

III - Funções de Green e Teoria de Perturbação

Como discutido no início do curso, estamos interessados em estudar sistemas com um grande número de partículas. Para tais sistemas, a função de onda total do sistema envolve um número muito grande de variáveis:

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad N \approx 10^{23}$$

Por envolver um número muito grande de partículas, a função de onda não é um objeto muito conveniente ~~para~~ ^{com que} se trabalhar. Ela contém muito mais informação do que pode ser medido na prática em um laboratório e, além disso, é impossível calculá-la em tanto detalhe com um número de precisão razoável. Portanto, em sistemas de muitos corpos, prefere-se trabalhar com quantidades que envolvem um número menor de variáveis mas que contém informação suficiente para se responder às perguntas mais comuns de experimentos. Tais quantidades são as "funções de Green". Há uma grande variedade de funções de Green e iremos apresentá-las aos poucos. Além disso, vamos mostrar como se podem calcular as quantidades físicas mais importantes por intermédio dessas funções.

Antes de prosseguirmos, vamos estabelecer ~~alguma~~ uma modificação conveniente. Ao invés de trabalharmos diretamente com o Hamiltoniano ~~para~~ para um sistema com um número fixo de partículas N , vamos trabalhar no ensemble grand-canônico, onde o número de partículas não é fixo mas o potencial químico μ é fixado de modo a obtermos um número médio de partículas tal que

$$\langle \hat{N} \rangle_\mu = N$$

Para isso, ao invés de usarmos $\hat{H}$ usaremos:

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \hat{H} - \mu \hat{N} \\ &= \hat{H} - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \end{aligned}$$

onde os índices $(i\sigma)$ devem ser escolhidos de acordo com o modelo apropriado a ser usado. Como exemplo, no modelo de Hubbard:

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \sum_{\langle ij \rangle_\sigma} (-t) (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \\ &= \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \end{aligned}$$

Daqui para frente, omitiremos a linha em $\hat{H}$ e ~~se~~ não explicitarmos sempre μ na dispersão (usaremos ϵ_k para significar $\epsilon_k - \mu$). Isso equivale a medir energias a partir do potencial químico.

Da ~~me~~ mecânica quântica usual, sabemos que podemos trabalhar na representação de Heisenberg ou na de Schrödinger. Na primeira, toda a dependência temporal é embutida nos operadores e a função de onda é independente do tempo e o inverso ocorre na segunda. Mais tarde, introduziremos uma outra representação conveniente que, num certo sentido, é intermediária às de Schrödinger e de Heisenberg.

Na representação de Heisenberg, os operadores são ~~são~~ escritos como:

$$\hat{A}_H(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{A}_S e^{-i\hat{H}t}$$

onde $\hat{A}_S$ é o mesmo operador na representação de Schrödinger. Em particular, os operadores de campo ficam:

$$\psi_H(\vec{r}, t) = e^{i\hat{H}t} \psi_S(\vec{r}) e^{-i\hat{H}t}$$

$$\psi_H^\dagger(\vec{r}, t) = e^{i\hat{H}t} \psi_S^\dagger(\vec{r}) e^{-i\hat{H}t}$$

(Estamos assumindo que H não contém dependência explícita ~~são~~ com o tempo).

Note que os operadores $\psi_H(\vec{r}, t)$ e $\psi_H^\dagger(\vec{r}, t)$ só obedecem às regras de comutação usual para férmions e bósons em INSTANTES IGUAIS:

$$\{\psi_H(\vec{r}, t), \psi_H(\vec{r}', t)\} = \{\psi_H^\dagger(\vec{r}, t), \psi_H^\dagger(\vec{r}', t)\} = 0$$

$$\{\psi_H(\vec{r}, t), \psi_H^\dagger(\vec{r}', t)\} = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

como segue imediatamente se aplicarmos e^{iHt} pela esquerda e e^{-iHt} pela direita nas regras de (anti-) comutação usuais na representação de Schrödinger. Para diferentes instantes, t e t' , as (anti-) comutadores são complicados e não podem ser escritos de maneira geral.

Definimos agora o operador de ordenamento temporal T da seguinte maneira:

$$T[A(t), B(t')] = \begin{cases} A(t)B(t') & t > t' \\ (-)^P B(t')A(t) & t' > t \end{cases}$$

onde P é o número de operadores FERMIÔNICOS que têm de ser transpostos a partir do ordenamento original. Essencialmente, T ordena, a menos de um sinal, os operadores em ordem cronológica com os tempos mais recentes à esquerda e os mais remotos à direita.

