\
 &\cdot [C(l_k l_k, p_k; l_k n_k, m_k) + C(l_k l_k, p_k; (-1)^{m_k} m_k)] \cdot C(l_k l_k, p_k; 000)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \int &= \left(\frac{h}{m\omega}\right)^{\uparrow} \sum_{\beta_j=1}^{l_j+2n_j} \sum_{p_k=1}^{l_k+2n_k} B(n_j l_j, n_j l_j, \beta_j) B(n_k l_k, n_k l_k, p_k) \frac{\Gamma(\beta_j+2)}{\Gamma(\beta_j+\frac{1}{2})} \frac{\Gamma(p_k+2)}{\Gamma(p_k+\frac{1}{2})} \\
 &\cdot C(l_j l_j, \beta_j; 0 m_j, m_j) C(l_j l_j, \beta_j; 000) C(l_k l_k, p_k; 0 m_k, m_k) C(l_k l_k, p_k; 000) \quad (F.32)
 \end{aligned}$$

Sustituyendo (F.32), (F.31), (F.26), (F.22) y (F.21) en (F.32), se tiene el valor de la integral directa.

INTEGRALES DE INTERCAMBIO

Usando (4.13), la integral de intercambio puede escribirse

como

$$V_{j\kappa\kappa j} = \int \phi_j^*(\vec{r}) \phi_{\kappa}^*(\vec{r}') \frac{m\mu^2}{2} (\vec{r} - \vec{r}')^2 \phi_{\kappa}(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}') d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \quad (\text{F.33})$$

con las ϕ_j dadas por (4.22). Poniendo el potencial de interacción en términos de coordenadas esféricas, se puede escribir

$$V_{j\kappa\kappa j} = \frac{m\mu^2}{2} (A + B + C) \quad (\text{F.34})$$

donde

$$A \equiv \int R_j^*(r) Y_j^*(\xi) R_{\kappa}^*(r') Y_{\kappa}^*(\xi') r^2 R_{\kappa}(r) Y_{\kappa}(\xi) R_j(r') Y_j(\xi') r'^2 dr r'^2 dr' d\xi d\xi' \quad (\text{F.35})$$

$$B \equiv \int R_j^*(r) Y_j^*(\xi) R_{\kappa}^*(r') Y_{\kappa}^*(\xi') r'^2 R_{\kappa}(r) Y_{\kappa}(\xi) R_j(r') Y_j(\xi') r^2 dr r'^2 dr' d\xi d\xi' \quad (\text{F.36})$$

$$\frac{C}{2} \equiv \int R_j^*(r) Y_j^*(\xi) R_{\kappa}^*(r') Y_{\kappa}^*(\xi') \vec{r} \cdot \vec{r}' R_{\kappa}(r) Y_{\kappa}(\xi) R_j(r') Y_j(\xi') r^2 dr r'^2 dr' d\xi d\xi' \quad (\text{F.37})$$

Separando en (F.35), las partes que dependen de r , r' , ξ y ξ' y utilizando la ortonormalidad de los esféricos armónicos y la relación

19) se tiene

$$A = \left(\frac{h}{m\omega}\right)^4 \int_{j_k} \int_{n_j} \sum_p \sum_q B(n_j, l_j, n_k, l_k, p) B(n_k, l_k, n_j, l_j, q) \frac{\Gamma(p + \frac{5}{2})}{\Gamma(p + \frac{3}{2})} \frac{\Gamma(q + \frac{3}{2})}{\Gamma(q + \frac{5}{2})} \quad (F.38)$$

donde $p \in [\frac{1}{2}(l_j + l_k), \frac{1}{2}(l_j + l_k) + n_j + n_k]$ y $q \in [\frac{1}{2}(l_j + l_k), \frac{1}{2}(l_j + l_k) + n_j + n_k]$ (F.39)

