

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Facoltà di Scienze e Tecnologie Laurea Triennale in Fisica

Il Formalismo di Keldysh

Relatore: Prof. Luca Guido MOLINARI

Elaborato finale di: **Daniele BIFFI** Matricola n° 755999 A.A. 2013/2014

Codice PACS: 03.65.-w

Il Formalismo di Keldysh

Daniele Biffi Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano, Via Celoria 16, 20133 Milano, Italia

 $21 \ {\rm Ottobre} \ 2014$

Sommario

Il Formalismo di Keldysh è un potente strumento teorico, sviluppato a partire dagli anni'60, che permette la trattazione di problemi legati al calcolo di correlatori e valori di aspettazione relativi ad un sistema in condizioni differenti da quelle canoniche dell'equilibrio termodinamico. In questo lavoro di tesi vogliamo introdurre opportunamente questa tecnica e presentare un esempio classico della sua applicazione quale quello del calcolo della corrente nel trasporto in una struttura mesoscopica.

Relatore: Prof. Luca Guido Molinari

Indice

In	Introduzione 5				
1	Evo	oluzione temporale	6		
	1.1	Evoluzione temporale in rappresentazione di			
		Schrödinger	7		
	1.2	Espressione esplicita dell'operatore di evoluzione temporale \ldots .	8		
	1.3	Rappresentazione di Schrödinger	11		
	1.4	Rappresentazione di Heisenberg	12		
	1.5	Rappresentazione di interazione	13		
	1.6	Operatore di evoluzione temporale in rappresentazione di interazione	14		
2	Inti	roduzione del contorno di Keldysh	17		
	2.1	Presentazione del problema di non equilibrio	17		
	2.2	Evoluzione rispetto ad H	19		
	2.3	Introduzione del formalismo del contorno	21		
	2.4	Evoluzione rispetto ad H_0	24		
	2.5	Estensione del contorno all'infinito	26		
	2.6	Operatore densità rispetto ad H_0	27		
3	Val	ori di aspettazione	29		
	3.1	Valore di aspettazione di una osservabile	29		
	3.2	Valore di aspettazione di più osservabili	33		
		3.2.1 Correlatore a due osservabili reale	33		
		3.2.2 Correlatore a due osservabili definito sul contorno	35		
		3.2.3 Calcolo di $C(\tau_1, \tau_{1'})$ per un sistema in condizioni di non equilibrio	35		
		3.2.4 Teorema di Wick e teoria perturbativa	38		
4	\mathbf{Rel}	azione con le funzioni reali	40		
	4.1	Rappresentazione matriciale	41		
	4.2	Teorema di Langreth	42		
	4.3	Equazione di Keldysh	47		

INDICE					
	4.4	Relazioni con le funzioni di Green	48		
		4.4.1 Informazioni contenute nelle funzioni di Green	50		
5	Trasporto Mesoscopico				
	5.1	Modello Teorico	54		
	5.2	Hamiltoniana del problema	55		
	5.3	Corrente	56		
	5.4	Funzione di Green sul contorno	57		
	5.5	Funzione di Green reale	60		
	5.6	Calcolo della corrente	61		
	5.7	Self-energia di tunneling	63		
	5.8	Corrente nel caso completamente non-interagente	64		
	5.9	Accoppiamenti proporzionali	65		
\mathbf{A}	A Teorema di Wick		67		
	A.1	Corollari del Teorema	67		
	A.2	Teorema di Wick-Matsubara	70		
Conclusioni					
	Rife	rimenti bibliografici	75		

Introduzione

L'interesse del seguente lavoro di tesi è quello di presentare sinteticamente il formalismo di Keldysh, un procedimento teorico che permette di affrontare in maniera conveniente lo studio di un sistema in condizioni lontane dall'equilibrio termodinamico usualmente considerato nelle analoghe trattazioni standard di Feynman-Dyson e di Matsubara [1]. Chiave di volta nella costruzione di questo metodo è l'utilizzo della conveniente rappresentazione di interazione e della sua implementazione all'interno del formalismo del cammino che sostituisce l'usuale retta temporale. In questo modo infatti la trattazione di correlatori tra osservabili a tempi diversi, obiettivo finale a cui siamo interessati, risulta opportunamente semplificata.

Per questo la prima parte del progetto è destinata ad una breve presentazione dell'evoluzione temporale degli stati e delle osservabili all'interno della formulazione classica della Meccanica Quantistica [10, 12], in modo da introdurre importanti elementi che, soprattutto nei primi capitoli, saranno ripresi ed utilizzati insistentemente.

Una volta impostato teoricamente nei termini presentati il problema del non equilibrio, l'innovazione nei lavori originari di Keldysh[5] e Schwinger[11], che per primi approfondirono queste tematiche nello studio delle funzioni di Green fuori equilibrio, sta nell'introduzione naturale al posto della retta temporale di un contorno che in parte ritorni su se stesso. A questo aspetto e alla sua descrizione approfondita è dedicato interamente il secondo capitolo.

Fatte salve queste premesse introduttive, i capitoli centrali mostreranno i risultati a cui si arriva nella ricerca di un'espressione calcolabile per i valori di aspettazione di una o più osservabili a tempi diversi, che sono d'altronde le prime richieste elementari che vengono mosse generalmente nello studio di un sistema e delle sue proprietà. All'interno di questo discorso, ci soffermeremo in particolare sui motivi che ci spingono alla costruzione delle analoghe quantità ambientate sul contorno introdotto in precedenza, sulla conveniente teoria perturbativa di cui queste godono e, infine, sulle relazioni che ci permettono di tradurre i risultati trovati in quelli indagati inizialmente per le funzioni reali[2, 8]. L'insieme di questi passaggi costituisce, in definitiva, il formalismo di Keldysh nella forma scelta in questa presentazione.

Concludendo, il capitolo finale è dedicato all'esposizione di un'applicazione classica di quanto presentato in precedenza: il calcolo della corrente circolante all'interno di una struttura mesoscopica[3, 4, 9].

Capitolo 1

Evoluzione temporale

Introduciamo il problema fondamentale dell'evoluzione di uno stato fisico e della determinazione delle sue proprietà nel formalismo della Meccanica Quantistica.

Il problema della dinamica si traduce nell'equazione di Schrödinger che la funzione d'onda, o in maniera equivalente l'operatore di evoluzione temporale, deve soddisfare rispetto a particolari condizioni al contorno. La soluzione di questo problema matematico risponde quindi completamente alle richieste iniziali che ci siamo posti. Questo primo approccio, introdotto in questi termini in maniera intuitiva ed elementare, non è tuttavia unico poichè, tramite particolari trasformazioni unitarie, è possibile scrivere lo stesso problema rispetto a differenti rappresentazioni, tutte equivalenti tra loro nei risultati, ma intrinsecamente distinte per le proprietà e le caratteristiche che le definiscono e che esse mettono in luce l'una rispetto all'altra. La prima formulazione del problema che abbiamo dato, secondo la quale l'evoluzione temporale interessa i soli stati fisici, coincide con la cosiddetta rappresentazione di Schrödinger, cui seguono quella di Heisenberg, che tratta in questi termini le sole osservabili, e infine quella di interazione, mista tra le due e particolarmente efficace per affrontare problemi riguardanti sistemi caratterizzati da una perturbazione dipendente dal tempo. Proprio questa è la descrizione di cui faremo uso successivamente per trattare le condizioni di non equilibrio del sistema.

Nel seguente capitolo vengono presentate brevemente queste rappresentazioni, sottolineandone le proprietà e le caratterstiche principali di cui faremo uso frequentemente. Nel confronto tra queste rappresentazioni, particolarmente significativo è il legame tra la forma di un operatore nel disegno di Heisenberg rispetto all'Hamiltoniana totale di un sistema perturbato e l'analoga espressione secondo la rappresentazione di interazione: tale studio infatti, su cui ci concentreremo nel capitolo successivo, permette di introdurre naturalmente il formalismo del contorno, rispetto al quale svilupperemo successivamente la teoria di Keldysh.

1.1 Evoluzione temporale in rappresentazione di Schrödinger

Uno dei problemi più ricorrenti in Fisica è la determinazione delle proprietà e della dinamica di un sistema fisico sotto esame. Generalmente quest'ultimo è definito a partire dalla sua Hamiltoniana H(t) che, corredata da un necessario set di condizioni al contorno da soddisfare, permette di identificare l'unica soluzione dell'equazione di Schrödinger corrispondente:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H(t)\psi(x,t)$$
 (1.1)

dove $\psi(x,t)$ è la funzione d'onda contenente tutte le informazioni rilevanti del sistema considerato. La risoluzione del problema di Cauchy così introdotto risponde completamente al problema della descrizione dello stato fisico e della sua evoluzione temporale.

Nella breve descrizione data abbiamo supposto che il tempo entri come un parametro elementare nella descrizione dello stato, così come in quella della funzione d'onda; in questa rappresentazione, detta di Schrödinger, il punto di partenza è quindi l'assunzione che siano gli stati a dipendere esplicitamente dal tempo, evolvendo rispetto alla particolare dinamica dettata dall'Hamiltoniana in altri stati a tempi differenti. Gli operatori, al contrario, sono trattati in maniera indipendente dal tempo e non evolvono. Questo processo che interessa gli stati viene implementato in maniera opportuna dall'operatore di evoluzione temporale $U(t, t_0)$, la cui definizione discende in maniera naturale dall'osservazione appena fatta:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle. \tag{1.2}$$

Sostituendo questa espressione nell'equazione di Schrödinger precedentemente introdotta, scritta relativamente agli stati, e tenendo conto dell'arbitrarietà del ket $|\psi(t_0)\rangle$, otteniamo immediatamente un'analoga equazione differenziale per l'operatore $U(t, t_0)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0)$$
(1.3)

che, combinata con la corrispondente condizione di bordo, anch'essa evidente dalla definizione dell'operatore

$$U(t_0, t_0) = 1, (1.4)$$

costituisce il problema di Cauchy relativo a $U(t, t_0)$. Se risolto, ne identifica completamente la forma e l'espressione, esattamente nello stesso modo in cui poco prima abbiamo evidenziato quelle relative alla funzione d'onda.

È importante sottolineare come i due risultati trovati, per $\psi(x,t)$ prima e $U(t,t_0)$ poi, siano completamente equivalenti tra loro in quanto discendenti ambedue dalla comune scelta di aver considerato gli stati soltanto dipendenti dal tempo e quindi soggetti all'evoluzione corrispondente. Invertendo gli elementi di partenza rispetto al primo caso, dove abbiamo ricavato il secondo risultato a partire dal primo, l'equazione di Schrödinger per $U(t, t_0)$ è ottenibile semplicemente come conseguenza delle proprietà dell'operatore e, una volta ricavata e aver applicato da ambo le parti il ket $|\psi(t_0)\rangle$, possiamo ricavare dalla definizione dell'opertatore quella relativa agli stati e di conseguenza alla funzione d'onda del sistema.

In conclusione dunque, la strada per risolvere il problema iniziale della dinamica di uno stato è doppia: risolvere l'equazione del moto relativa al ket o alla funzione d'onda, oppure ricavare l'espressione analitica dell'operatore di evoluzione temporale e, applicandolo sullo stato di partenza considerato, giungere al medesimo risultato.

1.2 Espressione esplicita dell'operatore di evoluzione temporale

Vogliamo a questo punto ricavare un'espressione analitica esplicita per l'operatore $U(t, t_0)$. Dall'equazione differenziale che soddisfa risulta immediato comprendere come il risultato sia fortemente dipendente dalla forma dell'Hamiltoniana H(t) generica del sistema.

Considerando il caso più semplice di un sistema fisico descritto da una Hamiltoniana indipendente dal tempo, la risoluzione dell'equazione di Schrödinger corrispondente, tenendo conto della condizione di bordo, è banale e porta al risultato:

$$U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right).$$
(1.5)

È il caso, per esempio, relativo ad una Hamiltoniana di interazione tra il momento magnetico di una particella e un campo assolutamente costante in ogni sua caratteristica.

A un risultato simile possiamo arrivare anche nell'ipotesi della dipendenza temporale dell'Hamiltoniana, alleggerita tuttavia dalla proprietà di commutare per tempi diversi, cosicchè ricaviamo:

$$U(t,t_{0}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_{0}}^{t}dt'H(t')\right).$$
(1.6)

Considerando l'esempio precedente, stiamo ora ipotizzando il campo variabile in intensità, ma non in direzione.

Più complicato è il caso in cui l'Hamiltoniana sia privata della proprietà precedente: per analogia con i casi pratici citati, l'interazione considerata sarebbe ora quella tra un momento magnetico e un campo esterno variabile sia per intensità che per direzione. In questo caso è conveniente costruire la corrispondente equazione integrale a partire dal problema di Cauchy:

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U(t',t_0)$$
(1.7)

e procedere iterativamente ad un'espressione analitica di $U(t, t_0)$ tramite sostituzione del termine corrispondente all'operatore presente come argomento dell'integrale.

CAPITOLO 1. EVOLUZIONE TEMPORALE

Nel caso di una prima sostituzione, esplicitamente:

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H(t') H(t'') U(t'',t_0), \quad (1.8)$$

espressione che possiamo generalizzare per infinite iterazioni, esprimendo il risultato in maniera compatta come una serie ed evidenziando la forma caratteristica assunta dal k-esimo addendo:

$$U(t,t_0) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k H(t_1) H(t_2) \dots H(t_k),$$
(1.9)

scrittura detta *serie di Dyson*, dal lavoro di F. J. Dyson che ottenne per primo questo sviluppo perturbativo nello studio della teoria quantistica dei campi.

Per i nostri scopi è necessario procedere ulteriormente nel calcolo e per farlo consideriamo gli estremi di integrazione dei termini interni della serie: nel k-esimo addendo infatti, l'n-esimo indice temporale integrale, con n libero di variare da 1 a k, è compreso tra il tempo di riferimento t_0 ed il valore raggiunto dell'(n-1)-esimo, o, nel caso del primissimo di questi, il secondo tempo di riferimento t. Quello che vorremmo è di uniformare questo intervello, rendendolo indipendente dalle variabili arbitrarie degli integrali tramite un'opportuna riparametrizzazione della regione interessata. Valutiamo ciò, per comodità di calcolo, nel caso più semplice del solo terzo addendo della serie, contenente due soli indici:

$$U^{(2)}(t,t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2).$$
(1.10)

Spezziamo dapprima il termine a metà e lavoriamo su una delle due parti invertendo la dipendenza temporale degli indici t_1 e t_2 come espresso in Fig. 1.1:



Figura 1.1: Rappresentazione grafica nel piano (t_1, t_2) della riparametrizzazione della regione definita dalla combinazione degli integrali.

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \equiv \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1.$$
(1.11)

CAPITOLO 1. EVOLUZIONE TEMPORALE

Tenendo conto dell'arbitrarietà nella scelta degli indici integrali e della conseguente libertà nell'invertire tra loro i nomi delle variabili, ricaviamo uno sviluppo dell'addendo come

$$U^{(2)}(t,t_0) = \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \left[\int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) + \int_{t_1}^t dt_2 H(t_2) H(t_1) \right].$$
(1.12)

A questo punto, introducendo opportune funzioni θ temporali che cancellino i termini aggiunti per il conseguente ampliamento, possiamo estendere l'integrale in t_2 tra t_0 e t:

$$U^{(2)}(t,t_0) = \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \left[\theta(t_1 - t_2)H(t_1)H(t_2) + \theta(t_2 - t_1)H(t_2)H(t_1)\right].$$
(1.13)

Osserviamo due cose: i termini raccolti tra parentesi sono tra loro autoescludenti per la forma che le funzioni θ ammettono ed inoltre, a seconda del termine che sopravvive tra questi, gli operatori Hamiltoniani, differenti tra loro per l'indice di dipendenza temporale, sono comunque ordinati in maniera tale che quello con indice maggiore preceda sempre quello con indice minore.

Una struttura così particolare di una sequenza di operatori rispetto alla propria dipendenza temporale è esattamente quella ottenuta dall'applicazione dell'*operatore di* T-ordinamento su una stringa di questi:

$$T(O_{1}(t_{1})\dots O_{k}(t_{k})) = (\pm)^{P} (O_{P(1)}(t_{P(1)})\dots O_{P(k)}(t_{P(k)}))$$

con *P* permutazione per cui $t_{P(1)} > \dots > t_{P(k)},$ (1.14)

che ammette la notevole proprietà di trattare gli argomenti al suo interno come quantità commutanti a meno di un segno dovuto alla statistica degli operatori trattati e alla permutazione applicata. Generalmente il fattore di segno, determinante solo nel caso fermionico, viene ignorato ipotizzando di avere a che fare con un numero pari di operatori, cosicchè la parità di una permutazione generica elida esattamente il segno.

In questa situazione l'operatore appena descritto può quindi essere introdotto naturalmente, agendo come l'identità sull'espressione ricavata per l'addendo precedente, che assume la forma elegante e compatta:

$$U^{(2)}(t,t_0) = \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 T \left(H(t_1) H(t_2) \right).$$
(1.15)

Generalizzando questa espressione per i restanti termini della serie di Dyson, otteniamo per l'operatore di evoluzione temporale un'espressione generale del tipo:

$$U(t,t_0) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_k T\left(H(t_1)\dots H(t_k)\right)$$
(1.16)

formalmente analoga allo sviluppo di un esponenziale e pertanto significativamente indicata anche come:

$$U(t,t_0) = T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')\right)$$
(1.17)

che rappresenta il risultato finale della scrittura esplicita dell'operatore in queste condizioni.

A questa famiglia di casistiche che abbiamo valutato a seconda della forma dell'Hamiltoniana del sistema, bisogna aggiungerne un'altra del tutto indipendente e relativa al solo confronto tra gli argomenti dell'operatore: i tempi $t e t_0$. Dalla definizione intuitiva dell'evoluzione temporale siamo portati a considerare $t > t_0$ quale ipotesi lasciata sottointesa nei risultati trovati sino ad ora, tuttavia quest'ultima non è a priori l'unica ammessa. Volendo ora valutare il caso inverso per cui $t < t_0$, le relazioni (1.5), (1.6) e (1.17) suggeriscono la forma dell'operatore in questo caso complementare. Tenendo conto infatti, a meno della rinominazione delle variabili, dell'equivalenza tra le scritture $U(t, t_0)$ con $t < t_0$ e $U(t_0, t)$ con $t > t_0$, e della proprietà del prodotto tra operatori concatenati per cui:

$$U(t,t') U(t',t'') = U(t,t''), \qquad (1.18)$$

si ricava immediatamente:

$$U(t,t_0) U(t_0,t) = U(t,t_0) U^{\dagger}(t,t_0) = \mathbb{1}.$$
(1.19)

Invertendo l'ultima relazione si giunge immediatamente ai risultati¹

$$U(t, t_0) = \exp\left(+\frac{i}{\hbar}H(t_0 - t)\right) \qquad \text{con } t < t_0 \tag{1.20}$$

e analogamente

$$U(t,t_{0}) = \exp\left(+\frac{i}{\hbar}\int_{t}^{t_{0}}H(t^{'})\,dt^{'}\right)$$
(1.21)

$$U(t,t_0) = \bar{T} \exp\left(\left(+\frac{i}{\hbar}\right) \int_t^{t_0} dt' H(t')\right)$$
(1.22)

dove nell'ultima espressione con \overline{T} -exp indichiamo lo stesso significato simbolico assegnato a T-exp, a meno della sostituzione dell'operatore T con quello di \overline{T} -ordinamento, definito in modo tale da agire al contrario del primo. Questo ordina infatti una serie di operatori in modo tale che ognuno di essi sia sempre a sinistra di un altro relativo a un tempo maggiore e a destra di uno ad un tempo minore:

$$\bar{T}(O_1(t_1) \dots O_k(t_k)) = (\pm)^P (O_{P(1)}(t_{P(1)}) \dots O_{P(k)}(t_{P(k)}))$$

con *P* permutazione per cui $t_{P(1)} < \dots < t_{P(k)}.$ (1.23)

1.3 Rappresentazione di Schrödinger

La rappresentazione di Schrödinger coincide come già osservato con la trattazione svolta sinora del problema dell'evoluzione temporale di un sistema: la dipendenza temporale è associata unicamente agli stati, che soddisfano l'equazione del moto di Schrödinger

¹dall'unitarietà dell'operatore di evoluzione temporale, le tre espressioni ricavate coincidono anche con quelle dei corrispondenti operatori aggiunti $U^{\dagger}(t, t_0)$, con $t > t_0$, nei rispettivi casi, rinominando opportunamente le variabili.

mostrata in precedenza, mentre le osservabili sono indipendenti nel tempo. La determinazione dell'operatore di evoluzione temporale, che risponde in maniera equivalente al problema iniziale, procede nei casi calcolati in precedenza. 2

1.4 Rappresentazione di Heisenberg

Nella rappresentazione di Heisenberg i ruoli rispetto al precedente disegno di Schrödinger sono completamente invertiti: gli stati in questo modello sono indipendenti dal tempo e non evolvono, mentre la dipendenza temporale è scaricata sugli operatori, che soddisfano un'analoga equazione del moto detta *equazione di Heisenberg.*³

La costruzione e la definizione dei soggetti della rappresentazione discende naturalmente dalla richiesta fatta sulla dipendenza temporale degli stati. Considerandone inizialmente uno nella rappresentazione di Schroedinger, $|\Psi(t)\rangle_S$, evolvente rispetto ad una generica Hamiltoniana H indipendente dal tempo, definiamo il corrispondente ket secondo Heisenberg, $|\Psi(t)\rangle_H$, come

$$\begin{aligned} |\psi_H(t)\rangle &= U(0,t) |\psi_S(t)\rangle \\ &= U^{\dagger}(t,0) |\psi_S(t)\rangle , \end{aligned}$$
(1.24)

dove con t = 0 indichiamo il tempo di riferimento rispetto al quale le rappresentazioni coincidono. Calcolandone l'evoluzione temporale attraverso il calcolo della propria derivata rispetto al tempo t, tenendo conto dell'equazione di Schrödinger soddisfatta sia dall'operatore di evoluzione temporale che dallo stato nella stessa rappresentazione, si ottiene come risultato zero, ossia proprio l'indipendenza temporale del ket ricercata come ipotesi.

Il punto di contatto tra il modello teorico che stiamo seguendo e la realtà sperimentale è dato dalla misura di un'osservabile su uno stato ad un tempo t, quantità che quantisticamente è espressa dal seguente prodotto interno

$$\langle O \rangle_{\psi,t} = \langle \psi | \, O \, | \psi \rangle_t \tag{1.25}$$

dove stato e osservabile devono essere specificati simultaneamente rispetto alla stessa rappresentazione. La libertà nella scelta dell'interpretazione della dinamica è garantita dall'invarianza del prodotto interno rispetto a trasformazioni unitarie, che a loro volta permettono di passare da una rappresentazione all'altra. Scritta nell'interpretazione di Schrödinger, l'espressione precedente assume la forma

$$\langle O \rangle_{\psi,t} = \langle \psi_S(t) | O | \psi_S(t) \rangle_t, \qquad (1.26)$$

mentre sostituendo i ket con quelli definiti nel disegno di Heisenberg otteniamo l'identificazione immediata di come trasformare l'operatore di Schrödinger in quello di

²per distinguere da qui in seguito le quantità espresse in questo disegno, utilizzo il pedice S.

³da ora in poi per distinguere le quantità scritte in questo modello utilizzo il pedice H per gli stati, mentre per le osservabili il solo pedice corrispondente all'Hamiltoniana che ne governa la dinamica in questa rappresentazione, al fine di non appesantire eccessivamente la notazione.

Heisenberg, al fine di ricavare un'espressione analoga per il valore di aspettazione nell'interpretazione di Heisenberg come:

$$\langle O \rangle_{\psi,t} = \langle \psi_H | O_H(t) | \psi_H \rangle_t.$$
(1.27)

La definizione dell'operatore $O_H(t)$ è di conseguenza:

$$O_H(t) = U(0, t) O U(t, 0)$$

= U[†](t, 0) O U(t, 0). (1.28)

Calcolandone, come fatto in precedenza per lo stato, la derivata temporale e tenendo conto delle relazioni valide per la rappresentazione di Schroedinger, otteniamo la legge del moto relativa alle osservabili in questo modello:

$$i\hbar \frac{d}{dt} O_H(t) = \left[O_H(t), H \right] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_H(t)$$

= $U(0, t) \left[O, H \right] U(t, 0) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_H(t)$ (1.29)

detta *equazione di Heisenberg* per l'operatore, dove l'ultimo termine tiene conto dell'eventuale derivata temporale dell'osservabile qualora essa ammetta a priori una qualche dipendenza temporale esplicita nella sua definizione.

1.5 Rappresentazione di interazione

La rappresentazione di interazione è un'interpretazione molto conveniente per affrontare il problema della dinamica di uno stato fisico quando l'Hamiltoniana globale può essere fattorizzata in due termini: una parte imperturbata H_0 indipendente dal tempo ed una perturbazione V(t) al contrario dipendente. La trattazione in questo disegno prevede di considerare sia gli stati che le osservabili dipendenti dal tempo, rispettivamente "alla Schrödinger" rispetto alla perturbazione e "alla Heisenberg" rispetto al termine imperturbato, in modo che le corrispondenti equazioni del moto assumano un aspetto del tutto analogo a quelle viste nei due casi precedenti. ⁴

Definiamo lo stato in rappresentazione di interazione in maniera simile a quanto fatto nel disegno di Heisenberg, in questo caso però rispetto all'operatore di evoluzione temporale relativo alla sola Hamiltoniana H_0 indipendente dal tempo, particolare sottolineato dal pedice aggiuntivo utilizzato:

$$|\psi_I(t)\rangle = U_{H_0}^{\dagger}(t,0) |\psi_S(t)\rangle = \exp\left(+\frac{i}{\hbar}H_0t\right) |\psi_S(t)\rangle$$
(1.30)

dove ancora definiamo con t = 0 il tempo di riferimento per l'equivalenza delle rappresentazioni.

⁴da qui in avanti per distinguere le quantità espresse in questo modello utilizzo il pedice I per gli stati, mentre per le osservabili il pedice relativo all'Hamiltoniana che ne determina la dinamica.

