

## Teoria de Perturbação

Nosso objetivo aqui é definir uma teoria de perturbação apropriada para o cálculo das funções de Green. Isso será feito através de uma série de passos para que se chegue às regras formais para o cálculo dos termos de correção à funções de Green não-interagentes (ou seja, para o sistema em que as interações foram "desligadas") ordem a ordem no potencial de interação. Ao final da jornada, vamos resumir todos os passos tomados até o ponto final.

### (a) Representação de interação

Como é familiar da Mecânica Quântica Básica há duas representações habituais conhecidas como a representação de Schrödinger ( $RS$ ) e a representação de Heisenberg ( $RH$ ). Vamos agora definir uma terceira representação, a representação de interação ( $RI$ ), que é, de certa forma a ser explicada mais adiante, "intermediária" entre a  $RS$  e a  $RH$ .

Na  $RS$ , na ausência de dependência explícita com o tempo no Hamiltoniano (essencialmente assumi um sistema isolado: daqui por diante iremos assumir que esse é o caso), toda a dinâmica temporal está isolada na função de onda e os operadores são independentes do tempo.

O sistema é descrito por um vetor de estado

$$|\Psi_s(t)\rangle$$

que evolui no tempo segundo a eq. de Schrödinger:

$$i\partial_t |\Psi_s(t)\rangle = \hat{H} |\Psi_s(t)\rangle$$

Uma solução formal dessa equação é facilmente obtida através do operador de evolução temporal

$$|\Psi_s(t)\rangle = U(t-t_0) |\Psi_s(t_0)\rangle$$

(a dependência ~~com~~ <sup>em</sup>  $t-t_0$  ao invés de  $t, t_0$  separadamente decorre da homogeneidade temporal assumida)

Aplicando-se  $i\partial_t$  à equação acima e utilizando-se a eq. de Schrödinger obtemos:

$$i\partial_t U(t-t_0) = \hat{H} U(t-t_0)$$

na condição inicial  $U(0) = \hat{1}$ . A solução formal é:

$$U(t-t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)}$$

(Lembre-se que  $e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}$ ). Note que:

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

A representação de Heisenberg é definida através de:

$$|\Psi_H(t)\rangle = e^{i\hat{H}t} |\Psi_S(t)\rangle$$

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

onde  $\hat{O}_S$  é um operador qualquer na representação de Schrödinger. Da definição acima, segue imediatamente que:

$$i\partial_t |\Psi_H(t)\rangle = -\hat{H} |\Psi_H(t)\rangle + e^{i\hat{H}t} (i\partial_t) |\Psi_S(t)\rangle = 0$$

$$\Rightarrow |\Psi_H(t)\rangle = |\Psi_H(0)\rangle \equiv |\Psi_H\rangle$$

O que justifica nossa afirmativa anterior de que o vetor de estado é constante no tempo na RH. Para os operadores na RH obtemos:

$$i\partial_t \hat{O}_H(t) = -\hat{H} \hat{O}_H(t) + \hat{O}_H(t) \hat{H}$$

$$= -[\hat{H}, \hat{O}_H(t)] = [\hat{O}_H(t), \hat{H}] = e^{i\hat{H}t} [\hat{O}_S, \hat{H}] e^{-i\hat{H}t}$$

Em particular, se  $\hat{O}_S$  comuta com  $\hat{H}$  ele é uma constante do movimento.

A representação de interação é definida por:

$$|\Psi_I(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t} |\Psi_S(t)\rangle$$

$$\hat{\Theta}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{O}_S e^{-i\hat{H}_0 t}$$

onde estamos supondo que  $\hat{H}$  pode ser escrito como a soma:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I$$

onde  $\hat{H}_0$  é usualmente um Hamiltoniano não-interagente (quadrático em operadores de criação e destruição) e  $\hat{H}_I$  é a parte de interação. Segue imediatamente que

$$\begin{aligned} i\partial_t |\Psi_I(t)\rangle &= -\hat{H}_0 |\Psi_I(t)\rangle + e^{i\hat{H}_0 t} (i\partial_t) |\Psi_S(t)\rangle \\ &= e^{i\hat{H}_0 t} [-\hat{H}_0 + \hat{H}] |\Psi_S(t)\rangle \\ &= e^{i\hat{H}_0 t} \hat{H}_I e^{-i\hat{H}_0 t} |\Psi_I(t)\rangle \\ &= \hat{H}_I(t) |\Psi_I(t)\rangle \end{aligned}$$

(Por simplicidade, omitiremos o sub-índice I em  $\hat{H}_I(t)$  aqui.)  
Note que a evolução temporal é determinada pela parte de interação apenas, o que dá razão ao nome representação de interação.

Por outro lado:

$$i\partial_t \hat{O}_I(t) = [\hat{O}_I(t), \hat{H}_0] = e^{i\hat{H}_0 t} [\hat{O}_S, \hat{H}_0] e^{-i\hat{H}_0 t}$$

e a evolução temporal dos operadores é dada por seu comutador com  $\hat{H}_0$ , que geralmente é bem simples. A essência dessa representação consiste em jogar parte da evolução temporal do sistema nos operadores (geralmente a parte mais simples) e deixar a parte mais complicada (determinada pela interação  $\hat{H}_I$ ) determinando a evolução temporal do vetor de estado.

