FI 193 – Teoria Quântica de Sistemas de Muitos Corpos

2º Semestre de 2023

26/09/2023

Aula 15

Aula passada

Hamiltoniano: $H = H_0 + H_1$

Versão de interação

- Estados: $\left|\Psi_I\left(t\right)\right\rangle = e^{iH_0 t}\left|\Psi_S\left(t\right)\right\rangle$
- Operadores: $O_I\left(t\right) = e^{iH_0 t} O_S e^{-iH_0 t}$

Se H_0 é quadrático, os operadores têm dinâmica simples:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{q}} \Rightarrow c_{\mathbf{q}I}\left(t\right) = e^{-i\omega_{\mathbf{q}} t} c_{\mathbf{q}}$$

$$\mathcal{O}_I\left(t\right) = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} O\left(\mathbf{k},\mathbf{q}\right) c_{\mathbf{k}I}^{\dagger}\left(t\right) c_{\mathbf{q}I}\left(t\right)$$

Aula passada

Os estados têm dinâmica complicada:

$$\left|\Psi_I\left(t\right)\right\rangle = \tilde{U}\left(t, t_0\right)\left|\Psi_I\left(t_0\right)\right\rangle$$

$$i\partial_t \tilde{U}\left(t, t_0\right) = H_{1I}\left(t\right)\tilde{U}\left(t, t_0\right)$$

O operador evolução temporal permite uma expansão perturbativa em H_1

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

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: $\quad H_0 \left|\Phi_0\right\rangle = E_0 \left|\Phi_0\right\rangle$

Se o seguinte limite existe $\displaystyle \lim_{\eta\to 0^+} \frac{\tilde{U}_\eta\left(0,\pm\infty\right)\left|\Phi_0\right\rangle}{\left\langle\Phi_0\right|\tilde{U}_\eta\left(0,\pm\infty\right)\left|\Phi_0\right\rangle}$

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

1. Nas aplicações tomaremos $|\Phi_0>$ como o estado fundamental não interagente e suporemos que $|\Psi_0>$ é o estado fundamental interagente.
2. Isso nem sempre é verdade, pode ser um estado excitado! Por exemplo, se $|\Phi_0>$ e $|\Psi_0>$ têm simetrias diferentes.
3. Também há problemas se o estado não é $|\Psi_0>$ perturbativamente acessível a partir de $|\Phi_0>$.
4. Também há ambiguidades se o estado $|\Phi_0>$ é degenerado.

Identidade útil

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

$$O_H(t) = e^{iHt} O_S e^{-iHt} = e^{iHt} e^{-iH_0 t} O_I(t) e^{iH_0 t} e^{-iHt}$$

Mas: $\tilde{U}(t, t_0) = e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0}$

$$\boxed{O_H(t) = \tilde{U}(0, t) O_I(t) \tilde{U}(t, 0)}$$

A função de Green em termos de U

$$iG(1,2) = \frac{\langle \Psi_{0H} | T\left[\psi_{1H}\psi_{2H}^{\dagger}\right] | \Psi_{0H} \rangle}{\langle \Psi_{0H} | \Psi_{0H} \rangle}$$

$1 \rightarrow \vec{r}_1, t_1, \sigma_1$

$2 \rightarrow \vec{r}_2\, t_2\, \sigma_2$

SUPOR $t_1 > t_2$ (O CASO $t_2 > t_1$ É ANÁLOGO):

$$iG(1,2) = \frac{\langle \Psi_{0H} | \psi_{1H}\psi_{2H}^{\dagger} | \Psi_{0H} \rangle}{\langle \Psi_{0H} | \Psi_{0H} \rangle} = \frac{N}{D}$$

DE GELL-MANN-LOW:

$$\tilde{U}_\eta(+\infty, -\infty) \equiv S$$

$$\frac{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}{|\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle|^2} = \frac{\langle \Phi_0 | \tilde{U}_\eta^{\dagger}(0,+\infty)\, \tilde{U}_\eta(0,-\infty) | \Phi_0 \rangle}{\underbrace{\langle \Phi_0 | \tilde{U}_\eta^{\dagger}(0,+\infty) | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | \tilde{U}_\eta(0,-\infty) | \Phi_0 \rangle}_{d}}$$