L'espressione trovata suggerisce, dal confronto con il valore di aspettazione di una osservabile su uno stato al tempo t, la definizione analoga dell'operatore in questo disegno come:

$$O_{H_0}(t) = U_{H_0}^{\dagger}(t,0) O U_{H_0}(t,0) = \exp\left(+\frac{i}{\hbar}H_0t\right) O \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0t\right).$$
(1.31)

Come in precedenza, passiamo a calcolare le leggi della dinamica in questo caso, dopo aver identificato le espressioni di stati e osservabili nell'interpretazione corrente rispetto a quelle degli stessi nelle precedenti, dove conosciamo le corrispondenti equazioni del moto che esse soddisfano.

Valutando le derivate per entrambi i soggetti della rappresentazione considerata, attraverso la propria definizione e con conti del tutto identici ai casi già descritti nei paragrafi precedenti, in conclusione ricaviamo le equazioni del moto in rappresentazione di interazione come:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = V_{H_0}(t) |\psi_I(t)\rangle$$
(1.32)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}O_{H_0}(t) = \left[O_{H_0}(t), H_0\right]$$
(1.33)

che ammettono con evidenza un'espressione formale equivalente rispettivamente all'equazione di Schrödinger e di Heisenberg, introdotte in precedenza, a meno della definizione dei soggetti della rappresentazione rispetto alla sola H_0 e della sostituzione della perturbazione nella prima espressione, così come la parte imperturbata nella seconda, al posto dell'Hamiltoniana totale.

1.6 Operatore di evoluzione temporale in rappresentazione di interazione

Avendo introdotto nuovamente una dipendenza temporale negli stati in rappresentazione di interazione, così come risultava in quella di Schrödinger, risulta conveniente lavorare con il corrispondente operatore di evoluzione temporale che agisce ora in questa interpretazione in maniera naturale come:

$$|\psi_I(t)\rangle = U_I(t,t_0) |\psi_I(t_0)\rangle.$$
(1.34)

Tenendo conto della solita condizione temporale per cui t = 0 corrisponde al tempo di riferimento rispetto al quale tutte e tre le rappresentazioni coincidono, vogliamo esprimere una relazione che leghi l'operatore $U_I(t, t_0)$ allo stesso scritto nel disegno di Schrödinger $U(t, t_0)$ del quale conosciamo l'equazione differenziale che soddisfa. Dalla definizione operatoriale introdotta in precedenza, scritta rispetto al tempo di riferimento $t_0 = 0$, vale

$$|\psi_I(t)\rangle = U_I(t,0) |\psi_I(0)\rangle \tag{1.35}$$

CAPITOLO 1. EVOLUZIONE TEMPORALE

nella quale, attraverso la relazione che ha definito i primi in precedenza, possiamo sostituire i ket nel modello di Heisenberg con i corrispondenti stati nel disegno di Schrödinger

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0t\right)\left|\psi_S(t)\right\rangle = U_I(t,0)\left|\psi_S(0)\right\rangle.$$
(1.36)

Isolando ora lo stato al tempo t in rappresentazione di Schrödinger otteniamo un risultato che lega quest'ultimo con il corrispondente al tempo $t_0 = 0$:

$$|\psi_S(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0t\right)U_I(t,0)\left|\psi_S(0)\right\rangle,\tag{1.37}$$

da confrontare con l'analoga espressione valida tra gli stessi rispetto all'operatore di evoluzione temporale U(t,0) relativa all'Hamiltoniana totale del sistema. Ricaviamo pertanto la relazione tra U(t,0) e $U_I(t,0)$ come:

$$U_{H_{tot}}(t,0) = U_{H_0}(t,0)U_I(t,0), \qquad (1.38)$$

avendo specificato nei pedici le Hamiltoniane di riferimento per gli operatori nel disegno di Schrödinger. Dalla proprietà di moltiplicazione tra operatori concatenati dell'operatore di evoluzione temporale possiamo infine esprimere il risultato per un tempo di riferimento generico t':

$$U_{I}(t,t') = U_{H_{0}}^{\dagger}(t,0) U_{H_{tot}}(t,t') U_{H_{0}}(t',0).$$
(1.39)

Come accennato in precedenza, l'utilità di aver scritto l'operatore di evoluzione temporale in rappresentazione di interazione rispetto a quello nell'interpretazione di Schrödinger sta nel calcolo dell'equazione del moto del primo, che può così essere semplificato rispetto a quello del secondo termine già noto.

Valutando pertanto la derivata temporale di $U_I(t, t')$ e sostituendo a questa la relazione precedente, si può calcolare in pochi elementari passaggi l'equazione differenziale che l'operatore di evoluzione temporale in rappresentazione di interazione deve soddisfare:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t,t') = V_{H_0}(t) U_I(t,t'),$$
 (1.40)

che allo stesso modo dello stato, rappresenta un risultato del tutto analogo all'equazione di Schrödinger con la presenza tuttavia della perturbazione $\hat{V}_{I}(t)$ al posto della consueta Hamiltoniana totale.

L'equazione trovata, combinata con la condizione al contorno

$$U_I(t_0, t_0) = 1 \tag{1.41}$$

costituisce il problema di Cauchy relativo all'operatore di evoluzione temporale $U_I(t, t')$. Scrivendo il sistema nella forma della propria equazione integrale corrispondente:

$$U_{I}(t,t') = \mathbb{1} - \frac{1}{\hbar} \int_{t'}^{t} dt_{1} V_{H_{0}}(t_{1}) U_{I}(t_{1},t'), \qquad (1.42)$$

CAPITOLO 1. EVOLUZIONE TEMPORALE

la risoluzione esplicita si protrae in modo del tutto equivalente al calcolo svolto in precedenza per l'operatore U(t,t') nel caso di una Hamiltoniana dipendente dal tempo. Per analogia con questo ultimo risultato, possiamo pertanto scrivere l'espressione analitica dell'operatore di evoluzione temporale in rappresentazione di interazione come:

$$U_{I}(t,t') = T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t} dt_{1} V_{H_{0}}(t_{1})\right) \quad \text{con } t > t'$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{k} \frac{1}{k!} \int_{t'}^{t} dt_{1} \dots \int_{t'}^{t} dt_{k} T\left(V_{H_{0}}(t_{1}) \dots V_{H_{0}}(t_{k})\right)$$

$$U_{I}(t,t') = \bar{T} \exp\left(+\frac{i}{\hbar} \int_{t}^{t'} dt_{1} V_{H_{0}}(t_{1})\right) \quad \text{con } t < t'$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \left(+\frac{i}{\hbar}\right)^{k} \frac{1}{k!} \int_{t}^{t'} dt_{1} \dots \int_{t'}^{t'} dt_{k} T\left(V_{H_{0}}(t_{1}) \dots V_{H_{0}}(t_{k})\right)$$
(1.43)
$$(1.44)$$

dove l'ultima relazione coincide, per l'unitarietà dell'operatore, con la forma esplicita di $U_I^{\dagger}(t,t')$ con t > t', a meno dell'opportuna rinominazione delle variabili.

Capitolo 2

Introduzione del contorno di Keldysh

Il formalismo introdotto nel capitolo precedente per lo studio della dinamica di un sistema si applica per estensione anche al caso in cui questo sia costituito da molti corpi interagenti tra loro, riprendendo i calcoli precedenti rispetto alla corrispondente funzione d'onda $\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t)$ che descrive l'intero sistema. Allo stesso modo la trattazione può essere svolta in riferimento all'operatore densità ρ , contenente tutte le informazioni statistiche dello stesso

$$\rho = \sum_{n} p_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|, \qquad (2.1)$$

ed equivalente alla somma dei singoli proiettori sugli stati puri che lo compongono, pesato ciascuno rispetto alla probabilità di trovare il sistema nello stato corrispondente. La complicazione dell'Hamiltoniana totale in questo caso determina tuttavia l'impossibilità di una risoluzione esatta e analitica delle equazioni introdotte in precedenza e pertanto implica la necessità di utilizzare nuovi metodi approssimativi o perturbativi per giungere a qualche tipo di risultato.

L'obiettivo di questo capitolo è dunque quello di introdurre il problema nel caso del non equilibrio, presentandolo in una sua formulazione convenientemente trattabile e di mostrare come il concetto di contorno discenda naturalmente a partire dal formalismo precedente già nei primi passi di questa teoria, per un calcolo elementare quale quello del valore di aspettazione di un'osservabile sul sistema preso in esame.

2.1 Presentazione del problema di non equilibrio

Per presentare la trattazione di un problema in condizioni di non equilibrio, consideriamo dapprima un sistema governato da una Hamiltoniana totale H, indipendente dal tempo, che supponiamo fattorizzabile in due componenti: $H_0 \in H'$, rispettivamente una parte quadratica, non interagente e facilmente risolvibile con esattezza nei termini espressi nel capitolo precedente, e una invece complicata contenente l'interazione tra le particelle:

$$H = H_0 + H^i. (2.2)$$

Il sistema è considerato aperto rispetto all'universo in cui è immerso, libero pertanto di scambiare con esso energia e materia: dal punto di vista termodinamico perciò la trattazione sarà di tipo gran canonico, per un sistema a contatto con un bagno termico a temperatura T e un reservoir caratterizzato da un certo potenziale chimico μ . All'equilibrio termico, esso sarà descritto dall'operatore densità $\rho(H)$:

$$\rho(H) = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \qquad \text{con } \beta = \frac{1}{K_B T}$$
(2.3)

dove Tr rappresenta la traccia nello spazio degli stati di più particelle del sistema considerato. Abbiamo scelto la condizione arbitraria $\mu = 0$ per misurare le energie delle particelle, per non dover considerare esplicitamente anche il corrispondente operatore numero nella forma dell'operatore.

Fatte queste premesse possiamo ora presentare il problema delle condizioni di non equilibrio in questi termini: consideriamo il sistema all'equilibrio termico nelle condizioni precedentemente descritte sino al tempo di riferimento t_0 , quando esso viene scollegato dal reservoir ed esposto ad una perturbazione rappresentata dal termine H'(t), nullo precedentemente. L'Hamiltoniana complessiva del sistema fuori equilibrio assume dunque la forma:

$$H_{tot}(t) = H + H'(t)$$
 (2.4)

e il nostro fine sarà quindi quello di conseguire risultati e informazioni riguardanti il sistema fisico sotto queste condizioni.

Una delle prime richieste portate è solitamente il risultato della misurazione di un'osservabile fisica O sul sistema ad un tempo $t > t_0$. Avendo a che fare con una miscela di stati fisici, l'espressione del valore di aspettazione per uno stato puro in rappresentazione di Schrödinger

$$\langle O(t) \rangle = \langle \psi(t) | \, O \, | \psi(t) \rangle \tag{2.5}$$

viene generalizzata tenendo conto dell'operatore densità come

$$\langle O(t) \rangle = \operatorname{Tr}[\rho(t) O],$$
(2.6)

dove O coincide con la quantità fisica in questione nello stesso disegno di Schrödinger, mentre con $\rho(t)$ indichiamo l'evoluzione della descrizione dello stato del sistema a molti corpi rispetto all'Hamiltoniana totale H_{tot} a partire dalla forma nota all'equilibrio, $\rho(t_0) = \rho(H)$,

$$\rho(t) = U_{H_{tot}}(t, t_0) \,\rho(t_0) \,U_{H_{tot}}^{\dagger}(t, t_0) \tag{2.7}$$

tenendo conto ovviamente della rappresentazione di Schrödinger per l'evoluzione temporale degli stati che lo compongono, con il relativo operatore

$$U_{H_{tot}}(t,t_0) = T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H_{tot}(t_1)\right) \quad \text{con } t > t_0.$$
(2.8)

Il calcolo appena eseguito rispetto all'operatore densità è valido nella condizione in cui le propabilità p_n dei singoli stati che lo determinano si mantengano inalterate durante l'evoluzione temporale o, detto in altri termini, se l'evoluzione di questi ultimi proceda come quella di sistemi isolati tra loro. Secondo questa trattazione infatti l'interazione con l'universo circostante è tenuta in considerazione per stabilire le condizioni iniziali al tempo t_0 , ma è poi trascurata da lì in avanti, come se il sistema globale fosse staccato dal resto dell'universo e lasciato evolvere indipendentemente. Se venisse iniettata energia nel sistema, come accade tramite l'accensione di una perturbazione, non ci sarebbe modo secondo questa trattazione per il sistema di dissiparla con l'esterno. Dal punto di vista fisico ovviamente questa è una restrizione molto forte, tuttavia una descrizione rigorosa e corretta dell'interazione con l'ambiente in cui il sistema è immerso richiederebbe una trattazione stocastica del problema più complessa che esula dal presente lavoro di tesi.

Tornando al problema iniziale del calcolo del valore di aspettazione di una osservabile, passiamo ora dalla formula precedente a quella equivalente nella rappresentazione di Heisenberg, scaricando, grazie alla proprietà ciclica della traccia, gli operatori di evoluzione temporale contenuti in $\rho(t)$ sull'osservabile, ottenendo:

$$\langle O(t) \rangle = \operatorname{Tr} \left[\rho(H) \, O_{H_{tot}}(t) \right] = \langle O_{H_{tot}}(t) \rangle_H. \tag{2.9}$$

In questa conveniente interpretazione del problema, il valor medio di una misura di un'osservabile al tempo $t > t_0$ è dato pertanto da quello di aspettazione della stessa, in rappresentazione di Heisenberg rispetto ad H_{tot} , sul sistema descritto dall'operatore densità all'equilibrio, per $t = t_0$, quando l'interazione H'(t) non è ancora stata accesa. Il risultato così trovato per una sola osservabile può essere generalizzato naturalmente nel caso di un numero maggiore, come accade per la funzione di Green ed i correlatori in generale.

L'espressione relativa alla particolare forma di ρ che si ricava a questo punto, come tutto il discorso precedente riguardante l'interazione con l'ambiente in cui è immerso il sistema, si giustificano formalmente dalla considerazione che i gradi di libertà del sistema siano inizialmente congelati e non seguano quindi istantaneamente la rapida variazione dovuta alla perturbazione H'(t) che caratterizza la condizione di non equilibrio.

Nei paragrafi successivi affrontiamo le problematiche principali che si affacciano una volta ricavato il risultato (2.9): la semplificazione della dipendenza temporale rispetto a quella governata da H_{tot} , in generale poco trattabile e difficile da gestire, e la sostituzione del precedente operatore densità con $\rho(H_0)$, relativo al solo termine quadratico, condizione necessaria richiesta per una trattazione successiva.

2.2 Evoluzione rispetto ad *H*

Abbiamo osservato come il valore di aspettazione di una osservabile sul sistema al tempo $t > t_0$, quando questo è soggetto dunque alle condizioni di non equilibrio, si

riconduca al calcolo dello stesso in rappresentazione di Heisenberg rispetto alla statistica dell'equilibrio $\rho(H)$, dove la dipendenza temporale dell'operatore è governata dall'Hamiltoniana complessiva H_{tot} .

Ci poniamo ora l'obiettivo di alleggerire quest'ultima dipendenza portandola nei confronti del solo termine imperturbato H, corrispondente alla situazione all'equilibrio e maggiormente trattabile rispetto al primo. Successivamente, semplificheremo ulteriormente la dipendenza portandola nei confronti della componente quadratica di H, H_0 .

Rispetto alle rappresentazioni dichiarate, abbiamo già visto come gli operatori vengano definiti dalle relazioni:

$$O_{H_{tot}}(t) = U_{H_{tot}}^{\dagger}(t, t_0) O U_{H_{tot}}(t, t_0)$$
(2.10)

 \mathbf{e}

$$\widehat{O}_{H}(t) = U_{H}^{\dagger}(t, t_{0}) O U_{H}(t, t_{0})$$
(2.11)

dove rispettivamente abbiamo specificato tramite opportuni pedici gli operatori di evoluzione temporale corrispondenti:

$$U_{H_{tot}}(t,t_0) = T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H_{tot}(t_1)\right)$$

$$U_H(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)\right)$$
(2.12)

a seguito delle caratteristiche delle relative Hamiltoniane di riferimento.

Il confronto tra le due scritture (2.10) e (2.11), isolando dalla seconda l'operatore nel disegno di Schrödinger e sostituendolo nella prima, permette di giungere all'uguaglianza operatoriale ricercata tra le osservabili nelle due rappresentazioni:

$$O_{H_{tot}}(t) = U_{H_{tot}}^{\dagger}(t, t_0) U_H(t, t_0) O_H(t) U_H^{\dagger}(t, t_0) U_{H_{tot}}(t, t_0), \qquad (2.13)$$

rispetto ai rispettivi operatori di evoluzione temporale.

L'espressione trovata può essere riscritta nella forma compatta:

$$O_{H_{tot}}(t) = V_H^{\dagger}(t, t_0) O_H(t) V_H(t, t_0)$$
(2.14)

avendo definito opportunamente l'operatore $V_H(t, t_0)$ come

$$V_{H}(t,t_{0}) = U_{H}^{\dagger}(t,t_{0}) U_{H_{tot}}(t,t_{0})$$

= $\exp\left(\frac{i}{\hbar}H(t-t_{0})\right) T \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_{0}}^{t}dt_{1} H_{tot}(t_{1})\right).$ (2.15)

L'ultimo operatore introdotto ammette l'esplicita espressione analitica

$$V_{H}(t, t_{0}) = T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt_{1} H'_{H}(t_{1})\right) \quad \text{con } t > t_{0}$$

= $\bar{T} \exp\left(+\frac{i}{\hbar} \int_{t}^{t_{0}} dt_{1} H'_{H}(t_{1})\right) \quad \text{con } t < t_{0}$ (2.16)

coincidente pertanto con la forma dell'operatore di evoluzione temporale in rappresentazione di interazione corrispondente al problema considerato, avente come argomento dell'esponenziale il termine di perturbazione fuori dall'equilibrio H'(t), la cui dipendenza temporale è governata dalla sola parte imperturbata H nella rappresentazione corrente.

La dimostrazione di questo ultimo risultato si basa sul calcolo dell'equazione differenziale che l'operatore $V_H(t, t_0)$, definito dal prodotto dei due operatori di evoluzione temporale, deve soddisfare, insieme alla corrispondente condizione al contorno

$$V_H(t_0, t_0) = 1 (2.17)$$

che discende naturalmente dalle analoghe condizioni valide per gli operatori $U_H(t, t_0)$ e $U_{H_{tot}}(t, t_0)$.

Differenziando infatti l'espressione $U_H^{\dagger}(t, t_0)U_{H_{tot}}(t, t_0)$ rispetto alla variabile t, otteniamo

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}V_H(t,t_0) = \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_H^{\dagger}(t,t_0)\right]U_{H_{tot}}(t,t_0) + U_H^{\dagger}(t,t_0)\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_{H_{tot}}(t,t_0)\right]$$
(2.18)

e tenendo conto delle rispettive equazioni del moto

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} V_H(t,t_0) = \left[-H U_H^{\dagger}(t,t_0) \right] U_{H_{tot}}(t,t_0) + U_H^{\dagger}(t,t_0) \left[H_{tot}(t) U_{H_{tot}}(t,t_0) \right]$$

= $-H V_H(t,t_0) + U_H^{\dagger}(t,t_0) H_{tot}(t) U_H(t,t_0) U_H^{\dagger}(t,t_0) U_{H_{tot}}(t,t_0)$ (2.19)
= $-H_H V_H(t,t_0) + H_{totH} V_H(t,t_0)$

ricaviamo allora l'equazione differenziale per l'operatore $V_H(t, t_0)$ come

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} V_H(t, t_0) = H'_H V_H(t, t_0).$$
(2.20)

Dal confronto con la forma delle espressioni (1.43) e (1.44), il problema di Cauchy ottenuto si risolve allora per iterazione con sostituzione nell'equazione integrale corrispondente, fino ad ottenere il risultato ricercato per la forma esplicita di $V_H(t, t_0)$ (2.16), dimostrando così l'equivalenza voluta.

2.3 Introduzione del formalismo del contorno

La principale utilità della forma esplicita dell'operatore V_H calcolato, sta nell'introduzione naturale a cui porta per il formalismo del contorno, mattone fondamentale della teoria di Keldysh.

Abbiamo calcolato nel paragrafo precedente come

$$V_H(t,t_0) = T \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H'_H(t_1)\right) \right\}$$
(2.21)

$$V_{H}^{\dagger}(t,t_{0}) = \bar{T} \bigg\{ \exp \bigg(-\frac{i}{\hbar} \int_{t}^{t_{0}} dt_{1} H_{H}'(t_{1}) \bigg) \bigg\};$$
(2.22)

noto allora il significato operativo di $T \in \overline{T}$ -ordinamento, possiamo scrivere le espressioni precedenti in maniera del tutto equivalente attraverso l'uso di un operatore di ordinamento riferito questa volta a una curva, come:

$$V_{H}(t,t_{0}) = T_{\gamma_{1}} \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_{1}} d\tau H'_{H}(\tau)\right) \right\}$$

$$(2.23)$$

$$V_{H}^{\dagger}(t,t_{0}) = T_{\gamma_{2}} \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_{2}} d\tau H_{H}^{\prime}(\tau)\right) \right\}$$
(2.24)



Figura 2.1: Curva totale γ data dall'unione delle componenti $\gamma_1 \in \gamma_2$.

dove con γ_1 e γ_2 , come si vede dalla Figura 2.1, identifichiamo le curve definite sull'asse reale dei tempi, aventi variabile interna generica τ e propaganti rispettivamente in avanti da t_0 a t e all'indietro da t a t_0 . T_{γ} è la notazione dell'operatore di T_{γ} -ordinamento che ordina un prodotto di operatori rispetto alla loro posizione sulla curva di riferimento in maniera analoga al T-ordinamento canonico, di modo che un'osservabile ad τ maggiore sia sempre a sinistra di una ad un τ minore, dove il confronto tra i due argomenti è stabilito rispetto al verso di γ scelto:

$$T_{\gamma}(O_1(\tau_1)\dots O_k(\tau_k)) = (\pm)^P (O_{P(1)}(\tau_{P(1)})\dots O_{P(k)}(\tau_{P(k)}))$$

con *P* permutazione per cui $\tau_{P(1)} >_{\gamma} \dots >_{\gamma} \tau_{P(k)}.$ (2.25)

Possiamo osservare come il T_{γ} -ordinamento rispetto alla curva propagante in avanti γ_1 coincida con il T-ordinamento temporale canonico, mentre quello relativo alla curva antipropagante all'indietro γ_2 con il \bar{T} -ordinamento temporale.

La scrittura della relazione tra l'osservabile $O_{H_{tot}}(t) \in O_H(t)$ assume allora in questi nuovi termini una forma del tipo:

$$O_{H_{tot}}(t) = T_{\gamma_2} \bigg\{ \exp\bigg(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_2} d\tau \, H'_H(\tau)\bigg) \bigg\} O_H(t) \, T_{\gamma_1} \bigg\{ \exp\bigg(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_1} d\tau \, H'_H(\tau)\bigg) \bigg\},$$
(2.26)

che risulta evidentemente T_{γ} -ordinata rispetto alla curva γ definita dall'unione delle curve γ_1 e γ_2 poichè, leggendo da sinistra a destra l'andamento temporale seguito nell'espressione, dal punto t_0 di partenza raggiungiamo l'estremo t, rispetto al quale è calcolata anche l'osservabile in rappresentazione di interazione e quindi ritorniamo al punto iniziale t_0 . Quest'ultima osservazione motiva allora la generalizzazione della formula ricavata nell'espressione finale, rispetto alla curva γ , dell'equivalenza tra l'operatore in rappresentazione di Heisenberg e lo stesso in quella di interazione:

$$O_{H_{tot}}(t) = T_{\gamma} \bigg\{ \exp \bigg(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau \, H'_{H}(\tau) \bigg) O_{H}(t) \bigg\}, \qquad (2.27)$$

dove γ è, nuovamente, la curva definita sull'asse reale temporale, avente come variabile interna τ , procedente da t_0 a t e quindi a ritroso tra gli stessi estremi; T_{γ} è l'operatore di ordinamento corrispondente e infine $H'_H(t)$ è il termine perturbativo fuori dall'equilibrio scritto in rappresentazione di interazione rispetto all'Hamiltoniana d'equilibrio H. Chiamata

$$S^{i}_{\gamma,H} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau \, H^{i}_{H}(\tau)\right) \tag{2.28}$$

l'espressione precedente prende la forma compatta

$$O_{H_{tot}}(t) = T_{\gamma} \left\{ S^{i}_{\gamma,H} O_{H}(t) \right\}$$
(2.29)

che rappresenta l'elegante e fondamentale risultato di questa sezione.