Para ilustrar a dependência temporal simples dos operadores, considere um sistema tal que:

$$\hat{H}_0 = \sum_k \omega_k c_k^\dagger c_k$$

sejam  $c_k^\dagger, c_k$  operadores férmionicos ou bosônicos. Nesse caso:

$$i\partial_t c_{kI}(t) = e^{i\hat{H}_0 t} [c_k, \hat{H}_0] e^{-i\hat{H}_0 t}$$

$$= \omega_k c_{kI}(t)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} c_{kI}(t) = e^{-i\omega_k t} c_k \\ c_{kI}^\dagger(t) = e^{i\omega_k t} c_k^\dagger \end{cases}$$

que é bastante simples, pois consiste apenas de uma fase.

Em particular, as regras de comutação e anti comutação serão preservadas. Mesmo para tempos diferentes elas são simples:

$$[c_{kI}(t), c_{k'I}^{\dagger}(t')] = e^{i(\omega_k t - \omega_{k'} t')} \delta_{kk'} = e^{i\omega_k(t-t')} \delta_{kk'}$$

Como qualquer operada, seja ele de 1 corpo, 2 corpos ou mais corpos, pode ser escrito como polinômios nesse operadores de criação e aniquilação, segue que também esse tem uma forma simples na RI. Basta fazer:

$$\begin{aligned} c_k &\rightarrow c_{kI}(t) \\ c_k^{\dagger} &\rightarrow c_{kI}^{\dagger}(t) \end{aligned}$$

nesses operadores para obter a RI de qualquer operador pois:

$$\begin{aligned} e^{i\hat{H}_0 t} A B C \dots N e^{-i\hat{H}_0 t} &= e^{i\hat{H}_0 t} A e^{-i\hat{H}_0 t} e^{i\hat{H}_0 t} B e^{-i\hat{H}_0 t} e^{i\hat{H}_0 t} C e^{-i\hat{H}_0 t} \dots e^{i\hat{H}_0 t} N e^{-i\hat{H}_0 t} \\ &= A_I(t) B_I(t) \dots N_I(t). \end{aligned}$$

Se agora tentarmos achar a evolução temporal de  $|\Psi_I(t)\rangle$  através de um operador unitário teremos:

$$\begin{aligned} |\Psi_I(t)\rangle &= e^{i\hat{H}_0 t} |\Psi_S(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t} U(t-t_0) |\Psi_S(t_0)\rangle \\ &= e^{i\hat{H}_0 t} U(t-t_0) e^{-i\hat{H}_0 t_0} |\Psi_I(t_0)\rangle = \\ &= e^{i\hat{H}_0 t} e^{-i\hat{H}(t-t_0)} e^{-i\hat{H}_0 t_0} |\Psi_I(t_0)\rangle \equiv \tilde{U}(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle \end{aligned}$$

$$\tilde{U}(t, t_0) = e^{i\hat{H}_0 t} e^{-i\hat{H}(t-t_0)} e^{-i\hat{H}_0 t_0}$$

Note, primeiramente, que:

$$\tilde{U}(t, t_0) \neq U_I(t-t_0) = e^{i\hat{H}_0 t} U(t-t_0) e^{-i\hat{H}_0 t}$$

pois o "sanduíche" é feito com operadores em tempos diferentes. Além disso,  $\tilde{U}(t, t_0)$  não depende simplesmente de  $t-t_0$ . Entretanto:

$$(i) \tilde{U}(t_0, t_0) = 1 \quad (\text{"Condição inicial"})$$

$$(ii) \tilde{U}^\dagger(t, t_0) \tilde{U}(t, t_0) = \tilde{U}(t, t_0) \tilde{U}^\dagger(t, t_0) = 1 \Rightarrow \tilde{U}^{-1}(t, t_0) = \tilde{U}^\dagger(t, t_0) \quad (\text{Unit})$$

$$(iii) \tilde{U}(t_3, t_2) \tilde{U}(t_2, t_1) = \tilde{U}(t_3, t_1) \quad (\text{Propriedade de grupo})$$

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

que são facilmente verificadas a partir da expressão formal acima ou da interpretação física de  $\tilde{U}(t, t_0)$  como sendo o operador que leva  $|\Phi_I(t_0)\rangle$  até  $|\Phi_I(t)\rangle$ .

O operador  $\tilde{U}(t, t_0)$  satisfaz uma equação diferencial que é:

$$i\partial_t \tilde{U}(t, t_0) = H_I(t) \tilde{U}(t, t_0)$$

que é obtida da eq. dif. de  $|\Phi_I(t)\rangle$  e da definição de  $\tilde{U}(t, t_0)$ . (ou da forma acima explícita de  $\tilde{U}(t, t_0)$ ).

Essa equação pode ser integrada de  $t_0$  a  $t$  para dar, usando a condição inicial  $U(t_0, t_0) = 1$ :

$$\tilde{U}(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t dt' H_1(t') \tilde{U}(t', t_0)$$

Vamos tentar resolver essa equação iterativamente como uma série perturbativa em  $H_1(t)$  (essa é a origem da teoria de perturbação para a função de Green a ser desenvolvida mais adiante).

$$\begin{aligned} \tilde{U}(t, t_0) = & 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 H_1(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1(t_1) H_1(t_2) \\ & + (-i)^3 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 H_1(t_1) H_1(t_2) H_1(t_3) + \dots \end{aligned}$$

O termo geral da série tem a forma:

$$\tilde{U}_{(n)}(t, t_0) = (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H_1(t_1) H_1(t_2) \dots H_1(t_n)$$

Nesse ponto, é importante observar duas coisas. As variáveis de integração  $(t_1, \dots, t_n)$  obedecem a:

$$t_1 \geq t_2 \geq t_3 \dots \geq t_n$$

e os operadores  $H_1(t_1) \dots H_1(t_n)$ , portanto, estão ORDENADOS CRONOLOGICAMENTE. Isso é crucial, pois  $H_1(t_1) \dots H_1(t_n)$  não comutam entre si.

