FI 193 – Teoria Quântica de Sistemas de Muitos Corpos

1º Semestre de 2025

08/04/2025

Aula 12

Funções de Green

. TODA A INFORMAÇÃO SOBRE UM SISTEMA DE $N \sim 10^{23}$ PARTÍCULAS A $T=0$ ESTÁ CONTIDA NA FUNÇÃO DE ONDA DO EST. FUND.:

$$\Psi(x_1, \ldots, x_N) \qquad x = (\vec{x}, \sigma)$$

. SÓ QUE:

a) INFORMAÇÃO EM EXCESSO.

b) IMPOSSÍVEL DE CALCULAR / ARMAZENAR.

É PRECISO DEFINIR QUANTIDADES MAIS SIMPLES, QUE POSSAM FORNECER A INFORMAÇÃO DESEJADA E QUE SEJAM CALCULÁVEIS EM ALGUM ESQUEMA APROXIMATIVO.

⇒ AS VÁRIAS FUNÇÕES DE GREEN.

Versões de Schrödinger e Heisenberg

a) VERSÃO DE SCHRÖDINGER:

. ESTADOS DEPENDEM DO TEMPO: $|\psi_s(t)\rangle$

$$i\partial_t |\psi_s(t)\rangle = H|\psi_s(t)\rangle$$

. OPERADORES BÁSICOS NÃO DEPENDEM DO TEMPO:

$X, P, L \ldots$ $\quad \psi^+_{s\sigma}(\vec{x}), \psi_{s\sigma}(\vec{x}), C_{\vec{k}\sigma}, \ldots$

b) VERSÃO DE HEISENBERG:

. ESTADOS QUE NÃO DEPENDEM DO TEMPO:

$$|\psi_H\rangle = e^{iHt}|\psi_s(t)\rangle$$

$$i\partial_t|\psi_H\rangle = \left[-H e^{iHt}|\psi_s(t)\rangle + e^{iHt}\overbrace{(i\partial_t)|\psi_s(t)\rangle}^{H|\psi_s(t)\rangle}\right] = 0$$

. OS OPERADORES PASSAM A DEPENDER DO TEMPO:

$$\hat{O}_H(t) = e^{iHt}\hat{O}_S e^{-iHt}$$

$$\Rightarrow i\partial_t \hat{O}_H(t) = e^{iHt}\underbrace{\left[-H\hat{O}_S + \hat{O}_S H\right]}_{[\hat{O}_S, H]} e^{-iHt} = -H\hat{O}_H(t) + \hat{O}_H(t)H = [\hat{O}_H(t), H]$$

EM PARTICULAR:

$$\psi_H(x) = e^{iHt}\psi_{S\sigma}(\vec{x})e^{-iHt} \qquad (x = \vec{x}, t, \sigma)$$

$$\psi_H^\dagger(x) = e^{iHt}\psi_{S\sigma}^\dagger(\vec{x})e^{-iHt}$$

$$\Rightarrow \psi_H^\dagger(x) = [\psi_H(x)]^\dagger$$

NOTE QUE: $[\psi_{S\sigma}(\vec{x}), \psi_{S\sigma'}^\dagger(\vec{x}')]_\zeta = \delta_{\sigma\sigma'}\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')$

ONDE $[A,B]_\zeta = AB - \zeta BA$ $\quad \zeta = \pm 1$ $\begin{cases} \text{BÓSONS} \\ \text{FÉRMIONS} \end{cases}$

TOMANDO $e^{iHt}(\ )e^{-iHt}$ $\Rightarrow$:

$$\Rightarrow [\psi_{H\sigma}(\vec{x},t), \psi_{H\sigma'}^\dagger(\vec{x}',t)]_\zeta = \delta_{\sigma\sigma'}\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')$$

SE OS TEMPOS FOREM IGUAIS

POR OUTRO LADO:

$$[\psi_{H0}(\vec{x}, t), \psi^{+}_{H0'}(\vec{x}', t')] = \text{NÃO TRIVIAL}$$

PARA $t \neq t'$

Operador ordenamento temporal

DEFINIÇÃO:

$$T[A_H(t)B_H(t')] = \begin{cases} A_H(t)B_H(t') & \text{SE } t > t' \\ (-1)^P B_H(t')A_H(t) & \text{SE } t < t' \end{cases}$$

A MENOS DO SINAL, O OPERADOR T ORDENA OS OPERADORES DENTRO DELE EM ORDEM CRONOLÓGICA CRESCENTE DA DIREITA PARA A ESQUERDA.

P É A PARIDADE (PAR OU ÍMPAR) DO NÚMERO DE TRANSPOSIÇÕES DE OPERADORES FERMIÔNICOS DA ORDEM INICIAL ATÉ A ORDEM FINAL.

