• Kontrakció és a normálrendezett szorzat

$i, j, k, \ldots$ betöltött

$a, b, c, \ldots$ virtuális pályák egy $|\Phi\rangle = |0\rangle$ det.-hoz képest

$|0\rangle$ ~ Fermi-vákuum

— <u>normálrendezés 2 op.-ra</u> $\qquad \overbracket{\hat A\hat B} = \langle 0|\hat A\hat B|0\rangle$

$$\hat A\hat B = \{\hat A\hat B\} + \underbrace{\langle 0|\hat A\hat B|0\rangle}_{0 \text{ v. } 1} = \underbrace{\{\hat A\hat B\}}_{\text{norm. rend. szorzat}} + \{\overbracket{\hat A\hat B}\}$$

kontrakció

$\Rightarrow \boxed{\langle 0|\{\hat A\hat B\}|0\rangle = 0} = \langle 0|\hat A\hat B|0\rangle - \langle 0|\langle 0|\hat A\hat B|0\rangle|0\rangle$

$\overbracket{\hat i^+\hat j^+} = 0,\ \overbracket{\hat a^+\hat b^+} = 0,\ \overbracket{\hat i^-\hat j^-} = 0,\ \overbracket{\hat a^-\hat b^-} = 0;\ \overbracket{\hat a^+\hat i} = 0$ stb. ...

$\overbracket{\hat i^+\hat j^-} = \delta_{ij}$, mert $\langle 0|\hat i^+\hat j^-|0\rangle = \delta_{ij} \Rightarrow \{\hat i^+\hat j^-\} = -\hat j^-\hat i^+$,

mert $\hat i^+\hat j^- = -\hat j^-\hat i^+ + \delta_{ij}$

$\overbracket{\hat j^-\hat i^+} = 0 \Rightarrow \{\hat j^-\hat i^+\} = \hat j^-\hat i^+$

$\overbracket{\hat a^+\hat b^-} = 0 \Rightarrow \{\hat a^+\hat b^-\} = \hat a^+\hat b^-$

$\overbracket{\hat b^-\hat a^+} = \delta_{ab} \Rightarrow \{\hat b^-\hat a^+\} = -\hat a^+\hat b^-$

— <u>normálrendezés több op szorzatára</u>

az $\{\hat A\hat B\ldots\hat D\}$ normálrendezett szorzatban az összes $i^+, j^+\ldots, \hat a^-, \hat b^-\ldots$ op.-t az előjel követésével jobbra mozgatunk

$\Rightarrow \boxed{\langle 0|\{\hat A\hat B\ldots\hat D\}|0\rangle = 0}$!

— <u>példa</u>: $\{i^- j^+ a^+ b^- c^+ k^-\} = \{i^- k^- j^+ a^+ b^- c^+\} =$

$-\{i^- k^- a^+ j^+ b^- c^+\} = -\{i^- k^- a^+ c^+ j^+ b^-\} = -i^- k^- a^+ c^+ j^+ b^- =$

$\langle 0|i^- = 0 \qquad \hat b^-|0\rangle = 0 \qquad k^- i^- a^+ c^+ j^+ b^-$

$\langle 0|a^+ = 0 \qquad \hat j^+|0\rangle = 0$

⋮

— <u>jelölés</u>

$$\{\hat A\hat B\hat C\hat D\hat E\ldots\hat Z\} = (-1)^2\{\overbracket{\hat A\hat C}\,\overbracket{\hat B\hat Z}\,\hat D\hat E\ldots\} = (-1)^n\langle 0|\hat A\hat C|0\rangle\langle 0|\hat B\hat Z|0\rangle\{\hat D\hat E\ldots\}$$

fontos a sorrend: kontraháljuk, majd normálrendezünk

(egy norm. rendezett szorzaton belül $\forall$ kontrakció nulla!) $[\sqcap, \{\,\}] \neq 0$

- Wick-tétel

$$\hat A\hat B\hat C\hat D\ldots = \{\hat A\hat B\hat C\hat D\ldots\} + \sum_{\substack{1\times\text{-es}\\ \text{kont}}}\{\hat A\hat B\hat C\hat D\ldots\} + \sum_{\substack{2\times\text{-es}\\ \text{kont}}}\underbrace{\{\hat A\hat B\hat C\hat D\ldots\}}_{\text{normálrendezett op.}} + \ldots$$

$$+ \sum_{\substack{3\times\text{-es}\\ \text{kontr}}}\{\hat A\hat B\hat C\hat D\ldots\} + \ldots + \sum_{\substack{\text{teljesen}\\ \text{kontrahált}}}\underbrace{\{\hat A\hat B\hat C\hat D\ldots\}}_{\text{szám!}}$$