Por exemplo, para os operadores de campo ~~fermiônicos~~

$$T[\psi_H(\vec{r}, t), \psi_H^\dagger(\vec{r}', t')] = \begin{cases} \psi_H(\vec{r}, t) \psi_H^\dagger(\vec{r}', t') & t > t' \\ \psi_H^\dagger(\vec{r}', t') \psi_H(\vec{r}, t) & t' > t \end{cases}$$

Definimos agora as funções de Green de um corpo como: (a temperatura zero $T=0$)

$$i G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \frac{\langle \Phi_0 | T [\psi_H(\vec{r}, t) \psi_H^\dagger(\vec{r}', t')] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle}$$

onde $|\Phi_0\rangle$ é o estado fundamental do sistema. Se as partículas tem spin, a função de Green é uma matriz no espaço de spin:

$$i G_{\alpha\beta}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \frac{\langle \Phi_0 | T [\psi_{\alpha H}(\vec{r}, t) \psi_{\beta H}^\dagger(\vec{r}', t')] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle}$$

Na ausência de dependência explícita com o tempo em $\hat{H}$, o tempo é homogêneo e

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = G(\vec{r}, \vec{r}'; t - t')$$

noí depende da diferença $t - t'$. Na ausência de campos magnéticos externos ou de ordenamento magnético

$G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} G$, pois não se podem distinguir as componentes do spin da direção de quantização.

Se o sistema é espacialmente homogêneo (como líquidos e gases) então $G(\vec{r}, \vec{r}') = G(\vec{r} - \vec{r}')$.

A matriz densidade de um corpo é: (MD1)

$$\rho_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \langle \psi_{\beta H}^\dagger(t, \vec{r}_2) \psi_{\alpha H}(t, \vec{r}_1) \rangle / \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle$$

É fácil ver que:

$$\rho_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mathcal{T} i G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, t; \vec{r}_2, t+0)$$

onde a notação $t+0$ ou t^+ significa que o limite $\eta \rightarrow t+\eta$ é tomado. Esse limite é essencial para que a ordem correta dos operadores seja obtida.

A partir da MD1, qualquer operador de um corpo pode ter seu valor esperado calculado. Com efeito:

$$\begin{aligned} \hat{U} &= \sum_{\alpha\beta} \int d^3r \psi_{\alpha S}^\dagger(\vec{r}) U_{\alpha\beta}(\vec{r}) \psi_{\beta S}(\vec{r}) \\ &= \sum_{\alpha\beta} \int d^3r \psi_{\alpha H}^\dagger(\vec{r}, t) U_{\alpha\beta}(\vec{r}) \psi_{\beta H}(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

onde a primeira linha está na representação de Schrödinger e a segunda na de Heisenberg. Note que se $\hat{U}$ envolve $\vec{p}$, então $U_{\alpha\beta}(\vec{r})$ envolve derivadas em relação a $\vec{r}$, como no caso da energia cinética:

$$\hat{T} = \sum_{\alpha} \int d^3r \psi_{\alpha H}^\dagger(\vec{r}, t) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \psi_{\alpha H}(\vec{r}, t)$$

(ver notas de segunda quantização)

De maneira geral, a $T=0$:

$$\langle \hat{U} \rangle = \frac{\langle \Psi_0 | \hat{U} | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = \sum_{\alpha\beta} \int d^3r \frac{\langle \Psi_0 | \psi_{\alpha H}^\dagger(\vec{r}, t) U_{\alpha\beta}(\vec{r}) \psi_{\beta H}(\vec{r}, t) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}$$

$$= \sum_{\alpha\beta} \int d^3r \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} U_{\alpha\beta}(\vec{r}) \frac{\langle \Psi_0 | \psi_{\alpha H}^\dagger(\vec{r}', t) \psi_{\beta H}(\vec{r}, t) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{II}}$
 $S_{\beta\alpha}(\vec{r}, \vec{r}') = \mathcal{I}i G_{\beta\alpha}(\vec{r}, t; \vec{r}', t^+)$

$$= \mathcal{I}i \sum_{\alpha\beta} \int d^3r \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} U_{\alpha\beta}(\vec{r}) G_{\beta\alpha}(\vec{r}, t; \vec{r}', t^+)$$

Note que o limite $\vec{r}' \rightarrow \vec{r}$ tem que ser tomado depois que $U_{\alpha\beta}(\vec{r})$ pois ele pode conter derivadas e elas só devem atuar nos operadores de destruição.

Em particular:

$$\langle \hat{T} \rangle = \mathcal{I}i \sum_{\alpha} \int d^3r \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \left[\left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\alpha\alpha}(\vec{r}, t; \vec{r}', t^+) \right]$$

$$\langle \hat{N} \rangle = \mathcal{I}i \sum_{\alpha} \int d^3r G_{\alpha\alpha}(\vec{r}, t; \vec{r}, t^+) = \mathcal{I}i \int d^3r \text{tr} G(\vec{r}, t; \vec{r}, t^+)$$

$$\langle \vec{S} \rangle = \mathcal{I}i \sum_{\alpha\beta} \int d^3r \left(\frac{\vec{\sigma}_{\alpha\beta}}{2} \right) G_{\beta\alpha}(\vec{r}, t; \vec{r}, t^+) =$$

$$= \mathcal{I}i \int d^3r \text{tr} \left[\frac{\vec{\sigma}}{2} G(\vec{r}, t; \vec{r}, t^+) \right]$$

e assim por diante.