$$\langle \Psi_0 | \psi_{1H}\psi_{2H}^{\dagger} | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{d} \langle \Phi_0 | \tilde{U}_\eta^{\dagger}(0,+\infty)\, \psi_{1H}\psi_{2H}^{\dagger}\, \tilde{U}_\eta(0,-\infty) | \Phi_0 \rangle$$

$$\langle \Phi_0 | \tilde{U}_\eta^\dagger(0,+\infty)\,\psi_{1H}\,\psi_{2H}^\dagger\,\tilde{U}_\eta(0,-\infty)\,|\Phi_0\rangle =$$

$$= \langle \Phi_0 | \underbrace{\tilde{U}_\eta^\dagger(0,+\infty)\,\tilde{U}(0,t_1)}_{\tilde{U}_\eta(+\infty,t_1)}\,\Psi_{1I}(t_1)\,\underbrace{\tilde{U}(t_1,0)\,\tilde{U}(0,t_2)}_{\tilde{U}(t_1,t_2)}\,\Psi_{2I}^\dagger(t_2)\,\overbrace{\tilde{U}(t_2,0)\,\tilde{U}_\eta(0,-\infty)}^{\tilde{U}(t_2,-\infty)}\,|\Phi_0\rangle$$

$$iG(1,2) = \frac{\langle \Phi_0 | \tilde{U}_\eta(+\infty,t_1)\,\Psi_{1I}\,\tilde{U}_\eta(t_1,t_2)\,\psi_{2I}^\dagger\,\tilde{U}_\eta(t_2,-\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{U}_\eta(+\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle}$$

PROVA-SE (F+W, pg. 84):

$$iG(1,2) = \frac{\langle \Phi_0 | T\left[\tilde{U}_\eta(+\infty,-\infty)\,\Psi_{1I}\,\Psi_{2I}^\dagger\right]|\Phi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | T\left[\tilde{U}_\eta(+\infty,-\infty)\right]|\Phi_0\rangle}$$

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

$\hookrightarrow$ VAMOS DEIXAR DE INCLUIR A PARTIR DE AGORA

$$H_{1I}(t) = \frac{1}{2} \sum_{l,m,o,p} V_{l,m,o,p}\, c^{\dagger}_{lI}(t)\, c^{\dagger}_{mI}(t)\, c_{pI}(t)\, c_{oI}(t)$$

NOTAMOS AGORA QUE CADA TERMO NO NUMERADOR E NO DENOMINADOR DE $G(1,2)$ ENVOLVE O VALOR ESPERADO NO EST. FUND. NÃO INTERAGENTE $|\Phi_0\rangle$ DE UMA SEQUÊNCIA DE OPERADORES DE CRIAÇÃO E DESTRUIÇÃO NA VERSÃO DE INTERAÇÃO:

$$\langle \Phi_0 | a_1^{\dagger}(t_1)\, a_2^{\dagger}(t_2)\, a_3(t_3)\, a_4(t_4) \cdots\cdots a_l(t_l)\, a_k^{\dagger}(t_k) | \Phi_0 \rangle$$

$$a_3(t_3) = e^{-i\omega_3 t_3}\, a_3$$

Forma útil

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt_3 H_{1I}\left(t_3\right) = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\int d^3r_3 d^3r_4 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_3 U\left(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4\right)\psi_{\alpha I}^{\dagger}\left(\mathbf{r}_3, t_3\right)\psi_{\beta I}^{\dagger}\left(\mathbf{r}_4, t_3\right)\psi_{\beta I}\left(\mathbf{r}_4, t_3\right)\psi_{\alpha I}\left(\mathbf{r}_3, t_3\right)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\underbrace{\int d^3r_3 d^3r_4 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_3 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_4}_{\int dx_3\, dx_4} \underbrace{U\left(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4\right)\delta\left(t_3 - t_4\right)}_{U(x_3 - x_4) \equiv U_{34}} \underbrace{\psi_{\alpha I}^{\dagger}\left(\mathbf{r}_3, t_3\right)\psi_{\beta I}^{\dagger}\left(\mathbf{r}_4, t_4\right)\psi_{\beta I}\left(\mathbf{r}_4, t_4\right)\psi_{\alpha I}\left(\mathbf{r}_3, t_3\right)}_{\psi^{\dagger}_{\alpha I}(x_3)\psi^{\dagger}_{\beta I}(x_4)\psi_{\beta I}(x_4)\psi_{\alpha I}(x_3)}$$