Vamos agora manipular o termo geral para que os tempos  $(t_1, \dots, t_n)$  apareçam de forma mais simétrica. Para tal considere primeiramente  $n=2$ . O operador de ordenamento cronológico pode ser escrito:

$$T[H_1(t_1)H_1(t_2)] = \theta(t_1 - t_2) H_1(t_1)H_1(t_2) + \theta(t_2 - t_1) H_1(t_2)H_1(t_1)$$

onde usamos o fato de que  $H_1$  envolve sempre um número par de operadores fermiônicos. Considere agora:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 T[H_1(t_1)H_1(t_2)] &= \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1(t_1)H_1(t_2) + \\ &+ \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H_1(t_2)H_1(t_1) = \end{aligned}$$

Como  $t_1, t_2$  não variáveis mudas:

$$= 2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1(t_1)H_1(t_2) = \frac{2}{(-i)^2} \tilde{U}_2(t, t_0)$$

Este resultado é facilmente generalizável para o  $n$ -ésimo termo  $\tilde{U}_n(t, t_0)$  notando-se que:

(i) há  $(n!)$  ordenamentos possíveis para as variáveis  $(t_1, \dots, t_n) \rightarrow t_{p_1} > t_{p_2} > \dots > t_{p_n}$

(ii) Para cada ordenamento, as variáveis de integração podem ser reorganizadas  $[t_{p_1} \rightarrow t_1; t_{p_2} \rightarrow t_2; \dots t_{p_n} \rightarrow t_n]$  para obtermos o termo geral da série  $\tilde{U}_n(t, t_0)$ .

Segue que:

$$\tilde{U}_n(t, t_0) = \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n T[H_1(t_1) H_1(t_2) \cdots H_1(t_n)]$$

Logo:

$$\tilde{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n T[H_1(t_1) \cdots H_1(t_n)]$$

Tal expressão sugere a expressão formal:

$$\tilde{U}(t, t_0) = T \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t H_1(t') dt' \right\}$$

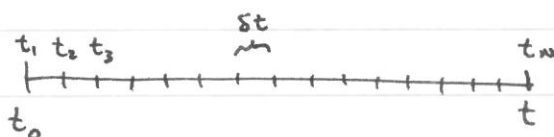
que é às vezes utilizada.

A redução iterada acima formará a base da expansão perturbativa da função de Green, como veremos a seguir.

Note que a forma exponencial acima sugere que se escreva:

$$\tilde{U}(t, t_0) \cong e^{-i H_1(t_N) \delta t} e^{-i H_1(t_{N-1}) \delta t} \cdots e^{-i H_1(t_1) \delta t} = \prod_{i=1}^N \exp[-i H_1(t_i) \delta t]$$

onde  $N \rightarrow \infty$  e  $t_1, \dots, t_N$  correspondem a uma partição do intervalo  $(t_0, t)$



Essa forma discretizada é muito útil em algumas aplicações e pode ser provada mostrando-se que ela satisfaz a equação diferencial de  $\tilde{U}(t, t_0)$ .

Note que, embora  $H_i(t_i)$  e  $H_i(t_{i+1})$  não comutam

$$e^{-i\delta t H_i(t_i)} e^{-i\delta t H_i(t_{i+1})} = e^{-i\delta t [H_i(t_i) + H_i(t_{i+1})]} + O(\delta t)^2$$

que se torna irrelevante quando  $N \rightarrow \infty$  ;  $\delta t \rightarrow 0$ .

A forma acima é válida para  $t > t_0$

## Teorema de Gell-Mann e Low

Vamos imaginar que a interação é "ligada adiabaticamente":

$$H = H_0 + e^{-\eta|t|} H_1$$

onde  $\eta$  é muito pequeno. É claro que, quando  $t \rightarrow \pm\infty$

$$H \xrightarrow{t \rightarrow \pm\infty} H_0$$

Em  $t=0$ ,  $H$  é o Hamiltoniano interagente. Portanto, nesse caso, se  $|0\rangle$  é um auto-estado de  $H_0$ , quando  $t \rightarrow -\infty$ :

$$|\psi_s(t)\rangle = e^{-iH_0 t} |0\rangle = e^{-iE_0 t} |0\rangle \quad (t \rightarrow -\infty)$$

e

$$|\psi_i(t)\rangle = e^{iH_0 t} |\psi_s(t)\rangle = |0\rangle \quad (t \rightarrow -\infty)$$

onde  $E_0$  é a energia do auto-estado  $|0\rangle$ . Em  $t=0$  o estado  $|\psi_i(t)\rangle$  evolui para um auto-estado do Hamiltoniano completo:

$$|\psi_i(0)\rangle = \tilde{U}_\eta(0, -\infty) |0\rangle$$

onde  $\tilde{U}_\eta(t_1, t_2)$  é o operador que faz a evolução temporal dos estados na representação de interação. Para que haja evolução de um auto-estado a outro é preciso que  $\eta \rightarrow 0^+$ , ou seja, que a interação seja ligada muito vagarosamente para que ela não induza transições para misturas quânticas.