Analizando (F.36), puede verse que es igual que A, pero con r y r' intercambiadas, por lo tanto

$$B = \int_{j_k} \int_{n_j} \left(\frac{h}{m\omega}\right)^4 \sum_{p,q} B(n_j, l_j, n_k, l_k, p) B(n_k, l_k, n_j, l_j, q) \frac{\Gamma(p + \frac{3}{2})}{\Gamma(p + \frac{5}{2})} \frac{\Gamma(q + \frac{5}{2})}{\Gamma(q + \frac{3}{2})} \quad (F.40)$$

Por otra parte, de (F.37) se tiene

$$\frac{C}{2} = C_1 + C_2 + C_3 \quad (F.41)$$

de

$$C_1 = \int R_j^*(r) Y_j^*(\beta) R_k^*(r') Y_k^*(\beta') r \operatorname{sen} \theta \cos \varphi r' \operatorname{sen} \theta' \cos \varphi' R_k(r) Y_k(\beta) R_j(r') Y_j(\beta') r^2 dr d\beta r'^2 dr' d\beta' \quad (F.42)$$

$$C_2 = \int R_j^*(r) Y_j^*(\beta) R_k^*(r') Y_k^*(\beta') r r' \cos \theta \cos \theta' R_k(r) Y_k(\beta) R_j(r') Y_j(\beta') r^2 dr d\beta r'^2 dr' d\beta' \quad (F.43)$$

$$C_3 = \int R_j^*(r) Y_j^*(\beta) R_k^*(r') Y_k^*(\beta') r r' \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \theta' \operatorname{sen} \varphi \operatorname{sen} \varphi' R_k(r) Y_k(\beta) R_j(r') Y_j(\beta') r^2 dr d\beta r'^2 dr' d\beta' \quad (F.44)$$

Para obtener las integrales sobre r y r' , se utiliza la relación (F.19); mientras que para las integrales sobre ξ y ξ' , se escriben las funciones trigonométricas, en función de armónicos esféricos, utilizando para ello las relaciones (F.24), (F.27) y (F.26). Después se utiliza (F.25).

De las integrales sobre ξ en C , se tiene

$$\int Y_{j, l}^*(\xi) \sqrt{\frac{2\pi}{3}} Y_{l, (-1)}(\xi) Y_{l, m}(\xi) d\xi - \int Y_{j, l}^*(\xi) Y_{l, m}(\xi) \sqrt{\frac{2\pi}{3}} d\xi = \\ = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \sqrt{\frac{3(2l+1)}{4\pi(2l+1)}} \left[C(l, l, l; (-1) m_l m_j) - C(l, l, l; 1 m_l m_j) \right] C(l, l, l; 000) \quad (F.45)$$

De las integrales sobre ξ' en C , se tiene

$$\int Y_{l, l}^*(\xi') \sqrt{\frac{2\pi}{3}} Y_{l, (-1)}(\xi') Y_{l, m}(\xi') d\xi' - \int Y_{l, l}^*(\xi') \sqrt{\frac{2\pi}{3}} Y_{l, m}(\xi') Y_{l, m}(\xi') d\xi' = \\ = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \sqrt{\frac{3(2l+1)}{4\pi(2l+1)}} \left[C(l, l, l; (-1) m_l m_l) - C(l, l, l; m_l m_l) \right] C(l, l, l; 000) \quad (F.46)$$

Así, se tiene finalmente

$$C_1 = \left(\frac{4}{\pi \omega} \right)^4 \sum_{l, m} B(n_1, l, m, l, n, p) B(n_2, l, m, n_2, l, q) \frac{\Gamma(p+2)}{\Gamma(p+\frac{3}{2})} \frac{\Gamma(q+2)}{\Gamma(q+\frac{3}{2})} \cdot \\ \cdot \sqrt{\frac{(2l_n+1)(2l_j+1)}{2(2l_f+1)(2l_n+1)}} \left[C(l, l, l; (-1) m_l m_j) - C(l, l, l; 1 m_l m_j) \right] C(l, l, l; 000) \quad (F.47) \\ \cdot \left[C(l, l, l; (-1) m_j m_l) - C(l, l, l; 1 m_j m_l) \right] C(l, l, l; 000)$$