Procediamo adesso a dimostrare in maniera rigorosa l'equivalenza della relazione (2.27) con quella ottenuta precedentemente rispetto a $V_H(t, t_0)$ (2.14). Espandiamo in serie l'esponenziale presente nella prima, tenendo conto di come l'operatore di ordinamento agisca sulla sola sequenza di termini di perturbazione $H'_H(\tau)$ scritti in rappresentazione di interazione

$$T_{\gamma} \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau \, H'_{H}(\tau)\right) O_{H}(t) \right\} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n} \frac{1}{n!} \cdot \int_{\gamma_{1}} d\tau_{1} \dots \int_{\gamma_{n}} d\tau_{n} \, T_{\gamma} \left(H'_{H}(\tau_{1}) \dots H'_{H}(\tau_{n}) \, O_{H}(t)\right) \cdot$$

$$(2.30)$$

Spezziamo ora la curva γ nei due tratti che la compongono, $\gamma_1 \in \gamma_2$, già precedentemente descritti. Dalla sostituzione svolta, ogni termine di ordine *n* nella serie produrrà allora 2^n contributi, distinti per la scelta tra le due possibili curve negli *n* integrali presenti; tra questi un esempio potrà essere quello con le prime due variabili integrate su γ_1 , e le restanti su γ_2 :

$$\int_{\gamma_1} d\tau_1 \int_{\gamma_1} d\tau_2 \int_{\gamma_2} d\tau_3 \dots \int_{\gamma_2} d\tau_n T_\gamma \big(H'_H(\tau_1) \dots H'_H(\tau_n) O_H(t) \big).$$
(2.31)

Possiamo semplificare ulteriormente la scrittura tenendo conto di introdurre, una volta applicato sommariamente l'operatore di ordinamento rispetto alla curva globale, quelli relativi ai singoli tratti in cui l'abbiamo fattorizzata

$$\int_{\gamma_2} d\tau_3 \dots \int_{\gamma_2} d\tau_n \, T_{\gamma_2} \left(H'_H(\tau_3) \dots H'_H(\tau_n) \right) O_H(t) \int_{\gamma_1} d\tau_1 \int_{\gamma_1} d\tau_2 \, T_{\gamma_1} \left(H'_H(\tau_1) H'_H(\tau_2) \right).$$
(2.32)

Dei 2^n termini generati, tenendo conto dell'arbitrarietà degli indici integrali, ce ne sono $\binom{n}{2}$, caratterizzati dalla presenza di due integrali su γ_1 o in maniera equivalente da t_0

a t, che danno lo stesso contributo. Dei 2^n termini totali, al variare di m da 0, caso in cui abbiamo solo integrali su γ_2 , ad n, in cui all'opposto l'unica curva integrata è γ_1 , abbiamo $\binom{n}{m}$ contributi uguali tra loro. Possiamo allora riassumere la riscrittura collettiva degli addendi generati dalla fattorizzazione nelle due curve come:

$$\int_{\gamma} d\tau_1 \dots \int_{\gamma} d\tau_n T_{\gamma} \left(H'_H(\tau_1) \dots H'_H(\tau_n) O_H(t) \right) = \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \cdot \int_{\gamma_2} d\tau_{m+1} \dots \int_{\gamma_2} d\tau_n T_{\gamma_2} \left(H'_H(\tau_{m+1}) \dots H'_H(\tau_n) \right) O_H(t) \cdot \qquad (2.33)$$
$$\cdot \int_{\gamma_1} d\tau_1 \dots \int_{\gamma_1} d\tau_m \left(H'_H(\tau_1) \dots H'_H(\tau_m) \right),$$

che possiamo riscrivere espandendo la sommatoria in m sino all'infinito grazie all'introduzione di una somma analoga nella nuova variabile k = n - m e di una appropriata delta di Kronecker necessaria per lasciare inalterata la scrittura:

$$\int_{\gamma} d\tau_{1} \dots \int_{\gamma} d\tau_{n} T_{\gamma} \left(H'_{H}(\tau_{1}) \dots H'_{H}(\tau_{n}) O_{H}(t) \right) = \sum_{m,k=0}^{\infty} \frac{n!}{m! \, k!} \, \delta_{n,k+m} \cdot \\ \cdot \left\{ \int_{\gamma_{2}} d\tau_{1} \dots \int_{\gamma_{2}} d\tau_{k} T_{\gamma_{2}} \left(H'_{H}(\tau_{1}) \dots H'_{H}(\tau_{k}) \right) \right\} O_{H}(t) \cdot \\ \cdot \left\{ \int_{\gamma_{1}} d\tau_{1} \dots \int_{\gamma_{1}} d\tau_{m} \left(H'_{H}(\tau_{1}) \dots H'_{H}(\tau_{m}) \right) \right\}.$$
(2.34)

Sostuendo quindi la relazione trovata nella forma generica dell'espansione dell'esponenziale scritta in precedenza e risolvendo la δ nella variabile n, arriviamo alla relazione conclusiva

$$O_{H_{tot}}(t) = T_{\gamma} \bigg\{ \exp \bigg(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau \, H'_{H}(\tau) \bigg) O_{H}(t) \bigg\}$$

$$\equiv \bigg(\sum_{k=0}^{\infty} \bigg(-\frac{i}{\hbar} \bigg)^{k} \frac{1}{k!} \int_{\gamma_{2}} d\tau_{1} \dots \int_{\gamma_{2}} d\tau_{k} \, T_{\gamma_{2}} \big(H'_{H}(\tau_{1}) \dots H'_{H}(\tau_{k}) \big) \bigg) O_{H}(t) \cdot (2.35)$$

$$\cdot \bigg(\sum_{m=0}^{\infty} \bigg(-\frac{i}{\hbar} \bigg)^{m} \frac{1}{m!} \int_{\gamma_{1}} d\tau_{1} \dots \int_{\gamma_{1}} d\tau_{m} \, T_{\gamma_{1}} \big(H'_{H}(\tau_{1}) \dots H'_{H}(\tau_{m}) \big) \bigg),$$

nella quale, dal confronto con gli operatori complessivi che moltiplicano $O_H(t)$ a destra e a sinistra, riconosciamo esattamente la forma esplicita rispettivamente di $V_H^{\dagger}(t, t_0)$ e $V_H(t, t_0)$.

2.4 Evoluzione rispetto ad H_0

Allo stesso modo di come abbiamo ottenuto la relazione che lega la forma di un operatore in rappresentazione di Heisenberg rispetto all'Hamiltoniana complessiva con quella dello stesso in rappresentazione di interazione rispetto al solo termine H, facciamo lo stesso con riferimento ora all'Hamiltoniana quadratica e maggiormente trattabile, H_0 , seguendo un procedimento simile e conti del tutto analoghi, .

Dai risultati precedenti, vale la definizione dell'operatore O in rappresentazione di interazione rispetto all'Hamiltoniana H_0 come

$$O_{H_0}(t) = U_{H_0}^{\dagger}(t, t_0) O U_{H_0}(t, t_0)$$
(2.36)

dove l'operatore di evoluzione temporale corrispondente risulta

$$U_{H_0}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0(t - t_0)\right).$$
(2.37)

Il problema, a meno dell'operatore di evoluzione utilizzato in questo caso, procede in maniera identica al caso precedente e porta all'analoga espressione del legame tra $O_{H_0}(t) \in O_{H_{tot}}(t)$ come

$$O_{H_{tot}}(t) = U_{H_{tot}}^{\dagger}(t, t_0) U_{H_0}(t, t_0) O_{H_0}(t) U_{H_0}^{\dagger}(t, t_0) U_{H_{tot}}(t, t_0), \qquad (2.38)$$

esprimibile anche nella forma

$$O_{H_{tot}}(t) = V_{H_0}^{\dagger}(t, t_0) O_{H_0}(t) V_{H_0}(t, t_0), \qquad (2.39)$$

avendo definito il corrispondente operatore $V^{H_0}(t, t_0)$ in questo caso come

$$V_{H_0}(t,t_0) = U_{H_0}^{\dagger}(t,t_0) U_{H_{tot}}(t,t_0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)\right) T\left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_{tot}(t')\right) \right\}.$$
(2.40)

Volendo ricavare la forma esplicita di quest'ultimo operatore, determiniamo il problema di Cauchy che deve soddisfare. Con un procedimento del tutto identico a quello che ci ha portato dall'espressione (2.18) alla (2.20), per la dimostrazione della scrittura esplicita di $V_H(t, t_0)$, ricaviamo in questa situazione una legge del moto del tipo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} V_{H_0}(t, t_0) = \left[H^i_{H_0}(t) + H^{'}_{H_0}(t) \right] V_{H_0}(t, t_0)$$
(2.41)

con la consueta condizione al contorno

$$V_{H_0}(t_0, t_0) = \mathbb{1}.$$
(2.42)

La classica risoluzione per sostituzione, iterata infinite volte, porta al risultato

$$V_{H_0}(t,t_0) = T \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left[H^i_{H_0}(t') + H^i_{H_0}(t') \right] \right) \right\}$$

= $T \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H^i_{H_0}(t')\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H^i_{H_0}(t')\right) \right\},$ (2.43)

esatta generalizzazione di quello ottenuto in precedenza, che tiene conto sia del termine di perturbazione fuori dall'equilibrio H'(t), che del contributo di interazione non quadratico che complica H_0 .

A questo punto è allora automatico trasferire il risultato ottenuto sul piano del formalismo del contorno, introducendo la curva γ definita in precedenza e con essa:

$$O_{H_{tot}} = T_{\gamma} \bigg\{ \exp \bigg(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau H^{i}_{H_{0}}(\tau) \bigg) \exp \bigg(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau H^{'}_{H_{0}}(\tau) \bigg) O_{H_{0}}(t) \bigg\}$$
(2.44)

scrivibile in maniera elegante, analogamente al risultato (2.29), come

$$O_{H_{tot}} = T_{\gamma} \{ S'_{\gamma, H_0} S^i_{\gamma, H_0} O_{H_0}(t) \}$$
(2.45)

nella quale abbiamo definito

$$S'_{\gamma,H_0} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{\gamma} d\tau H'_{H_0}(\tau)\right) \qquad S^i_{\gamma,H_0} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{\gamma} d\tau H^i_{H_0}(\tau)\right). \tag{2.46}$$

I notevoli risultati (2.27), (2.28), (2.29), (2.45), (2.46) appena mostrati costituiscono il punto di partenza per la trasformazione del problema fuori equilibrio, complicato e difficile da risolvere rispetto all'Hamiltoniana complessiva H_{tot} , in quello equivalente calcolabile e risolvibile rispetto alla sola componente imperturbata e quadratica H_0 , ambientato nel formalismo delle curva.

2.5 Estensione del contorno all'infinito

La curva γ introdotta ed utilizzata frequentemente in precedenza, propagante da t_0 a te quindi a ritroso, ha la scomoda proprietà per cui la propria lunghezza dipende esplicitamente dalla variabile t, mentre sarebbe conveniente sviluppare un risultato analogo rispetto ad una curva universale ed indipendente dal tempo e dal problema al quale viene applicata. La soluzione più semplice a questa richiesta è l'estensione del contorno all'infinito, nel limite per cui l'estremo superiore non sia t bensì $+\infty$, come mostrato in Figura 2.2.



Figura 2.2: Contorno di Keldysh.

La soluzione ottenuta risulta una generalizzazione gratuita e naturale della curva precedente, completamente equivalente ad essa secondo la teoria che abbiamo costruito, senza bisogno di fattori correttivi o approssimanti aggiuntivi. Per dimostrarlo, consideriamo le implicazioni di questa estensione sull'esempio del calcolo dell'espressione (2.27) come

$$O_{H_{tot}}(t) = T_{\gamma_{\infty}} \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_{\infty}} d\tau \, H'_{H}(\tau)\right) O_{H}(t) \right\}$$
(2.47)

dove con γ_{∞} indichiamo la curva estesa. Rispetto agli esempi precedenti, nasce in questo caso un'ambiguità dovuta alla corrispondenza del punto reale t con due possibili scelte della variabile della curva τ , a seconda del tratto del contorno scelto. Preso ad esempio il valole τ_1 sul tratto γ_1 propagante in avanti da t_0 all' ∞ , risolvendo il T_{γ} -ordinamento e tenendo conto della scrittura degli operatori di evoluzione temporale in rappresentazione di interazione e della loro proprietà di composizione, vale

$$O_{H_{tot}}(t) = T_{\gamma_{\infty}} \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_{\infty}} d\tau \, H'_{H}(\tau)\right) O_{H}(t) \right\} \\ = V_{H}(t_{0}, t) \, O_{H}(t) \, V_{H}(t, \infty) \, V_{H}(\infty, t_{0}) \\ = V_{H}(t_{0}, t) \, O_{H}(t) \, V_{H}(t, t_{0}),$$
(2.48)

esattamente il risultato analogo al calcolo con la curva γ precedente, non prolungata. La scelta del valore τ_2 sul tratto γ_2 antipropagante dall' ∞ a t_0 , procede esattamente allo stesso modo e porta al medesimo risultato.

Pertanto, come volevamo dimostrare, i risultati trovati, utilizzando la curva γ precedentemente definita, non cambiano a seguito della sostituzione di questa con γ_{∞} , detto contorno di Keldysh o di Schwinger-Keldysh dal nome dei due fisici che per primi introdussero tale idea nello studio delle funzioni di Green fuori equilibrio.¹

2.6 Operatore densità rispetto ad H_0

Come abbiamo osservato dal calcolo del valore di aspettazione di una osservabile in rappresentazione di Heisenberg, l'operatore assume una dipendenza temporale data da $H_{tot}(t)$, che abbiamo visto come trasformare in una equivalente e più trattabile rispetto ad H prima e ad H_0 poi, mentre l'operatore densità coincide con quello relativo all'Hamiltoniana all'equilibrio $\rho(H)$. Per i nostri scopi tuttavia è necessario sviluppare ulteriormente quest'ultima scrittura per poterla sostituire con quella relativa alla sola componente quadratica H_0 : ci prefiggiamo pertanto come obiettivo una relazione che permetta il passaggio da $\rho(H)$ a $\rho(H_0)$.

Abbiamo calcolato in precedenza la relazione operatoriale che soddisfa $V_H(t, t_0)$:

$$V_{H}(t,t_{0}) = U_{H}^{\dagger}(t,t_{0}) U_{H_{tot}}(t,t_{0}) = T \bigg\{ \exp \bigg(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt' H_{H}'(t) \bigg) \bigg\}.$$
 (2.49)

che implementa la trasformazione necessaria per portare la dipendenza temporale della rappresentazione di Heisenberg in H_{tot} a quella in rappresentazione di interazione in H, con le due Hamiltoniane legate dalla relazione

$$H_{tot}(t) = H + H'(t).$$
(2.50)

Adattandola al caso simile in cui l'Hamiltoniana totale di riferimento sia H, contenente i due termini H_0 , nel ruolo relativo ad H in precedenza, e H^i perturbazione

¹In seguito per non appesantire la notazione, indico sempre con il simbolo γ il contorno di Keldysh esteso all' ∞ .

corrispondente a H', le relazioni precedenti assumono la forma

$$H = H_0 + H^i$$

$$V_{H_0}^i(t, t_0) = U_{H_0}^{\dagger}(t, t_0) U_H(t, t_0) = T \bigg\{ \exp \bigg(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_{H_0}^i(t) \bigg) \bigg\}.$$
(2.51)

Isolando l'operatore di evoluzione temporale $U_H(t, t_0)$:

$$U_H(t,t_0) = U_{H_0}(t,t_0) V_{H_0}^i(t,t_0)$$
(2.52)

e tenendo conto della scrittura esplicita degli stessi, nel caso delle Hamiltoniane considerate indipendenti dal tempo, otteniamo:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)\right)T\left\{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t dt' H_{H_0}^i(t')\right)\right\}.$$
 (2.53)

Valutando il caso in cui $t = t_0 - i\beta$ la relazione precedente assume la forma

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} V_{H_0}^i(t_0 - i\beta, t_0), \qquad (2.54)$$

dove abbiamo chiamato

$$V_{H_0}^i(t_0 - i\beta, t_0) = T \bigg\{ \exp \bigg(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_0 - i\beta} dt \, H_{H_0}^i(t) \bigg) \bigg\}.$$
(2.55)

Abbiamo ricavato quindi l'espressione richiesta dell'operatore densità relativo all'Hamiltoniana H nei confronti della sua sola parte quadratica.



Figura 2.3: Curva γ_K , introdotto in questi termini per ambientare la relazione (2.55) nel formalismo del contorno.

Dalla definizione di $V_{H_0}^i(t, t_0)$ possiamo generalizzare la sua espressione definendola nell'ambiente del contorno come fatto con le quantità precedenti; tenendo conto della particolare scelta di t per la validità della relazione principale, possiamo scrivere

$$V_{H_0}^i(t_0 - i\beta, t_0) = T_{\gamma_K} \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_K} d\tau \, H_{H_0}^i(\tau)\right) \right\}$$
(2.56)

con γ_K , come evidente in Figura 2.3, curva costituita dal solo tratto verticale che collega t_0 con $t_0 - i\beta$.

L'ultimo risultato, la scrittura nel formalismo del contorno, è un passaggio conveniente in quanto solo in questo modello è possibile sviluppare una teoria perturbativa grazie alla forma conveniente che assumono le grandezze considerate. La sostituzione dell'operatore densità con quello relativo ad una Hamiltoniana quadratica d'altronde discende a posteriori come condizione necessaria per l'applicabilità del Teorema di Wick.

Capitolo 3

Valori di aspettazione

Introdotte le trasformazioni che ci permettono di sostituire l'operatore densità con quello relativo alla sola componente quadratica H_0 e in maniera simile di alleggerire la dipendenza nell'evoluzione temporale dall'Hamiltoniana totale complessa alla stessa H_0 , utilizziamo tali relazioni nel calcolo del valore di aspettazione di alcuni oggetti, a partire da una sola osservabile per poi considerare il caso di due e più. I risultati ottenuti permetteranno di introdurre naturalmente le analoghe quantità definite sul contorno e di approfondire il loro studio rispetto alle prime. Grazie alle convenienti relazioni messe in evidenza nel capitolo precedente saremo in grado allora di costruire, grazie all'applicazione del Teorema di Wick, una completa teoria perturbativa per le stesse con strumenti (grafici di Feynman) e risultati (equazione di Dyson) del tutto analoghi a quelli che si ricavano per le stesse quantità, reali, relativamente a sistemi all'equilibrio.

Nel lavoro di Tesi proposto si vuole soprattutto mostrare il percorso che porta a questo importante risultato conclusivo, ma non evidenziare le proprietà o esporre nei dettagli la teoria perturbativa, essendo questo un lavoro che necessiterebbe di una trattazione più ampia e rigorosa rispetto alla presente.

3.1 Valore di aspettazione di una osservabile

Le relazioni ottenute per la trasformazione dell'operatore densità e della dipendenza temporale, ci permettono di scrivere il risultato esplicito del calcolo del valore di aspettazione di una osservabile O sul sistema in condizioni di non equilibrio, al generico tempo t. Abbiamo calcolato come questo risultato, in rappresentazione di Heisenberg, assuma la forma:

$$\langle O(t) \rangle = \operatorname{Tr} \left[\rho(H) \, O_{H_{tot}}(t) \right]$$

= $\frac{\operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H} \, O_{H_{tot}}(t) \right]}{\operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H} \right]};$ (3.1)

sostituendo ora all'espressione dell'operatore densità relativo ad ${\cal H}$ quello della sola parte quadratica otteniamo

$$\langle O(t) \rangle = \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta H_0} V_{H_0}^i(t_0 - i\beta, t_0) O_{H_{tot}}(t) \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta H_0} V_{H_0}^i(t_0 - i\beta, t_0) \right]}.$$
(3.2)

A questo punto per proseguire nel calcolo è necessario sostituire le relazioni delle variabili interne con le rispettive espressioni nel formalismo del contorno; tenendo conto di (2.45) e (2.56) otteniamo

$$\langle O(t) \rangle = \frac{\text{Tr} \bigg[e^{-\beta H_0} \bigg(T_{\gamma_K} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_K} d\tau H_{H_0}^i(\tau)} \bigg) \bigg(T_\gamma \bigg(e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau H_{H_0}^i(\tau)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau H_{H_0}^i(\tau)} O_{H_0}(t) \bigg) \bigg) \bigg]}{\text{Tr} \bigg[e^{-\beta H_0} T_{\gamma_K} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_K} d\tau H_{H_0}^i(\tau)} \bigg]$$
(3.3)



Figura 3.1: Curva di Kadanoff-Baym γ_{tot} , ottenuta dall'unione tra il contorno di Keldysh γ , introdotto naturalmente nel passaggio da $O_{H_{tot}}(t)$ a $\widehat{O}_{H_0}(t)$, e il tratto puramente verticale γ_K , a sua volta ricavato in quello da $\rho(H)$ a $\rho(H_0)$.

Possiamo unire i termini definiti sui differenti contorni introducendo la curva totale $\gamma_{tot} = \gamma \cup \gamma_K$, detta di Kadanoff-Baym, propagante da t_0 all' ∞ , quindi a ritroso sino a t_0 e da qui lungo il tratto verticale sino al punto $t_0 - i\beta$, come mostrato in Figura 3.1. Tenendo conto del verso della curva, possiamo pertanto unire i fattori sotto un unico simbolo di $T_{\gamma_{tot}}$ -ordinamento, all'interno del quale essi commutano come numeri. Otteniamo allora per il numeratore dell'espressione precedente la forma

$$\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta H_0} T_{\gamma_{tot}} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_{tot}} d\tau \, H_{H_0}^i(\tau)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau \, H_{H_0}'(\tau)} O_{H_0}(t) \right\} \right], \tag{3.4}$$

mentre, per quanto riguarda il denominatore, tenendo conto della libertà di poter inserire la quantità

$$T_{\gamma} \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau \ H^{i}_{H_{0}}(\tau)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau \ H^{'}_{H_{0}}(\tau)\right) \right\} = \mathbb{1}$$
(3.5)

CAPITOLO 3. VALORI DI ASPETTAZIONE

valida in assenza di altri operatori e con la curva γ chiusa, otteniamo con ragionamenti analoghi

$$\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta H_0} T_{\gamma_{tot}} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_{tot}} d\tau \, H^i_{H_0}(\tau)} \, e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau \, H'_{H_0}(\tau)} \right\} \right].$$
(3.6)

In conclusione quindi, nel formalismo del contorno, il valore di aspettazione di un'osservabile sul sistema in condizioni di non equilibrio al tempo t, risulta:

$$\langle O(t) \rangle = \frac{\operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H_0} T_{\gamma_{tot}} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_{tot}} d\tau \, H_{H_0}^i(\tau)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau \, H_{H_0}'(\tau)} O_{H_0}(t) \right\} \right]}{\operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H_0} T_{\gamma_{tot}} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_{tot}} d\tau \, H_{H_0}^i(\tau)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau \, H_{H_0}'(\tau)} \right\} \right]},$$
(3.7)

esprimibile in una forma più compatta ed elegante, detta *di Kadanoff-Baym* dal particolare contorno utilizzato, come

$$\langle O(t) \rangle = \frac{\operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H_0} T_{\gamma_{tot}} \left\{ S'_{\gamma, H_0} S^i_{\gamma_{tot}, H_0} O_{H_0}(t) \right\} \right]}{\operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H_0} T_{\gamma_{tot}} \left\{ S'_{\gamma, H_0} S^i_{\gamma_{tot}, H_0} \right\} \right]}$$
(3.8)

avendo definito

$$S'_{\gamma,H_0} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma} d\tau H'_{H_0}(\tau)\right)$$

$$S^{i}_{\gamma_{tot},H_0} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\gamma_{tot}} d\tau H^{i}_{H_0}(\tau)\right).$$
(3.9)

L'ultima formula ricavata (3.7)(3.8) ha le notevoli proprietà di isolare le componenti complicate dell'Hamiltoniana totale, $H'(t) \in H^i$, rispettivamente nei fattori esponenziali S' ed S^i , inoltre tutte le dipendenze nell'evoluzione temporale sono relative al solo termine quadratico H_0 , così come l'operatore densità utilizzato. È importante osservare come le stesse caratteristiche siano verificate nella trattazione del problema simile all'equilibrio, per permettere una risoluzione perturbativa dello stesso.

Dall'analisi del contorno globale utilizzato, nel tratto verticale γ_K sopravvive solo il termine di interazione H^i , mentre quello di perturbazione fuori equilibrio H'(t), acceso solo per tempi successivi a t_0 , è nullo. Possiamo utilizzare questa proprietà, se non siamo interessati a fenomeni transienti o alla fisica relativa ai tempi immediatamente successivi a t_0 , per valutare il limite approssimato del problema andando a considerare il caso in cui lo stato sia stazionario rispetto alla perturbazione, quando cioè quest'ultima sia accesa da un tempo molto lungo, nei nostri parametri $t \gg t_0$ o in maniera equivalente t_0 portato al limite $-\infty$.

Formalmente quello che succede in questo caso è che il contributo del tratto verticale puramente immaginario svanisce ed il contorno γ coincide quindi, a meno dell'estensione inferiore da $-\infty$, con quello di Keldysh originariamente utilizzato (Figura 3.2). Dal punto di vista della scrittura l'eliminazione del tratto verticale comporta la semplificazione del denominatore, in quanto il T_{γ} -ordinamento degli operatori S' ed S^i ,

CAPITOLO 3. VALORI DI ASPETTAZIONE

relativi ora allo stesso contorno γ chiuso, coincide con l'identità ed il termine rimanente è proprio la funzione di partizione dell'operatore densità $\rho(H_0)$, corrispondente al sistema fisico sottoposto all'Hamiltoniana quadratica H_0 in condizioni di equilibrio termodinamico.

Riscrivendo in maniera compatta il risultato, tenendo conto del significato rispetto all'operatore ρ del valore di aspettazione, otteniamo il risultato di Schwinger-Keldysh



Figura 3.2: Curva di Keldysh, estesa a $-\infty$.

dove con il pedice intendiamo che il calcolo è fatto appunto rispetto all'operatore densità corrispondente

$$\rho_0 = \rho(H_0) = \frac{e^{-\beta H_0}}{\text{Tr}[e^{-\beta H_0}]}.$$
(3.11)

Le formule trovate ammettono a questo livello più la forma di una riscrittura equivalente dell'espressione di partenza che non quella di un risultato calcolabile. Le complicazioni del calcolo diretto dalla definizione del valore di aspettazione infatti, prima tra tutte la difficile dipendenza temporale da un'Hamiltoniana globale fuori equilibrio che tiene conto di numerosi termini, vengono scaricate ora sugli operatori esponenziali relativi alle interazioni, compatti ed eleganti nella forma ma difficilmente trattabili, nonchè sulla traccia sullo spazio degli stati considerato.

Il modo più semplice e naturale per trattare i complicati operatori esponenziali che abbiamo trovato sta nella loro espansione in serie di Taylor all'interno di una teoria perturbativa per valutare ad ordini successivi il risultato del valore di aspettazione scritto in questi termini. I generici soggetti degli addendi che così nascono sono stringhe di n operatori, scritti in rappresentazione di interazione, la cui dipendenza temporale è riferita ad H_0 quadratica, sotto il simbolo complessivo di T_{γ} -ordinamento; una forma generale detta correlatore T_{γ} -ordinato di n osservabili, del tipo

$$\langle T_{\gamma} \left(O_{H_0}(1) \dots O_{H_0}(j) \dots \right) \rangle_0 \tag{3.12}$$

in cui con $O_{H_0}(j)$ identifichiamo il generico operatore della stringa, avente come argomento sul contorno la variabile τ_j . Le difficoltà di calcolo trovano soluzione nell'introduzione della stessa funzione relativa a due operatori soltanto e alla possibilità, tramite il Teorema di Wick, di una teoria perturbativa che procederà in maniera del tutto simile al caso canonico della funzione di Green per sistemi a molti corpi all'equilibrio a qualunque temperatura.