Entretanto, o limite  $\eta \rightarrow 0$  é singular pois ele introduz uma fase divergente no estado. Isso pode ser remediado, dividindo-se pela fase, da seguinte maneira:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{U_\eta(0, -\infty) |0\rangle}{\langle 0 | U_\eta(0, -\infty) | 0 \rangle} = \frac{|\psi_0\rangle}{\langle 0 | \psi_0 \rangle} \quad \text{t.g.} \quad H \left( \frac{|\psi_0\rangle}{\langle 0 | \psi_0 \rangle} \right) = E \left( \frac{|\psi_0\rangle}{\langle 0 | \psi_0 \rangle} \right)$$

onde  $|\psi_0\rangle$  é o autoestado a que  $|0\rangle$  é levado. A igualdade acima é o resultado de um teorema devido a Gell-Mann e Low, que é provado perturbativamente. Igualmente:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{U_\eta(0, +\infty) |0\rangle}{\langle 0 | U_\eta(0, +\infty) | 0 \rangle} = \frac{|\psi'_0\rangle}{\langle 0 | \psi'_0 \rangle} \quad \text{t.g.} \quad H \left( \frac{|\psi'_0\rangle}{\langle 0 | \psi'_0 \rangle} \right) = E \left( \frac{|\psi'_0\rangle}{\langle 0 | \psi'_0 \rangle} \right)$$

Se  $|\psi'_0\rangle$  é não degenerado:

$$\frac{|\psi_0\rangle}{\langle 0 | \psi_0 \rangle} = \frac{|\psi'_0\rangle}{\langle 0 | \psi'_0 \rangle}$$

O teorema de Gell-Mann e Low permite que escrevamos, de maneira análoga:

$$iG_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = \frac{\langle \Phi_0 | T [U_\eta(+\infty, -\infty) \psi_\alpha(x_1) \psi_\beta^\dagger(x_2)] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | U_\eta(+\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle}$$

# AULA PASSADA

R.I.

$$\begin{cases} |\Psi_I(t)\rangle = e^{iH_0 t} |\Psi_S(t)\rangle & \text{onde } H = H_0 + H_1 \\ \hat{O}_I(t) = e^{iH_0 t} \hat{O}_S e^{-iH_0 t} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} i\partial_t |\Psi_I(t)\rangle = \hat{H}_{SI}(t) |\Psi_I(t)\rangle \\ i\partial_t \hat{O}_I(t) = [\hat{O}_I(t), \hat{H}_0] \end{cases}$$

$$\text{Se } H_0 = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k \Rightarrow \begin{aligned} c_{kI}(t) &= e^{-i\epsilon_k t} c_{kS} \\ c_{kI}^\dagger(t) &= e^{+i\epsilon_k t} c_{kS}^\dagger \end{aligned}$$

Op. so. temporal

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

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

Prop.  $\left\{ \begin{aligned} (i) \quad & \tilde{U}(t_0, t_0) = 1 \quad (\text{Cond. inicial}) \\ (ii) \quad & \tilde{U}^\dagger(t, t_0) \tilde{U}(t, t_0) = 1 \quad (\text{Unitário}) \\ (iii) \quad & \tilde{U}(t_3, t_2) \tilde{U}(t_2, t_1) = \tilde{U}(t_3, t_1) \quad (\text{Prop. de grupo}) \\ (iv) \quad & \tilde{U}^{-1}(t_1, t_2) = \tilde{U}(t_2, t_1) \end{aligned} \right.$

Eq. Def.

$$i\partial_t \tilde{U}(t, t_0) = H_1(t) \tilde{U}(t, t_0)$$

$$\Rightarrow \tilde{U}(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t dt' H_1(t') \tilde{U}(t', t_0) \quad \text{Eq. Integral}$$

Sol. it.

$$\Rightarrow \tilde{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H_1(t_1) H_1(t_2) \cdots H_1(t_n)$$

$$t \geq t_1 \geq t_2 \geq \cdots \geq t_n$$

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

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

$$i\partial_t \tilde{U}(t, t_0) = H_I(t) \tilde{U}(t, t_0) \quad H_I(t) = e^{iH_0 t} H_I e^{-iH_0 t}$$

$$\tilde{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots dt_n T[H_I(t_1) \dots H_I(t_n)]$$

$$H = H_0 + e^{-\eta(t)} H_I \quad \eta \rightarrow 0^+ \quad (\text{Ligand adiabatic})$$

$$t \rightarrow -\infty \quad H = H_0 \quad |\Psi_I(t)\rangle \rightarrow |0\rangle \quad H_0 |0\rangle = E_0^{(0)} |0\rangle$$

$$\text{Gell-Mann-Low: } \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\tilde{U}_\eta(0, -\infty) |0\rangle}{\langle 0 | \tilde{U}_\eta(0, -\infty) | 0 \rangle} = \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle 0 | \Psi_0 \rangle}$$

$$\text{t.g. } H \left( \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle 0 | \Psi_0 \rangle} \right) = E \left( \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle 0 | \Psi_0 \rangle} \right)$$

$$iG_{12} = \frac{\langle \Phi_0 | [\Psi_{1H} \Psi_{2H}^\dagger] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} = \frac{\langle 0 | T [\tilde{U}_\eta(+\infty, -\infty) \Psi_{1H} \Psi_{2H}^\dagger] | 0 \rangle}{\langle 0 | \tilde{U}_\eta(+\infty, -\infty) | 0 \rangle}$$

$$\tilde{U}_\eta(+\infty, -\infty) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots dt_n e^{-\eta(|t_1| + \dots + |t_n|)} T[H_I(t_1) \dots H_I(t_n)]$$

$$H_I(t) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda \mu \sigma} V_{\lambda \mu \sigma} a_\lambda^\dagger(t) a_\mu^\dagger(t) a_\sigma(t) a_\sigma(t)$$