$$= \int R_j^*(r) r R_n(r) r^2 dr \int R_n(r') r' R_j(r') dr' r'^2 \cdot \\ \cdot \int Y_j^*(\xi) \text{Sen} \theta \text{Sen} \varphi Y_n(\xi) d\xi \int Y_n^*(\xi') \text{Sen} \theta' \text{Sen} \varphi' Y_j(\xi') d\xi'$$

$$\text{con: } \int Y_j^*(\xi) \text{Sen} \theta \text{Sen} \varphi Y_n(\xi) d\xi = \int Y_j^*(\xi) i \sqrt{\frac{2n}{\xi}} Y_n(\xi) Y_n(\xi) d\xi + i \sqrt{\frac{2n'}{\xi'}} \int Y_j^*(\xi') Y_n(\xi') Y_n(\xi') d\xi' \quad (\text{F.49})$$

$$\int Y_j^*(\xi) \text{Sen} \theta \text{Sen} \varphi Y_n(\xi) d\xi = i \sqrt{\frac{2l_n+1}{2(2j+1)}} [C(l_n, l_j; \pm m_n, m_j) + C(l_n, l_j; (-1)m_n, m_j)] \cdot \\ \cdot C(l_n, l_j; 000) \quad (\text{F.49})$$

$$\int Y_n^*(\xi') \text{Sen} \theta' \text{Sen} \varphi' Y_j(\xi') d\xi' = i \sqrt{\frac{2l_j+1}{2(2l_n+1)}} [C(l_j, l_n; \pm m_j, m_n) + C(l_j, l_n; (-1)m_j, m_n)] \cdot \\ \cdot C(l_j, l_n; 000) \quad (\text{F.50})$$

Finalmente, se tiene para C_2 ,

$$C_2 = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^4 \sum_{p, q} B(n, l_j, m_n, l_n, p) B(n, l_n, m_j, l_j, q) \frac{\Gamma(p+2)}{\Gamma(p+\frac{3}{2})} \frac{\Gamma(q+2)}{\Gamma(q+\frac{3}{2})} \cdot \frac{1}{2} \cdot \\ \cdot [C(l_n, l_j; \pm m_n, m_j) + C(l_n, l_j; (-1)m_n, m_j)] C(l_n, l_n; 000) \cdot \\ \cdot [C(l_j, l_n; \pm m_j, m_n) + C(l_j, l_n; (-1)m_j, m_n)] C(l_j, l_n; 000) \quad (\text{F.51})$$

Para C_3 , se tiene

$$C_3 = \int R_j^*(r) r R_n(r) r^2 dr \int R_n(r') r' R_j(r') r'^2 dr' \int Y_j^*(\xi) \text{Cos} \theta Y_n(\xi) d\xi \int Y_n^*(\xi') \text{Cos} \theta' Y_j(\xi') d\xi'$$

de aquí

$$\int_0^1 Y_j^*(x) \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}^*(x) Y_k^*(x) dx = \sqrt{\frac{2l_k+1}{2l_j+1}} C(1l_k l_j; 0 m_k m_j) C(11 l_k; 000) \quad (F.52)$$

$$\int_0^1 Y_k^*(x') \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}^*(x') Y_j^*(x') dx' = \sqrt{\frac{2l_j+1}{2l_k+1}} C(1l_j l_k; 0 m_j m_k) C(11 l_k; 000) \quad (F.53)$$

por lo tanto

$$C_2 = \left(\frac{4}{m\omega}\right)^4 \sum_{l, m} B(n, l; n_k l_k, P) B(n_k l_k, n_j l_j, q) \frac{\Gamma(P+2)}{\Gamma(P+\frac{3}{2})} \frac{\Gamma(q+2)}{\Gamma(q+\frac{3}{2})} \cdot \quad (F.54)$$

$$\cdot C(1 l_k l_j; 0 m_k m_j) C(1 l_k l_j; 000) C(1 l_j l_k; 0 m_j m_k) C(1 l_j l_k; 000)$$

Sustituyendo (F.52), (F.51) y (F.47) en (F.41), se tiene C y por lo tanto, sustituyendo (F.41), (F.40) y (F.39) en (F.34), se tiene el valor de las integrales de intercambio.