Para um sistema homogêneo com interação entre pares de partículas, o valor esperado da interação entre partículas também pode ser escrito em termos da função de Green de um corpo, embora $\hat{V}$ envolva 4 operadores de campo ao invés de 2. Seja $\hat{H}$ nesse caso:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \int d\vec{r} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \psi_{\alpha}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \int d\vec{r} d\vec{r}' \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}') V(\vec{r}-\vec{r}') \psi_{\beta}(\vec{r}') \psi_{\alpha}(\vec{r})$$

onde assumimos que a interação independe do spin. Nesse caso,

$$i\partial_t \psi_{\alpha s}(\vec{r}, t) = [\psi_{\alpha s}(\vec{r}, t), \hat{H}] = e^{iHt} [\psi_{\alpha s}(\vec{r}), H] e^{-iHt}$$

Mas:

$$\begin{aligned} [\psi_{\alpha s}(\vec{r}), \hat{T}] &= \sum_{\beta} \int d\vec{r}' [\psi_{\alpha s}(\vec{r}), \psi_{\beta s}^{\dagger}(\vec{r}') \left(-\frac{\nabla'^2}{2m} \right) \psi_{\beta s}(\vec{r}')] \\ &= \sum_{\beta} \int d\vec{r}' \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{r}-\vec{r}') \left(-\frac{\nabla'^2}{2m} \right) \psi_{\beta s}(\vec{r}') \\ &= \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \psi_{\alpha s}(\vec{r}) \end{aligned}$$

$$[\psi_{\alpha s}(\vec{r}), \hat{V}] = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} \int d\vec{x} d\vec{x}' V(\vec{x}-\vec{x}') [\psi_{\alpha s}(\vec{r}), \psi_{\lambda s}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\mu s}^{\dagger}(\vec{x}') \psi_{\mu s}(\vec{x}') \psi_{\lambda s}(\vec{x})]$$

$$[\psi_{\alpha s}(\vec{r}), \psi_{\lambda s}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\mu s}^{\dagger}(\vec{x}') \psi_{\mu s}(\vec{x}') \psi_{\lambda s}(\vec{x})] = [\psi_{\alpha s}(\vec{r}), \psi_{\lambda s}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\mu s}^{\dagger}(\vec{x}')] \psi_{\mu s}(\vec{x}') \psi_{\lambda s}(\vec{x})$$

$$= \delta_{\alpha\lambda} \delta(\vec{r}-\vec{x}) \psi_{\mu s}^{\dagger}(\vec{x}') \psi_{\mu s}(\vec{x}') \psi_{\lambda s}(\vec{x}) + \delta_{\alpha\mu} \delta(\vec{r}-\vec{x}') \psi_{\lambda s}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\lambda s}(\vec{x}) \psi_{\mu s}(\vec{x}') \psi_{\lambda s}(\vec{x})$$

$$[A, BC] = [A, B]_J C + JB[A, C]_J$$

onde

$$[A, B]_J = AB - JBA$$

De fato:

$$\begin{aligned} & [A, B]_J C + JB[A, C]_J \\ &= ABC - \cancel{JBAC} + \cancel{JBAC} - J^2 BCA \\ &= ABC - BCA \end{aligned}$$

$$[\psi_{\alpha s}(\vec{r}), \hat{V}] = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \int d^3x V(\vec{r}-\vec{x}) \left[\psi_{\lambda s}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\lambda s}(\vec{x}) \psi_{\alpha s}(\vec{r}) + \psi_{\lambda s}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\alpha s}(\vec{r}) \psi_{\lambda s}(\vec{x}) \right]$$

$$= \sum_{\lambda} \int d^3x V(\vec{r}-\vec{x}) \psi_{\lambda s}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\lambda s}(\vec{x}) \psi_{\alpha s}(\vec{r})$$

$$\Rightarrow i \partial_t \psi_{\alpha H}(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \psi_{\alpha H}(\vec{r}, t) + \sum_{\beta} \int d^3x V(\vec{r}-\vec{x}) \psi_{\beta H}^{\dagger}(\vec{x}, t) \psi_{\beta H}(\vec{x}, t) \psi_{\alpha H}(\vec{r}, t)$$