$\alpha x_3 \to x_3$ $\qquad$ $\beta x_4 \to x_4$ $\qquad$ $\sum_{\alpha}\int dx_3 \to \int dx_3 \equiv \int d3$

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dt_3 H_{1I}\left(t_3\right) = \frac{1}{2}\int d3 \int d4 U_{34}\psi_3^{\dagger}\psi_4^{\dagger}\psi_4\psi_3}$$

Teorema de Wick

Teorema de Wick: O valor esperado no estado fundamental não-interagente de uma sequência de operadores de criação e destruição na versão de interação é dado pela soma de todas as contrações possíveis de pares, onde cada termo tem o sinal de +1 (-1) de acordo com o número de transposições necessárias de operadores fermiônicos para ir da ordem inicial até a ordem final ser par (ímpar).

Cada contração de um operador de destruição com um operador de criação (nessa ordem) é igual à função de Green não-interagente.

EXEMPLO:

$$\langle \Phi_0 | T[a_4^\dagger a_3^\dagger a_2 a_1] | \Phi_0 \rangle = 1 + 2$$

NOTEM QUE SÓ HÁ CONTRAÇÕES ENTRE UM OP. DE DEST. E UM DE CRIAÇÃO.

$$1: \langle \Phi_0 | T[a_2 a_3^\dagger a_1 a_4^\dagger] | \Phi_0 \rangle = i\,G^{(0)}(2,3) \times i\,G^{(0)}(1,4)$$

$$2: \langle \Phi_0 | T[a_2 a_4^\dagger a_1 a_3^\dagger] | \Phi_0 \rangle (-1) = (-1)\, i\,G^{(0)}(1,3)\, i\,G^{(0)}(2,4)$$

APLICANDO O TEOREMA PARA:

$$iG(1,2) = \frac{\langle \Phi_0 | T[\tilde{U}_h(+\infty,-\infty)\Psi_{1I}\Psi^\dagger_{2I}] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | T[\tilde{U}_h(+\infty,-\infty)] | \Phi_0 \rangle}$$

VAMOS FOCAR NO 1º TERMO Ñ-TRIVIAL ($n=1$) DO NUMERADOR:

$$iG^{(1N)}(1,2) = (-i)\frac{1}{2}\int d3\,d4\; U_{34} \langle T[\psi_1 \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_4 \psi_3] \rangle_0$$

$$\psi_1 \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_4 \psi_3 + \psi_1 \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_4 \psi_3 + \psi_1 \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_4 \psi_3 +$$

$$\psi_1 \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_4 \psi_3 + \psi_1 \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_4 \psi_3 + \psi_1 \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_4 \psi_3 =$$

$$= iG^0_{12}\left[-iG^{(0)}_{43}\, iG^{(0)}_{34} + iG^{(0)}_{44}\, iG^{(0)}_{33}\right] + iG^0_{13}\left[iG^{(0)}_{42}\, iG^{(0)}_{34} - iG^{(0)}_{44}\, iG^{(0)}_{32}\right] +$$

$$iG^0_{14}\left[-iG^{(0)}_{42}\, iG^{(0)}_{33} + iG^{(0)}_{43}\, iG^{(0)}_{32}\right]$$

$$iG^{(1N)}(1,2) = \frac{1}{2}\int d3\,d4\, U_{34}\Big[G^{0}_{12}\big(G^{(0)}_{43} G^{(0)}_{34} - G^{(0)}_{33} G^{(0)}_{44}\big) +$$

$$+ G^{(0)}_{13}\big(G^{(0)}_{44} G^{(0)}_{32} - G^{(0)}_{42} G^{(0)}_{34}\big) + G^{(0)}_{14}\big(G^{(0)}_{42} G^{(0)}_{33} - G^{(0)}_{43} G^{(0)}_{32}\big)\Big]$$

i) HÁ F.G. COM TEMPOS IGUAIS! $G^{(0)}_{33}$ E $G^{(0)}_{44}$ O QUE É AMBÍGUO: NOTAMOS QUE ELES SEMPRE VÊM DA INTERAÇÃO, ONDE CRIAÇÃO ESTÁ À ESQUERDA DE DESTRUIÇÃO:

$$\Rightarrow G^{(0)}_{44} = G^{(0)}(\vec{r}_4, t_4; \vec{r}_4, t_4) \equiv \lim_{\eta \to 0^+} G^{(0)}(\vec{r}_4, t_4; \vec{r}_4, t_4+\eta)$$

