FI 193 – Teoria Quântica de Sistemas de Muitos Corpos

2º Semestre de 2023

21/09/2023

Aula 14

A representação de Lehmann

$$iG_{\alpha\beta}(x,y) = \left\langle T\left[\psi_{H\alpha}(x)\,\psi^{\dagger}_{H\beta}(y)\right]\right\rangle$$

Para sistemas isolados genéricos:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) \;=\; V\sum_{n}\Bigg[& \frac{\langle\Psi_0|\,\psi_{S\alpha}(\mathbf{r})\,|\Psi_n\rangle\,\langle\Psi_n|\,\psi^{\dagger}_{S\beta}(\mathbf{r}')\,|\Psi_0\rangle}{\omega-\epsilon_n(N+1)-\mu+i\eta}+ \\ & +\frac{\langle\Psi_0|\,\psi^{\dagger}_{S\beta}(\mathbf{r}')\,|\Psi_n\rangle\,\langle\Psi_n|\,\psi_{S\alpha}(\mathbf{r})\,|\Psi_0\rangle}{\omega+\epsilon_n(N-1)-\mu-i\eta}\Bigg] \end{aligned}$$

Energias de excitação:

$$\epsilon_n(N\pm 1) = E_n(N\pm 1) - E_0(N\pm 1)$$

A representação de Lehmann

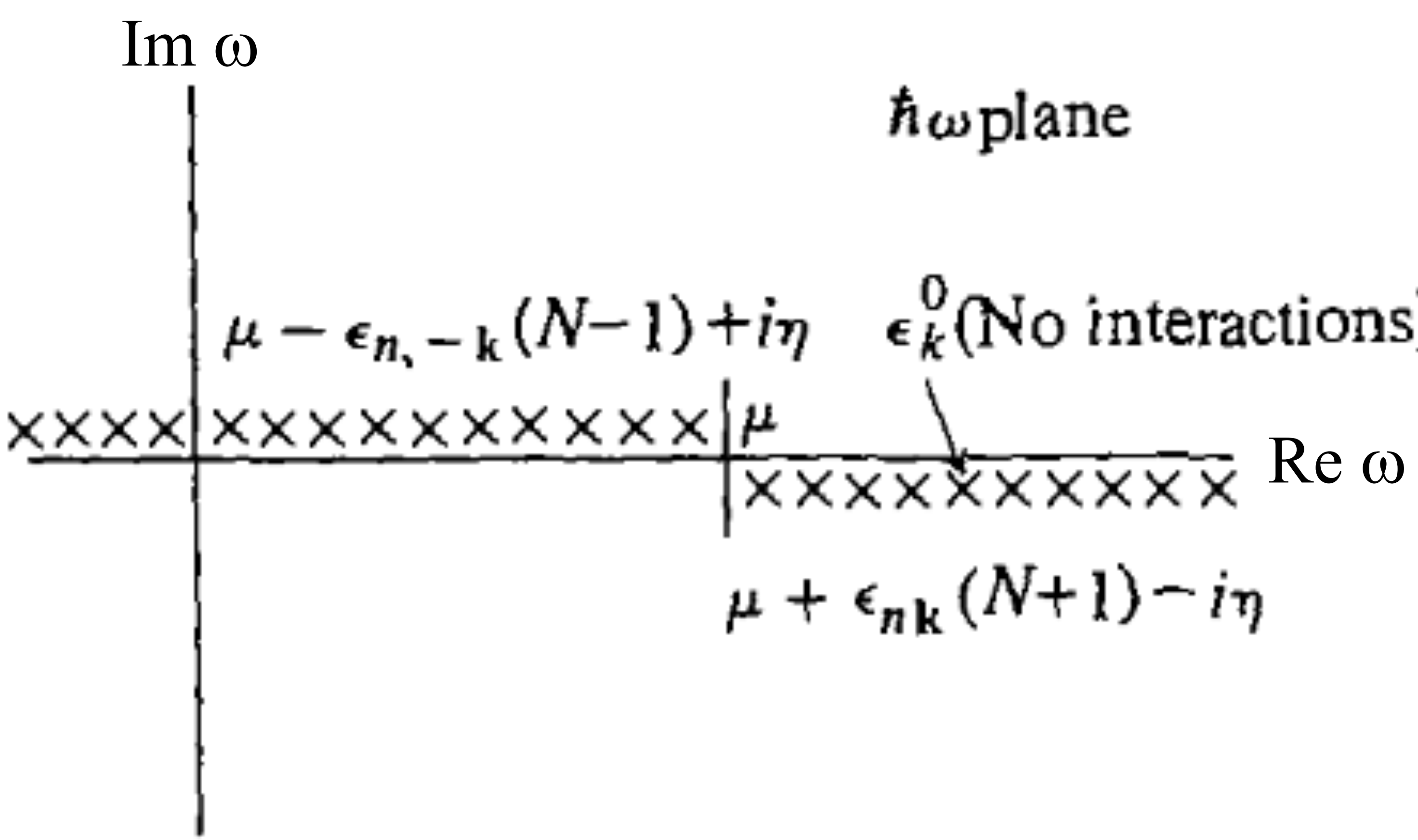
Se houver invariância translacional:

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega) = V\sum_n \left[\frac{\langle\Psi_0|\,\psi_{S\alpha}(\mathbf{0})\,|n,\mathbf{k}\rangle\,\langle n,\mathbf{k}|\,\psi^\dagger_{S\beta}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle}{\omega-\epsilon_{n,\mathbf{k}}(N+1)-\mu+i\eta} + \right.$$
$$\left. + \frac{\langle\Psi_0|\,\psi^\dagger_{S\beta}(\mathbf{0})\,|n,-\mathbf{k}\rangle\,\langle n,-\mathbf{k}|\,\psi_{S\alpha}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle}{\omega+\epsilon_{n,-\mathbf{k}}(N-1)-\mu-i\eta} \right]$$

Energias de excitação:

$$\epsilon_{n,\mathbf{k}}(N\pm1) = E_{n,\mathbf{k}}(N\pm1) - E_0(N\pm1)$$

Estrutura analítica no plano de ω complexo



A representação de Lehmann

Se houver simetria de reversão temporal:

$$G(\mathbf{k},\omega) \;=\; \delta_{\alpha\beta} V \sum_n \left[\frac{A_{n,\mathbf{k}}}{\omega-\epsilon_{n,\mathbf{k}}(N+1)-\mu+i\eta}+\frac{B_{n,\mathbf{k}}}{\omega+\epsilon_{n,-\mathbf{k}}(N-1)-\mu-i\eta}\right]$$

$$A_{n,\mathbf{k}} = \left|\langle n,\mathbf{k}|\,\psi^{\dagger}_{S\alpha}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle\right|^2 \geq 0,$$

$$B_{n,\mathbf{k}} = \left|\langle n,-\mathbf{k}|\,\psi_{S\alpha}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle\right|^2 \geq 0$$

Versões de Schrödinger e Heisenberg

VERSÃO DE SCHRÖDINGER: $i\partial_t|\Psi_S(t)\rangle = H|\Psi_S(t)\rangle$ (1)

OPERADORES FUNDAMENTAIS NÃO DEPENDEM DO TEMPO.