3.2 Valore di aspettazione di più osservabili

Seguendo rigorosamente i passaggi realizzati finora, passiamo al calcolo del valore di aspettazione del prodotto di due o più osservabili sul sistema in condizioni di non equilibrio. L'impossibilità di una semplice estensione dei risultati trovati nel caso precedente ci permetterà l'introduzione naturale del concetto di correlatore definito sul contorno e nello studio di quest'ultimo oggetto, di una completa teoria perturbativa trattabile attraverso l'applicabilità del Teorema di Wick. Il problema principale assume quindi nel formalismo della curva una forma conveniente e particolarmente trattabile, peraltro del tutto equivalente a una generalizzazione di quella già nota per un sistema a molti corpi "classico" all'equilibrio secondo la trattazione di Dyson-Feynman.

3.2.1 Correlatore a due osservabili reale

Siamo interessati a generalizzare i calcoli svolti sinora per determinare la forma assunta dal valore di aspettazione del prodotto di due osservabili $A \in B$ sul sistema considerato, quantità che fisicamente prende il nome di *correlatore* tra le stesse. Dal punto di vista formale vogliamo indagare il caso in cui entrambi gli operatori ammettano un'esplicita dipendenza temporale, $A(t_1) \in B(t_{1'})$, sia questa implicita nella loro definizione o ereditata dalla rappresentazione scelta per la dinamica del sistema. Rispetto a questo ulteriore grado di libertà, possiamo definire molteplici forme del correlatore rispetto al confronto tra gli argomenti delle osservabili, che di conseguenza saranno parametri espliciti della stessa funzione che stiamo ora indagando.

Definiamo per primo il correlatore greater $C^{>}(t_1, t_{1'})$, come

$$C^{>}(t_1, t_{1'}) = \langle A(t_1) B(t_{1'}) \rangle, \qquad (3.13)$$

cui segue il complementare correlatore lesser $C^{<}(t_1, t_{1'})$

$$C^{<}(t_{1}, t_{1'}) = \pm \langle B(t_{1'}) A(t_{1}) \rangle, \qquad (3.14)$$

dove il fattore di segno tiene conto della statistica delle particelle considerate nel sistema sotto studio, rispettivamente bosoniche o fermioniche, relativamente all'inversione degli operatori. Introducendo opportunamente una condizione di confronto tra i rispettivi parametri, la forma delle due funzioni suggerisce automaticamente l'introduzione di altri due correlatori, quello *T*-ordinato $C^{T}(t_{1}, t_{1'})$ e quello \overline{T} -ordinato $C^{\overline{T}}(t_{1}, t_{1'})$, rispettivamente

$$C^{T}(t_{1}, t_{1'}) = \langle T A(t_{1}) B(t_{1'}) \rangle$$

$$C^{\bar{T}}(t_{1}, t_{1'}) = \langle \bar{T} A(t_{1}) B(t_{1'}) \rangle,$$
(3.15)

e fattorizzabili in $C^{>}(t_1, t_{1'})$ e $C^{<}(t_1, t_{1'})$ rispetto alla definizione degli operatori di ordinamento e al confronto tra gli argomenti:

$$C^{T}(t_{1}, t_{1'}) = \theta(t_{1} - t_{1'}) C^{>}(t_{1}, t_{1'}) + \theta(t_{1'} - t_{1}) C^{<}(t_{1}, t_{1'})$$

$$C^{\bar{T}}(t_{1}, t_{1'}) = \theta(t_{1} - t_{1'}) C^{<}(t_{1}, t_{1'}) + \theta(t_{1'} - t_{1}) C^{>}(t_{1}, t_{1'}).$$
(3.16)

Per completezza risulta conveniente definire un altro tipo di funzioni a due osservabili, il correlatore ritardato $C^{ret}(t_1, t_{1'})$:

$$C^{ret}(t_1, t_{1'}) = \theta(t_1 - t_{1'}) \left\langle \left[A(t_1), B(t_{1'}) \right]_{\mp} \right\rangle, \tag{3.17}$$

quello avanzato $C^{av}(t_1, t_{1'})$:

$$C^{av}(t_1, t_{1'}) = \theta(t_{1'} - t_1) \left\langle \left[A(t_1), B(t_{1'}) \right]_{\mp} \right\rangle, \tag{3.18}$$

e infine quello di Keldysh $C^{K}(t_{1}, t_{1'})$:

$$C^{K}(t_{1}, t_{1'}) = \langle \left[A(t_{1}), B(t_{1'}) \right]_{\pm} \rangle, \qquad (3.19)$$

dove in tutti e tre il pedice alle parentesi specifica rispettivamente il commutatore o l'anticommutatore a seconda del segno scelto nella statistica corrispondente, dalla cui notazione abbiamo ereditato lo stesso ordine nella scrittura:

$$[A, B]_{+} = \{A, B\} = AB + BA$$

[A, B]__ = [A, B] = AB - BA. (3.20)

Dalle definizioni date discendono le numerose proprietà che legano tra di loro le funzioni e che permettono di esprimere le une rispetto alle altre, come

$$C^{ret}(t_{1}, t_{1'}) = \theta(t_{1} - t_{1'}) \left(C^{>}(t_{1}, t_{1'}) - C^{<}(t_{1}, t_{1'}) \right)$$

$$C^{av}(t_{1}, t_{1'}) = \theta(t_{1'} - t_{1}) \left(C^{>}(t_{1}, t_{1'}) - C^{<}(t_{1}, t_{1'}) \right)$$

$$C^{>}(t_{1}, t_{1'}) - C^{<}(t_{1}, t_{1'}) = C^{ret}(t_{1}, t_{1'}) - C^{av}(t_{1}, t_{1'})$$

$$C^{ret}(t_{1}, t_{1'}) = C^{T}(t_{1}, t_{1'}) - C^{<}(t_{1}, t_{1'}) = C^{>}(t_{1}, t_{1'}) - C^{\bar{T}}(t_{1}, t_{1'})$$

$$C^{av}(t_{1}, t_{1'}) = C^{T}(t_{1}, t_{1'}) - C^{>}(t_{1}, t_{1'}) = C^{<}(t_{1}, t_{1'}) - C^{\bar{T}}(t_{1}, t_{1'})$$

$$C^{K}(t_{1}, t_{1'}) = C^{>}(t_{1}, t_{1'}) + C^{<}(t_{1}, t_{1'}) = C^{T}(t_{1}, t_{1'}) + C^{\bar{T}}(t_{1}, t_{1'}).$$
(3.21)

La possibilità a questo punto di una naturale generalizzazione della trattazione svolta in precedenza per il calcolo diretto di una di queste quantità reali, si scontra con l'impossibilità di introdurre automaticamente il formalismo del contorno a questo livello, come fatto invece in precedenza. Ad ogni punto dell'asse reale ne corrispondono due sulla curva, a seconda che si consideri la proiezioni sul tratto propagante o antipropagante che la compongono. Questa ambiguità è del tutto ininfluente quando consideriamo un solo operatore poichè, come abbiamo visto nella dimostrazione dell'estensione del contorno all'infinito, qualunque sia la scelta sull'argomento la scrittura si mantiene inalterata rispetto a quella originale. La presenza di più osservabili tuttavia comporta la valutazione di un ugual numero di variabili temporali reali e del confronto tra di esse (che peraltro regola la forma particolare del correlatore scelto tra quelli presentati): la libertà di fissare a piacimento i corrispondenti argomenti τ sul tratto propagante o antipropagante del contorno cambia profondamente in questo caso la forma del correlatore e quindi del risultato. Le espressioni del correlatore elencate in precedenza si compendiano in un'unica forma ambientata sul contorno. Si dimostra perciò necessario ragionare in senso opposto e, a partire da un correlatore definito sul contorno e avente argomenti τ appartenenti ad esso, ricavare relazioni valide per le funzioni reali.

CAPITOLO 3. VALORI DI ASPETTAZIONE

3.2.2 Correlatore a due osservabili definito sul contorno

A seguito della praticità già evidenziata dei risultati espressi nel formalismo del contorno, nonchè da quanto emerso approfondendo l'espressione reale, è conveniente generalizzare il concetto di correlatore di due osservabili (la trattazione è del tutto analoga per un numero maggiore) nel caso in cui gli argomenti di queste ultime siano variabili definite sul contorno, $A(\tau_1) \in B(\tau_{1'})$, rispetto alla loro appartenenza ad un generico contorno (di Keldysh) γ scelto. Introduciamo dunque il correlatore T_{γ} -ordinato corrispondente, definito dalla relazione

$$C(\tau_1, \tau_{1'}) = \langle T_\gamma A(\tau_1) B(\tau_{1'}) \rangle.$$
(3.22)

L'operatore di ordinamento rispetto al verso di percorrenza fissato della curva ci permette di identificare una forte analogia con le funzioni reali introdotte in precedenza: se andiamo a considerare nello specifico la posizione dei punti $\tau_1 e \tau_{1'}$ sulla componente di γ propagante o antipropagante da t_0 all' ∞ , rispettivamente γ_1 o γ_2 , otteniamo le seguenti utilissime identificazioni

$$C(\tau_{1},\tau_{1'}) = \begin{cases} C^{T}(t_{1},t_{1'}) & \text{se } \tau_{1},\tau_{1'} \in \gamma_{1} \\ C^{<}(t_{1},t_{1'}) & \text{se } \tau_{1} \in \gamma_{1} \text{ e } \tau_{1'} \in \gamma_{2} \\ C^{>}(t_{1},t_{1'}) & \text{se } \tau_{1} \in \gamma_{2} \text{ e } \tau_{1'} \in \gamma_{1} \\ C^{\bar{T}}(t_{1},t_{1'}) & \text{se } \tau_{1},\tau_{1'} \in \gamma_{2} \end{cases}$$
(3.23)

dove con t_1 e $t_{1'}$ identifichiamo l'esatta proiezione dei rispettivi punti sulla retta reale dei tempi. Le relazioni ricavate saranno di fondamentale importanza quando, mostrata la possibilità di una risoluzione esatta del calcolo della funzione $C(\tau_1, \tau_{1'})$, vorremo ricavare da questa informazioni e risultati per le corrispondenti funzioni reali.

3.2.3 Calcolo di $C(\tau_1, \tau_{1'})$ per un sistema in condizioni di non equilibrio

Generalizziamo ora i calcoli svolti sinora per il calcolo del valore di aspettazione (reale) di una sola osservabile, al problema analogo relativo a due osservabili ambientate sul contorno grazie al correlatore T_{γ} -ordinato. Per semplificare i calcoli, consideriamo di far agire l'operatore di ordinamento sulla funzione, spezzandola nei due termini $C^{>}(\tau_1, \tau_{1'})$ e $C^{<}(\tau_1, \tau_{1'})$, rispettivamente correlatore γ -greater e γ -lesser, che calcolo separatamente come

$$C(\tau_{1},\tau_{1'}) = \begin{cases} C^{>}(\tau_{1},\tau_{1'}) = \langle A(\tau_{1})B(\tau_{1'})\rangle & \text{se } \tau_{1} >_{\gamma} \tau_{1'} \\ C^{<}(\tau_{1},\tau_{1'}) = \pm \langle B(\tau_{1'})A(\tau_{1})\rangle & \text{se } \tau_{1'} >_{\gamma} \tau_{1}. \end{cases}$$
(3.24)

Passiamo adesso al calcolo del primo dei due che dalla propria definizione risulta

$$\langle A(\tau_1)B(\tau_{1'})\rangle = \operatorname{Tr}\left[\rho(t)\,A(t_1)\,B(t_{1'})\right],\tag{3.25}$$

dove i parametri reali $t_1 e t_{1'}$ sono le proiezioni dei punti del contorno $\tau_1 e \tau_{1'}$ sulla retta reale, introdotti esplicitamente in quanto variabili canoniche della rappresentazione della dinamica utilizzata. Scrivendo l'espressione trovata nella rappresentazione

CAPITOLO 3. VALORI DI ASPETTAZIONE

di Heisenberg, scaricando l'evoluzione temporale dell'operatore densità attraverso la proprietà ciclica della traccia e inserendo l'opportuna identità, otteniamo

$$\langle A(\tau_1)B(\tau_{1'})\rangle = \operatorname{Tr}[\rho(H) A_{H_{tot}}(t_1) B_{H_{tot}}(t_{1'})],$$
 (3.26)

che evidenzia l'universalità dell'analogo sviluppo reale ricavato nel caso di un solo operatore quando andiamo a valutarne un numero maggiore. Avendo ora a che fare con l'operatore $\rho(H)$ e con i restanti scritti in rappresentazione di Heisenberg rispetto alla complicata Hamiltoniana complessiva, possiamo applicare le formule ricavate in precedenza per rendere questi argomenti trattabili. Sostituiamo allora le relazioni che ci permettono di alleggerire la dipendenza temporale degli operatori $A_{H_{tot}}(t_1) \in B_{H_{tot}}(t_{1'})$, tenendo conto di utilizzare, con un ragionamento chiaro a posteriori, il riferimento del contorno γ non esteso all' ∞ , ottenendo



Figura 3.3: Decomposizione del contorno γ , non esteso all' ∞ , nell'unione delle curve $\gamma_A \in \gamma_B$. Abbiamo evidenziato il tratto in comune ai due contorni, percorso tra loro in senso opposto.

$$\langle A(\tau_{1})B(\tau_{1'})\rangle = \operatorname{Tr}\left[\rho(H) T_{\gamma_{A}} \left\{ S_{\gamma_{A},H_{0}}^{'} S_{\gamma_{A},H_{0}}^{i} A_{H_{0}}(\tau_{1}) \right\} \cdot T_{\gamma_{B}} \left\{ S_{\gamma_{B},H_{0}}^{'} S_{\gamma_{B},H_{0}}^{i} B_{H_{0}}(\tau_{1'}) \right\} \right]$$
(3.27)

in cui con $\gamma_A \in \gamma_B$ identifichiamo le curve che propagano da t_0 rispettivamente a $t_1 \in t_{1'}$ (senza specificare l'ordine tra i due) e quindi a ritroso. Possiamo riscrivere l'espressione precedente come

$$\langle A(\tau_1)B(\tau_{1'})\rangle = \operatorname{Tr}\left[\rho(H) T_{\gamma}\left\{S_{\gamma,H_0}' S_{\gamma,H_0}^i A_{H_0}(\tau_1)B_{H_0}(\tau_{1'})\right\}\right]$$
(3.28)

dove il contorno combinato γ , dato dall'unione di $\gamma_A \in \gamma_B$ ed evidenziato in Figura 3.3, propaga da t_0 sino al min $(t_1, t_{1'})$ e successivamente a ritroso, per poi eseguire lo stesso percorso relativo questa volta al max $(t_1, t_{1'})$. Il tratto evidenziato percorso in senso opposto dai due contorni separatamente può essere semplificato, riducendoci così all'usuale curva γ . Questa semplificazione è permessa dalla particolare forma del tratto considerato, all'interno del quale sono esclusi gli operatori $A \in B$ relativi a tempi successivi e gli esponenziali rimanenti integrati sulla curva chiusa danno l'identità.


Figura 3.4: Contorno di Keldysh canonico, completato dall'estensione all' ∞ .

In maniera equivalente, traducendo il discorso appena svolto nei termini degli operatori di evoluzione temporale, avremmo $U(\min(t_1, t_{1'}), t_0)U(t_0, \min(t_1, t_{1'})) = 1$.¹

Considerando ora la sola parte relativa all'operatore densità corrente, trasformandolo in $\rho(H_0)$ secondo le consuete relazioni, eseguiamo gli stessi conti svolti nel secondo paragrafo lavorando sulla combinazione degli esponenziali relativi ai contorni e sulla deformazione di questi ultimi. Con l'identica definizione della curva di Kadanoff-Baym γ_{tot} richiamata nel paragrafo precedente, otteniamo in definitiva l'espressione del correlatore come

$$C^{>}(\tau_{1},\tau_{1'}) = \langle A(\tau_{1})B(\tau_{1'}) \rangle = \frac{\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta H_{0}}T_{\gamma_{tot}}\left\{S_{\gamma,H_{0}}^{'}S_{\gamma_{tot},H_{0}}^{i}A_{H_{0}}(\tau_{1})B_{H_{0}}(\tau_{1'})\right\}\right]}{\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta H_{0}}T_{\gamma_{tot}}\left\{S_{\gamma,H_{0}}^{'}S_{\gamma_{tot},H_{0}}^{i}\right\}\right]}$$
(3.29)

e, con ragionamenti analoghi, dimostriamo la formula approssimata rispetto al contorno di Keldysh nel limite di t_0 a $-\infty$, come

$$C^{>}(\tau_{1},\tau_{1'}) = \langle A(\tau_{1})B(\tau_{1'})\rangle = \langle T_{\gamma} \{ S_{\gamma,H_{0}}^{'} S_{\gamma,H_{0}}^{i} A_{H_{0}}(\tau_{1}) B_{H_{0}}(\tau_{1'}) \} \rangle_{0}$$
(3.30)

dove il pedice al valore di aspettazione sottointende l'utilizzo del corrispondente operatore densità all'equilibrio rispetto all'Hamiltoniana quadratica H_0 .

Allo stesso risultato, con i corrispondenti operatori invertiti, si giunge nel caso del calcolo di $C^{<}(\tau, \tau')$ nelle stesse condizioni; è pertanto possibile esprimere il risultato nel caso generale del correlatore T_{γ} -ordinato dalla combinazione di questi due come

$$C(\tau_1, \tau_{1'}) = \theta_{\gamma}(\tau_1 - \tau_{1'}) C^{>}(\tau_1, \tau_{1'}) + \theta_{\gamma}(\tau_{1'} - \tau_1) C^{<}(\tau_1, \tau_{1'}), \qquad (3.31)$$

dove con θ_{γ} generalizziamo l'usuale funzione di Heavside reale rispetto al confronto degli argomenti considerati sul contorno γ .

Come osservato in precedenza per la forma assunta dal valore di aspettazione di una sola osservabile, scritto nel formalismo del contorno, l'espressione ottenuta isola i termini complicati del problema in fattori esponenziali, mentre trasferisce la dipendenza temporale e l'operatore densità rispetto a cui eseguire il calcolo agli stessi relativi al solo termine imperturbato, non interagente e quadratico, H_0 . La difficoltà analitica

¹Le motivazioni utilizzate sono le stesse che ci hanno permesso in precedenza di estendere la curva di riferimento γ nel consueto contorno di Keldysh, come mostrato in uno dei capitoli precedenti

CAPITOLO 3. VALORI DI ASPETTAZIONE

nell'avere a che fare con gli operatori $S'_{\gamma,H_0} \in S^i_{\gamma,H_0}$ viene parzialmente rimossa dalla loro espansione nei relativi sviluppi di Taylor e nella trattazione perturbativa del problema:

$$S'_{\gamma,H_{0}} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{\gamma} d\tau H'_{H_{0}}(\tau)\right)$$

= $\sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{k} \frac{1}{k!} \int_{\gamma} d\tau_{1} \dots \int_{\gamma} d\tau_{k} H'_{H_{0}}(\tau_{1}) \dots H'_{H_{0}}(\tau_{k})$ (3.32)

e analogamente per lo sviluppo di S^i_{γ,H_0} .

A questo riguardo è necessario introdurre il Teorema di Wick che permette di trattare l'oggetto fondamentale che otteniamo nella valutazione a qualunque ordine di questa trattazione: il valore di aspettazione rispetto ad un operatore densità quadratico di una stringa di operatori relativi a τ differenti (o equivalentemente a tempi differenti) sotto il simbolo complessivo di T_{γ} -ordinamento.

3.2.4 Teorema di Wick e teoria perturbativa

Riassumendo quanto ottenuto, la trattazione del calcolo dei valori di aspettazione di un prodotto di più osservabili svolta sinora, ha portato ai risultati di Kadanoff-Baym e di Schwinger-Keldysh, relativamente al contorno adoperato, come:

$$\langle T_{\gamma} (A_{1}(\tau_{1})A_{2}(\tau_{2})\dots A_{n}(\tau_{n})) \rangle = \frac{\operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H_{0}} T_{\gamma_{tot}} \left\{ S_{\gamma,H_{0}}^{\prime} S_{\gamma_{tot},H_{0}}^{i} A_{1H_{0}}(\tau_{1})\dots A_{nH_{0}}(\tau_{n}) \right\} \right] }{\operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H_{0}} T_{\gamma_{tot}} \left\{ S_{\gamma,H_{0}}^{\prime} S_{\gamma_{tot},H_{0}}^{i} \right\} \right]$$
$$= \langle T_{\gamma} \left\{ S_{\gamma,H_{0}}^{\prime} S_{\gamma,H_{0}}^{i} A_{1H_{0}}(\tau_{1})\dots A_{nH_{0}}(\tau_{n}) \right\} \rangle_{0}.$$
(3.33)

Entrambi i risultati ammettono le fondamentali proprietà per cui:

- l'operatore densità utilizzato è quello relativo all'equilibrio termodinamico dello stesso sistema sottoposto alla sola Hamiltoniana quadratica H_0 : nel primo caso questo è verificato a meno del fattore di partizione nascosto nel denominatore, nel secondo invece in maniera rigorosa;
- i termini esponenziali contengono come argomenti le Hamiltoniane di perturbazione, sia l'interazione fuori equilibrio H'(t) che quella non quadratica H^i , scritte in rappresentazione di interazione rispetto alla stessa H_0 che ne governa la dinamica.

Come già considerato, una volta sostituiti agli esponenziali i corrispondenti sviluppi in serie, il soggetto principale ad ogni ordine risulta il valore di aspettazione, rispetto ad un operatore densità quadratico, di una stringa di operatori espressi nello stesso disegno, sotto il simbolo complessivo di T_{γ} -ordinamento. Vogliamo perciò valutare ora come trattare una scrittura di questo tipo:

$$\langle T_{\gamma} \big(O_1(\tau_1) O_2(\tau_2) \dots O_n(\tau_n) \big) \rangle_0. \tag{3.34}$$

CAPITOLO 3. VALORI DI ASPETTAZIONE

La risposta a questo interrogativo è fornita dal Teorema di Wick, un potente strumento teorico su cui si fondano le trattazioni perturbative dei generici correlatori per un sistema all'equilibrio, sia a temperatura nulla (formulazione di Feynman-Dyson) o meno (Matsubara), la cui versione è esattamente quella generalizzata ed utilizzata in questo caso. Applicabile il Teorema in questa situazione grazie alle proprietà messe in evidenza in precedenza, esso afferma che la scrittura (3.34) ammette la proprietà gaussiana, è possibile cioè scriverla come la somma, su tutti i possibili accoppiamenti delle osservabili, dei prodotti dei valori di aspettazione sotto le stesse condizioni di due di esse alla volta, o, detto in altri termini, dei correlatori a coppie caratterizzati da un operatore densità quadratico ed indicato sinteticamente dal pedice ₀ utilizzato:

$$\langle T_{\gamma} \big(O_1(\tau_1) \dots O_n(\tau_n) \big) \rangle_0 = \sum_{\substack{\text{possibili} \\ \text{coppie}}} \prod_{q,q'} \langle T_{\gamma} \big(O_q(\tau) O_{q'}(\tau') \big) \rangle_0$$

$$= \sum_{\substack{\text{possibili} \\ \text{coppie}}} \prod_{q,q'} C_{q,q'}^0(\tau,\tau').$$

$$(3.35)$$

Il risultato ottenuto permette allora di ricondurre il calcolo di qualunque correlatore di n osservabili ad una composizione di ordini differenti di contributi provenienti da correlatori a due operatori alla volta, sempre definiti sul contorno.

Applicando questo risultato ad ogni ordine dello sviluppo delle espressioni (3.33), la trattazione dell'oggetto principale è esattamente equivalente a quella svolta per il correlatore corrispondente in condizioni di equilibrio termodinamico. È possibile dunque costruire una rappresentazione diagrammatica che tenga conto dello sviluppo ad ogni ordine ed allo stesso modo è possibile dimostrare a partire da questa l'*equazione di Dyson* corrispondente

$$C(\tau_{1},\tau_{1'}) = C^{0}(\tau_{1},\tau_{1'}) + \int_{\gamma} d\tau_{2} C^{0}(\tau_{1},\tau_{2}) V(\tau_{2}) C(\tau_{2},\tau_{1'}) + \int_{\gamma} d\tau_{2} \int_{\gamma} d\tau_{3} C^{0}(\tau_{1},\tau_{2}) \Sigma(\tau_{2},\tau_{3}) C(\tau_{3},\tau_{1'}),$$
(3.36)

dove C è il generico correlatore, C_0 la funzione relativa ad un operatore densità quadratico, $V(\tau)$ il termine che riassume la perturbazione fuori equilibrio, la *self-energia* $\Sigma(\tau, \tau')$ quello che considera l'interazione non quadratica e, infine, gli integrali sono estesi sul contorno. Una volta specificato, rispetto al problema particolare considerato, la forma esplicita di V, $\Sigma \in C_0$, il problema del calcolo del generico C è formalmente risolto grazie all'applicazione di questa conveniente trattazione, la cui completa e dettagliata esposizione non è comunque l'obiettivo del seguente lavoro di tesi.