Multiplicando agora por $\psi_{\alpha H}^{\dagger}(\vec{r}', t')$ pela esquerda calculando o valor esperado em $|\Phi_0\rangle$ dos dois lados e tomando $\vec{r}' \rightarrow \vec{r}$ e $t' \rightarrow t^+$ temos: (somando sobre α e $\vec{r}$)

$$\int d^3r \lim_{\substack{\vec{r} \rightarrow \vec{r}' \\ t' \rightarrow t^+}} \sum_{\alpha} \left(i \partial_t + \frac{\nabla^2}{2m} \right) \frac{\langle \Phi_0 | \psi_{\alpha H}^{\dagger}(\vec{r}', t') \psi_{\alpha H}(\vec{r}, t) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} =$$

$$= 2 \langle \hat{V} \rangle$$

$$\Rightarrow \lim_{\substack{\vec{r} \rightarrow \vec{r}' \\ t' \rightarrow t^+}} \int d^3r \sum_{\alpha} \left(i \partial_t + \frac{\nabla^2}{2m} \right) i \int G_{\alpha\alpha}(\vec{r}t, \vec{r}'t') = 2 \langle \hat{V} \rangle$$

Segue que:

$$\langle E \rangle = \langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} + \hat{V} \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \int d^3r \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \left[i \partial_t - \frac{\nabla^2}{2m} \right] G_{\alpha\alpha}(\vec{r}t, \vec{r}'t^+)$$

Muito frequentemente, o sistema é homogêneo e não há dependência explícita com o tempo. Nesse caso $G_{\alpha\beta}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = G_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t')$ e é conveniente trabalhar-se no espaço de momentos e frequências:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') &= \sum_{\vec{k}} \int \frac{d\omega}{2\pi V} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} e^{-i\omega(t-t')} G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) \\ &= \int \frac{d^3k d\omega}{(2\pi)^4} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} e^{-i\omega(t-t')} G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) \end{aligned}$$

É fácil ver que, nesse caso:

$$\langle \hat{T} \rangle = \frac{1}{2} iV \sum_{\alpha} \int \frac{d^3k d\omega}{(2\pi)^4} e^{i\omega\eta} G_{\alpha\alpha}(\vec{k}, \omega) \left(\frac{k^2}{2m} \right) \quad (\eta \rightarrow 0^+)$$

$$\langle \hat{N} \rangle = \frac{1}{2} iV \sum_{\alpha} \int \frac{d^3k d\omega}{(2\pi)^4} e^{i\omega\eta} G_{\alpha\alpha}(\vec{k}, \omega) \quad (\eta \rightarrow 0^+)$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} iV \sum_{\alpha} \int \frac{d^3k d\omega}{(2\pi)^4} \left[\frac{k^2}{2m} + \omega \right] e^{i\omega\eta} G_{\alpha\alpha}(\vec{k}, \omega) \quad (\eta \rightarrow 0^+)$$

etc., onde $\eta \rightarrow 0^+$ é um limite que corresponde ao limite $t' \rightarrow t^+$ e que muitas vezes é deixado implícito.

- Espectro de excitações e representação de Lehmann (para férmions somente, por enquanto)

Vamos analisar agora algumas propriedades gerais das funções de Green. De modo geral: $\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1$

$$i G_{\alpha\beta}(\bar{r}, t; \bar{r}', t') = \theta(t-t') \langle \Psi_0 | \psi_{\alpha H}(\bar{r}, t) \psi_{\beta H}^\dagger(\bar{r}', t') | \Psi_0 \rangle$$

$$- \theta(t'-t) \langle \Psi_0 | \psi_{\beta H}^\dagger(\bar{r}', t') \psi_{\alpha H}(\bar{r}, t) | \Psi_0 \rangle$$

Inserimos agora a relação de fechamento:

$$\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| = 1$$

entre os operadores de campo: $(x \equiv (\bar{r}, t); x' = (\bar{r}', t'))$

$$i G_{\alpha\beta}(x, x') = \sum_n \left[\theta(t-t') \langle \Psi_0 | \psi_{\alpha H}(x) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi_{\beta H}^\dagger(x') | \Psi_0 \rangle \right. \\ \left. - \theta(t'-t) \langle \Psi_0 | \psi_{\beta H}^\dagger(x') | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi_{\alpha H}(x) | \Psi_0 \rangle \right]$$

A dependência temporal pode ser explicitada

$$= \sum_n \left[\theta(t-t') e^{-i(E_n - E_0)(t-t')} \langle \Psi_0 | \psi_{\alpha S}(\bar{r}) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi_{\beta S}^\dagger(\bar{r}') | \Psi_0 \rangle \right. \\ \left. - \theta(t'-t) e^{i(E_n - E_0)(t-t')} \langle \Psi_0 | \psi_{\beta S}^\dagger(\bar{r}') | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi_{\alpha S}(\bar{r}) | \Psi_0 \rangle \right]$$

Das propriedades dos operadores de criação e aniquilação é claro que os estados $|\Psi_n\rangle$ no 1º termo têm $(N+1)$ partículas e os estados do 2º $(N-1)$ partículas, se $|\Psi_0\rangle$ tem N partículas.