EVOLUÇÃO TEMPORAL: UNITÁRIO

$$|\Psi_S(t)\rangle = U(t-t_0)|\Psi_S(t_0)\rangle \quad (2)$$

DE (1) E (2):

$$i\partial_t|\Psi_S(t)\rangle = H|\Psi_S(t)\rangle = i\partial_t U(t-t_0)|\Psi_S(t_0)\rangle$$

$$H\,U(t-t_0)|\Psi_S(t_0)\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{i\partial_t U(t-t_0) = H\,U(t-t_0)} \quad (3)$$

SOLUÇÃO FORMAL:

$$U(t-t_0) = e^{-iH(t-t_0)}$$

LEMBRANDO:

$$e^A = 1 + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \dots$$

PROPRIEDADES DE $U(t-t_0)$:

UNITÁRIO: $U^{\dagger}(t-t_0) = U^{-1}(t-t_0) = U(t_0-t)$

VERSÃO DE HEISENBERG: $|\Psi_H(t)\rangle = e^{iHt}|\Psi_S(t)\rangle$

$O_H(t) = e^{iHt} O_S e^{-iHt}$

$i\partial_t|\Psi_H(t)\rangle = 0 \Rightarrow |\Psi_H(t)\rangle = |\Psi_H(t_0)\rangle$

$i\partial_t O_H(t) = [O_H(t), H] = e^{iHt}[O_S, H]e^{-iHt}$

Versão de interação

HIPÓTESE: $H = H_0 + H_1$

H_0: QUADRÁTICO, H_1: QUÁRTICO

VERSÃO DE INTERAÇÃO: $|\Psi_I(t)\rangle = e^{iH_0 t}|\Psi_S(t)\rangle$

$O_I(t) = e^{iH_0 t}\, O_S\, e^{-iH_0 t}$

$$i\partial_t|\Psi_I(t)\rangle = e^{iH_0 t}(-H_0 + i\partial_t)|\Psi_S(t)\rangle$$

$$= e^{iH_0 t}(\cancel{-H_0} + \cancel{H_0} + H_1)|\Psi_S(t)\rangle$$

$$= e^{iH_0 t} H_1 e^{-iH_0 t} e^{iH_0 t}|\Psi_S(t)\rangle$$

$$\boxed{i\partial_t|\Psi_I(t)\rangle = H_{1I}(t)|\Psi_I(t)\rangle} \quad (4)$$

$$i\partial_t [O_I(t)] = i\partial_t [e^{iH_0 t} O_S e^{-iH_0 t}]$$

$$= e^{iH_0 t}(-H_0 O_S + O_S H_0) e^{-iH_0 t}$$

$$= e^{iH_0 t}[O_S, H_0] e^{-iH_0 t} = [O_I(t), H_0]$$

$$\boxed{i\partial_t O_I(t) = [O_I(t), H_0]} \Leftarrow$$

SE H_0 É QUADRÁTICO ESSA PARTE É SOLÚVEL

NA BASE QUE DIAGONALIZA H_0: $H_0 = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k$

VIMOS QUE: $c_{kH}(t) = e^{-i\epsilon_k t} c_k = c_{kI}(t)$

$$c_{kH}^\dagger(t) = e^{i\epsilon_k t} c_k^\dagger = c_{kI}^\dagger(t)$$

MAS, QUALQUER OPERADOR, TANTO DE UM CORPO QUANTO DE DOIS CORPOS, É UMA COMBINAÇÃO LINEAR DE c_k'S E $c_k^\dagger$'S

$$e^{iH_0t}(A\,B\,C\cdots Z)e^{-iH_0t} = \left(e^{iH_0t}Ae^{-iH_0t}\right)\left(e^{iH_0t}Be^{-iH_0t}\right)\cdots(\quad)$$

$$A\underbrace{\wedge}_{e^{-iH_0t}} B \underbrace{\wedge}_{e^{iH_0t}} C$$

$$= A_I(t)\,B_I(t)\cdots Z_I(t)$$

EXEMPLO:

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}'\\ \vec{q}\\ \sigma,\sigma'}} V(\vec{q})\, c^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\, c^\dagger_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}\, c_{\vec{k}',\sigma'}\, c_{\vec{k},\sigma}$$

$$\hat{V}_I(t) = \frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{k}\vec{k}'\\ \vec{q},\sigma,\sigma'}} V(\vec{q})\, c^\dagger_{I\,\vec{k}+\vec{q},\sigma}(t)\, c^\dagger_{I\,\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}(t)\,\times$$

$$c_{I\,\vec{k}',\sigma'}(t)\,\underbrace{c_{I\,\vec{k},\sigma}(t)}_{e^{-i\epsilon_{\vec{k}}t}\,c_{\vec{k},\sigma}}$$