Capitolo 4

Relazione con le funzioni reali

Abbiamo osservato come il problema del calcolo del valore di aspettazione di due osservabili T_{γ} -ordinate si riconduce al calcolo delle espressioni

$$C(\tau, \tau') = \langle T_{\gamma} A(\tau) B(\tau') \rangle = \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta H_0} T_{\gamma_{tot}} \left\{ S'_{\gamma, H_0} S^i_{\gamma_{tot}, H_0} A_{H_0}(\tau) B_{H_0}(\tau') \right\} \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta H_0} T_{\gamma_{tot}} \left\{ S'_{\gamma, H_0} S^i_{\gamma_{tot}, H_0} \right\} \right]}, \qquad (4.1)$$
$$= \langle T_{\gamma} \left\{ S'_{\gamma, H_0} S^i_{\gamma, H_0} A_{H_0}(\tau) B_{H_0}(\tau') \right\} \rangle_0$$

che possono essere calcolate tenendo conto dello sviluppo in serie degli esponenziali presenti e dell'applicazione del Teorema di Wick ad ogni ordine sull'elemento centrale così ottenuto. Il risultato di una trattazione di questo tipo è una teoria perturbativa completa del correlatore studiato, che porta da un lato alla possibilità di una rappresentazione diagrammatica conveniente del problema e dall'altro alla fondamentale equazione di Dyson relativa alle grandezze considerate:

$$C(1,1') = C_0(1,1') + \int_{\gamma} d2 C_0(1,2) V(2) C(2,1') + \int_{\gamma} d2 \int_{\gamma} d3 C_0(1,2) \Sigma(2,3) C(3,1'),$$

$$(4.2)$$

avendo introdotto la notazione conveniente per cui $(\tau_j) = j$ nella scrittura simbolica utilizzata. All'interno di questa espressione ricorsiva, punto di partenza per qualunque altra trattazione successiva, $C_0(\tau, \tau')$ rappresenta il correlatore scritto in riferimento ad un altro operatore statistico quadratico, detto perciò enfaticamente *correlatore imperturbato* (e al suo interno gli operatori sono scritti in rappresentazione di interazione rispetto all'Hamiltoniana H_0), $V(\tau)$ rappresenta un potenziale esterno ad un corpo che riassume la perturbazione fuori equilibrio e $\Sigma(\tau, \tau')$ la *self-energia* che tiene conto di tutti i contributi di interazione tra le particelle. Dal punto di vista formale la scrittura è la naturale generalizzazione di quella che si ricava per lo stesso calcolo in condizioni di equilibrio termodinamico, a meno della presenza dell'integrazione sul contorno al posto di quella consueta sull'asse reale dei tempi. Quest'ultimo aspetto costituisce anche la principale difficoltà che si riscontra a questo punto nella risoluzione analitica di un problema di questo genere, in quanto rispetto al solo formalismo del contorno è praticamente impossibile procedere oltre col calcolo diretto. In definitiva pertanto, il correlatore definito sul contorno ammette una conveniente e completa teoria perturbativa ma è intrattabile dal punto di vista del calcolo analitico; al contrario le analoghe funzioni reali mostrate in precedenza hanno un preciso significato fisico e metodi risolutivi noti, ma nella loro prima presentazione all'interno del problema considerato non sono particolarmente vantaggiose.

Il percorso che seguiremo perciò nel seguente capitolo sarà quello di mostrare il legame presente tra le funzioni considerate e successivamente di sostituire all'integrazione sulla curva γ quella relativa ai tempi reali, procedimento detto *continuazione analitica*, in modo da arrivare ad avere delle relazioni che ci permettano di tradurre nel formalismo reale abituale i risultati della teoria ambientata nel formalismo del contorno.

4.1 Rappresentazione matriciale

Le relazioni che intercorrono tra il correlatore T_{γ} -ordinato e la famiglia di funzioni analoghe aventi parametri reali, dipendono fortemente dalla scelta della posizione dei punti $\tau_1 \in \tau_{1'}$ sulla curva globale e dal rispettivo confronto. Si può dimostrare agevolmente come

$$C(\tau_{1},\tau_{1'}) = \begin{cases} C^{T}(t_{1},t_{1'}) & \text{se } \tau_{1},\tau_{1'} \in \gamma_{1} \\ C^{<}(t_{1},t_{1'}) & \text{se } \tau_{1} \in \gamma_{1} \in \tau_{1'} \in \gamma_{2} \\ C^{>}(t_{1},t_{1'}) & \text{se } \tau_{1} \in \gamma_{2} \in \tau_{1'} \in \gamma_{1} \\ C^{\bar{T}}(t_{1},t_{1'}) & \text{se } \tau_{1},\tau_{1'} \in \gamma_{2} \end{cases}$$
(4.3)

avendo considerato t_1
e t_{1^\prime} come le corrispondenti proiezioni sull'asse reale dei punti della curva.

I risultati trovati giustificano l'introduzione di una notazione conveniente in molte trattazioni, che metta in risalto la proprietà del correlatore sulla curva di ammettere componenti reali a seconda dei differenti casi. Definiamo perciò la *rappresentazione matriciale* della funzione $C(\tau_1, \tau_{1'})$ rispetto alla libertà dei suoi parametri di appartenere a γ_1 o γ_2 , introducendo la matrice generalizzata 2×2 , C come:

$$\mathcal{C}_{ij} = \left(C(\tau_1, \tau_{1'})\right)_{\substack{\tau_1 \in \gamma_i \\ \tau_{1'} \in \gamma_j}}.$$
(4.4)

Rispetto alle espressioni (4.3) si ricava immediatamente la forma che essa assume come

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} \mathcal{C}_{11} & \mathcal{C}_{12} \\ \mathcal{C}_{21} & \mathcal{C}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C^T & C^< \\ C^> & C^{\bar{T}} \end{pmatrix}, \tag{4.5}$$

dove le funzioni reali utilizzate sono legate tra loro dalle numerose relazioni (3.16) e (3.21).

La dipendenza esistente tra di esse suggerisce l'introduzione di una ulteriore trasformazione matriciale che permetta di scrivere la matrice rispetto ad un altro set di funzioni reali e di semplificarne il numero necessario alla descrizione. Questo è svolto dalla conveniente rappresentazione di Larkin-Ovchinnikov rispetto alla quale definiamo la matrice \mathcal{C}' a partire dalle precedente come

$$\mathcal{C}' = \mathcal{L} \, \tau^{(3)} \, \mathcal{C} \, \mathcal{L}^{\dagger}, \tag{4.6}$$

dove $\mathcal{L} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau^{(0)} - i\tau^{(2)}) e \tau^{(i)} \operatorname{con} i = 0 \dots 3$ sono le matrici di Pauli ($\tau^{(0)}$ è l'identità). Con questa definizione \mathcal{C}' ammette la scrittura suggestiva

$$\mathcal{C}' = \begin{pmatrix} C^{ret} & C^K \\ 0 & C^{av} \end{pmatrix}. \tag{4.7}$$

L'utilità di queste rappresentazioni risiede nella possibilità, così facendo, di trasformare relazioni, come l'equazione di Dyson, da espressioni che legano tra loro funzioni definite sul contorno ad altre matriciali riferite a funzioni di correlazioni reale dotate di un preciso significato fisico. Un lavoro del tutto simile viene eseguito sui risultati diagrammatici che si ottengono per il correlatore $C(\tau, \tau')$.

4.2 Teorema di Langreth

La forma esplicita dell'equazione di Dyson suggerisce la forma di alcune quantità integrali su γ tipicamente riscontrabili in una trattazione di questo tipo, ad esempio

$$c(1,1') = \int_{\gamma} d\tau_2 \, a(1,2) \, b(2,1'), \tag{4.8}$$

analoga al *prodotto di convoluzione* rispetto ad una variabile muta del contorno, o similmente una sua generilazzione per un numero maggiore di operatori. Siamo interessati a tradurre queste relazioni nel formalismo reale, nel quale l'integrazione può essere affrontata in maniera più agevole e rispetto alle cui funzioni di correlazione reali possediamo una teoria più trattabile.

Per fare ciò, consideriamo per iniziare il caso in cui l'oggetto cui siamo interessati sia nella forma di tipo *lesser* secondo la classificazione fatta in precedenza nel confronto dei suoi argomenti

$$c^{<}(1,1') = \int_{\gamma_0} d2 \, a(1,2) \, b(2,1') \quad \text{con } \tau_1 <_{\gamma} \tau_{1'}. \tag{4.9}$$

Una quantità di questo tipo indica che per qualunque curva γ_0 scelta, il punto $\tau_{1'}$ appare successivamente a τ_1 rispetto al verso di percorrenza stabilito. Come abbiamo visto in alcune dimostrazioni precedenti, a partire dal contorno canonico di Keldysh siamo liberi di utilizzarne altri particolari equivalenti: tenendo conto di questa proprietà pertanto deformiamo quello generico non esteso all' ∞ (Figura 4.1) nella somma $\gamma_1 + \gamma_{1'}$ come mostrato in Figura 4.2.



Figura 4.1: Generica curva γ_0 che soddisfa la relazione di tipo *lesser* tra i punti interessati.



Figura 4.2: Deformazione della curva γ_0 nell'unione dei tratti $\gamma_1 \in \gamma_{1'}$.

A questo punto possiamo pertanto scrivere la relazione iniziale rispetto al contorno scelto e alla sua deformazione, spezzando i due termini relativi alle curve distinte messe in evidenza:

$$c^{<}(1,1') = \int_{\gamma_{0}} d2 \, a(1,2) \, b(2,1') = \int_{\gamma_{1}} d2 \, a(1,2) \, b(2,1') + \int_{\gamma_{1'}} d2 \, a(1,2) \, b(2,1').$$
(4.10)

In queste condizioni però la variabile integrale τ_2 assume nel primo integrale solo valori appartenenti alla curva γ_1 , quindi il termine integrato $b(\tau_2, \tau_{1'})$ sarà sempre di tipo *lesser*; con un ragionamento analogo nel secondo integrale $a(\tau_1, \tau_2)$ è sempre dello stesso tipo:

$$c^{<}(1,1^{'}) = \int_{\gamma_{1}} d2 \, a(1,2) \, b^{<}(2,1^{'}) + \int_{\gamma_{1^{'}}} d2 \, a^{<}(1,2) \, b(2,1^{'}). \tag{4.11}$$

Spezzando entrambi i contorni nei tratti propaganti e antipropaganti, nel modo e con la notazione mostrati sinteticamente in Figura 4.3 per una curva generica, possiamo associare nello stesso modo il carattere delle funzioni dal confronto degli argomenti (scritto per comodità di volta in volta a destra di ogni addendo), ottenendo ancora una riscrittura in termini di integrali curvilinei del tipo



Figura 4.3: Decomposizione della generica curva γ nei tratti propagante e antipropagante.

$$c^{<}(1,1^{'}) = \int_{\overrightarrow{\gamma_{1}}} d2 \, a^{>}(1,2) \, b^{<}(2,1^{'}) + \qquad \overrightarrow{\gamma_{1}} : \tau_{1} >_{\gamma} \tau_{2} \\ + \int_{\overleftarrow{\gamma_{1}}} d2 \, a^{<}(1,2) \, b^{<}(2,1^{'}) + \qquad \overleftarrow{\gamma_{1}} : \tau_{1} <_{\gamma} \tau_{2} \\ + \int_{\overrightarrow{\gamma_{1'}}} d2 \, a^{<}(1,2) \, b^{<}(2,1^{'}) + \qquad \overrightarrow{\gamma_{1'}} : \tau_{2} >_{\gamma} \tau_{1'} \\ + \int_{\overleftarrow{\gamma_{1'}}} d2 \, a^{<}(1,2) \, b^{>}(2,1^{'}) \cdot \qquad \overleftarrow{\gamma_{1'}} : \tau_{2} <_{\gamma} \tau_{1'} \end{cases}$$
(4.12)

Siamo ora nella posizione di poter parametrizzare i contorni ai quali siamo arrivati trasformandoli finalmente in intervalli reali (assumiamo di mandare ora t_0 a $-\infty$ di modo da utilizzare solo il consueto contorno di Keldysh come riferimento):

$$c^{<}(1,1') = \int_{-\infty}^{t_{1}} dt_{2} a^{>}(t_{1},t_{2}) b^{<}(t_{2},t_{1'}) - \int_{-\infty}^{t_{1}} dt_{2} a^{<}(t_{1},t_{2}) b^{<}(t_{2},t_{1'}) + \int_{-\infty}^{t_{1'}} dt_{2} a^{<}(t_{1},t_{2}) b^{<}(t_{2},t_{1'}) - \int_{-\infty}^{t_{1'}} dt_{2} a^{<}(t_{1},t_{2}) b^{>}(t_{2},t_{1'})$$

$$(4.13)$$

e raccogliendo

$$c^{<}(1,1') = \int_{-\infty}^{t_{1}} dt_{2} \left[a^{>}(t_{1},t_{2}) - a^{<}(t_{1},t_{2}) \right] b^{<}(t_{2},t_{1'}) + \int_{-\infty}^{t_{1'}} dt_{2} a^{<}(t_{1},t_{2}) \left[b^{<}(t_{2},t_{1'}) - b^{>}(t_{2},t_{1'}) \right].$$

$$(4.14)$$

Inseriamo delle opportune funzioni θ di modo da estendere gli integrali sino all' ∞

$$c^{<}(1,1') = \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2 \,\theta(t_1 - t_2) \left[a^{>}(t_1, t_2) - a^{<}(t_1, t_2) \right] b^{<}(t_2, t_{1'}) + \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2 \, a^{<}(t_1, t_2) \,\theta(t_{1'} - t_2) \left[b^{<}(t_2, t_{1'}) - b^{>}(t_2, t_{1'}) \right]$$
(4.15)

e riconosciamo le espressioni delle osservabili rispettivamente ritardata e avanzata,

$$C^{ret}(t_1, t_{1'}) = \theta(t_1 - t_{1'}) \left(C^{>}(t_1, t_{1'}) - C^{<}(t_1, t_{1'}) \right)$$

$$C^{av}(t_1, t_{1'}) = \theta(t_{1'} - t_1) \left(C^{>}(t_1, t_{1'}) - C^{<}(t_1, t_{1'}) \right)$$
(4.16)

in modo che, raccogliendo i termine sotto un unico simbolo integrale, possiamo ottenere il risultato

$$c^{<}(t_{1},t_{1'}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[a^{ret}(t_{1},t) \, b^{<}(t,t_{1'}) + a^{<}(t_{1},t) \, b^{av}(t,t_{1'}) \right]. \tag{4.17}$$

L'evidente utilità della riscrittura così compiuta è quella di aver trasformato un'espressione riferita a variabili del contorno ad una equivalente che racchiude solo quantità reali definite su intervalli anch'essi reali.

Introducendo il simbolo \circ per la generica moltiplicazione matriciale, che nel nostro caso consiste nelle somme sui gradi di libertà interni e nell'integrazione di convoluzione su tutta la retta reale dei tempi rispetto alla variabile intermedia, otteniamo la riscrittura compatta del risultato trovato come

$$c^{<}(t_{1},t_{1'}) = a^{ret}(t_{1},t) \circ b^{<}(t,t_{1'}) + a^{<}(t_{1},t) \circ b^{av}(t,t_{1'}).$$

$$(4.18)$$

Allo stesso modo è possibile dimostrare la formula analoga relativa al caso in cui prendiamo in considerazione l'oggetto nella sua forma *greater*:

$$c^{>}(t_{1}, t_{1'}) = a^{ret}(t_{1}, t) \circ b^{>}(t, t_{1'}) + a^{>}(t_{1}, t) \circ b^{av}(t, t_{1'}).$$

$$(4.19)$$

I risultati trovati per le funzioni reali $c^{<}(t_1, t_{1'})$ e $c^{>}(t_1, t_{1'})$ ci permettono di ricavare le espressioni esplicite dei correlatori $c^{av}(t_1, t_{1'})$ e $c^{ret}(t_1, t_{1'})$ a partire dalla loro definizione rispetto alle relazioni (4.16). Nel caso della funzione ritardata:

$$c^{ret}(t_1, t_{1'}) = \theta(t_1 - t_{1'}) \left(C^{>}(t_1, t_{1'}) - C^{<}(t_1, t_{1'}) \right) = \theta(t_1 - t_{1'}) \left[a^{ret} \circ b^{>} + a^{>} \circ b^{av} - a^{ret} \circ b^{<} - a^{<} \circ b^{av} \right]$$
(4.20)

sottointendendo per comodità gli indici temporali, tenendo conto del loro ordine a sinistra dell'equazione e del significato del simbolo di moltiplicazione \circ . Combinando opportunamente le variabili presenti tra parentesi, ricaviamo

$$c^{ret}(t_1, t_{1'}) = \theta(t_1 - t_{1'}) \left[a^{ret} \circ (b^> - b^<) + (a^> - a^<) \circ b^{av} \right]$$
(4.21)

o, esplicitamente, sostituendo al simbolo \circ quello di moltiplicazione canonico e l'integrazione:

$$c^{ret}(t_1, t_{1'}) = \theta(t_1 - t_{1'}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \, a^{ret} \cdot (b^> - b^<) + \theta(t_1 - t_{1'}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \, (a^> - a^<) \cdot b^{av}.$$
(4.22)

Sostituendo ora alle funzioni ritardata e anticipata presenti la rispettiva espressione usata anche in precedenza

$$c^{ret}(t_1, t_{1'}) = \theta(t_1 - t_{1'}) \left[\int_{-\infty}^{t_1} dt \, (a^> - a^<) \cdot (b^> - b^<) \, + \, \int_{-\infty}^{t_{1'}} dt \, (a^> - a^<) \cdot (b^< - b^>) \right]$$
(4.23)

e unendo opportunamente gli integrali, invertendo l'ordine del secondo, ricaviamo

$$c^{ret}(t_1, t_{1'}) = \theta(t_1 - t_{1'}) \int_{t_{1'}}^{t_1} dt \, (a^> - a^<) \cdot (b^> - b^<). \tag{4.24}$$

quantità sul contorno	quantità reali
$c=\int_{\gamma}ab$	$\begin{split} c^{\lessgtr} &= \int_t (a^{ret} b^{\lessgtr} + a^{\lessgtr} b^{av}) \\ c^{ret,av} &= \int_t a^{ret,av} b^{ret,av} \end{split}$
$d = \int_{\gamma} \int_{\gamma} a b c$	$ \begin{aligned} d^{\lessgtr} &= \int_{t_1} \int_{t_2} \left(a^{ret} b^{ret} c^{\lessgtr} + a^{ret} b^{\lessgtr} c^{av} + a^{\lessgtr} b^{av} c^{av} \right) \\ d^{ret,av} &= \int_{t_1} \int_{t_2} a^{ret,av} b^{ret,av} c^{ret,av} \end{aligned} $
$c_{\rightrightarrows}(\tau_1, \tau_{1'}) = a(\tau_1, \tau_{1'}) b(\tau_1, \tau_{1'})$	$\begin{array}{l} c^{\lessgtr}_{\rightrightarrows} = a^{\lessgtr} b^{\lessgtr} \\ c^{ret,av}_{\rightrightarrows} = a^{<} b^{ret,av} + a^{ret,av} b^{ret,av} \mp a^{ret,av} b^{ret,av} \end{array}$
$c_{\leftrightarrows}(\tau_1, \tau_{1'}) = a(\tau_1, \tau_{1'}) b(\tau_{1'}, \tau_1)$	$\begin{array}{ll} c^{\lessgtr}_{\leftrightarrows}(t_1,t_{1'}) = a^{\lessgtr}(t_1,t_{1'}) b^{\gtrless}(t_{1'},t_1) \\ c^{ret,av}_{\leftrightarrows}(t_1,t_{1'}) &= a^{\lt}(t_1,t_{1'}) b^{ret,av}(t_{1'},t_1) \\ a^{av,ret}(t_1,t_{1'}) b^{\lt}(t_{1'},t_1) \end{array}$

Tabella 4.1: rappresentazione compatta del Teorema di Langreth con le regole di continuità analitica nel passaggio tra funzioni definite sul contorno e simili quantità reali

Possiamo infine scomporre la funzione θ nel modo seguente

$$\theta(t_1 - t_{1'}) = \theta(t_1 - t)\,\theta(t - t_{1'}) \tag{4.25}$$

in modo da riconoscere esplicitamente, di nuovo, l'espressione delle variabili nella loro forma ritardata e ottenere perciò l'elegante risultato

$$c^{ret,av}(t_1, t_{1'}) = a^{ret,av}(t_1, t) \cdot b^{ret,av}(t, t_{1'}), \qquad (4.26)$$

generalizzato anche al caso di assumere dall'inizio la forma anticipata anzichè quella ritardata.

I risultati ottenuti fino ad ora si riferiscono ai calcoli relativi al tipico prodotto di convoluzione di due operatori definiti sul contorno che si può incontrare all'interno dei risultati della teoria perturbativa di un correlatore dello stesso tipo. Le altre uniche forme standard riscontrabili in queste situazioni sono la generalizzazione di queste ultime per un numero maggiore di osservabili coinvolte oppure quelle del cosiddetto prodotto parallelo o antiparallelo, rispettivamente nella forma

$$c_{\Rightarrow}(\tau_1, \tau_{1'}) = a(\tau_1, \tau_{1'}) b(\tau_1, \tau_{1'})$$

$$c_{\Rightarrow}(\tau_1, \tau_{1'}) = a(\tau_1, \tau_{1'}) b(\tau_{1'}, \tau_1).$$
(4.27)

Seguendo il procedimento appena illustrato, possiamo ricavare immediatamente le espressioni corrispondenti per il prolungamento analitico, riunite complessivamente nell'espressione del cosiddetto *Teorema di Langreth* che esprime per ognuno di questi oggetti generali le relative componenti reali, come mostrato nella relativa Tabella (4.1).

Grazie ai risultati ottenuti siamo quindi in grado di tradurre nel formalismo reale ogni quantità o equazione scritta in quello del contorno, nonchè qualunque diagramma ottenuto dalla teoria perturbativa.

4.3 Equazione di Keldysh

Una delle più semplici e istruttive applicazioni del Teorema di Langreth è quella nei confronti dell'equazione di Dyson valida per il correlatore definito sul contorno

$$C(\tau_{1},\tau_{1'}) = C_{0}(\tau_{1},\tau_{1'}) + \int_{\gamma} d\tau_{2} C_{0}(\tau_{1},\tau_{2}) V(\tau_{2}) C(\tau_{2},\tau_{1'}) + \int_{\gamma} d\tau_{2} \int_{\gamma} d\tau_{3} C_{0}(\tau_{1},\tau_{2}) \Sigma(\tau_{2},\tau_{3}) C(\tau_{3},\tau_{1'}),$$

$$(4.28)$$

che permette così di poter calcolare una serie di equazioni integrali analoghe valide per le corrispondenti componenti reali ricavabili dal Teorema di Langreth (4.1). Usando dapprima le relazioni valide per le forme anticipate e ritardate, otteniamo

$$C^{ret,av}(1,1') = C_0^{ret,av}(1,1') + \int_t d2 C_0^{ret,av}(1,2) V(2) C^{ret,av}(2,1') + \int_t d2 \int_t d3 C_0^{ret,av}(1,2) \Sigma^{ret,av}(2,3) C^{ret,av}(3,1')$$
(4.29)

all'interno della quale abbiamo tenuto conto che V sia un potenziale ad un corpo e che, come tale, sia esprimibile con una δ temporale che lo esuli da un'eventuale interpretazione ritardata o anticipata. L'espressione ricavata permette di osservare come i correlatori relativi soddisfino in condizioni di non equilibrio la stessa equazione di Dyson che soddisfano all'equilibrio, corretta per il termine corrispondente che tiene conto della perturbazione.

Per quanto riguarda le espressioni *greater* e *lesser*, la sostituzione iniziale delle relazioni, in questo caso molto meno elementari, provenienti dal Teorema di Langreth porta al risultato

$$C^{\leq}(1,1') = C_0^{\leq}(1,1') + \int_t d2 \left[C_0^{ret}(1,2) V(2) C^{\leq}(2,1') + C_0^{\leq}(1,2) V(2) C^{av}(2,1') \right] + \int_t d2 \int_t d3 \left[C_0^{ret}(1,2) \Sigma^{ret}(2,3) C^{\leq}(3,1') + C_0^{ret}(1,2) \Sigma^{\leq}(2,3) C^{av}(3,1') + C_0^{\leq}(1,2) \Sigma^{av}(2,3) C^{av}(3,1') \right]$$

$$(4.30)$$

il quale evidenzia il comportamento più complicato di queste grandezze rispetto al caso appena trattato. La presenza del correlatore indagato anche a destra dell'uguaglianza suggerisce tuttavia una risoluzione della scrittura per sostituzione. Seguendo questa idea, semplifichiamo ulteriormente l'espressione ridefinendo il correlatore imperturbato di modo che tenga conto del potenziale V e siano dunque mascherati i termini legati allo sviluppo di quest'ultimo.

Agendo per sostituzione una prima volta, otteniamo

$$\begin{split} C^{\leq}(1,1') &= \int_{t} d2 \dots \int_{t} d5 \, C_{0}^{ret}(1,2) \Sigma^{ret}(2,3) \, C^{0^{ret}}(3,4) \Sigma^{ret}(4,5) C^{\leq}(5,1') + \\ &+ \int_{t} d2 \int_{t} d3 \, C_{0}^{ret}(1,2) \Sigma^{\leq}(2,3) C^{av}(3,1') + \\ &+ \int_{t} d2 \dots \int_{t} d5 \, C_{0}^{ret}(1,2) \Sigma^{ret}(2,3) C_{0}^{ret}(3,4) \Sigma^{\leq}(4,5) C^{av}(5,1') + \\ &+ C_{0}^{\leq}(1,1') + \int_{t} d2 \int_{t} d3 \, C_{0}^{\leq}(1,2) \Sigma^{av}(2,3) C^{av}(3,1') + \\ &+ \int_{t} d2 \int_{t} d3 \, C_{0}^{ret}(1,2) \Sigma^{ret}(2,3) C^{\leq}(3,1') + \\ &+ \int_{t} d2 \dots \int_{t} d5 \, C_{0}^{ret}(1,2) \Sigma^{ret}(2,3) C_{0}^{\leq}(3,4) \Sigma^{av}(4,5) C^{av}(5,1') \end{split}$$

$$(4.31)$$

scrivibile riordinandolo opportunamente, in maniera più compatta ed elegante secondo la notazione matriciale usata precedentemente, come

$$C^{\leq} = C_0^{ret} \circ \Sigma^{ret} \circ C_0^{ret} \circ \Sigma^{ret} \circ C^{\leq} + (C_0^{ret} + C_0^{ret} \circ \Sigma^{ret} \circ C_0^{ret}) \circ \Sigma^{\leq} \circ C^{av} + (1 + C_0^{ret} \circ \Sigma^{ret}) \circ C_0^{\leq} \circ (1 + \Sigma^{av} \circ C^{av}).$$

$$(4.32)$$

A partire dal risultato trovato possiamo generalizzare quindi il risultato del calcolo all'infinitesimo ordine dell'interazione, ottenendo le equazioni dei correlatori greater e lesser del problema come

$$C^{\leq} = (1 + C_0^{ret} \circ \Sigma^{ret}) \circ C_0^{\leq} \circ (1 + \Sigma^{av} \circ C^{av}) + C_0^{ret} \circ \Sigma^{\leq} \circ C^{av},$$
(4.33)

dette equazioni di Keldysh.