BIBLIOGRAFIA

1. Abrikosov, A.A., L. P. Gorkov y I. E. Dzyaloshinski, "Methods of quantum field theory in statistical physics", Dover publications, Inc., New York, 1963.
2. Arfken, G., "Mathematical methods for physicists", Academic Press International Edition, 1970.
3. Asplund, E. y Lutz Bungart, "A first course in integration", Holt, Rinehart and Winston, 1966.
4. Baym, G., "Lectures on quantum mechanics", W. A. Benjamin, Inc., 1974.
5. Blinder, S. M., "Basic concepts of self-consistent-field theory" Am. J. Phys., 33, 431 (1965).
6. Blokhintsev, D. I., "Quantum mechanics", Allyn and Bacon, Boston, 1964.
7. Bonchbruevich, V. L. y S. V. Tuablikov, "The Green function method in statistical mechanics", North Holland Amsterdam, 1962.
8. Brody, T. A. y M. Moshinsky, "Tablas de paréntesis de transformación: para calculos en el modelo de capas nucleares", Monografías del instituto de física, México, 1960.
9. Davidov, A. S., "Quantum mechanics", Pergamon Press Addison-Wesley, 1968.
10. Fetter, A. L. y J. D. Walecka, "Quantum theory of many particles systems", McGraw-Hill book company, 1971.

11. Galitski, V. M. y A. B. Migdal, "Application of quantum field theory methods to many-body", Sov. Phys. JETP, 7, 96 (1958).
12. Goscinski, O. y B. Lukman, "Moment-conserving decoupling of Green functions via Pade aproximants", Chem. Phys. Letters, 7, 573 (1970).
13. Jørgensen, P., "Molecular and Atomic applications of time-dependent Hartree-Fock theory", Annual Review of Phys. Chem., 26, 359 (1975).
14. Kittel, C., "Quantum theory of solids", John Wiley & Sons, Inc., Inc., New York, London, Sudney, 1963.
15. Landau, L. D., "The properties of the Green's function for particles in statistics", Sov. Phys. JETP, 7, 182 (1958).
16. Mann, A. y R. Gross, "Linearized version of the Hartree-Fock method", Phys. Rev. C, 3, 945 (1971).
17. Moiseiwitsch, B. L., "Variational principles", Interscience Publishers, John Wiley and Sons, 1966.
18. Moshinsky, M., "The Harmonic oscillator in modern physics: from Atoms to Quars, Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1969.
19. Parry, W. E., "The many body problem", Clarendon Press Oxford, 1973.
20. Pines, D., "The many-body problem", W. A. Benjamin, Inc., 1973.
21. Rose, M. E., "Elementary theory of Angular Momentum", John Wiley and Sons, Inc., 1957.
22. Roth, L. M., "New method for linearizing many-body equations of motion in statistical mechanics", Phys. Rev. Letters, 20, 1431. (1968).

23. Sommerfeld, A., "Partial Differential equations in Physics", Lectures on theoretical physics, vol. VI, Academic Press, Inc., 1949.
24. Suhl, H. y N. R. Werthamer, "Higher Random-Phase Aproximations in the many-body problem", Phys. Rev. 122, 359 (1961).
25. Tahir-Kehli, R.A. y H. S. Jarret, Phys. Rev. 180, 544 (1961).
26. Thouless, D. J., "The quantum mechanics of many-body systems", Second edition, Academic Press, New York, 1972.
27. Wyld, H. W., "Mathematical methods for physics", W.A. Benjamin, Inc., 1976.
28. Young, R. A., Phys. Rev. 184, 601 (1961).
29. Ziman, J. M., "Elements of advanced quantum mechanics", Cambridge University Press, 1969.
- Zubarev, D. N., "Double-time Green functions in statistical physics", Usp. Fiz. Nauk., 71, 71-1116 (1960); traducido al inglés en, Sov. Phys. Uspekhi, 3, 320 (1960).