EXEMPLO: $t < t'$

$$T[\psi_{H0}(\vec{x},t)\psi_{H0}(\vec{x}',t')] = (-1)\psi_{H0}(\vec{x}',t')\psi_{H0}(\vec{x},t)$$

MAS:

$$T\left[\psi^{\dagger}_{H\sigma}(\vec{x},t)\,\psi_{H\sigma}(\vec{x},t)\,\psi^{\dagger}_{H\sigma'}(\vec{x}',t')\,\psi_{H\sigma'}(\vec{x}',t')\right] =$$

$$= \psi^{\dagger}_{H\sigma'}(\vec{x}',t')\,\psi_{H\sigma'}(\vec{x}',t')\;\;\psi^{\dagger}_{H\sigma}(\vec{x},t)\,\psi_{H\sigma}(\vec{x},t)$$

Função de Green de um corpo a T=0

ORDENADA TEMPORALMENTE

$$iG_{\alpha\beta}(\vec{x},t;\vec{x}',t') = \frac{\langle \Psi_{0H}|T[\psi_{\alpha H}(\vec{x},t)\,\psi^{\dagger}_{\beta H}(\vec{x}',t')]|\Psi_{0H}\rangle}{\langle \Psi_{0H}|\Psi_{0H}\rangle}$$

COMO PROMETIDO, É UMA FUNÇÃO DE POUCAS VARIÁVEIS QUE, NO ENTANTO, JÁ FORNECE MUITA INFORMAÇÃO MENSURÁVEL.

. ALGUMAS CARACTERÍSTICAS DE $G_{\alpha\beta}(x,x')$

. SE O SISTEMA É ISOLADO, $G_{\alpha\beta}(x,x')$ SÓ DEPENDE DA DIFERENÇA $(t-t')$.

. SE O SISTEMA NÃO QUEBRA A SIMETRIA DE REVERSÃO TEMPORAL (NÃO TEM CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO, NEM MAGNETIZAÇÃO ESPONTÂNEA), $G_{\alpha\beta}(x,x') = \delta_{\alpha\beta}\,G(x,x')$

. SE O SISTEMA É INVARIANTE POR TRANSLAÇÕES $G_{\alpha\beta}(x, x')$ SÓ DEPENDE DE $\vec{x} - \vec{x}'$

NO CASO DE SISTEMA "DE REDE" (COM INVARIÂNCIA POR TRANSLAÇÕES DISCRETA), $G_{\alpha\beta}(x, x')$ É INVARIANTE SE $\vec{x} \to \vec{x} + \vec{R}$, $\vec{x}' \to \vec{x}' + \vec{R}$, ONDE $\vec{R}$ É UM DOS DESLOCAMENTOS QUE DEIXAM A REDE INVARIANTE.

Valores esperados de operadores de um corpo

GENERICAMENTE, OPERADORES DE UM CORPO PODEM SER ESCRITOS COMO:

$$\hat{U} = \sum_{\alpha\beta} \int d^3r \, \psi^{\dagger}_{\alpha s}(\vec{r}) \, U_{\alpha\beta}(\vec{r}) \, \psi_{\beta s}(\vec{r})$$

EXEMPLOS:

a) SE $U_{\alpha\beta}(\vec{r}) = \delta_{\alpha\beta} \Rightarrow \hat{U} = \hat{N}$

b) SE $U_{\alpha\beta}(\vec{r}) = \frac{\sigma^a_{\alpha\beta}}{2} \Rightarrow \hat{U} = S^a_T \quad (a = x, y, z)$

c) SE $U_{\alpha\beta}(\vec{r}) = \delta_{\alpha\beta}\left(-\frac{\nabla^2}{2m}\right) \Rightarrow \hat{U} = \hat{T}$ = EN. CINÉTICA TOTAL

d) SE $U_{\alpha\beta}(\vec{r}) = \delta_{\alpha\beta} V(\vec{r}) \Rightarrow \hat{U} = \hat{V}$ = EN. POTENCIAL TOTAL NO POTENCIAL EXTERNO $V(\vec{r})$

NOTE QUE :

$$\lim_{t' \to t^+} i G_{\alpha\beta}(\vec{x}, t; \vec{x}', t') = \mp \langle \Psi_{0H} | \psi^\dagger_{\beta H}(\vec{x}', t') \psi_{\alpha H}(\vec{x}, t) | \Psi_{0H} \rangle$$

$$= \mp \langle \Psi_{0S} | \psi^\dagger_{\beta S}(\vec{x}') \psi_{\alpha S}(\vec{x}) | \Psi_{0S} \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \hat{U} \rangle = \sum_{\alpha\beta} \int d^3x \, \langle \Psi_{0S} | \psi^\dagger_{S\alpha}(\vec{x}) U_{\alpha\beta}(\vec{x}) \psi_{S\beta}(\vec{x}) | \Psi_{0S} \rangle$$