Tenendo conto della semplificazione fatta riguardo alle componenti che riguardavano il potenziale ad un corpo V, è possibile ricavare la stessa espressione tenendo conto esplicitamente di quest'ultima grandezza, e risulta

$$C^{\lessgtr} = \left(1 + C_0^{ret} \circ (\Sigma^{ret} + V)\right) \circ C_0^{\lessgtr} \circ \left(1 + (\Sigma^{av} + V) \circ C^{av}\right) + C_0^{ret} \circ \Sigma^{\lessgtr} \circ C^{av}.$$
(4.34)

4.4 Relazioni con le funzioni di Green

Abbiamo dedotto fino ad ora le relazioni trovate ed il formalismo in riferimento a generici correlatori tra osservabili di un sistema fisico in particolari condizioni, valori medi termici cioè del prodotto di più operatori dei quali per ora non abbiamo specificato alcuna caratteristica.

Considerando per semplicità il caso semplificato in cui ne utilizziamo solo due, il nostro

``

studio si è focalizzato sulle seguenti quantità:

$$C^{>}(t_{1}, t_{1'}) = \langle A(t_{1}) B(t_{1'}) \rangle$$

$$C^{<}(t_{1}, t_{1'}) = \pm \langle B(t_{1'}) A(t_{1}) \rangle$$

$$C^{T}(t_{1}, t_{1'}) = \langle T A(t_{1}) B(t_{1'}) \rangle$$

$$C^{\bar{T}}(t_{1}, t_{1'}) = \langle \bar{T} A(t_{1}) B(t_{1'}) \rangle$$

$$C^{ret}(t_{1}, t_{1'}) = \theta(t_{1} - t_{1'}) \langle [A(t_{1}), B(t_{1'})]_{\mp} \rangle$$

$$C^{av}(t_{1}, t_{1'}) = \theta(t_{1'} - t_{1}) \langle [A(t_{1}), B(t_{1'})]_{\mp} \rangle$$

$$C^{K}(t_{1}, t_{1'}) = \langle [A(t_{1}), B(t_{1'})]_{\pm} \rangle$$

$$C(\tau_{1}, \tau_{1'}) = \langle T_{\gamma} A(\tau_{1}) B(\tau_{1'}) \rangle$$

$$(4.35)$$

e abbiamo visto come, a partire dai risultati provenienti dallo studio teorico dell'ultima, sia possibile ricavare relazioni che soddisfano le funzioni precedenti rispetto al problema considerato.

Ambientando ora la trattazione nella seconda quantizzazione, siamo interessati a valutare il caso particolare in cui alle generiche osservabili $A \in B$ sostituiamo degli operatori di campo, rispettivamente al primo il distruttore ψ e al secondo il costruttore ψ^{\dagger} , entrambi relativi secondo la propria definizione ad un set di variabili tra cui la posizione x, lo spin σ (che tuttavia lasciamo generalmente sottointeso) e l'opportuno parametro temporale, sia esso t reale o τ sul contorno a seconda della quantità trattata. Con tale precisazione, i correlatori a due osservabili precedenti assumono l'aspetto delle consuete Funzioni di Green a un corpo (e in maniera equivalente per un numero maggiore di osservabili le analoghe funzioni a più corpi):

$$\begin{split} G^{>}_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},t_{1};x_{1'},t_{1'}) &= \langle \psi_{\sigma_{1}}(x_{1},t_{1})\psi^{\dagger}_{\sigma_{1'}}(x_{1'},t_{1'})\rangle \\ G^{<}_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},t_{1};x_{1'},t_{1'}) &= \pm \langle \psi^{\dagger}_{\sigma_{1'}}(x_{1'},t_{1'})\psi_{\sigma_{1}}(x_{1},t_{1})\rangle \\ G^{T}_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},t_{1};x_{1'},t_{1'}) &= \langle T\psi_{\sigma_{1}}(x_{1},t_{1})\psi^{\dagger}_{\sigma_{1'}}(x_{1'},t_{1'})\rangle \\ G^{\bar{T}}_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},t_{1};x_{1'},t_{1'}) &= \langle \bar{T}\psi_{\sigma_{1}}(x_{1},t_{1})\psi^{\dagger}_{\sigma_{1'}}(x_{1'},t_{1'})\rangle \\ G^{ret}_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},t_{1};x_{1'},t_{1'}) &= \theta(t_{1}-t_{1'})\langle \left[\psi_{\sigma_{1}}(x_{1},t_{1}),\psi^{\dagger}_{\sigma_{1'}}(x_{1'},t_{1'})\right]_{\mp} \rangle \\ G^{av}_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},t_{1};x_{1'},t_{1'}) &= \theta(t_{1'}-t_{1})\langle \left[\psi_{\sigma_{1}}(x_{1},t_{1}),\psi^{\dagger}_{\sigma_{1'}}(x_{1'},t_{1'})\right]_{\mp} \rangle \\ G^{K}_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},t_{1};x_{1'},t_{1'}) &= \langle \left[\psi_{\sigma_{1}}(x_{1},t_{1}),\psi^{\dagger}_{\sigma_{1'}}(x_{1'},t_{1'})\right] \rangle \\ G_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},\tau_{1};x_{1'},\tau_{1'}) &= \langle T_{\gamma}\psi_{\sigma_{1}}(x_{1},\tau_{1})\psi^{\dagger}_{\sigma_{1'}}(x_{1'},\tau_{1'}) \rangle. \end{split}$$

Tutti i risultati ottenuti in precedenza possono dunque venire tradotti naturalmente nel formalismo di Green semplicemente sostituendo ai correlatori (4.35) le corrispondenti funzioni (4.36). Richiamando quanto abbiamo dedotto nei capitoli precedenti e tenendo conto dell'ultima osservazione, abbiamo perciò ricavato una teoria perturbativa completa per l'ultima funzione di Green di questo elenco, che conduce da un lato ad una serie di equazioni ambientate sulla curva e dall'altro ad una conveniente trattazione diagrammatica. Alcune utili relazioni riassunte nel Teorema di Langreth infine ci permettono di tradurre questi oggetti e i loro risultati nelle usuali funzioni di Green reali.

4.4.1 Informazioni contenute nelle funzioni di Green

La scelta di utilizzare come particolari correlatori del problema le funzioni di Green è motivata dalle innumerevoli proprietà che esse soddisfano e dalla loro significativa interpretazione fisica, che permette di riassumere al loro interno le principali informazioni sul sistema sotto indagine. Quest'ultimo aspetto appare particolarmente evidente specialmente nel caso di situazioni di stati stazionari, quando cioè non siamo interessati alla fisica relativa ai tempi immediatamente successivi ad un'eventuale variazione del sistema globale, ma al contrario vogliamo considerare il comportamento delle grandezze una volta che queste si sono adattate alla perturbazione. In queste condizioni, di invarianza temporale, si dimostra come le funzioni risultino dipendenti dal punto di vista delle variabili corrispondenti unicamente dalla loro differenza, suggerendo pertanto una conveniente riscrittura delle stesse attraverso la trasformata di Fourier nello spazio coniugato delle energie (equivalente a quello delle frequenze a meno di un opportuno riscalamento delle variabili) come:

$$G^{j}_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},x_{1'},\epsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\epsilon t} G^{j}_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},x_{1'},t_{1}-t_{1'})$$

$$j = \{ret, av, >, <, T, \bar{T}, K\}.$$
(4.37)

Allo stesso modo la simile ipotesi di simmetria spaziale del problema, per cui la dipendenza dalle posizioni si riduca esplicitamente alla loro differenza, suggerisce l'uso di un'analoga trasformata relativa in questo caso allo spazio dei momenti:

$$G^{j}_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(k,\epsilon) = \int \frac{d_{3k}}{(2\pi)^{3}} e^{ikx} G^{j}_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1} - x_{1'},\epsilon)$$

$$j = \{ret, av, >, <, T, \bar{T}, K\}.$$
(4.38)

Introdotte queste espressioni, vogliamo adesso descrivere brevemente le funzioni elencate in (4.36), evidenziando la conveniente interpretazione fisica che ci motiva ad utilizzarle. Considerando per iniziare le definizioni delle funzioni ritardata e anticipata, attraverso l'analisi delle θ temporali implicite al loro interno e al corrispondente ordinamento nell'applicazione degli operatori di campo corrispondenti a tempi diversi, siamo liberi di dar loro l'interpretazione di ampiezze di probabilità relative rispettivamente alla propagazione di una particella o a quella dell'eventuale vacanza lasciata dalla sua distruzione. Similmente, rispetto all'equivalente riscrittura nello spazio delle energie, le funzioni $G^{ret}(x_1, \sigma_1; x_{1'}, \sigma_{1'}; \epsilon)$ e $G^{av}(x_1, \sigma_1; x_{1'}, \sigma_{1'}; \epsilon)$ esprimono la probabilità di aggiungere o distruggere una particella di spin σ_1 ed energia ϵ in x_1 e rimuoverne o crearne un'altra avente spin $\sigma_{1'}$ ed energia ϵ in $x_{1'}$. In entrambe le rappresentazioni perciò ambedue risultano funzioni di risposta all'eccitazione di una particella o di una vacanza lasciata dalla sua distruzione. Tenendo conto di questo, è conveniente introdurre a questo punto la funzione spettrale $A(x_1, \sigma_1; x_{1'}, \sigma_{1'}; \epsilon)$, definita dalla relazione

$$A_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},x_{1'},\epsilon) = i \left[G_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}^{ret}(x_{1},x_{1'},\epsilon) - G_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}^{av}(x_{1},x_{1'},\epsilon) \right] = i \left[G_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}^{>}(x_{1},x_{1'},\epsilon) - G_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}^{<}(x_{1},x_{1'},\epsilon) \right].$$
(4.39)

Grazie alla definizione e alle regole di (anti)commutazione degli operatori di campo, si verifica la proprietà

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} A_{\sigma_1,\sigma_{1'}}(k,\epsilon) = 1, \qquad (4.40)$$

che unita all'interpretazione data dei costituenti G^{ret} e G^{av} ci permette di concludere come sia possibile esprimere attraverso la funzione spettrale la densità degli stati rispetto all'energia fissata

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int \frac{d_3k}{(2\pi)^3} A_{\sigma_1,\sigma_{1'}}(k,\epsilon).$$
(4.41)

Quest'ultima interpretazione di A offre la possibilità di estenderne una simile anche alle funzioni greater e lesser, legate alla prima dalle fondamentali relazioni

$$G_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}^{<}(x_{1},x_{1'},\epsilon) = \pm if(\epsilon)A_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},x_{1'},\epsilon)$$

$$G_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}^{>}(x_{1},x_{1'},\epsilon) = i(\pm f(\epsilon)-1)A_{\sigma_{1},\sigma_{1'}}(x_{1},x_{1'},\epsilon),$$
(4.42)

dove con $f(\epsilon)$ indichiamo la funzione di distribuzione statistica relativa agli stati occupati dalle particelle considerate, sia questa quella di Fermi-Dirac per i fermioni o Bose-Einstein per i bosoni:

_

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} \qquad \text{(Fermi-Dirac)}$$

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} \qquad \text{(Bose-Einstein).}$$
(4.43)

Osservando con attenzione le relazioni (4.42), formalmente $G^{<}$ coincide con la densità di particelle per energia, in quanto si ottiene dal prodotto della densità di stati con la distribuzione statistica che questi siano occupati; analogamente $G^{>}$ per le vacanze.

L'importanza della prima delle due tuttavia è resa evidente anche nel rapporto che ammette con le generiche osservabili del sistema, in quanto attraverso la sua applicazione è possibile ottenere il valore medio di una qualunque di queste nella situazione in esame:

$$\langle O(x,t) \rangle = \mp i\hbar \lim_{x_{1'} \to x_1} \lim_{t_1^+ \to t_1} O(x,t) G_{\sigma_1,\sigma_{1'}}^< (1,1^+).^1$$
(4.44)

 $^{^{1}}$ L'apice $^{+}$ presente sul secondo argomento della funzione di Green *lesser* è uno strumento matematico, utilizzato anche successivamente, per giustificare la scrittura, altrimenti equivoca, di una funzione di questo tipo con gli argomenti temporali uguali tra loro. Tiene conto, quando utilizzata, di considerare il secondo argomento temporale infinitesimamente maggiore del primo.

Nel caso particolare di prendere sotto esame l'operatore densità otteniamo il notevole risultato

$$\langle n(x,t) \rangle = -i\hbar \lim_{x_{1'} \to x_1} \lim_{t_1^+ \to t_1} G_{\sigma_1,\sigma_{1'}}^<(1,1^+)$$
(4.45)

da cui vediamo come la funzione *lesser* contenga al limite la stessa distribuzione delle particelle sotto esame.

Concludendo dunque questo breve riepilogo sulle proprietà fondamentali delle Funzioni di Green, per le quali una trattazione rigorosa e dettagliata occuperebbe eccessivamente spazio,

- le funzioni T-ordinata e \overline{T} -ordinata ammettono una conveniente teoria perturbativa;
- le funzioni ritardata e avanzata coincidono con funzioni di risposta del sistema e contengono informazioni sulla densità degli stati;
- le funzioni *lesser* e *greater* sono collegate con i valori di aspettazione di qualunque osservabile e con quantità cinetiche come la densità delle particelle e la sua generalizzazione nella corrente;

e attraverso il loro studio e la loro conoscenza siamo dunque in grado di rispondere a qualunque interrogativo riguardante il sistema sotto studio, motivo che ne ha alimentato il successo applicativo di cui godono.

Capitolo 5

Trasporto Mesoscopico

Ambientiamo i risultati e la teoria svolta sinora in un esempio classico di calcolo come il trasporto elettronico in una struttura mesoscopica in condizioni di non equilibrio.

Con il termine mesoscopico intendiamo un sistema particolare, caratterizzato da dimensioni fisiche molto maggiori della semplice scala atomica (decine di *nm*) e al tempo stesso minori rispetto a quelle di una struttura micrometrica, valutabile come prototipo di un sistema macroscopico. Questa particolarità negli ordini di grandezza interessati permette che la fisica globale del sistema soddisfi le usuali leggi della meccanica classica, ma sia al contempo pesantemente influenzata da oscillazioni e perturbazioni dovute ad effetti quantistici. La fortuna che lo studio di modelli di questo tipo ha riscontrato è dovuta perciò alla possibilità di indagare interessanti situazioni intermedie in cui coesistano gli effetti del mondo quantistico microscopico e di quello classico macroscopico. Al tempo stesso il forte successo riscontrato dalla produzione di dispositivi elettronici in questa scala ha determinato la necessità di indagare a fondo questo genere di strutture al fine di evidenziarne problematiche e caratteristiche necessarie per la loro costruzione, il loro impiego e, infine, la loro futura evoluzione.

L'obiettivo del calcolo esemplificativo presentato è evidenziare come, attraverso l'utilizzo rigoroso dei metodi presentati precedentemente, sia possibile ricavare agevolmente un importante risultato del problema come la forma della corrente circolante. Dopo aver scritto il risultato richiesto in una forma conveniente che evidenzi la naturale introduzione delle grandezze definite sul contorno, ampiamente introdotte e utilizzate in precedenza, utilizzeremo i risultati della teoria di Keldysh per ottenere l'importante formula di Wingreen e Meir. Nella parte finale del lavoro, andremo a considerare le conclusioni alle quali si giunge in alcuni casi limite e di interesse della precedente espressione.

Dal punto di vista storico, il problema analizzato è stato affrontato a partire dagli anni'70, sull'onda del successo della teoria delle funzioni di Green fuori equilibrio, sino ad arrivare al 1992, quando il fondamentale lavoro di Y. Meir e S. Wingreen [9] aprì la strada a un'enorme quantità (oltre milleduecento articoli pubblicati dal'92 in poi su Physical Review Letters che citano l'articolo in questione) di trattazioni simili e standardizzate, differenti per le particolari condizioni applicate al modello originale.

5.1 Modello Teorico

Consideriamo un modello semplificato e standardizzato costituito da due contatti collegati ad una regione mesoscopica intermedia. I contatti sono supposti metallici idealmente perfetti e pertanto al loro interno gli elettroni sono considerati completamente liberi e non interagenti; nel mezzo invece può esistere un'interazione che interessi le particelle qui localizzate, ma a questo punto della trattazione non è necessario specificarne il tipo particolare. I due sistemi sono messi in relazione tra loro da un termine di accoppiamento che tenga conto dinamicamente della modificazione che subiscono a seguito del riposizionamento degli elettroni liberi provenienti dai contatti e che permetta perciò il passaggio di corrente.

Vogliamo a questo punto introdurre naturalmente il formalismo analizzato in precedenza per situazioni di non equilibrio per il sistema considerato, in modo da poterne utilizzare i notevoli risultati ricavati per i nostri attuali scopi. Per fare ciò procediamo in questo modo: consideriamo nel passato al tempo $t = -\infty$ i contatti e la regione intermedia disaccoppiati tra loro, spegnendo l'interazione di accoppiamento che li unisce: ognuno dei contatti sarà allora supposto all'equilibrio termico con un rispettivo valore di potenziale chimico, rispettivamente $\mu_R \in \mu_L$, supposti di poco differenti. Al tempo $t = t_0$ ipotizziamo di accendere l'accoppiamento, che di conseguenza pone in contatto termodinamico i tre sistemi precedentemente isolati; in queste condizioni, se ad esempio $\mu_L > \mu_R$, ci aspettiamo allora una corrente netta I circolante da sinistra a destra della nostra struttura, come espresso schematicamente in Figura 5.1.



Figura 5.1: Schematizzazione del sistema studiato nel trasporto mesoscopico.

Dopo un tempo sufficientemente grande, nell'ipotesi che i reservoir relativi ai contatti siano abbastanza grandi per cui il flusso di particelle non modifichi significativamente i valori dei potenziali chimici, la configurazione del problema raggiungerà una situazione stazionaria stabile. Il nostro obiettivo è quindi quello di ricavare la corrente in questa particolare condizione, per $t \gg t_0$, in un conto che è del tutto analogo a quelli che ci hanno portato ad ottenere i risultati precedenti per problemi espressi in questi stessi termini.

5.2 Hamiltoniana del problema

Il discorso svolto in precedenza suggerisce la scrittura dell'Hamiltoniana generica del problema nella forma:

$$H_{tot} = H_{L,R} + H_S + H_{acc} \tag{5.1}$$

con $H_{L,R} \in H_S$ rispettivamente i termini isolati relativi ai contatti metallici e alla regione intermedia, mentre H_{acc} è il termine di accoppiamento tra di loro. Nella rappresentazione che stiamo dando dobbiamo tenere conto che ogni singolo contatto è suddiviso al suo interno in molteplici canali $\{\alpha\}_{\alpha \in L,R}$, dove con questo termine indichiamo il set di numeri quantici che ne identificano gli stati elettronici permessi.

Vogliamo scrivere ora esplicitamente i singoli addendi: per il primo, che descrive un sistema di elettroni liberi, avremo una generica forma quadratica rispetto al set di operatori di campo $\{c_{k,\alpha}\}_{k,\alpha\in L,R}$ e $\{c_{k,\alpha}^{\dagger}\}_{k,\alpha\in L,R}$ relativi alla distruzione o alla creazione di elettroni di momento k nel canale α del contatto:

$$H_{L,R} = \sum_{k,\alpha \in L,R} \epsilon_{k,\alpha} c^{\dagger}_{k,\alpha} c_{k,\alpha}$$
(5.2)

con $\epsilon_{k,\alpha}$ autovalore corrispondente all'indice della sommatoria considerato.

Per quanto riguarda H_S , Hamiltoniana della regione centrale, questa dipende dall'ipotesi fatta sul tipo di interazione presente al suo interno per le particelle, rispetto alle quali identifichiamo $\{d_n\}_n \in \{d_n^{\dagger}\}_n$ come l'insieme dei rispettivi operatori di campo per lo stato quantico determinato dalla base di stati scelti in questa regione $\{|n\rangle\}_n$. Indichiamo genericamente questo termine come

$$H_S = H_S(\{d_n\}_n, \{d_n^{\dagger}\}_n)$$
(5.3)

senza specificarne perciò la forma. A seconda della situazione che vogliamo indagare, potremo considerare ad esempio l'interazione assente e ottenere quindi un'altra forma quadratica in d_n e d_n^{\dagger} , oppure un'interazione coulombiana tra le particelle o, ancora, con i fononi.

Valutando infine il termine di accoppiamento, la sua espressione esplicita può essere ricavata da una trattazione autoconsistente sulle densità di carica presenti e si può dimostrare come esplicitamente assuma la forma

$$H_{acc} = \sum_{\substack{k,\alpha \in L, R \\ n}} \left[V_{k\alpha,n} c_{k,\alpha}^{\dagger} d_n + h.c. \right],$$
(5.4)

accoppiando, come potrebbe essere logico, ad un operatore di campo di un sistema uno col carattere opposto dell'altro e modulando l'interazione attraverso un parametro di accoppiamento relativo.

In generale dunque scriviamo l'Hamiltoniana complessiva nella forma esplicita

$$H_{tot} = \sum_{k,\alpha\in L,R} \epsilon_{k,\alpha} c_{k,\alpha}^{\dagger} c_{k,\alpha} + H_S\big(\{d_n\}_n, \{d_n^{\dagger}\}_n\big) + \sum_{\substack{k,\alpha\in L,R\\n}} \big[V_{k\alpha,n} c_{k,\alpha}^{\dagger} d_n + h.c.\big] \quad (5.5)$$

dove non abbiamo specificato per ora le caratteristiche specifiche della regione mesoscopica. Rispetto al modello teorico scelto per rendere il problema trattabile sotto le condizioni di non equilibrio, l'Hamiltoniana può essere schematizzata come la somma di due termini:

$$H_{tot} = H_0 + H'$$
 (5.6)

uno di equilibrio termodinamico H_0 , somma delle componenti isolate dei contatti e della regione intermedia, e una perturbazione H', coincidente con l'accoppiamento. L'ultima scrittura equivalente di H_{tot} rappresenta la forma canonica con cui abbiamo presentato un generico problema di non equilibrio nel secondo capitolo e ci permette quindi di poter applicare le tecniche ed i risultati trovati in precedenza.

5.3 Corrente

La corrente circolante dal contatto sinistro alla regione intermedia, lavorando sotto l'ipotesi $\mu_L > \mu_R$ specificata inizialmente, può essere calcolata a partire dalla variazione temporale del numero di particelle nello stesso contatto come

$$I_L = -e\langle N_L \rangle \tag{5.7}$$

 \cos

$$N_L = \sum_{k,\alpha \in L} c^{\dagger}_{k,\alpha} c_{k,\alpha} \tag{5.8}$$

che soddisfa l'equazione di Heisenberg

$$i\hbar\dot{N}_L = \left[N_L, H_{tot}\right].\tag{5.9}$$

Per calcolare la quantità richiesta, iniziamo a mostrare il risultato del commutatore a partire dalla sua decomposizione in seconda quantizzazione e dalle regole di commutazione canoniche relative agli operatori di campo che lo compongono. La scrittura si riduce in questo modo a

$$\begin{bmatrix} N_L, H_{tot} \end{bmatrix} = \sum_{\substack{k,\alpha \in L \\ n}} \begin{bmatrix} c_{k,\alpha}^{\dagger} c_{k,\alpha}, V_{k\alpha,n} c_{k,\alpha}^{\dagger} d_n + h.c. \end{bmatrix}$$
$$= \sum_{\substack{k,\alpha \in L \\ n}} \{ \begin{bmatrix} c_{k,\alpha}^{\dagger} c_{k,\alpha}, V_{k\alpha,n} c_{k,\alpha}^{\dagger} d_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_{k,\alpha}^{\dagger} c_{k,\alpha}, V_{k\alpha,n}^{*} d_n^{\dagger} c_{k,\alpha} \end{bmatrix} \}$$
$$= \sum_{\substack{k,\alpha \in L \\ n}} \{ i\hbar V_{k\alpha,n} c_{k,\alpha}^{\dagger} d_n - i\hbar V_{k\alpha,n}^{*} d_n^{\dagger} c_{k,\alpha} \}$$
$$= i\hbar \sum_{\substack{k,\alpha \in L \\ n}} \{ V_{k\alpha,n} c_{k,\alpha}^{\dagger} d_n - h.c. \}.$$
(5.10)

Sostituendo l'ultimo risultato trovato in (5.9) ed applicando il valore di aspettazione ricaviamo

$$\langle \dot{N}_L \rangle = \sum_{\substack{k,\alpha \in L \\ n}} \{ V_{k\alpha,n} \langle c_{k,\alpha}^{\dagger} \, d_n \rangle - V_{k\alpha,n}^* \langle d_n^{\dagger} \, c_{k,\alpha} \rangle \},$$
(5.11)

che sostituito nel calcolo diretto della corrente porta al risultato

$$I_L = ie \sum_{\substack{k,\alpha \in L \\ n}} \{ V_{k\alpha,n} \, i \langle c_{k,\alpha}^{\dagger} \, d_n \rangle - V_{k\alpha,n}^* \, i \langle d_n^{\dagger} \, c_{k,\alpha} \rangle \}.$$
(5.12)

Nella parentesi graffa abbiamo evidenziato tramite un opportuno fattore immaginario degli oggetti che, per costruzione, ricordano la forma canonica di funzioni di Green, costituiti cioè dal valore medio del prodotto di un distruttore con un costruttore. Introdotta un'opportuna dipendenza temporale rispetto all'Hamiltoniana complessiva del problema, definiamo allora le funzioni ibride suggerite da quest'ultimo passaggio come

$$G_{n,k\alpha}^{<}(t,t') = i \langle c_{k,\alpha}^{\dagger}(t') d_{n}(t) \rangle$$

$$G_{k\alpha,n}^{<}(t,t') = i \langle d_{n}^{\dagger}(t') c_{k,\alpha}(t) \rangle,$$
(5.13)

rispetto alle quali la scrittura (5.12) si riduce nel calcolo delle loro componenti diagonali

$$I_L = ie \sum_{\substack{k,\alpha \in L \\ n}} \{ V_{k\alpha,n} \, G_{n,k\,\alpha}^<(t,t^+) - V_{k\alpha,n}^* \, G_{k\alpha,n}^<(t,t^+) \}.$$
(5.14)

Tenendo tuttavia conto della relazione tra le due funzioni introdotte, per cui

$$\left[G_{n,k\,\alpha}^{<}(t,t')\right]^{*} = -G_{k\alpha,n}^{<}(t,t'), \qquad (5.15)$$

riconosciamo nell'espressione trovata la parte reale del primo addendo, ottenendo in definitiva

$$I_L = 2e \,\mathfrak{Re}\Big[\sum_{\substack{k,\alpha \in L \\ n}} V_{k\alpha,n} \, G_{n,k\alpha}^<(t,t^+)\Big].$$
(5.16)

Nell'ultimo importante risultato abbiamo perciò espresso la corrente ricercata rispetto all'espressione della Funzione di Green *lesser* definita in precedenza. In assenza di strumenti che ci permettano di indagarla altrimenti, possiamo studiarne la forma considerando il Teorema di Langreth relativo alla corrispondente componente reale a partire dalla Funzione di Green analoga definita nel formalismo del contorno, della quale possiamo calcolare lo sviluppo perturbativo per quanto visto in precedenza.