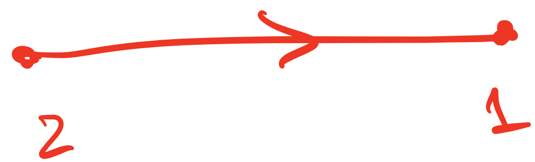
$$= -\frac{1}{i}\langle \Phi_0 | \psi^{\dagger}(\vec{r}_4)\psi(\vec{r}_4) | \Phi_0 \rangle = i\, n_\sigma(\vec{r}_4) = i\, n^{(0)}_\sigma = i\,\frac{n^{(0)}}{2}$$

ii) OS DOIS ÚLTIMOS TERMOS SÃO IGUAIS SE PERMUTARMOS AS VARIÁVEIS MUDAS 3 E 4. MANTENHO APENAS UM DELES E ELIMINO O FATOR 1/2.

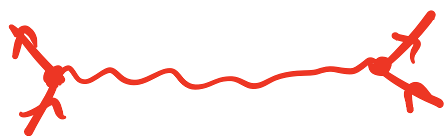
ESSE CANCELAMENTO DO $\frac{1}{2}$ SOBREVIVE EM ORDENS SUPERIORES EM TODOS OS TERMOS NOS QUAIS HÁ CONTRAÇÃO DE ÍNDICE EXTERNO COM ALGUM ÍNDICE INTERNO.

iii) O PRIMEIRO TERMO Ñ TEM CONTRAÇÃO DOS ÍNDICES EXTERNOS COM ALGUM ÍNDICE INTERNO. ESSA ESTRUTURA ESPECIAL ESTARÁ PRESENTE EM TODAS AS ORDENS. VEREMOS ADIANTE O QUE FAZER COM ELA.

TODOS OS TERMOS TÊM UMA FORMA QUE SUGERE UMA REPRESENTAÇÃO GRÁFICA:



$\rightsquigarrow \quad i\, G^{(0)}_{12}$



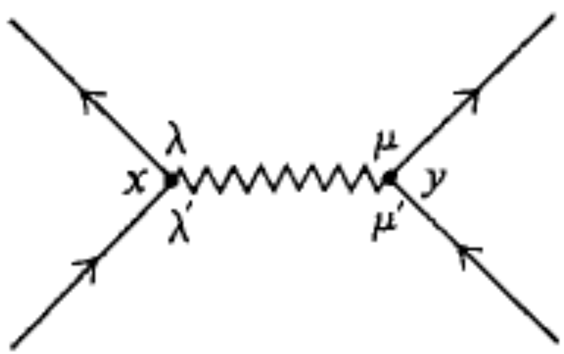
$\rightsquigarrow \quad -i\, U_{34}$

Elementos gráficos dos diagramas

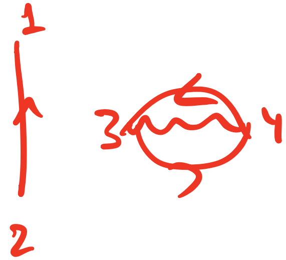
$$iG^{(0)}_{\alpha\beta}(x,y) = \left\langle T\left[\psi_{\alpha I}(x)\,\psi^{\dagger}_{\beta I}(y)\right]\right\rangle_0$$

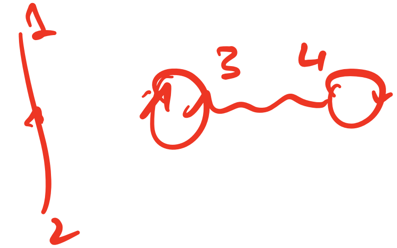
GÁS DE ELÉTRONS:

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

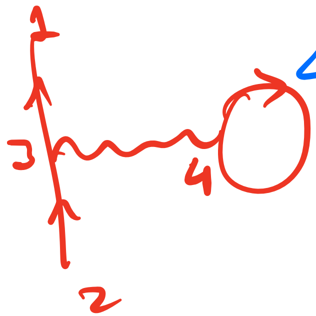


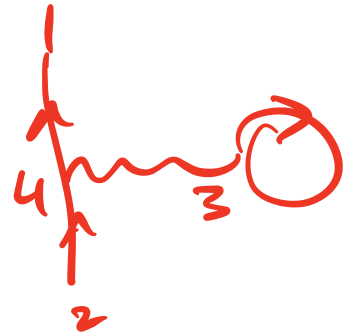
$$-iU(x,y)\,\delta_{\lambda,\lambda'}\delta_{\mu,\mu'}$$