Para sistemas homogêneos, a dependência espacial também pode ser explicitada. Nesse caso, o operador de momento linear total comuta com o Hamiltoniano e é um bom número quântico, podendo ser usado para rotular os ^{auto}estados do sistema.

O operador momento total pode ser escrito em termos dos operadores de campo como:

$$\hat{\vec{P}} = \int d^3r \sum_{\kappa} \psi_{\kappa s}^{\dagger}(\vec{r}) (-i\vec{\nabla}) \psi_{\kappa s}(\vec{r})$$

É fácil calcular o comutador de $\psi_{\kappa s}(\vec{r})$ com $\hat{\vec{P}}$:

$$\begin{aligned} [\psi_{\kappa s}(\vec{r}), \hat{\vec{P}}] &= \int d^3r' \sum_{\beta} [\psi_{\kappa s}(\vec{r}), \psi_{\beta s}^{\dagger}(\vec{r}') (-i\vec{\nabla}') \psi_{\beta s}(\vec{r}')] \\ &= -i\vec{\nabla} \psi_{\kappa s}(\vec{r}) \end{aligned}$$

Se escrevermos:

$$\psi_{\kappa s}(\vec{r}) = e^{-i\hat{\vec{P}} \cdot \vec{r}} \hat{A} e^{i\hat{\vec{P}} \cdot \vec{r}}$$

segue que:

$$-i\vec{\nabla} \psi_{\kappa s}(\vec{r}) = e^{-i\hat{\vec{P}} \cdot \vec{r}} [\hat{A}, \hat{\vec{P}}] e^{i\hat{\vec{P}} \cdot \vec{r}} = [\psi_{\kappa s}(\vec{r}), \hat{\vec{P}}]$$

que resolve o comutador. Além disso, fazendo $\vec{r} = 0$:

$$\hat{A} = \psi_{\kappa s}(\vec{0}) \Rightarrow \boxed{\psi_{\kappa s}(\vec{r}) = e^{-i\hat{\vec{P}} \cdot \vec{r}} \psi_{\kappa s}(\vec{0}) e^{i\hat{\vec{P}} \cdot \vec{r}}}$$

Levando esse resultado à expressão da função de Green:

$$i G_{\alpha\beta}(x, x') = \sum_n \left[\theta(t-t') e^{i(\vec{P}_n) \cdot (\vec{r}-\vec{r}')} e^{-i(E_n-E_0)(t-t')} \langle \Phi_0 | \psi_{\alpha s}(0) | \Phi_n \rangle \right. \\ \left. \langle \Phi_n | \psi_{\beta s}^\dagger(0) | \Phi_0 \rangle - \theta(t'-t) e^{-i\vec{P}_n \cdot (\vec{r}-\vec{r}')} e^{i(E_n-E_0)(t-t')} \langle \Phi_0 | \psi_{\beta s}^\dagger(0) | \Phi_n \rangle \right. \\ \left. \langle \Phi_n | \psi_{\alpha s}(0) | \Phi_0 \rangle \right]$$

onde $\vec{P}_n$ é o momento total do estado n e assumindo como é geralmente o caso, que $\vec{P}_0 = 0$. Agora que as dependências temporal e espacial foram explicitadas podemos tomar as transformadas de Fourier:

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = \int d^3(\vec{r}-\vec{r}') d(t-t') e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}-\vec{r}')} e^{i\omega(t-t')} G_{\alpha\beta}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') \\ = V \sum_n \left[\delta_{\vec{k}, \vec{P}_n} \frac{\langle \Phi_0 | \psi_{\alpha s}(0) | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \psi_{\beta s}^\dagger(0) | \Phi_0 \rangle}{\omega - (E_n - E_0) + i\eta} + \right. \\ \left. + \delta_{\vec{k}, -\vec{P}_n} \frac{\langle \Phi_0 | \psi_{\beta s}^\dagger(0) | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \psi_{\alpha s}(0) | \Phi_0 \rangle}{\omega + (E_n - E_0) - i\eta} \right]$$

onde introduzimos os fatores de convergência $\eta \rightarrow 0^+$ e usamos que:

$$\pm \int_0^{\pm\infty} e^{i(\omega \mp (E_n - E_0) \pm i\eta)t} dt = \frac{\pm i}{\omega \mp (E_n - E_0) \pm i\eta}$$

Na soma acima é conveniente escrever:

$$\delta_{\vec{k}, \pm\vec{P}_n} |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n| = \delta_{\vec{k}, \pm\vec{P}_n} |n \pm \vec{k}\rangle \langle \pm \vec{k} n|$$