5.4 Funzione di Green sul contorno

Avendo costruito le funzioni di Green ibride reali precedenti nella forma

$$G_{n,k\alpha}^{<}(t,t') = i \langle c_{k,\alpha}^{\dagger}(t') d_{n}(t) \rangle$$

$$G_{k\alpha,n}^{<}(t,t') = i \langle d_{n}^{\dagger}(t') c_{k,\alpha}(t) \rangle,$$
(5.17)

viene naturale definire l'analoga funzione ambientata sul generico contorno di Keldysh come

$$G_{n,k\alpha}(\tau,\tau') = -i\langle T_{\gamma} d_n(\tau) c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau') \rangle, \qquad (5.18)$$

dove la dipendenza temporale degli operatori è espressa in rappresentazione di interazione rispetto all'Hamiltoniana complessiva del problema, H_{tot} . La conveniente definizione rispetto all'operatore di T_{γ} -ordinamento permette, come abbiamo visto nell'ipotesi di un sistema caratterizzato nel passato da un operatore densità relativo ad un'Hamiltoniana quadratica, una trattazione perturbativa completa della funzione così introdotta, che giustifichi l'uguaglianza¹

$$G_{n,k\alpha}(\tau,\tau') = -i \langle T_{\gamma} \left(S_{\gamma,H_0}' \, \widehat{d}_n(\tau) \, c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau') \right) \rangle \tag{5.19}$$

 con

$$S'_{\gamma,H_0} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{\gamma} d\tau_1 \dots \int_{\gamma} d\tau_n \, \langle T_\gamma \big(H'(\tau_1) \dots H'(\tau_n) \big) \rangle. \tag{5.20}$$

Nel nostro caso, a seguito del modello teorico utilizzato e descritto in precedenza, siamo giustificati ad utilizzare questo risultato per procedere nell'indagine di una forma analitica esplicita della funzione considerata. Sostituendo l'espressione dell'operatore S'_{γ,H_0} nella relazione (5.19), ricaviamo

$$G_{n,k\alpha}(\tau,\tau') = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i)^{m+1}}{m!} \int_{\gamma} d\tau_1 \dots \int_{\gamma} d\tau_m \left\langle T_{\gamma} \left(d_n(\tau) c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau') H'(\tau_1) \dots H'(\tau_m) \right) \right\rangle$$
(5.21)

all'interno del quale poniamo in evidenza il valore medio termico nella forma

$$\langle T_{\gamma} \left(d_n(\tau) c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau') H'(\tau_1) \dots H'(\tau_m) \right) \rangle$$
(5.22)

oppure scrivendo esplicitamente i termini di perturbazione interni

$$\langle T_{\gamma} \left(d_n(\tau) c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau') \left[\sum_{k_1 \alpha_1, n_1} V_{k_1 \alpha_1, n_1}^{*} d_{n_1}^{\dagger}(\tau_1) c_{k_1, \alpha_1}(\tau_1) + h.c. \right] \dots \left[\sum_{k_m \alpha_m, n_m} V_{k_m \alpha_m, n_m}^{*} d_{n_m}^{\dagger}(\tau_m) c_{k_m, \alpha_m}(\tau_m) + h.c. \right] \right) \rangle.$$

$$(5.23)$$

Considerando gli operatori di campo relativi agli elettroni nei contatti, essi sono sottoposti ad una Hamiltoniana quadratica e non interagente e, pertanto, soddisfano la proprietà fondamentale necessaria per l'applicazione del Teorema di Wick sull'espressione considerata.

Ragioniamo perciò adesso sui correlatori a due osservabili che si vengono a creare in questo modo. Quelli anomali, tra operatori di campo aventi lo stesso significato, sono nulli poichè il sistema complessivo conserva il numero totale di particelle:

$$\langle T_{\gamma} c_{k_i,\alpha_i}(\tau_i) c_{k_j,\alpha_j}(\tau_j) \rangle = 0 \qquad \forall i,j \langle T_{\gamma} c^{\dagger}_{k_i,\alpha_i}(\tau_i) c^{\dagger}_{k_j,\alpha_j}(\tau_j) \rangle = 0 \qquad \forall i,j$$

$$(5.24)$$

¹Per non appesantire eccessivamente la scrittura abbiamo sottointeso il pedice relativo all'Hamiltoniana che governa l'evoluzione temporale in rappresentazione di interazione, H_0

Allo stesso modo si elidono anche quelli tra le osservabili relative agli elettroni nei contatti con quelle relative invece alla regione mesoscopica intermedia, in quanto per ipotesi in queste condizioni i sistemi sono tra loro isolati:

$$\langle T_{\gamma} c_{k_{i},\alpha_{i}}(\tau_{i}) d_{n}^{\dagger}(\tau_{j}) \rangle = 0 \qquad \forall i, j \langle T_{\gamma} c_{k_{i},\alpha_{i}}^{\dagger}(\tau_{i}) d_{n}(\tau_{j}) \rangle = 0 \qquad \forall i, j.$$
 (5.25)

Gli unici termini che sopravvivono sono perciò quelli canonici tra un distruttore ed un costruttore appartenenti alla medesima famiglia di operatori di campo del sistema elettronico nei contatti. Applicando il teorema quindi possiamo evidenziare nella somma l'unico accoppiamento che sopravvive tra il costruttore $c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau')$, implicito nella definizione della funzione, e il distruttore generico $c_{k_i,\alpha_i}(\tau'_i)$ preso di addendo in addendo da ognuno degli m termini di interazione provenienti dallo sviluppo di S'_{γ,H_0} :

$$(5.23) = \sum_{k_{1} \alpha_{1} n_{1}} \langle T_{\gamma} (c_{k_{1},\alpha_{1}}(\tau_{1}) c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau')) \rangle V_{k_{1}\alpha_{1},n_{1}}^{*} \langle T_{\gamma} (d_{n}(\tau) d_{n_{1}}^{\dagger}(\tau_{1}) H'(\tau_{2}) \dots \\ \dots H'(\tau_{m})) \rangle + \\ + \sum_{k_{2} \alpha_{2} n_{2}} \langle T_{\gamma} (c_{k_{2},\alpha_{2}}(\tau_{2}) c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau')) \rangle V_{k_{2}\alpha_{2},n_{2}}^{*} \langle T_{\gamma} (d_{n}(\tau) H'(\tau_{1}) d_{n_{2}}^{\dagger}(\tau_{1}) H'(\tau_{3}) \dots \\ \dots H'(\tau_{m})) \rangle +$$

+ restanti (m-2) termini simili ai precedenti.

(5.26)

Tenendo conto dell'arbitrarietà delle variabili integrali e rinominandole opportunamente possiamo raggruppare il medesimo contributo ad ogni ordine nell'espressione compatta:

$$\langle T_{\gamma} \left(d_{n}(\tau) c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau') H'(\tau_{1}) \dots H'(\tau_{m}) \right) \rangle = m \sum_{\substack{k_{1},\alpha_{1} \in L \\ n_{1}}} V_{k_{1}\alpha_{1},n_{1}}^{*} \cdot \left\langle T_{\gamma} \left(c_{k_{1},\alpha_{1}}(\tau_{1}) c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau') \right) \right\rangle \langle T_{\gamma} \left(d_{n}(\tau) d_{n_{1}}^{\dagger}(\tau_{1}) H'(\tau_{2}) \dots H'(\tau_{m}) \right) \rangle.$$

$$(5.27)$$

Sostituito l'ultimo risultato in (5.21) otteniamo per la funzione totale a questo punto del calcolo l'espressione

$$G_{n,k\alpha}(\tau,\tau') = \sum_{\substack{k_1,\alpha_1 \in L \\ n_1}} \int_{\gamma} d\tau_1(-i) \cdot \frac{1}{(m-1)=0} \frac{(-i)^{m-1}}{(m-1)!} \int_{\gamma} d\tau_2 \dots \int_{\gamma} d\tau_m \langle T_{\gamma} \left(d_n(\tau) d_{n_1}^{\dagger}(\tau_1) H'(\tau_2) \dots H'(\tau_m) \right) \rangle \cdot V_{k_1\alpha_1,n_1}^{\ast}(-i) \langle T_{\gamma} \left(c_{k_1,\alpha_1}(\tau_1) c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau') \right) \rangle$$
(5.28)

dove abbiamo riarrangiato la scrittura in modo da mettere in evidenza lo sviluppo dell'operatore S'_{γ,H_0} rispetto all'indice di sommatoria (m-1), così da poter riscrivere l'uguaglianza precedente come:

$$G_{n,k\alpha}(\tau,\tau') = \sum_{\substack{k_1,\alpha_1 \in L \\ n_1}} \int_{\gamma} d\tau_1(-i) \langle T_{\gamma} \left(S'_{\gamma,H_0} d_n(\tau) d^{\dagger}_{n_1}(\tau_1) \right) \rangle \cdot V^*_{k_1\alpha_1,n_1}(-i) \langle T_{\gamma} \left(c_{k_1,\alpha_1}(\tau_1) c^{\dagger}_{k,\alpha}(\tau') \right) \rangle.$$
(5.29)

Riconosciamo a questo punto nella scrittura ottenuta il significato formale dei valori di aspettazione in cui abbiamo fattorizzato il calcolo:

$$G_{m,n}(\tau,\tau') = -i \langle T_{\gamma} d_m(\tau) d_n^{\dagger}(\tau') \rangle$$

$$\equiv -i \langle T_{\gamma} (S'_{\gamma,H_0} d_m(\tau) d_n^{\dagger}(\tau')) \rangle$$
(5.30)

è la Funzione di Green relativa alla sola regione intermedia, costruita rispetto all'Hamiltoniana complessiva del problema e per la quale abbiamo tenuto conto dello sviluppo perturbativo di Keldysh grazie all'opportuna ricostruzione dell'operatore S'_{γ,H_0} necessario; per il secondo termine invece, tenuto conto dell'invarianza traslazionale del solo sistema dei contatti metallici, otteniamo

$$-i\langle T_{\gamma}(c_{k,\alpha}(\tau)c_{k',\alpha'}^{\dagger}(\tau'))\rangle = \delta_{\alpha,\alpha'}\delta_{k,k'}g_{k,\alpha}(\tau,\tau')$$
(5.31)

 \cos

$$g_{k,\alpha}(\tau,\tau') = -i\langle T_{\gamma} c_{k,\alpha}(\tau) c_{k,\alpha}^{\dagger}(\tau') \rangle \rangle$$
(5.32)

funzione T_{γ} -ordinata isolata e imperturbata dei contatti, relativa alla sola parte H_0 di equilibrio.

Tenuto conto di queste identificazioni, otteniamo perciò in definitiva la forma esplicita compatta della funzione di Green T_{γ} -ordinata ibrida, come

$$G_{n,k\alpha}(\tau,\tau') = \sum_{n_1} \int_{\gamma} d\tau_1 V_{k\alpha,n_1}^* G_{n,n_1}(\tau,\tau_1) g_{k,\alpha}(\tau_1,\tau').$$
(5.33)

5.5 Funzione di Green reale

Ricavata la forma esplicita della funzione definita sul contorno in una forma particolarmente conveniente sulla quale è possibile applicare le regole elencate nel Teorema di Langreth (4.1) per passare alle componenti reali, siamo interessati a ricavare la corrispondente funzione reale *lesser*. Analizzando l'espressione (5.33), questa è nella forma di un prodotto di convoluzione rispetto alla variabile integrale intermedia e dunque vale la trasformazione suggerita dal prolungamento analitico:

se la funzione sul contorno
$$c = \int_{\gamma} a b$$
 allora per quella reale $c^{<} = \int_{t} (a^{ret} b^{<} + a^{<} b^{av})$
(5.34)

che applicata al caso in esame porta al risultato

$$G_{n,k\alpha}^{<}(t,t') = \sum_{n_1} \int dt_1 V_{k\alpha,n_1}^* \left[G_{n,n_1}^{ret}(t,t_1) g_{k,\alpha}^{<}(t_1,t') + G_{n,n_1}^{<}(t,t_1) g_{k,\alpha}^{av}(t_1,t') \right].$$
(5.35)

Consideriamo ora di prendere in esame come detto una situazione di stato stazionario, per cui la dipendenza temporale delle funzioni si riduca alla sola differenza tra i parametri; passando nello spazio coniugato delle frequenze attraverso la trasformata di Fourier corrispondente, otteniamo

$$G_{n,k\alpha}^{<}(\epsilon) = \sum_{n_1} V_{k\alpha,n_1}^{*} \left[G_{n,n_1}^{ret}(\epsilon) \, g_{k,\alpha}^{<}(\epsilon) + G_{n,n_1}^{<}(\epsilon) \, g_{k,\alpha}^{av}(\epsilon) \right], \tag{5.36}$$

dove le componenti relative alla funzione di Green dei contatti metallici sono note a priori come quelle di un sistema isolato non interagente:

$$g_{k,\alpha}^{<}(\epsilon) = 2\pi i f_L(\epsilon) \delta(\epsilon - \epsilon_{k,\alpha})$$

$$g_{k,\alpha}^{>}(\epsilon) = -2\pi i (1 - f_L(\epsilon)) \delta(\epsilon - \epsilon_{k,\alpha})$$
(5.37)

 \cos

$$f_L(\epsilon) = \left(e^{\beta(\epsilon - \mu_L)} + 1\right)^{-1} \tag{5.38}$$

distribuzione statistica per l'occupazione degli stati relativa al contatto sotto esame, in condizioni iniziali di equilibrio termodinamico prima che l'accoppiamento tra i sistemi fosse acceso.

5.6 Calcolo della corrente

Ricavata la forma esplicita della funzione reale, possiamo sostituire l'espressione (5.36) all'interno della formula generica ricavata per la corrente circolante dal contatto L alla regione mesoscopica (5.16), ottenendo

$$I_L = 2e \,\mathfrak{Re}\left[\sum_{\substack{k,\alpha \in L\\n,n_1}} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \, V_{k\alpha,n_1}^* \, V_{k\alpha,n} \left(G_{n,n_1}^{ret}(\epsilon) \, g_{k,\alpha}^<(\epsilon) + G_{n,n_1}^<(\epsilon) \, g_{k,\alpha}^{av}(\epsilon)\right)\right]. \tag{5.39}$$

Risulta conveniente a questo punto, sulla prima parte della scrittura che non tiene conto direttamente delle funzioni di Green, trasformare la sommatoria sui momenti in un ulteriore integrale sulle energie, attraverso l'introduzione della densità di stati come:

$$\sum_{k} F(\epsilon_{k,\alpha}) = \int d\epsilon \,\rho_{\alpha}(\epsilon) F(\epsilon) \qquad \text{con} \quad \rho_{\alpha}(\epsilon) = \sum_{k} \delta(\epsilon - \epsilon_{k,\alpha}), \tag{5.40}$$

e definire inoltre la conveniente funzione $\Gamma_{m,n}^L(\epsilon)$:

$$\Gamma_{m,n}^{L}(\epsilon_{k}) = 2\pi \sum_{\alpha \in L} \rho_{\alpha}(\epsilon_{k}) V_{\alpha,m}^{*}(\epsilon_{k}) V_{\alpha,n}(\epsilon_{k}) \qquad \text{con } V_{\alpha,n}(\epsilon_{k}) = V_{k\alpha,n} \text{ per } \epsilon_{k} = \epsilon_{k,\alpha}.$$
(5.41)

Per risolvere al contempo la parte reale che agisce sulle funzioni scritte, sostituiamo a quelle imperturbate $g_{k,\alpha}$ le proprie espressioni esplicite e calcoliamo il termine risultante. Nel caso del primo termine ad esempio otteniamo sinteticamente

$$2e \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \int d\epsilon_k \, \Gamma^L_{n_1,n}(\epsilon_k) \, \mathfrak{Re} \left[G^{ret}_{n,n_1}(\epsilon) \, g^{<}_{k,\alpha}(\epsilon) \right] = 2e \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \, f_L(\epsilon) \, \Gamma^L_{n_1,n}(\epsilon) \, \mathfrak{Re} \left[i G^{ret}_{n,n_1}(\epsilon) \right]$$
$$= -2e \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \, f_L(\epsilon) \, \Gamma^L_{n_1,n}(\epsilon) \, \mathfrak{Im} \left[G^{ret}_{n,n_1}(\epsilon) \right]$$
$$= ie \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \, f_L(\epsilon) \, \Gamma^L_{n_1,n}(\epsilon) \, \left[G^{ret}_{n,n_1}(\epsilon) - G^{av}_{n,n_1}(\epsilon) \right]. \tag{5.42}$$

Svolgendo un conto analogo anche sul secondo, siamo in grado di scrivere allora il risultato finale per la corrente uscente dal contatto sinistro ed entrante nella regione mesoscopica (e analogamente generalizzando opportunamente il risultato, di quella uscente dalla regione intermedia ed entrante nel contatto destro) come

$$I_{L(R)} = ie \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \operatorname{Tr}\left(\Gamma^{L(R)}(\epsilon) \left\{ G^{<}(\epsilon) + f_{L(R)}(\epsilon) \left[G^{ret}(\epsilon) - G^{av}(\epsilon) \right] \right\} \right),$$
(5.43)

dove abbiamo tenuto conto della conveniente notazione per cui gli oggetti Γ e G sono matrici nella regione intermedia rispetto agli indici dei livelli n ed n_1 . Il primo in particolare acquista l'interpretazione di termine relativo all'accoppiamento per effetto tunnel tra il contatto e la regione intermedia.

Unendo i risultati per ricavare la corrente totale transitante tra i contatti, nelle condizioni già specificate a inizio del capitolo, la stazionarietà imposta esige che questa sia uniforme cosicchè: $I = I_L = -I_R$ e possiamo ricavare la prima simmetrizzando quelle parziali ottenute sinora come $I = (I_L + I_L)/2 = (I_L - I_R)/2$ e dunque

$$I = \frac{ie}{2} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \operatorname{Tr} \left(\left[f_L(\epsilon) \, \Gamma^L(\epsilon) - f_R(\epsilon) \, \Gamma^R(\epsilon) \right] \cdot \left[G^{ret}(\epsilon) - G^{av}(\epsilon) \right] + \left[\Gamma^L(\epsilon) - \Gamma^R(\epsilon) \right] G^<(\epsilon) \right)$$

$$(5.44)$$

che è il risultato centrale del lavoro di Wingreen e Meir [9].

Come ci aspetteremmo, all'equilibrio ipotetico in cui i due reservoir che riforniscono i contatti si portano allo stesso potenziale chimico, le distribuzioni statistiche a destra e sinistra coincidono e la corrente totale svanisce annullandosi.

Il risultato (5.44) è esattamente ciò che abbiamo richiesto all'inizio: una relazione che leghi la corrente che attraversa la regione intermedia alle funzioni di distribuzione dei contatti metallici e alle proprietà locali della regione mesoscopica, tramite le opportune interpretazioni già sottolineate nel capitolo precedente delle funzioni presenti:

- la densità degli stati, proporzionale alla parte diagonale della differenza $G^{ret} G^{av}$ che coincide con la funzione spettrale caratteristica del problema;
- l'occupazione degli stessi, contenuta nel termine $G^{<}$ come il suo prodotto per la densità.

A questo livello la difficoltà principale del calcolo rimane unicamente in quello esplicito delle funzioni di Green isolate e relative alla regione intermedia che devono tuttavia essere calcolate rispetto al sistema accoppiato ai contatti. La risoluzione analitica di quest'ultimo problema dipende ovviamente dal tipo di interazione scelta e dalla specifica descrizione dell'Hamiltoniana H_S fino ad ora ignorata nella nostra trattazione.

5.7 Self-energia di tunneling

Seguendo la trattazione svolta che ci ha portato sino al notevole risultato (5.44), è possibile a partire da uno dei primi risultati parziali ricavati ottenere una nuova e generale scrittura per la corrente, caratterizzata da un'evidente e significativa interpretazione fisica delle sue componenti. Per questo fine, ripartiamo dall'espressione (5.39) e la riscriviamo tenendo conto delle relazioni che legano le differente funzioni di Green reali tra loro, di modo che assuma la forma:

$$I_{L} = e \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \sum_{\substack{k,\alpha \in L \\ n,n_{1}}} V_{k\alpha,n_{1}}^{*} V_{k\alpha,n_{1}} \left(G_{n,n_{1}}^{>}(\epsilon) g_{k,\alpha}^{<}(\epsilon) + G_{n,n_{1}}^{<}(\epsilon) g_{k,\alpha}^{>}(\epsilon) \right) \right].$$
(5.45)

Noto il significato generale del termine di *self-energia* in un problema, come la somma di tutte le interazioni che caratterizzano il problema, definiamo la *self-energia di tunnelling* come il contributo che tiene conto tra le interazioni presenti nel problema del solo accoppiamento tra i contatti metallici e la regione intermedia attraverso il passaggio degli elettroni, per effetto tunnel, dall'uno all'altro sistema. Per quanto detto, le possibili interazioni interne alla regione mesoscopica invece non sono considerate al suo interno e rimangono espresse implicitamente all'interno della funzioni di Green corrispondenti, $G^> e G^<$. Costruita questa particolare funzione come

$$\Sigma_{\substack{k,\alpha\in L\\n,n_1}}(\epsilon) = \sum_{\substack{k,\alpha\in L\\n,n_1}} V_{k\alpha,n_1}^* g_{k,\alpha}(\epsilon) V_{k\alpha,n}$$
(5.46)

e tale da ammettere componenti

$$\Sigma_{n,n_1}^{\leq}(\epsilon) = \sum_{\substack{k,\alpha \in L \\ n,n_1}} V_{k\alpha,n_1}^* g_{k,\alpha}^{\leq}(\epsilon) V_{k\alpha,n}$$

$$\Sigma_{n,n_1}^{ret,av}(\epsilon) = \sum_{\substack{k,\alpha \in L \\ n,n_1}} V_{k\alpha,n_1}^* g_{k,\alpha}^{ret,av}(\epsilon) V_{k\alpha,n}$$
(5.47)

riconosciamo ora queste ultime relazioni all'interno dell'espressione (2.46).

Con tale sostituzione, utilizzando la conveniente rappresentazione matriciale rispetto agli indici relativi alla regione intermedia, la relazione iniziale della corrente circolante dal contatto L alla regione intermedia assume la forma elegante

$$I_L = e \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \operatorname{Tr} \left[G^{>} \Sigma_L^{<} - G^{<} \Sigma_L^{>} \right] \qquad (5.48)$$

L'ultimo risultato trovato ammette, come anticipato in precedenza, una conveniente interpretazione fisica in quanto l'integranda assume il significato di un tasso di scattering totale delle particelle per energia fissata, variabile quest'ultima che è integrata su tutti i valori ammessi dal problema. Il primo addendo infatti corrisponde alla corrente che esce dal contatto di sinistra ed è proporzionale al prodotto della funzione $\Sigma_L^<$, che rappresenta il tasso per cui, per effetto tunnel, una particella con energia ϵ può lasciare il contatto L, con $G^<$, che invece è proporzionale alla probabilità di avere uno stato disponibile ad energia ϵ nella regione intermedia. Analogamente un commento simile può essere fatto riguardo al secondo addendo, in riferimento in questo caso alla corrente che fluisce nel verso opposto ed entra nel contatto. Possiamo pertanto considerare la somma dei due termini come il contributo netto tra il tasso di scattering-in degli elettroni dal contatto alla regione e quello di scattering-out nel verso opposto; il loro confronto determina la corrente netta circolante nonchè il suo verso.

L'espressione (5.48) rispetto a quella di Wingreen-Meir ricavata in precedenza si differenzia unicamente in quanto non tiene conto della particolare forma che possono assumere le funzioni di Green isolate relative ai contatti metallici, che qui non abbiamo approfondito mentre nei passaggi che ci hanno condotto alla relazione (5.44) sono un elemento fondamentale. Nell'ipotesi aggiuntiva di considerare condizioni di equilibrio termodinamico degli stessi comunque, la trasformazione delle funzioni di self-energia di tunneling del problema porta alla formulazione della corrente totale circolante nel sistema esattamente nei termini espressi dalla relazione (5.44).

5.8 Corrente nel caso completamente non-interagente

Consideriamo il caso particolare in cui l'Hamiltoniana relativa alla sola regione mesoscopica intermedia è anch'essa semplicemente quadratica e non interagente, esattamente come quella relativa agli elettroni nei contatti metallici:

$$H_S = \sum_n \epsilon_n \, d_n^{\dagger} \, d_n. \tag{5.49}$$

Vogliamo determinare in queste condizioni la forma particolare che, all'interno dell'espressione di Wingreen e Meir (5.44), assumono i termini che la compongono, al fine di proseguire col calcolo diretto.