(b) Relação entre  $G(x, x')$  e  $\tilde{U}(t, t_0)$ 

Vamos agora derivar a relação entre a função de Green e o operador evolução  $\tilde{U}(t, t_0)$  num determinado limite. Vamos considerar que  $t_1 > t_2$  em  $G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_2, t_2)$ , pois a derivação para o outro caso é completamente análoga. Vamos também por simplicidade escrever:  $\psi_{\alpha H}(\vec{r}_1, t_1) \rightarrow \psi_{1H}(t_1)$  etc. Logo:

$$i G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_2, t_2) = \langle \Phi_0 | \psi_{1H}(t_1) \psi_{2H}^\dagger(t_2) | \Phi_0 \rangle \quad (t_1 > t_2)$$

(supondo  $\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle = 1$ ). Considere agora a seguinte expressão:

$$\langle \Phi_0 | T \{ \tilde{U}(T_2, T_2) \psi_{1I}(t_1) \psi_{2I}^\dagger(t_2) \} | \Phi_0 \rangle = (*)$$

onde:

- (i) os operadores  $\psi, \psi^\dagger$  estão agora na representação de interações
- (ii)  $|\Phi_0\rangle$  é o estado fundamental de  $\hat{H}_0$  (sistema não-interagente)
- (iii) supomos:  $T_2 > t_1 > t_2 > T_2$

Ora, da propriedade de grupo dos  $\tilde{U}$ 's e da definição do operador de ordenamento temporal:

$$T[\tilde{U}(T_2, T_2) \psi_{1I}(t_1) \psi_{2I}^\dagger(t_2)] = \tilde{U}(T_2, t_1) \psi_{1I}(t_1) \tilde{U}(t_1, t_2) \psi_{2I}^\dagger(t_2) \tilde{U}(t_2, T_2)$$

(ver prova formal em F+W, p. 84)

Usando agora

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

temos:

$$\begin{aligned} (*) &= \langle \Phi_0 | e^{iH_0 T_1} e^{-iH(T_1-t_1)} \psi_{1s} e^{-iH(t_1-t_2)} \psi_{2s}^\dagger e^{-iH(t_2-T_2)} e^{-iH_0 T_2} | \Phi_0 \rangle \\ &= e^{i(E_0^{(0)})(T_1-T_2)} \langle \Phi_0 | e^{-iHT_1} \psi_{1H}(t_1) \psi_{2H}^\dagger(t_2) e^{iHT_2} | \Phi_0 \rangle \end{aligned}$$

onde  $E_0^{(0)}$  é a energia de  $|\Phi_0\rangle$  (estado fundamental de  $\hat{H}_0$ )

Obviamente, uma derivação análoga à de cima nos dá (basta omitirmos os operadores  $\psi_1$  e  $\psi_2^\dagger$ )

$$\langle \Phi_0 | \tilde{U}(T_1, T_2) | \Phi_0 \rangle = e^{iE_0(T_1-T_2)} \langle \Phi_0 | e^{-iH(T_1-T_2)} | \Phi_0 \rangle$$

Portanto, a seguinte razão é:

$$\frac{\langle T[\tilde{U}(T_1, T_2) \psi_{1s}(t_1) \psi_{2s}^\dagger(t_2)] \rangle_0}{\langle \tilde{U}(T_1, T_2) \rangle_0} = \frac{\langle e^{-iHT_1} \psi_{1H}(t_1) \psi_{2H}^\dagger(t_2) e^{iHT_2} \rangle_0}{\langle e^{-iH(T_1-T_2)} \rangle_0} = \langle \dots \rangle_0$$

onde  $\langle \dots \rangle_0$  denota  $\langle \Phi_0 | \dots | \Phi_0 \rangle$ . Podemos agora utilizar a relação de fechamento com <sup>auto-</sup>estados de  $H$ :

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

$$(\Delta) = \frac{\sum_{n,m} \langle \Phi_0 | \Phi_n \rangle \langle \Phi_m | \Phi_0 \rangle e^{-i(E_n)T_1} e^{iE_m T_2} \langle \Phi_m | \psi_{1H}(t_1) \psi_{2H}^\dagger(t_2) | \Phi_n \rangle}{\sum_n \langle \Phi_0 | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \Phi_0 \rangle e^{-iE_n(T_1-T_2)}}$$

Tomamos agora o limite da razão acima quando :

$$\left. \begin{array}{l} T_1 \rightarrow +\infty (1-i\eta) \\ T_2 \rightarrow -\infty (1-i\eta) \end{array} \right\} \eta \rightarrow 0^+$$

Nome caso:  $e^{-iE_n T_1} \rightarrow e^{-iE_n T} e^{-\eta E_n T}$  onde  $T \rightarrow \infty$  etc.