Além disso:

$$E_m - E_0 = E_m(N \pm 1) - E_0(N) = E_m(N \pm 1) - E_0(N \pm 1)$$

$$+ E_0(N \pm 1) - E_0(N)$$

onde o sinal $(+)$ corresponde ao primeiro termo e o sinal $(-)$ ao segundo e explicitamos o número de partículas a que cada energia corresponde. Agora:

$$E_m(N \pm 1) - E_0(N) = \pm \mu$$

pois corresponde à ^{mudança na} energia do estado fundamental do sistema quando uma partícula é adicionada. Além disso

$$E_m(N \pm 1) - E_0(N \pm 1) = \epsilon_m(N \pm 1) \geq 0$$

é a energia de excitação do sistema com $(N \pm 1)$ partículas correspondente ao estado m . Finalmente, segue que:

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = V \sum_m \left[\frac{\langle \Phi_0 | \psi_{\alpha s}(0) | m, \vec{k} \rangle \langle m, \vec{k} | \psi_{\beta s}^\dagger(0) | \Phi_0 \rangle}{\omega - \mu - \epsilon_{m, \vec{k}}(N+1) + i\eta} + \frac{\langle \Phi_0 | \psi_{\beta s}^\dagger(0) | m, -\vec{k} \rangle \langle m, -\vec{k} | \psi_{\alpha s}(0) | \Phi_0 \rangle}{\omega - \mu + \epsilon_{m, -\vec{k}}(N-1) - i\eta} \right]$$

Na ausência de campos magnéticos externos ou de magnetização espontânea $G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} G(\vec{k}, \omega)$ e:

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

onde:

$$A_{n\vec{k}} \equiv |\langle n\vec{k} | \psi_{\alpha s}^\dagger(0) | \Psi_0 \rangle|^2 \geq 0 \quad e$$

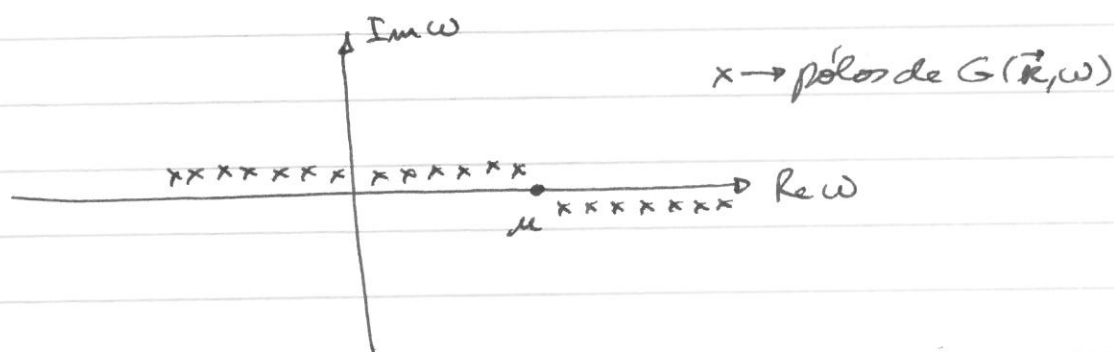
$$B_{n\vec{k}} \equiv |\langle n-\vec{k} | \psi_{\alpha s}(0) | \Psi_0 \rangle|^2 \geq 0$$

Essa é a representação de Lehmann para a função de Green. Ela é importante porque mostra de forma explícita a dependência com a frequência de $G(\vec{k}, \omega)$. É aparente que $G(\vec{k}, \omega)$ tem pólos abaixo do eixo real para $\omega > \mu$ nos pontos:

$$\omega = \mu + \epsilon_{n\vec{k}}(n+1) - i\eta$$

e acima do eixo real para $\omega < \mu$ nos pontos:

$$\omega = \mu - \epsilon_{n-\vec{k}}(n-1) + i\eta$$



Os pólos de $G(\vec{k}, \omega)$ no plano ω complexo nos dão, portanto, importantes informações sobre o espectro do sistema. Entretanto, os pólos que aparecem são aqueles que correspondem a estados excitados com "overlap" não nulo com

$$\psi_{\vec{k}}^{\dagger} |\Phi_0\rangle \quad \text{e} \quad \psi_{\vec{k}}(0) |\Phi_0\rangle$$

correspondentes à criação de um elétron na origem do estado fundamental ou à aniquilação do mesmo respectivamente.

A estrutura analítica de $G(\vec{k}, \omega)$ no plano $(\text{Re } \omega, \text{Im } \omega)$ é tal que ela não é analítica nem no plano superior nem no semi-plano inferior. Mais tarde, introduziremos funções de Green modificadas que terão diferentes propriedades analíticas.