Sotto l'ipotesi che anche nella regione intermedia gli elettroni siano liberi, la self-energia totale del problema coincide completamente con quella di tunnelling precedentemente definita ed unica presente in queste condizioni. Partendo quindi dall'equazione di Dyson per la funzione ritardata e da quella di Keldysh per le componenti lesser e greater scritte in questi termini e valide sotto queste assunzioni:

$$G^{ret}(\epsilon) = G^{0^{ret}}(\epsilon) + G^{0^{ret}}(\epsilon) \Sigma^{ret}(\epsilon) G^{ret}(\epsilon)$$

$$G^{\leq}(\epsilon) = G^{ret}(\epsilon) \Sigma^{\leq}_{tot}(\epsilon) G^{av}(\epsilon)$$
avendo considerato $\Sigma_{tot}(\epsilon) = \Sigma_L(\epsilon) + \Sigma_R(\epsilon)$
(5.50)

scritte per comodità nel formalismo matriciale, si possono dimostrare le relazioni

$$G^{<} = if_{L} G^{ret} \Gamma^{L} G^{av} + if_{R} G^{ret} \Gamma^{R} G^{av}$$

$$G^{ret} - G^{av} = -iG^{ret} (\Gamma^{L} + \Gamma^{R}) G^{av}.$$
(5.51)

Sostituite queste ultime all'interno della formula generale (5.44), possiamo risalire dopo qualche passaggio algebrico alla relazione per la corrente nella forma compatta:

$$I = e \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \left[f_L(\epsilon) - f_R(\epsilon) \right] \operatorname{Tr} \left\{ G^{av} \, \Gamma^R \, G^{ret} \, \Gamma^L \right\},\tag{5.52}$$

che, identificato il coefficiente di trasmissione del problema come

$$T(\epsilon) = \operatorname{Tr}\left\{G^{av}\,\Gamma^R\,G^{ret}\,\Gamma^L\right\}$$
(5.53)

assume l'espressione

$$I = e \int \frac{d\epsilon}{2\pi} T(\epsilon) \left[f_L(\epsilon) - f_R(\epsilon) \right] \quad .$$
(5.54)

Il risultato trovato coincide con quello che in letteratura prende il nome di *formula* di Landauer-Buttiker per un sistema a due terminali come quello studiato in questo capitolo. Questo importante risultato relativo al problema della conduzione elettronica nelle stesse condizioni, fu ottenuto da Landauer[7][6] con un'opportuna teoria di scattering delle funzioni d'onde elettroniche in queste condizioni e successivamente verificato dalle prime misurazioni sperimentali. L'aver ottenuto, in un caso limite della (5.44), l'identica conclusione proveniente da un'altra teoria diversa ed indipendente, è un'evidenza della bontà della teoria di Keldysh e fu all'epoca un motivo del successo e dell'affidabilità di questa trattazione per problemi più complicati.

5.9 Accoppiamenti proporzionali

L'espressione della corrente ricavata da Wingreen e Meir (5.44) assume un aspetto particolare nel caso in cui consideriamo gli accoppiamenti tra i contatti e la regione intermedia proporzionali tra loro a meno di una costante

$$\Gamma^{L}(\epsilon) = \lambda \Gamma^{R}(\epsilon). \tag{5.55}$$

Rispetto a questa scelta è conveniente simmetrizzare la corrente globale circolante tra i contatti attraverso l'utilizzo del parametro arbitrario x, che verrà poi determinato con esattezza in un caso particolare, che permette la scrittura $I = xI_L - (1 - x)I_R$. Sostituita la prima relazione all'interno della forma ricavata per la corrente I_L (5.43) e simmetrizzando rispetto all'espressione in x presentata, otteniamo

$$I = ie \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \operatorname{Tr} \left\{ \Gamma^{R}(\epsilon) \left(\left[\lambda x - (1-x) \right] G^{<}(\epsilon) + \left[\lambda x f_{L}(\epsilon) - (1-x) f_{R}(\epsilon) \right] \cdot \left[G^{ret}(\epsilon) - G^{av}(\epsilon) \right] \right) \right\}$$
(5.56)

che esprime la corrente globale in funzione del valore di x generico considerato. Nel caso particolare in cui quest'ultimo sia fissato al valore $x = 1/(1 + \lambda)$ dalla condizione che il primo addendo si annulli e la corrente non dipenda esplicitamente da $G^{<}$ e quindi, secondo la sua interpretazione, dalla densità degli stati nella regione mesoscopica, l'espressione si riduce allora a

$$I = ie \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \tau(\epsilon) \left[f_L(\epsilon) - f_R(\omega) \right]$$
(5.57)

 con

$$\tau(\epsilon) = \operatorname{Tr}\left\{\Gamma\left(G^{ret}(\epsilon) - G^{av}(\epsilon)\right)\right\}.$$
(5.58)

L'ultimo risultato ricorda nella forma quello ricavato nel capitolo precedente nell'ipotesi che anche la regione intermedia sia caratterizzata da un'Hamiltoniana non interagente, e porterebbe a concludere come sia possibile ritrovare il fondamentale risultato di Landauer anche sotto queste condizioni. Bisogna comunque sottolineare come, andando oltre la semplice somiglianza estetica, non esista, a priori, nessun tipo di legame tra la funzione τ qui definita e il coefficiente di trasmissione T presentato precedentemente. In questo caso infatti le funzioni di Green G^{av} e G^{ret} isolate relative alla sola regione mesoscopica nascondono al loro interno le eventuali interazioni locali, termini provenienti da scattering inelastico tra le particelle, perturbazioni dovute allo spin e altri elementi assenti in una teoria noninteragente come quella precedente. Tutti questi elementi determinano la dispersione dei risultati pratici e l'allontanamento teorico da un comportamento esatto come mostrato dalla formula di Landauer.

Appendice A

Teorema di Wick

Il Teorema di Wick, nelle sue numerose versioni, è un potente mezzo teorico che permette di semplificare quantità relative a più oggetti, complicate e generalmente poco trattabili, nelle somme dei prodotti degli analoghi oggetti relativi soltanto a due di queste alla volta. Nel caso della nostra trattazione, trasforma il calcolo di un correlatore di N osservabili in quello di più correlatori a due variabili.

L'obiettivo della presente appendice è quello di introdurre i corollari necessari e la successiva dimostrazione del teorema, nella sua particolare versione utilizzata nell'ambito della teoria di sistema a molti corpi fuori dall'equilibrio. Per fare questo è necessario utilizzare il formalismo della seconda quantizzazione e con esso gli operatori di creazione e distruzione e le loro regole di commutazione, necessarie per dimostrare quanto richiesto. Sfruttando quindi la composizione di ogni operatore relativo ad un'osservabile fisica negli operatori di campo, il risultato finale può essere generalizzato a livello di operatori qualsiasi.

A.1 Corollari del Teorema

Prima di enunciare il Teorema e dimostrarlo, consideriamo quattro corollari, facilmente dimostrabili a partire dalle ipotesi che adesso introdurremo, necessari per ridurre in pochi passaggi la dimostrazione centrale del capitolo che faremo in un secondo momento. Consideriamo un operatore densità ρ_0 , relativo ad un sistema all'equilibrio termodinamico, soggetto ad una Hamiltoniana quadratica H_0^1 :

$$\rho_0 = \frac{e^{-\beta H_0}}{\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta H_0}\right]} \qquad \text{con } \beta = \frac{1}{K_B T}.$$
(A.1)

Essendo H_0 caratteristica di un sistema non interagente, fissato $\{q\}$ l'insieme dei gradi di libertà ammessi del sistema, tra loro indipendenti, vale la decomposizione:

$$H_0 = \sum_q h_q \tag{A.2}$$

 $^{^{1}}$ Da qui in poi chiamo un operatore densità avente questa caratteristica semplicemente quadratico.

che ci permette di fattorizzare a sua volta ρ_0 rispetto ai singoli $\{\rho_q\}_q$, insieme degli operatori statistici relativi ad ogni modo considerato:

$$\rho_0 = \prod_q \rho_q \qquad \text{con } \rho_q = \frac{e^{-\beta h_q}}{1 - e^{-\beta h_q}}.$$
(A.3)

Assodate queste ipotesi, possiamo allora enunciare:

Corollario 1. Considerato un sistema sottoposto all'operatore statistico ρ_0 e detti a_q i generici operatori di campo che ammette, vale la relazione (anti)commutativa:

$$\left[a_q, \rho_0\right]_{\mp} = \rho_0 \, a_q \left(e^{\lambda \epsilon_q \beta} \mp 1\right) \tag{A.4}$$

dove ϵ_q è l'autovalore dell'hamiltoniana h_q corrispondente, mentre λ è un indice che tiene conto del carattere dell'operatore di campo ed assume il valore +1 se esso è un costruttore, -1 se un distruttore.

Dimostrazione. Vogliamo giungere ad una equivalenza tra l'espressione $a_q \rho_0$ e un'analoga forma avente gli operatori scambiati tra loro, in modo da costruire in questo modo il (anti)commutatore richiesto. Dalla fattorizzazione di ρ_0 e dalla commutatività degli operatori relativi a q diversi, discende

$$a_q \rho_0 = \left(\prod_{q' \neq q} \rho_{q'}\right) a_q \rho_q. \tag{A.5}$$

A partire ora dalla regola di commutazione tra l'operatore di campo a_q e l'Hamiltoniana totale H_0 :

$$\begin{bmatrix} a_q, H_0 \end{bmatrix}_{\mp} = \begin{bmatrix} a_q, h_q \end{bmatrix}_{\mp} = a_q h_q \mp h_q a_q$$

= $-\lambda \epsilon_q a_q$ (A.6)

si ricava immediatamente la relazione:

$$a_q h_q = (h_q - \lambda \epsilon_q) a_q, \tag{A.7}$$

che possiamo facilmente generalizzare, per iterazione, in:

$$a_q h_q^n = (h_q - \lambda \epsilon_q)^n a_q. \tag{A.8}$$

La presenza della potenza *n*-esima di h_q suggerisce l'espansione in serie di Taylor dell'operatore statistico ρ_q corrispondente, ricostruibile da ambo le parti inserendo gli opportuni fattori mancanti dello sviluppo; tenendo conto dell'ordine degli operatori, otteniamo quindi

$$a_q \rho_q = \rho_q e^{\lambda \epsilon_q \beta} a_q, \tag{A.9}$$

che, sostituita nella (A.5), permette di scrivere l'espressione:

$$a_q \rho_0 = e^{\lambda \epsilon_q \beta} \rho_0 a_q \tag{A.10}$$

esattamente il risultato che abbiamo richiesto equivalente a quello scritto in termini del (anti)commutatore. $\hfill \Box$

Corollario 2. Considerato un generico operatore O, rispetto alle ipotesi precedenti, vale la relazione

$$\langle \left[a_q, O\right]_{\mp} \rangle_0 = \left(1 \mp e^{\lambda \epsilon_q \beta}\right) \langle a_q O \rangle_0.$$
 (A.11)

Dimostrazione. Espandiamo il calcolo del valore di aspettazione del commutatore o dell'anticommutatore secondo la definizione

$$\langle \left[a_q, O\right]_{\mp} \rangle_0 = \operatorname{Tr}\left(\rho_0 \left[a_q, O\right]_{\mp}\right).$$
 (A.12)

Lavorando solo con la linearità e la proprietà ciclica della traccia, eseguendo esplicitamente il (anti)commutatore, è possibile trasformare la relazione precedente nella forma equivalente

$$\langle \left[a_q, O\right]_{\mp} \rangle_0 = \mp \operatorname{Tr}\left(\left[a_q, \rho_0\right]_{\mp} O\right).$$
 (A.13)

Usando a questo punto il risultato del corollario precedente, otteniamo

$$\langle [a_q, O]_{\mp} \rangle_0 = \mp (e^{\lambda \epsilon_q \beta} \mp 1) \operatorname{Tr}(\rho_0 a_q O),$$
 (A.14)

nella quale riconosciamo il risultato cercato, avendo ricostruito il valore di aspettazione finale scritto esplicitamente e aver semplificato il segno iniziale. $\hfill\square$

Corollario 3. Considerato l'operatore di campo a_q , scritto in rappresentazione di interazione rispetto all'Hamiltoniana quadratica H_0 , l'operatore risultante è ancora un operatore di campo e la dipendenza temporale finisce solo in un fattore di fase ininfluente:

$$\widehat{a}_q(t) = a_q \, e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\epsilon_q t},\tag{A.15}$$

dove abbiamo sottointeso il pedice relativo all'Hamiltoniana che governa l'evoluzione temporale al fine di non appesantire eccessivamente la notazione.

Dimostrazione. Dalla definizione della dinamica scelta risulta:

$$\widehat{a}_{q}(t) = U_{H_{0}}^{\dagger}(t,0) a_{q} U_{H_{0}}(t,0)$$

$$= \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_{0}t\right) a_{q} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_{0}t\right)$$
(A.16)

in quanto H_0 non interagente e indipendente dal tempo, avendo definito t = 0 come tempo di riferimento per la rappresentazione. Come fatto all'interno della dimostrazione del corollario 1, cerchiamo una relazione che permetta di invertire l'ordine tra gli operatori a destra dell'uguaglianza, $a_q \in U_{H_0}(t, 0)$.

Dalla fattorizzazione dell'Hamiltoniana e dall'applicazione dei medesimi risultati trovati nella dimostrazione del corollario 1, è possibile dimostrare la relazione:

$$a_q H_0^n = (H_0 - \lambda \epsilon_q)^n a_q. \tag{A.17}$$

Analogamente a quanto fatto in precedenza, la presenza della potenza *n*-esima a sinistra suggerisce di ricostruire l'operatore di evoluzione temporale relativo ad H_0 a partire dal

suo sviluppo in serie di Taylor. Tenendo conto dell'ordine degli operatori presenti, il risultato precedente assume la forma:

$$a_q \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0 t\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0 t\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\lambda\epsilon_q t\right) a_q \tag{A.18}$$

che sostituita nella (A.16) porta esattamente al risultato richiesto.

Corollario 4. Le regole di (anti)commutazione canoniche tra operatori di campo, scritti in rappresentazione di interazione rispetto ad H_0 , si mantengono inalterate rispetto a quelle classiche, a meno di un termine di fase che tenga conto delle fasi provenienti dalla dipendenza temporale:

$$\left[\hat{a}_{q}(t), \hat{a}_{q'}^{\dagger}(t')\right]_{\mp} = \delta_{q,q'} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\epsilon_{q}(t-t')\right).$$
(A.19)

Dimostrazione. La dimostrazione discende naturalmente dal corollario 3, tenendo conto di aver specificato il carattere del generico operatore di campo a_q come distruttore e del suo aggiunto come costruttore, al fine, in questo caso particolare, di avere una notazione priva di ogni ambiguità.

A.2 Teorema di Wick-Matsubara

Siamo ora in grado di dimostrare il teorema principale dell'appendice corrente:

Teorema 5 (di Wick-Matsubara). La traccia, pesata quadraticamente, del T_{γ} - ordinamento di una stringa di operatori di campo, può essere decomposta nella somma su tutte le possibili permutazioni distinte che accoppiano due operatori alla volta dei prodotti dei correlatori T_{γ} -ordinati corrispondenti:

$$\langle T_{\gamma}(a(\tau_1)\dots a(\tau_n))\rangle_0 = \sum_{\substack{\text{possibili}\\accoppiamenti}} (\pm)^P \prod_{q,q' \in \{q\}} \langle T_{\gamma}(a_q(\tau)a_{q'}(\tau'))\rangle_0 \quad , \quad (A.20)$$

dove il fattore di segno tiene conto della statistica delle particelle nell'inversione degli operatori rispetto alla permutazione.

Dimostrazione. Per semplicità e per avere una notazione più agevole, portiamo avanti la dimostrazione nel caso solamente bosonico. Il procedimento nel caso fermionico si mantiene comunque inalterato a meno di sostituire al commutatore l'anticommutatore e di tener conto del segno corrispondente nelle permutazioni considerate per l'antisimmetria nello scambio di due operatori.

Dimostriamo il teorema per induzione:

- nel caso di un solo operatore o di due, la validità del teorema è ovvia;
- consideriamo il teorema valido sino al livello (2N-1);

• dimostriamo il caso di (2N) operatori,

$$S_{2N} \equiv \langle T_{\gamma} \left(a(\tau_1) \dots a(\tau_{2N}) \right) \rangle_0 \tag{A.21}$$

e supponiamo di applicare la permutazione che ordina gli operatori correttamente rispetto al T_{γ} -ordinamento presente, in modo da poter semplificare quest'ultimo operatore che agisce ora come identità. Rinominate opportunamente le variabili permutate, ed introdotta la notazione compatta per cui $(\tau_i) \equiv (j)$, otteniamo:

$$S_{2N} = \langle a(2N) \, a(2N-1) \dots a(1) \rangle_0 \quad \text{con} \quad \tau_{2N} >_{\gamma} \dots >_{\gamma} \tau_1, \tag{A.22}$$

scrivibile in una forma compatta come:

$$S_{2N} = \langle \prod_{n=1}^{2N'} a(n) \rangle_0 \tag{A.23}$$

dove con l'apice primato alla sommatoria intendiamo che, all'aumentare dell'indice n, il fattore corrispondente viene moltiplicato di volta in volta a sinistra di quello precedente, così da preservare il T_{γ} -ordinamento.

Riscriviamo ora l'ultimo risultato mettendo in evidenza il termine relativo alla variabile τ_{2N} :

$$S_{2N} = \langle a(2N) \prod_{n=1}^{2N-1} a(n) \rangle_0;$$
 (A.24)

in questo modo possiamo riconoscere nella scrittura la forma idonea all'applicazione del corollario 1, ottenendo:

$$S_{2N} = \left(1 - e^{\lambda_{2N}\epsilon_q \beta}\right)^{-1} \langle \left[a(2N), \prod_{n=1}^{2N-1'} a(n)\right] \rangle_0.$$
 (A.25)

Ci concentriamo a questo punto sulla determinazione di un'espressione esplicita conveniente per il commutatore così introdotto. Dalla sua definizione esso risulta:

$$\begin{bmatrix} a(2N), \prod_{n=1}^{2N-1'} a(n) \end{bmatrix} = a(2N) \prod_{n=1}^{2N-1'} a(n) - \left(\prod_{n=1}^{2N-1'} a(n)\right) a(2N)$$

= $a(2N) a(2N-1) \prod_{n=1}^{2N-2'} a(n) - \left(\prod_{n=1}^{2N-1'} a(n)\right) a(2N).$ (A.26)

Nel primo termine vogliamo invertire l'ordine tra gli operatori a(2N) e a(2N-1); per fare questo, aggiungiamo e sottriamo nell'espressione lo stesso termine con gli operatori invertiti, così da isolare il termine scambiato e costruire il commutatore tra quello

originario non scambiato ed il rimanente:

$$\left[a(2N), \prod_{n=1}^{2N-1'} a(n)\right] = a(2N-1) a(2N) \prod_{n=1}^{2N-2'} a(n) + \left[a(2N), a(2N-1)\right] \prod_{n=1}^{2N-2'} a(n) + \left(\prod_{n=1}^{2N-1'} a(n)\right) a(2N).$$
(A.27)

Prendendo in considerazione nuovamente il primo termine, a sua volta iteriamo il procedimento appena svolto facendo scalare l'operatore a(2N) di un ulteriore posto a destra, a discapito questa volta di a(2N - 2), ottenendo:

$$a(2N-1) a(2N) a(2N-2) \prod_{n=1}^{2N-3'} a(n) = a(2N-1)a(2N-2)a(2N) \prod_{n=1}^{2N-3'} a(n) + a(2N-1) [a(2N), a(2N-2)] \prod_{n=1}^{2N-3'} a(n).$$
(A.28)

Tenendo conto dal corollario 4 e che il commutatore quindi corrisponde formalmente ad un *c*-numero e commuta con gli altri operatori, possiamo riscrivere l'espressione precedente ricordando la definizione della produttoria utilizzata, come:

$$a(2N-1) a(2N) a(2N-2) \prod_{n=1}^{2N-3'} a(n) = a(2N-1)a(2N-2)a(2N) \prod_{n=1}^{2N-3'} a(n) + \left[a(2N), a(2N-2)\right] \prod_{\substack{n=1\\n\neq 2N-2}}^{2N-3} a(n),$$
(A.29)

che sostituita nella formula (A.27) porta al risultato parziale per il commutatore

$$\begin{bmatrix} a(2N), \prod_{n=1}^{2N-1'} a(n) \end{bmatrix} = a(2N-1) a(2N-2) 1, a(2N) \prod_{n=1}^{2N-3'} a(n) + \\ + \begin{bmatrix} a(2N), a(2N-1) \end{bmatrix} \prod_{\substack{n=1\\n \neq 2N-1}}^{2N-1} a(n) + \\ + \begin{bmatrix} a(2N), a(2N-2) \end{bmatrix} \prod_{\substack{n=1\\n \neq 2N-1}}^{2N-2} a(n) + \\ - \left(\prod_{n=1}^{2N-1'} a(n)\right) a(2N) \tag{A.30}$$
APPENDICE A. TEOREMA DI WICK

Iterando, nel primo termine messo in evidenza, il procedimento che sposta posto dopo posto l'operatore a(2N) a destra sino a superare tutta la stringa di operatori contenuti nella produttoria, otteniamo alla fine esattamente l'ultimo termine scambiato di segno, col quale si elide, e gli addendi costituiti dal commutatore e della produttoria opportunamente ciclati negli indici:

$$\left[a(2N), \prod_{n=1}^{2N-1'} a(n)\right] = \sum_{n=1}^{2N-1} \left[a(2N), a(n)\right] \prod_{\substack{m=1\\m \neq n}}^{2N-1'} a(m).$$
(A.31)

Sostituito il risultato ricavato nella formula (A.25) e fattorizzata la media termica, essendo il commutatore un *c*-numero, otteniamo:

$$S_{2N} = \left(1 - e^{\lambda_{2N}\epsilon_q \beta}\right)^{-1} \left(\sum_{n=1}^{2N-1} \langle \left[a(2N), a(n)\right] \rangle_0 \langle \prod_{\substack{m=1\\m \neq n}}^{2N-1'} a(m) \rangle_0 \right).$$
(A.32)

Applicando sulla media termica del commutatore il corollario 3, il fattore numerico risultante semplifica esattamente quello presente in precedenza, rendendo la scrittura di S_{2N} nella forma:

$$S_{2N} = \sum_{n=1}^{2N-1} \langle a(2N), a(n) \rangle_0 \langle \prod_{m=1}^{2N-1'} a(m) \rangle_0.$$
(A.33)

Possiamo a questo punto reintrodurre, senza ulteriori correzioni, il T_{γ} -ordinamento in entrambi i termini, tenendo conto della rinominazione data alle variabili a seguito della permutazione originaria applicata e del significato della produttoria usata. Applicando la permutazione inversa e riportando così la stringa all'aspetto di partenza, il risultato conclusivo trovato è nella forma:

$$S_{2N} = \langle T_{\gamma} \left(a(\tau_1) \dots a(\tau_{2N}) \right) \rangle_0$$

$$\equiv \sum_{n=1}^{2N-1} \langle T_{\gamma} \left(a(\tau_{2N}) a(\tau_n) \right) \rangle_0 \langle T_{\gamma} \left(a(\tau_1) \dots a(\tau_n) \dots a(\tau_{2N-1}) \right) \rangle_0.$$
(A.34)

L'ultimo risultato è proprio quello cercato, in quanto mostra come l'espressione per 2N operatori possa essere decomposta in una somma, su (2N - 1) di essi, dei prodotti tra il primo fattore, corrispondente al correlatore T_{γ} -ordinato tra il (2N)-esimo e quello ciclato nella somma, e la media termica pesata quadraticamente della stringa T_{γ} -ordinata dei (2N - 1) operatori su cui stiamo ciclando, meno quello ciclato, che soddisfa il Teorema di Wick per induzione. In definiva dunque, come volevamo dimostrare, abbiamo semplificato un correlatore di 2N variabili nella somma, su tutte le possibili permutazioni distinte, dei prodotti dei correlatori a due variabili.

Conclusioni

L'esempio finale del calcolo relativo alla corrente circolante in una struttura mesoscopica ha permesso di ricavare, attraverso i calcoli mostrati, una formula equivalente a quella teorica di Landauer, proveniente da un altro tipo di trattazione completamente indipendente. La coerenza dei risultati dimostra pertanto l'efficacia ed il successo del formalismo presentato per affrontare problematiche di questo tipo. La possibilità di estendere i calcoli ad altri esempi simili, per i quali siano portate da un lato migliorie teoriche e dall'altro nuovi gradi di libertà che permettano di specializzare i conti a situazioni via via differenti, ha permesso la diffusione e l'applicazione del formalismo di Keldysh per una grande varietà di problemi analoghi (per dare un'idea basti pensare che ad oggi l'articolo di Wingreen e Meir del '92 è stato citato in oltre milleduecento articoli successivi). Al tempo stesso l'assoluta generalità con cui abbiamo naturalmente presentato la problematica del non equilibrio e la tecnica qui proposta ne motivano la vastità dei possibili campi di applicazione (dinamica in prossimità delle transizioni di fase, proprietà cinetiche di particolari stati della materia, quantum device e relative problematiche, analisi di sistemi mesoscopici).

Bibliografia

- A. Fetter e J. Walecka. Quantum Theory of Many-Particles Systems. McGraw-Hill, 2003.
- [2] T. Fredriksen. «Inelastic Electron Transport in Nanosystems». Tesi di laurea mag. Department of Micro e Nanotechnology, Technical University of Denmark, 2004.
- [3] Haug, H. and Jauho, A. Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors. Springer, 2008.
- [4] Jacoboni, C. Theory of Electron Transport in Semiconductors. Springer, 2010.
- [5] V. Keldysh. «Diagram Technique for Non-Equilibrium Processes». In: JETP 20 (1965), p. 1018.
- [6] R. Landauer. «Electrical Resistance of Disordered One-Dimensional Lattices». In: *Philos. Mag.* 21 (1970), p. 863.
- [7] R. Landauer. «Spatial Variation of Currents and Fields due to Localized Scatterers in Metalic Conduction». In: *IBM J. Res. Dev.* 1 (1957), p. 233.
- [8] J. Maciejko. An Introduction to Non-Equilibrium Many-Body Theory. Springer, 2007.
- [9] Y. Meir e N. Wingreen. «Landauer Formula for the Current through an Interacting Electron Region». In: Phys. Rev. Lett. 68 (1992), p. 2512.
- [10] J. Rammer. Quantum Field Theory of Non-Equilibrium States. Cambridge University Press, 2007.
- [11] J. Schwinger. «Brownian Motion of a Quantum Oscillator». In: J. Math. Phys. 2 (1961), p. 407.
- [12] G Stefanucci e R. Van Leeuwen. Non-Equilibrium Many-Body Theory of Quantum Systems, a Modern Introduction. Cambridge University Press, 2013.