$$= \sum_{\alpha\beta} \int d^3x \lim_{\substack{t' \to t^+ \\ \vec{x}' \to \vec{x}}} (\mp i) U_{\alpha\beta}(\vec{x}) G_{\beta\alpha}(\vec{x}, t; \vec{x}', t')$$

$$= i \mp \sum_{\alpha\beta} \int d^3x \lim_{\substack{t' \to t^+ \\ \vec{x}' \to \vec{x}}} U_{\alpha\beta}(\vec{x}) G_{\beta\alpha}(\vec{x}, t; \vec{x}', t')$$

$$= i \mp \int d^3x \lim_{\substack{t' \to t^+ \\ \vec{x}' \to \vec{x}}} \mathrm{Tr}\left[\underset{\sim}{U}(\vec{x}) \underset{\sim}{G}(\vec{x}, t; \vec{x}', t') \right]$$

Aula passada

Valores esperados no estado fundamental de operadores de um corpo:

$$\widehat{\mathcal{O}} = \sum_{\alpha\beta} \int d^3 r \psi_\alpha^\dagger (\mathbf{r}) U_{\alpha\beta} (\mathbf{r}) \psi_\beta (\mathbf{r})$$

$$\boxed{\langle \Psi_0 | \widehat{\mathcal{O}} | \Psi_0 \rangle = \zeta i \sum_{\alpha\beta} \int d^3 r \lim_{\eta \to 0^+} \lim_{\mathbf{r} \to \mathbf{r}'} \left[U_{\alpha\beta} (\mathbf{r}) G_{\beta\alpha} (\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t + \eta) \right]}$$

Função de Green não interagente

FERMIOS (SPIN-1/2):

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{k^2}{2m} c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}\sigma}$$

EST. FUNDAMENTAL: ESFERA DE FERMI COM $\frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{N}{V}$

$|\Phi_0\rangle$

ALÉM DISSO: $\psi_\sigma(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} c_{\vec{k}\sigma}$

$$\psi^\dagger_\sigma(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} c^\dagger_{\vec{k}\sigma}$$

$$iG_{\alpha\beta}(x,x') = \theta(t-t')\langle\Phi_0|\psi_{H\alpha}(\vec{x},t)\psi^\dagger_{H\beta}(\vec{x}',t')|\Phi_0\rangle -$$

$$-\theta(t'-t)\langle\Phi_0|\psi^\dagger_{H\beta}(\vec{x}',t')\psi_{H\alpha}(\vec{x},t)|\Phi_0\rangle$$

$$\psi_{H\alpha}(\vec{x},t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\ e^{iHt} c_{\vec{k}\sigma} e^{-iHt}$$

$$e^{iHt}\, c_{\vec{k}\sigma}\, e^{-iHt} = e^{i\epsilon_{\vec{k}}\hat{n}_{\vec{k}\sigma}t}\, c_{\vec{k}\sigma}\, e^{-i\epsilon_{\vec{k}}\hat{n}_{\vec{k}\sigma}t} = e^{-i\epsilon_{\vec{k}}t}\, c_{\vec{k},\sigma}$$

PARA ISSO, BASTA MOSTRAR PARA $|n_{\vec{k}\sigma}=1\rangle$ E

$|n_{\vec{k}\sigma}=0\rangle$

$$e^{iHt}\, c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\, e^{-iHt} = e^{i\epsilon_{\vec{k}}t}\, c^{\dagger}_{\vec{k},\sigma}$$

$$\Rightarrow \psi_{H\alpha}(\vec{x},t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, e^{-i\epsilon_{\vec{k}}t}\, c_{\vec{k},\alpha}$$

$$\psi^{\dagger}_{H\beta}(\vec{x}',t') = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{p}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}'}\, e^{+i\epsilon_{\vec{p}}t'}\, c^{\dagger}_{\vec{p},\beta}$$

$$iG_{\alpha\beta}(x,x') = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k},\vec{p}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\vec{p}\cdot\vec{x}')}\, e^{-i(\epsilon_{\vec{k}}t-\epsilon_{\vec{p}}t')}\left[\theta(t-t')\langle\Phi_0|c_{\vec{k}\alpha}c^{\dagger}_{\vec{p}\beta}|\Phi_0\rangle\right.$$

$$\left. -\theta(t'-t)\langle\Phi_0|c^{\dagger}_{\vec{p}\beta}c_{\vec{k}\alpha}|\Phi_0\rangle\right]$$

$$\langle\Phi_0|\, c^{\dagger}_{\vec{p}\beta}c_{\vec{k}\alpha}|\Phi_0\rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\vec{p},\vec{k}}\langle\Phi_0|\hat{n}_{\vec{k}\alpha}|\Phi_0\rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\vec{p},\vec{k}}\,\theta(k_F-k)$$