Ora, os fatores  $\eta$  fazem com que os <sup>termos</sup> das somas decaiam exponencialmente à medida que  $T \rightarrow \infty$ . Para  $T$  muito grande as somas são dominadas pelos termos com menor  $E_n$ , ou seja, pelo estado fundamental  $n=0$  de  $\hat{H}$  ( $|\Phi_0\rangle$ ). Segue que:

$$\langle \Delta \rangle = \frac{|\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle|^2 e^{-iE_0(T_1-T_2)} \langle \Phi_0 | \psi_{1H}(t_1) \psi_{2H}^\dagger(t_2) | \Phi_0 \rangle}{|\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle|^2 e^{-iE_0(T_1-T_2)}}$$

$$= \langle \Phi_0 | \psi_{1H}(t_1) \psi_{2H}^\dagger(t_2) | \Phi_0 \rangle = i G_{\alpha\beta}(x_1, x_2)$$

Portanto a razão acima no limite  $T_1 \rightarrow +\infty(1-i\eta)$  e  $T_2 \rightarrow (1-i\eta)(-\infty)$  pode ser usada como base de uma expansão perturbativa para  $G_{\alpha\beta}(x_1, x_2)$ . Note porém que é imprescindível que  $\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle \neq 0$  na derivação acima para que a fórmula final tenha validade. Ou seja, é preciso que o estado fundamental de  $\hat{H}_0$  não seja ortogonal ao estado fundamental de  $\hat{H}$ . Embora essa condição seja quase sempre satisfeita, há casos em que ela é inválida:

(i) Quando  $|\Phi_0\rangle$  não é perturbativamente acessível a  $|\Phi_0\rangle$

(Transição de fase entre  $|\Phi_0\rangle$  e  $|\Phi_0\rangle$ )

(ii) Quando  $|\Phi_0\rangle$  não tem a mesma simetria que  $|\Phi_0\rangle$

(Problema Kondo, gás de elétrons em  $\vec{B} \neq 0$  em que a interação com o campo é a perturbação).

$$S_e \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle \neq 0 :$$

$$i G_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty(1-in)}^{+\infty(1-in)} dt'_1 \dots dt'_n \langle \Phi_0 | T[H_1(t'_1) H_1(t'_2) \dots H_1(t'_n) \psi_{1I}(t_1) \psi_{2I}^\dagger(t_2)] | \Phi_0 \rangle}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty(1-in)}^{+\infty(1-in)} dt'_1 \dots dt'_n \langle \Phi_0 | T[H_1(t'_1) \dots H_1(t'_n)] | \Phi_0 \rangle}$$

As séries acima, no denominador e no numerador, definem uma expansão perturbativa para a função de Green de um corpo. Nosso objetivo agora é calcular os elementos de matriz:

$$\langle \Phi_0 | T[H_1(t'_1) \dots H_1(t'_n) \psi_{1I}(\bar{r}_1, t_1) \psi_{2I}^\dagger(\bar{r}_2, t_2)] | \Phi_0 \rangle$$

ou os correspondentes em os operadores  $\psi, \psi^\dagger$  que aparecem no denominador. Como  $H_1(t_1)$ :

$$H_1(t_1) = \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^\dagger(t_1) a_j^\dagger(t_1) a_k(t_1) a_l(t_1)$$

tudo que temos que fazer é ser capazes de calcular algo como:

$$\langle \Phi_0 | T[a_{k_1}^\dagger(t_1) a_{k_2}^\dagger(t_2) \dots a_{k_{n-1}}(t_{n-1}) a_{k_n}(t_n)] | \Phi_0 \rangle$$

Como os operadores estão na representação de interação a dependência temporal é trivial:

$$a_{kI}(t) = e^{-i\omega_k t} a_{kS}, \text{ etc.}$$

e como  $|\Phi_0\rangle$  é o estado fundamental não-interagente, nossa tarefa se resume a transportar operadores de esquerda para a direita, usando as regras de (anti-)comutação.

Essa tarefa é feita mais econômica e compactamente por intermédio do chamado "Teorema de Wick

### (c) Teorema de Wick (TW)

Para provarmos o TW usaremos a propriedade distributiva de  $T$ :

$$T[(A+B)C] = T[AC] + T[BC]$$

Se expandirmos  $\psi_\alpha(\vec{r})$  em uma base que diagonaliza  $\hat{H}_0$  e provarmos o teorema nessa base, isso será portanto suficiente para a prova geral do TW. Por exemplo, para férmions livres:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}} \int d^3x \psi_{\vec{k}}^\dagger(\vec{x}) \left( -\frac{\nabla^2}{2m} \right) \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \frac{k^2}{2m} c_{\vec{k}\alpha}^\dagger c_{\vec{k}\alpha}$$

e expandiremos:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}} c_{\vec{k}\alpha}^\dagger.$$

Nesse caso ( $\omega_{\vec{k}} = k^2/2m$ ):

$$c_{\vec{k}\alpha I}(t) = e^{-i\omega_{\vec{k}} t} c_{\vec{k}\alpha S}, \text{ etc.}$$

Vamos agora formular o TW para depois provar-lo.

Teorema de Wick ("toma restita"): O valor esperado em  $|\Phi_0\rangle$  de produtos ordenados temporalmente de operadores de criação e aniquilação na RI:

$$\langle \Phi_0 | T[a_{k_n}^+(t_n) a_{k_{n-1}}^+(t_{n-1}) \dots a_{k_2}(t_2) a_{k_1}(t_1)] | \Phi_0 \rangle =$$

é igual à soma dos produtos de todos os "emparelhamentos possíveis entre os operadores em questão, onde chamamos de "emparelhamento" o valor esperado em  $|\Phi_0\rangle$  do ~~produto~~ produto ordenado temporalmente de dois operadores. O sinal de cada termo da soma é dado pela "paridade" das transposições necessárias para reordenar os emparelhamentos dados. Por exemplo:  $(i \rightarrow k_i, t_i)$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | T[a_4^+ a_3^+ a_2 a_1] | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | T[a_4^+ a_1] | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | T[a_3^+ a_2] | \Phi_0 \rangle \\ &\quad - \langle \Phi_0 | T[a_4^+ a_2] | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | T[a_3^+ a_1] | \Phi_0 \rangle \\ &\quad + \langle \Phi_0 | T[a_4^+ a_3^+] | \Phi_0 \rangle \times \langle \Phi_0 | T[a_2 a_1] | \Phi_0 \rangle \end{aligned}$$

Note os sinais usados. O último termo é nulo pois é o valor esperado em  $|\Phi_0\rangle$  de dois operadores de criação e dois de destruição. Portanto, só consideramos emparelhamentos de operadores de criação com operadores de destruição. Além disso, só nos interessam freqüências com números iguais de operadores de destruição e criação, do contrário o valor esperado é nulo.