OPERADOR EVOLUÇÃO TEMPORAL NA VERSÃO DE INTERAÇÃO:

$$|\Psi_I(t)\rangle = \tilde{U}(t,t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle \quad (5)$$

A PARTIR DESSA DEFINIÇÃO E DE $U(t-t_0)$ TEMOS:

$$|\Psi_I(t)\rangle = e^{iH_0t}|\Psi_S(t)\rangle = e^{iH_0t}U(t-t_0)|\Psi_S(t_0)\rangle$$

$$= e^{iH_0t}e^{-iH(t-t_0)}e^{-iH_0t_0}|\Psi_I(t_0)\rangle \quad (6)$$

COMPARANDO (6) COM (5):

$$\boxed{\tilde{U}(t,t_0) = e^{iH_0t}e^{-iH(t-t_0)}e^{-iH_0t_0}} \quad (7)$$

NOTEM QUE, DE FATO, $\tilde{U}(t,t_0)$ NÃO DEPENDE APENAS DA DIFERENÇA $t-t_0$.

NOTEM TAMBÉM QUE:

$$\tilde{U}(t,t_0) \neq U_I(t-t_0) = e^{iH_0t}e^{-iH(t-t_0)}e^{-iH_0t}$$

ALGUMAS PROPRIEDADES DE $\tilde{U}(t,t_0)$ (FACILMENTE PROVÁVEIS A PARTIR DE (7) E FISICAMENTE PLAUSÍVEIS):

i) $\tilde{U}(t_0,t_0) = \mathbb{1}$ ("CONDIÇÃO INICIAL")

ii) $\tilde{U}^{\dagger}(t,t_0) = \tilde{U}^{-1}(t,t_0)$ ("UNITARIEDADE")

iii) $\tilde{U}(t_3,t_2)\tilde{U}(t_2,t_1) = \tilde{U}(t_3,t_1)$ ("PROPRIEDADE DE GRUPO")

iv) $\tilde{U}^{-1}(t,t_0) = \tilde{U}(t_0,t) = \tilde{U}^{\dagger}(t,t_0)$

EQ. DIFERENCIAL SATISFEITA POR $\tilde{U}(t,t_0)$. DE (4)

$$\boxed{i\partial_t \tilde{U}(t,t_0) = H_{1I}(t)\,\tilde{U}(t,t_0)} \quad (8)$$

INTEGRANDO (8) DE t_0 A t:

$$\int_{t_0}^{t} dt' \left[i\partial_{t'} \tilde{U}(t',t_0) \right] = \int_{t_0}^{t} dt'\, H_{1I}(t')\,\tilde{U}(t',t_0)$$

$$\Rightarrow i\left[\tilde{U}(t,t_0) - \underbrace{\tilde{U}(t_0,t_0)}_{1}\right] = \int_{t_0}^{t} H_{1I}(t')\,\tilde{U}(t',t_0)\,dt'$$

$$\Rightarrow \boxed{\tilde{U}(t,t_0) = 1 - i\int_{t_0}^{t} H_{1I}(t')\,\tilde{U}(t',t_0)\,dt'} \quad (8)$$

EQ. INTEGRAL PARA $\tilde{U}(t,t_0)$ QUE INCORPORA A COND. INICIAL.