példa:
$$i^+j^+k^-e^- = -i^+k^-j^+e^- + i^+e^-\delta_{jk} = k^-i^+j^+e^- - \delta_{ik}j^+e^- + i^+e^-\delta_{jk} = -k^-i^+e^-j^+ + \delta_{je}k^-i^+ - \delta_{ik}j^+e^- + i^+e^-\delta_{jk}$$

$$= k^-e^-i^+j^+ - \delta_{ie}k^-j^+ + \delta_{je}k^-i^+ - \delta_{ik}j^+e^- + i^+e^-\delta_{jk}$$

$$= k^-e^-i^+j^+ - \delta_{ie}k^-j^+ + \delta_{je}k^-i^+ + \delta_{ik}e^-j^+ - \delta_{ik}\delta_{je} - e^-i^+\delta_{jk} + \delta_{jk}\delta_{ie}$$

$$= \{i^+j^+k^-e^-\} + \{i^+j^+k^-e^-\} + \{i^+j^+k^-e^-\} + \{i^+j^+k^-e^-\} + \{i^+j^+k^-e^-\} + \{i^+j^+k^-e^-\} + \{i^+j^+k^-e^-\}$$

~ $\langle\Phi_0|\{\hat A\hat B\hat C\hat D\ldots\}|\Phi_0\rangle = 0 \Rightarrow \langle\Phi_0|\hat A\hat B\hat C\hat D\ldots|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0|\sum_{\substack{\text{teljesen}\\ \text{kontr.}}}\{\hat A\hat B\hat C\hat D\ldots\}|\Phi_0\rangle$

~ általánosított Wick-tétel

Shavitt-Bartlett

Szalay P. előadása

$$\{\hat A\hat B\hat C\}\{\hat D\hat E\}\{\hat F\hat G\}\ldots =$$

$$\{\hat A\hat B\hat C\hat D\hat E\hat F\hat G\ldots\} + \sum_{1\times\text{es}}\{\{\hat A\hat B\hat C\}\{\hat D\hat E\}\{\hat F\hat G\}\} +$$

$$\sum_{2\times\text{es}}\{\{\hat A\hat B\hat C\}\{\hat D\hat E\}\{\hat F\hat G\}\} + \ldots + \underbrace{\sum_{\substack{\text{teljesen}\\ \text{kontrahált}}}\{\{\hat A\hat B\hat C\}\{\hat D\hat E\}\{\hat F\hat G\}\ldots\}}$$

$$= \langle\Phi_0|\{ABC\}\{DE\}\{FG\}\ldots|\Phi_0\rangle$$

- A normálrendezett Hamilton op.

$$\hat{H} = \hat{H}_N + \langle 0|\hat{H}|0\rangle$$

$$\hat{H}_N = \sum_{p,q} f_{pq} \{p^+ q^-\} + \frac{1}{4}\sum_{pqrs} \langle pq||sr\rangle \{p^+ q^+ r^- s^-\}$$

f_{pq} ← Fock-mátrix

igazolás:

Wick-tétel

$$\hat{H} = \sum_{pq} h_{pq} p^+ q^- + \frac{1}{4}\sum_{pqrs} \langle pq||sr\rangle p^+ q^+ r^- s^- \stackrel{\downarrow}{=}$$

$$\sum_{pq} h_{pq} \{p^+ q^-\} + \sum_{pq} h_{pq} \{p^+ q^-\} + \frac{1}{4}\sum_{pqrs} \langle pq||sr\rangle \Big[\{p^+ q^+ r^- s^-\}$$

$\delta_{qr},\ q \in occ.$

$$+ \{p^+ q^+ r^- s^-\} + \{p^+ q^+ r^- s^-\} + \{p^+ q^+ r^- s^-\} + \{p^+ q^+ r^- s^-\}$$

$$+ \{p^+ q^+ r^- s^-\} + \{p^+ q^+ r^- s^-\}\Big] =$$

$$\sum_{pq} h_{pq} \{p^+ q^-\} + \sum_{i \in occ.} h_{ii} + \frac{1}{4}\sum_{pqrs} \langle pq||sr\rangle \{p^+ q^+ r^- s^-\} +$$

$$\sum_{\substack{pq \\ i \in occ.}} \langle pi||qi\rangle \{p^+ q^-\} + \frac{1}{2}\sum_{ij \in occ.} \langle ij||ij\rangle ,$$

mivel $f_{pq} = h_{pq} + \sum_{i \in occ} \langle pi||qi\rangle$ és

$$\langle 0|\hat{H}|0\rangle = \sum_{i \in occ} h_{ii} + \frac{1}{2}\sum_{ij \in occ} \langle ij||ij\rangle$$

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{pq} f_{pq} \{p^+ q^-\} + \frac{1}{4}\sum_{pqrs} \langle pq||sr\rangle \{p^+ q^+ r^- s^-\}}_{\hat{H}_N} + \langle 0|\hat{H}|0\rangle$$