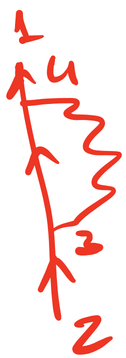
$iG^{(1N)}_{12} = -\frac{1}{2}$ 

$+\frac{1}{2}$ 

DIAGRAMAS DESCONECTADOS

$-\frac{1}{2}$ 

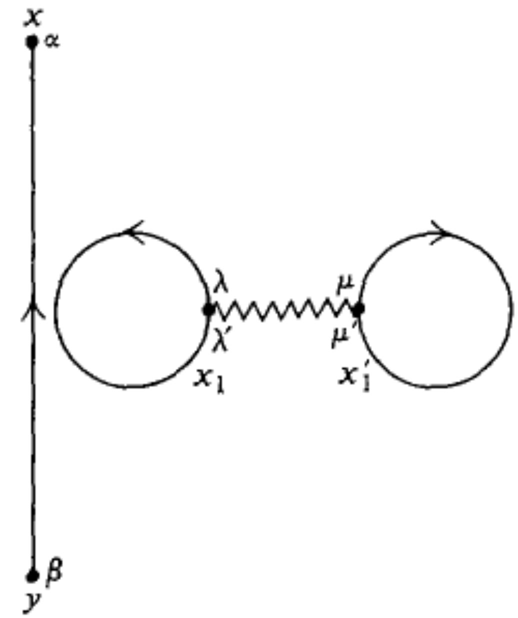
$=$
$-\frac{1}{2}$ 

$+\frac{1}{2}$ 

$=$
$+\frac{1}{2}$ 

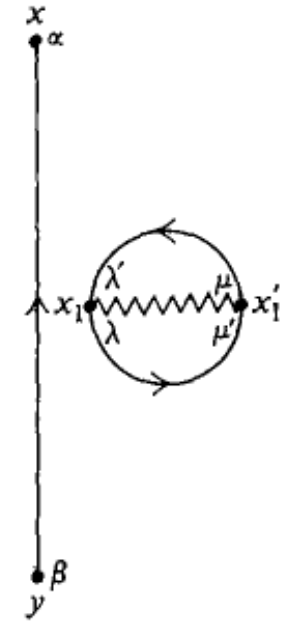
DIAGRAMAS CONECTADOS

DIAGRAMAS DE FEYNMAN



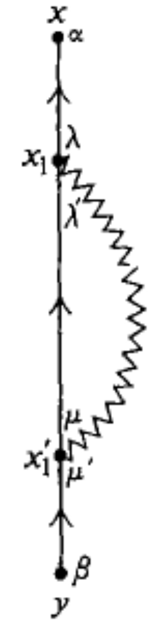
x
α
λ
λ′
x1
μ
μ′
x′1
β
y

(A)



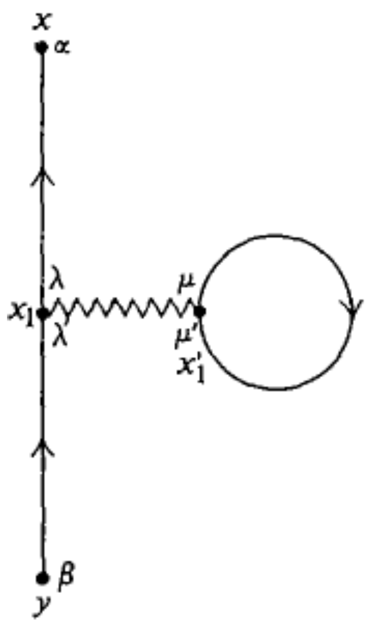
x
α
x1
λ′
λ
μ
μ′
x′1
β
y

(B)



x
α
λ
x1
λ′
μ
x′1
μ′
β
y

(C)