Utilizando agora:

$$\frac{1}{x \pm i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x),$$

onde $\mathcal{P}$ significa a parte principal em uma integração em x ; obtemos:

$$\text{Im } G(\vec{k}, \omega) = -V\pi \sum_{\vec{n}} \left[A_{\vec{n}\vec{k}} \delta(\omega - \epsilon_{\vec{n}\vec{k}}(N+1)) + B_{\vec{n}\vec{k}} \delta(\omega - \epsilon_{\vec{n}\vec{k}}(N-1)) \right].$$

e:

$$\text{Re } G(\vec{k}, \omega) = V \sum_n \left[P \frac{A_{n\vec{k}}}{\omega - \mu - E_{n\vec{k}}(\omega+1)} + P \frac{B_{n\vec{k}}}{\omega - \mu + E_{n-\vec{k}}(\omega-1)} \right]$$

Como $A_{n\vec{k}} \geq 0$ e $B_{n\vec{k}} \geq 0$, segue que:

$$\text{Im } G(\vec{k}, \omega) \rightarrow \begin{cases} < 0 & \omega > \mu \\ > 0 & \omega < \mu \end{cases} = -\text{sgn}(\omega - \mu)$$

Para um sistema muito grande, os níveis de energia são pouco espaçados entre si. Podemos portanto aproximar as somas sobre os estados n com energia entre E e $E+dE$:

$$A(\vec{k}, E) dE = V \sum_n A_{n\vec{k}} \geq 0 \quad E < E_{n\vec{k}}(\omega+1) < E+dE$$

$$B(\vec{k}, E) dE = V \sum_n B_{n\vec{k}} \geq 0 \quad E < E_{n-\vec{k}}(\omega-1) < E+dE$$

ou

$$A(\vec{k}, E) dE = V \sum_n \int_E^{E+dE} dx \delta(x - E_{n\vec{k}}(\omega+1)) A_{n\vec{k}}$$

$$B(\vec{k}, E) dE = V \sum_n \int_E^{E+dE} dx \delta(x - E_{n-\vec{k}}(\omega-1)) B_{n\vec{k}}$$

Segue que:

$$G(\vec{k}, \omega) = \int_0^{\infty} d\epsilon \left[\frac{A(\vec{k}, \epsilon)}{\omega - \mu - \epsilon + i\eta} + \frac{B(\vec{k}, \epsilon)}{\omega - \mu + \epsilon - i\eta} \right]$$

$$\text{Im } G(\vec{k}, \omega) = \begin{cases} -\pi A(\vec{k}, \omega - \mu) & \omega > \mu \\ \pi B(\vec{k}, -(\omega - \mu)) & \omega < \mu \end{cases}$$

$$\text{Re } G(\vec{k}, \omega) = P \int_0^{\infty} d\epsilon \left[\frac{A(\vec{k}, \epsilon)}{\omega - \mu - \epsilon} + \frac{B(\vec{k}, \epsilon)}{\omega - \mu + \epsilon} \right]$$

Podemos manipular a expressão de $\text{Re } G(\vec{k}, \omega)$ para obtermos:

$$\begin{aligned} \text{Re } G(\vec{k}, \omega) &= P \int_{\mu}^{\infty} dx \frac{A(\vec{k}, x - \mu)}{\omega - x} + P \int_{-\infty}^{\mu} (-dx) \frac{B(\vec{k}, \mu - x)}{\omega - x} \\ &= P \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{[-A(\vec{k}, x - \mu)\theta(x - \mu) + B(\vec{k}, \mu - x)\theta(\mu - x)]}{x - \omega} \end{aligned}$$

$$\boxed{\text{Re } G(\vec{k}, \omega) = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\pi} \frac{\text{Im } G(\vec{k}, x) \text{sgn}(x - \mu)}{x - \omega}}$$

que relaciona diretamente as partes real e imaginária de $G(\vec{k}, \omega)$.

Finalmente, tomando $\omega \rightarrow \infty$ obtemos:

$$G(\vec{k}, \omega) \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} \frac{1}{\omega} \left[\int_0^\infty (A(\vec{k}, \epsilon) + B(\vec{k}, \epsilon)) d\epsilon \right] =$$

$$= \frac{1}{\omega} \left[V \sum_{\vec{n}} (A_{\vec{n}\vec{k}} + B_{\vec{n}\vec{k}}) \right]$$

Tomando o valor esperado em $|\Psi_0\rangle$ do anti-comutador:

$$\{\psi_{\alpha}(\vec{r}), \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}')\} = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

inserindo a relação de fechamento, explicitando a dependência espacial e transformando em Fourier obtemos que:

$$V \sum_{\vec{n}} (A_{\vec{n}\vec{k}} + B_{\vec{n}\vec{k}}) = 1$$

Portanto:

$$G(\vec{k}, \omega) \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} \frac{1}{\omega}$$

Função de Green não-interagente (Fermions)