$$i G_{\alpha\beta}(x-x') = \frac{1}{V}\sum_{k,p} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\vec{p}\cdot\vec{x}')}\, e^{-i(\epsilon_k t-\epsilon_p t')}\,\delta_{\alpha\beta}\,\delta_{\vec{k},\vec{p}}\times$$

$$\left[\theta(t-t')\theta(k-k_f)-\theta(t'-t)\theta(k_f-k)\right]$$

$$= \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\, e^{-i\epsilon_k(t-t')}\times$$

$$\left[\theta(t-t')\theta(k-k_f)-\theta(t'-t)\theta(k_f-k)\right]$$

TR. DE FOURIER:

$$G(\vec{p},\nu) = \int d^3(\vec{x}-\vec{x}')\, d(t-t')\, e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\, e^{i\nu(t-t')}\, G_{\alpha\beta}(x,x')$$

$$\int d^3x\, \frac{e^{i(\vec{k}-\vec{p})\cdot\vec{x}}}{V} = \delta_{\vec{k},\vec{p}}$$

$$i G_{\alpha\beta}(\vec{p},\, t-t') = \delta_{\alpha\beta}\, e^{-i\epsilon_{\vec{p}}\overbrace{(t-t')}^{T}}\left[\theta(t-t')\theta(p-k_f)-\theta(t'-t)\theta(k_f-p)\right]$$

$$i G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \delta_{\alpha\beta}\int dT\, e^{i\omega T}\, e^{-i\epsilon_{\vec{k}}T}\left[\theta(t-t')\theta(k-k_f)-\theta(t'-t)\theta(k_f-k)\right]$$

$$iG_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \delta_{\alpha\beta}\int dT\, e^{i\omega T}\, e^{-i\epsilon_{\vec{k}}T}\left[\theta(t-t')\theta(k-k_F) - \overbrace{\theta(t'-t)}^{\theta(-T)}\theta(k_F-k)\right]$$

$$\int dT\, e^{iT(\omega-\epsilon_{\vec{k}})}\,\theta(T)\theta(k-k_F) = \int_0^\infty dT\, e^{iT(\omega-\epsilon_{\vec{k}})}\theta(k-k_F)$$

$$= \int_0^\infty dT\, e^{iT(\omega-\epsilon_{\vec{k}}+i\eta)}\theta(k-k_F) \qquad (\eta\to 0^+)$$

$$= \frac{i\,\theta(k-k_F)}{\omega-\epsilon_{\vec{k}}+i\eta}$$

$$\int_{-\infty}^0 dT\, e^{iT(\omega-\epsilon_{\vec{k}})}\,\theta(k_F-k) = \int_{-\infty}^0 dT\, e^{iT(\omega-\epsilon_{\vec{k}}-i\eta)}\theta(k_F-k)$$

$$= \frac{-i\,\theta(k_F-k)}{\omega-\epsilon_{\vec{k}}-i\eta}$$

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\theta(k-k_F)}{\omega-\epsilon_{\vec{k}}+i\eta} + \frac{\theta(k_F-k)}{\omega-\epsilon_{\vec{k}}-i\eta}\right]$$

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\theta(k-k_F)}{\omega-\epsilon_{\vec{k}}+i\eta} + \frac{\theta(k_F-k)}{\omega-\epsilon_{\vec{k}}-i\eta}\right]$$

$$\boxed{G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\omega-\epsilon_{\vec{k}}+i\eta\,\mathrm{sgn}(k-k_F)}} \quad (\eta\to 0^+)$$

Aula passada

Função de Green não interagente (férmions):

$$iG_{\alpha\beta}^{(0)}\left(\mathbf{r}t;\mathbf{r}'t'\right)=\frac{\delta_{\alpha\beta}}{V}\sum_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)}e^{-i\epsilon\left(\mathbf{k}\right)\left(t-t'\right)}\left[\theta\left(t-t'\right)\theta\left(k-k_F\right)-\theta\left(t'-t\right)\theta\left(k_F-k\right)\right]$$

$$G_{\alpha\beta}\left(\mathbf{k},\omega\right)=\int d^3RdTe^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}e^{i\omega T}G_{\alpha\beta}\left(\mathbf{R},T\right)$$

$$G_{\alpha\beta}\left(\mathbf{R},T\right)=\int\frac{d^3kd\omega}{\left(2\pi\right)^4}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}e^{-i\omega T}G_{\alpha\beta}\left(\mathbf{k},\omega\right)$$

$$G_{\alpha\beta}^{(0)}\left(\mathbf{k},\omega\right)=\delta_{\alpha\beta}G^{(0)}\left(\mathbf{k},\omega\right)$$

$$G^{(0)}\left(\mathbf{k},\omega\right)=\frac{1}{\omega-\epsilon\left(\mathbf{k}\right)+i\eta\mathrm{sgn}\left(k-k_F\right)}$$