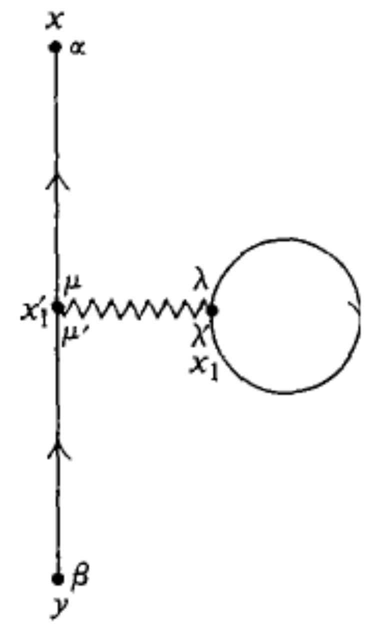


x
α
λ
x1
λ′
μ
μ′
x′1
β
y

(D)

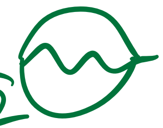
x
α
μ
x′1
μ′
λ
x1
λ′
β
y

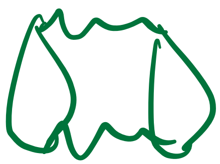
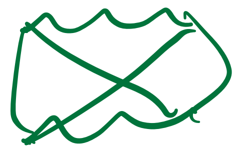
(E)



x
α
μ
x′1
μ′
λ
λ′
x1
β
y

(F)

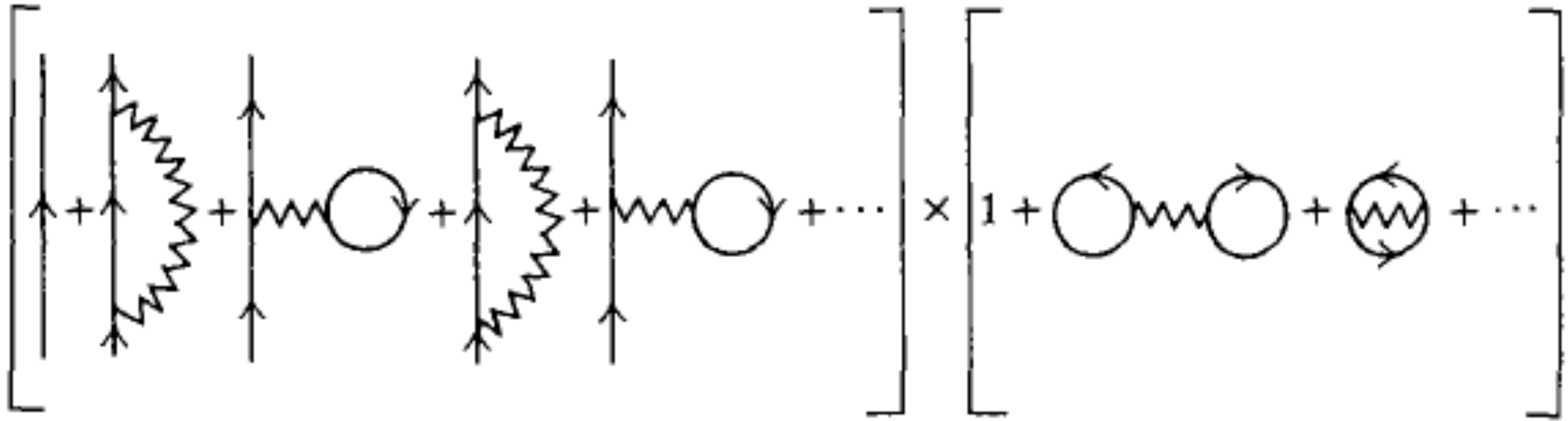
$\langle \Phi_0 | T[\tilde{U}_n(+\infty,-\infty)] | \Phi_0 \rangle = 1 + \frac{1}{2}$  $+ \frac{1}{2}$  $+$

$+$  $+$  $+ \ldots$

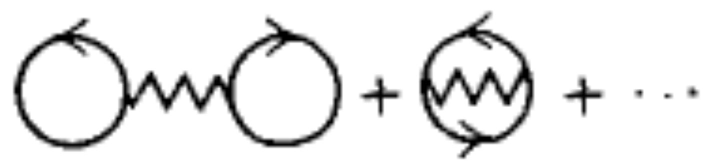
PROVA-SE QUE ESSE TERMOS EM TODAS AS ORDENS CANCELAM OS DIAGRAMAS DESCONECTADOS.

Os diagramas desconectados

$\tilde{G}_{\alpha\beta}(x,y) =$



$<\Phi_0|\hat{S}|\Phi_0> = 1 +$



Diagramas em 1a. ordem