Vamos provar o teorema por indução. Suponhamos que o teorema seja válido para  $n = 2p$  operadores, sendo  $p$  operadores de criação e  $p$  operadores de destruição. Vamos então provar que ele é válido para  $n+2 = 2(p+1)$  operadores. Como o teorema é trivialmente válido para 2 operadores, ele fica provado para um número qualquer. Portanto vamos mostrar que:

$$\begin{aligned}
 & \langle \Phi_0 | T [ a_{k_{2p+2}}^{\dagger}(t_{2p+2}) a_{k_{2p+1}}^{\dagger}(t_{2p+1}) \dots a_{k_{p+2}}^{\dagger}(t_{p+2}) a_{k_{p+1}}^{\dagger}(t_{p+1}) \dots a_{k_1}(t_1) ] | \Phi_0 \rangle \\
 &= \langle \Phi_0 | T [ a_{k_{2p+2}}^{\dagger}(t_{2p+2}) a_{k_1}(t_1) ] | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | T [ a_{k_{2p+1}}^{\dagger}(t_{2p+1}) \dots a_{k_2}(t_2) ] | \Phi_0 \rangle \\
 &- \langle \Phi_0 | T [ a_{k_{2p+2}}^{\dagger}(t_{2p+2}) a_{k_2}(t_2) ] | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | T [ a_{k_{2p+1}}^{\dagger}(t_{2p+1}) \dots a_{k_3}(t_3) a_{k_1}(t_1) ] | \Phi_0 \rangle \\
 &\dots \pm \langle \Phi_0 | T [ a_{k_{2p+2}}^{\dagger}(t_{2p+2}) a_{k_{p+1}}(t_{p+1}) ] | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | T [ a_{k_{2p+1}}^{\dagger}(t_{2p+1}) \dots a_{k_p}(t_p) a_{k_{p-1}}(t_{p-1}) \dots a_{k_1}(t_1) ] | \Phi_0 \rangle
 \end{aligned}$$

O sinal do último termo é  $(+)$  se  $p$  é par e  $(-)$  se  $p$  é ímpar. É evidente que, se o teorema é válido para  $n = 2p$  operadores, podemos expandir os valores esperados de n operadores do lado direito acima ~~em~~ para obtermos então todos os emparelhamentos possíveis de  $n+2$  operadores, o que prova o teorema para  $n+2$ .

Note que escolhemos uma ordem para os operadores ~~em~~ do lado esquerdo em que todos os operadores de criação estão à esquerda e todos os de destruição estão à direita. Isso não implica perda de generalidade já que os operadores podem ser reordenados simultaneamente dos dois lados da equação e o sinal global.

em cada lado é o mesmo e se cancela.

Para provarmos a equação acima vamos mostrar que:

(i) ambos os lados da ~~equação~~ equação satisfazem a mesma equação de ~~for~~ diferencial de primeira ordem em  $t_{2p+2}$ , para quaisquer valores dos outros tempos  $(t_1, \dots, t_{2p+1})$

(ii) ambos os lados da equação coincidem para um determinado valor de  $t_{2p+2}$ , quaisquer que sejam  $(t_1, \dots, t_{2p+1})$

Para isso, note que:

$$a_{k_{2p+2}}^+(t_{2p+2}) = e^{i\omega_{k_{2p+2}} t_{2p+2}} a_{k_{2p+2}}^+$$

$$\text{Logo: } (i\partial_{t_{2p+2}} + \omega_{k_{2p+2}}) a_{k_{2p+2}}^+(t_{2p+2}) = 0.$$

Se operarmos com  $(i\partial_{t_{2p+2}} + \omega_{k_{2p+2}})$  no lado esquerdo da equação acima, entretanto, não obtemos zero pois o operador de ordenamento temporal impõe descontinuidades temporais em  $t_{2p+2}$  ("Funções degrau quando ele coincide com  $(t_1, t_2, \dots, t_{p+1})$ ). Assim, por exemplo:

$$\begin{aligned} (i\partial_{t_{2p+2}} + \omega_{k_{2p+2}}) T[a_{k_{2p+2}}^+(t_{2p+2}) a_{k_1}(t_1)] &= \\ &= i\delta(t_{2p+2} - t_1) [a_{k_{2p+2}}^+(t_{2p+2}) a_{k_1}(t_1) + a_{k_1}(t_1) a_{k_{2p+2}}^+(t_{2p+2})] \end{aligned}$$

$$= i \delta(t_{2p+2} - t_1) \{a_{k_{2p+2}}^+, a_{k_1}\} = i \delta(t_{2p+2} - t_1) \delta_{k_1, k_{2p+2}}$$