Considere, por exemplo, férmions não-relativísticos livres. O hamiltoniano é:

$$H = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{k^2}{2m} \right) c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}}$$

onde omitimos os índices de spin por serem triviais ($G_{\alpha\beta}(\vec{r}t; \vec{r}'t') = \delta_{\alpha\beta} G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$). O estado fundamental consiste na esfera de Fermi com raio k_F :

$$\frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{N}{V} \quad (\text{para férmions com spin } 1/2)$$

$$\frac{k_F^3}{6\pi^2} = \frac{N}{V} \quad (\text{para "férmions sem spin"})$$

Obviamente: $\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} c_{\vec{k}}$, etc.

$$iG(\vec{x}, \vec{x}') = \theta(t-t') \langle \Phi_0 | \psi_H(\vec{r}, t) \psi_H^\dagger(\vec{r}', t') | \Phi_0 \rangle - \theta(t'-t) \langle \Phi_0 | \psi_H^\dagger(\vec{r}', t') \psi_H(\vec{r}, t) | \Phi_0 \rangle$$

Note que, como $H_i = 0$, a representação de Heisenberg é idêntica à de interação e:

$$\psi_H(\vec{r}, t) = \psi_I(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} c_{\vec{k}I}(t) = \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} e^{-i\omega_{\vec{k}}t} c_{\vec{k}}$$

onde $\omega_{\vec{k}} = \frac{k^2}{2m}$ (ver dedução mais adiante ou faça a dedução você mesmo)

Logo:

$$iG(x, x') = \frac{\theta(t-t')}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} e^{i\bar{\mathbf{k}} \cdot \bar{\mathbf{r}}} e^{-i\bar{\mathbf{p}} \cdot \bar{\mathbf{r}}'} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} e^{i\omega_{\mathbf{p}} t'} \langle \Phi_0 | c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{p}}^\dagger | \Phi_0 \rangle$$

$$- \frac{\theta(t'-t)}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} e^{i\bar{\mathbf{k}} \cdot \bar{\mathbf{r}}} e^{-i\bar{\mathbf{p}} \cdot \bar{\mathbf{r}}'} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} e^{i\omega_{\mathbf{p}} t'} \langle \Phi_0 | c_{\mathbf{p}}^\dagger c_{\mathbf{k}} | \Phi_0 \rangle$$

$$\text{Mas: } \langle \Phi_0 | c_{\mathbf{p}}^\dagger c_{\mathbf{k}} | \Phi_0 \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \theta(k_F - k)$$

$$\langle \Phi_0 | c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{p}}^\dagger | \Phi_0 \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} - \langle \Phi_0 | c_{\mathbf{p}}^\dagger c_{\mathbf{k}} | \Phi_0 \rangle$$

$$= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} [1 - \theta(k_F - k)] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \theta(k - k_F)$$

$$\Rightarrow iG(x, x') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\bar{\mathbf{k}} \cdot (\bar{\mathbf{r}} - \bar{\mathbf{r}}')} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')} [\theta(t-t') \theta(k - k_F) - \theta(t'-t) \theta(k_F - k)]$$

(Refaca as contas para fermions com spin e mostre que $G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} G$). É óbvio pela expressão acima que:

$$iG(\bar{\mathbf{k}}; t-t') = \int d^3(\bar{\mathbf{r}} - \bar{\mathbf{r}}') iG(\bar{\mathbf{r}}; t; \bar{\mathbf{r}}'; t') e^{-i\bar{\mathbf{k}} \cdot (\bar{\mathbf{r}} - \bar{\mathbf{r}}')}$$

$$= e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')} [\theta(t-t') \theta(k - k_F) - \theta(t'-t) \theta(k_F - k)]$$

Além disso:

$$iG(\bar{\mathbf{k}}; \omega) = i \int d(t-t') e^{i\omega(t-t')} G(\bar{\mathbf{k}}; t-t') =$$

$$= \theta(k - k_F) \int_0^{+\infty} e^{i(\omega - \omega_{\mathbf{k}})T} dT - \theta(k_F - k) \int_{-\infty}^0 e^{i(\omega - \omega_{\mathbf{k}})T} dT$$

Para que as integrais converjam é necessário deslocar as frequências ω do eixo real ($\eta > 0$; $\eta < 0$;

$$= \theta(k - k_F) \int_0^{\infty} e^{i(\omega - \omega_k + i\eta)T} dT - \theta(k_F - k) \int_{-\infty}^0 e^{i(\omega - \omega_k - i\eta)T} dT$$

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

$$= \frac{i}{\omega - \omega_k + i\eta \operatorname{sgn}(k - k_F)}$$

$$\Rightarrow G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \omega_k + i\eta \operatorname{sgn}(k - k_F)}$$

Note como os pólos têm a estrutura achada na representação de Lehmann.