Expansão perturbativa do operador evolução temporal

INSERINDO EM $\tilde{U}(t,t_0)$ NO INTEGRANDO DO LADO DIREITO, O PRÓPRIO LADO DIREITO:

$$\tilde{U}(t,t_0) = 1 - i\int_{t_0}^{t} H_{1I}(t')\,dt' + (-i)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, H_{1I}(t') H_{1I}(t'')$$

$$+ (-i)^3 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \int_{t_0}^{t''} dt'''\, H_{1I}(t') H_{1I}(t'') H_{1I}(t''') + \cdots$$

O TERMO GENÉRICO É

$$\tilde{U}^{(n)}(t,t_0) = (-i)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, H_{1I}(t_1) H_{1I}(t_2) \cdots H_{1I}(t_n)$$

PODEMOS SIMETRIZAR AS INTEGRAIS, MOSTRANDO QUE:

$$\tilde{U}^{(n)}(t,t_0) = \frac{(-i)^n}{n!}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n \, T\left[H_{1I}(t_1)\cdots H_{1I}(t_n)\right]$$

(PROVA NAS NOTAS). POR EXEMPLO, DE $n=2$:

$$\tilde{U}^{(2)}(t,t_0) = \frac{(-i)^2}{2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \left[\theta(t_1-t_2) H_{1I}(t_1) H_{1I}(t_2) + \theta(t_2-t_1) \times H_{1I}(t_2) H_{1I}(t_1)\right] = \frac{(-i)^2}{2}\left[\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, H_{1I}(t_1) H_{1I}(t_2) + \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \, H_{1I}(t_2) H_{1I}(t_1)\right]$$

TROCANDO $t_1 \rightleftarrows t_2$ NO 2º TERMO, POR SEREM VARIÁVEIS MUDAS, NOTA-SE QUE 2º TERMO = 1º TERMO, E OBTEMOS A FORMA ORIGINAL DE $\tilde{U}^{(2)}(t,t_0)$

A PROVA SE GENERALIZA FACILMENTE PARA $n>2$.

$$\boxed{\tilde{U}(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i)^n}{n!}\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t}dt_n\, T\left[H_{1I}(t_1)\cdots H_{1I}(t_n)\right]} \quad (10)$$

ESSA EXPRESSÃO SUGERE ALGO COMO:

$$\tilde{U}(t,t_0)\equiv T\left[\exp\left[-i\int_{t_0}^{t}H_{1I}(t')\,dt'\right]\right]$$

QUE DEVE SER VISTO COMO UMA DEFINIÇÃO.

NA VERDADE, PODEMOS ESCREVER, DISCRETIZANDO A INTEGRAL TEMPORAL:

$$\tilde{U}(t,t_0)\simeq e^{-iH_{1I}(t_N)\delta t}\,e^{-iH_{1I}(t_{N-1})\delta t}\cdots e^{-iH_{1I}(t_1)\delta t}=$$

$$=\prod_{i=1}^{N}\exp\left[-i\,H_{1I}(t_i)\,\delta t\right]$$

ESSA FORMA DISCRETIZADA É ÚTIL NUMERICAMENTE (SUZUKI-TROTTER)

Teorema de Gell-Mann-Low

(Fetter & Walecka, Seção 6)

INTRODUZ-SE A "LIGAÇÃO ADIABÁTICA DA INTERAÇÃO":

$$H(t) = H_0 + e^{-\eta|t|} H_1 \qquad \eta \to 0^+$$

VEJAM QUE:

$$t \to \pm\infty \;, \quad H(t) \longrightarrow H_0$$

$$t = 0 \;, \quad H(0) = H_0 + H_1$$

Teorema de Gell-Mann e Low

(Fetter & Walecka, Seção 6)

$$H = H_0 + e^{-\eta|t|} H_1 \quad \left(\eta \to 0^+\right)$$

Seja um autoestado de H_0: $\quad H_0 |\Phi_0\rangle = E_0 |\Phi_0\rangle$

Se o seguinte limite existe: $\quad \lim_{\eta \to 0^+} \dfrac{\tilde{U}_\eta(0, \pm\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\tilde{U}_\eta(0, \pm\infty)|\Phi_0\rangle}$

então ele é $\quad \dfrac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}$ onde $\quad \boxed{H\left(\dfrac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}\right) = E\left(\dfrac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}\right)}$