Levando-se em conta os sinais das permutações no ordenamento temporal obtemos:

$$\begin{aligned} (i\partial_{t_{2p+2}} + \omega_{k_{2p+2}}) \Pi[a_{k_{2p+2}}^+(t_{2p+2}) \dots a_{k_1}(t_1)] &= \\ = i \delta(t_{2p+2} - t_1) \delta_{k_1, k_{2p+2}} T[a_{k_{2p+1}}^+(t_{2p+1}) \dots a_{k_2}(t_2)] & \\ - i \delta(t_{2p+2} - t_2) \delta_{k_2, k_{2p+2}} T[a_{k_{2p+1}}^+(t_{2p+1}) \dots a_{k_3}(t_3) a_{k_1}(t_1)] + \dots & \\ \dots \pm i \delta(t_{2p+2} - t_{p+1}) \delta_{k_{p+1}, k_{2p+2}} T[a_{k_{2p+1}}^+(t_{2p+1}) \dots a_{k_{p+2}}^+(t_{p+2}) a_{k_p}(t_p) \dots a_{k_1}(t_1)] & \end{aligned}$$

É evidente que:

$$\begin{aligned} (i\partial_{t_{2p+2}} + \omega_{k_{2p+2}}) \langle \Phi_0 | T[a_{k_{2p+2}}^+(t_{2p+2}) \dots a_{k_1}(t_1)] | \Phi_0 \rangle & \\ = i \delta(t_{2p+2} - t_1) \delta_{k_1, k_{2p+2}} \langle \Phi_0 | T[a_{k_{2p+1}}^+(t_{2p+1}) \dots a_{k_2}(t_2)] | \Phi_0 \rangle + \dots & \end{aligned}$$

A mesma expressão é obtida se atuarmos com  $(i\partial_{t_{2p+2}} + \omega_{k_{2p+2}})$  no lado direito da equação e temos provado então o item (i).

Para provar o item (ii) considere dois casos:

(a)  $k_{2p+2} < k_F$ : Nesse caso, tome  $t_{2p+2}$  menor que todos os outros tempos  $(t_1 \dots t_{2p+1})$ . Logo, quando os ordenamentos temporais são executados, o operador  $a_{k_{2p+2}}^\dagger(t_{2p+2})$  fica à direita de todos os outros e atua diretamente em  $|\Phi_0\rangle$ . Mas:

$$a_{k_{2p+2}}^\dagger(t_{2p+2})|\Phi_0\rangle = 0 \quad \text{pois } k_{2p+2} < k_F$$

Logo os dois lados coincidem identicamente para todos os  $t_{2p+2} < (t_1 \dots t_{2p+1})$  e o resultado está provado.

(b)  $k_{2p+2} > k_F$ : Nesse caso, procede-se de maneira inversa. Tome  $t_{2p+2} > (t_1 \dots t_{2p+1})$ . Nesse caso, os ordenamentos temporais posicionam  $a_{k_{2p+2}}^\dagger(t_{2p+2})$  à esquerda de todos os outros operadores e

$$\langle \Phi_0 | a_{k_{2p+2}}^\dagger(t_{2p+2}) = 0 \quad \text{pois } k_{2p+2} > k_F$$

E o resultado fica provado para qualquer  $k_{2p+2}$ .

Isso conduziu a prova do TW. Vale aqui uma ressalva. Nós provamos com a prova simples acima, que o teorema é válido para valores operados no estado fundamental. Existe uma forma mais forte do teorema, que é provada em Fetter + Walecka p. 86-92, que é uma identidade de operadores e não apenas de valores operados em  $|\Phi_0\rangle$ . Estude essa prova.

Vamos agora ver como o TW facilita o cálculo da teoria de perturbação em  $H_1$ . Para isso note primeiro que :

$$\langle \Phi_0 | T [\psi(1) \psi^\dagger(2)] | \Phi_0 \rangle = i G_{12}^{(\psi)}$$

onde voltamos para os operadores de campo,  $1 \rightarrow x_1, t_1$ , etc. Portanto, os "emparelhamentos" nada mais são que as funções de Green não-interagentes (também chamadas de contrações ou propagadores). Note também que :

$$\langle \Phi_0 | T [\psi^\dagger(2) \psi(1)] | \Phi_0 \rangle = -i G_{12}$$

Vamos supor agora uma interação entre pares como usual:

$$H_1(t) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \int d^3r d^3r' V(\vec{r}-\vec{r}') \psi_\alpha^\dagger(\vec{r},t) \psi_\beta^\dagger(\vec{r}',t) \psi_\beta(\vec{r}',t) \psi_\alpha(\vec{r},t)$$

Se escrevermos  $V(x-x') = V(\vec{r}-\vec{r}') \delta(t-t')$  temos :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_1(t') dt' = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \int d^4x d^4x' V(x-x') \psi_\alpha^\dagger(x) \psi_\beta^\dagger(x') \psi_\beta(x') \psi_\alpha(x)$$

ou ainda se  $U_{\alpha\beta}(x-x') = V(x-x') \delta_{\alpha\beta}$   $\sum_{\alpha\beta} \int d^4x \rightarrow \int d^4x$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_1(t') dt' = \frac{1}{2} \int d^4x d^4x' U(x-x') \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \psi(x') \psi(x)$$

que torna a notação mais compacta, ou ainda:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_1(t') dt' = \frac{1}{2} \int d^4x_1 d^4x_2 U_{12} \psi_1^\dagger \psi_2^\dagger \psi_2 \psi_1$$

Vamos calcular agora a contribuição de primeira ordem para o numerador da série perturbativa de  $G_{12}$ :

$$iG_{12}^{(1)} = -\frac{i}{2} \int d^4x_3 d^4x_4 U_{34} \langle T[\psi_1 \psi_2^+ \psi_3^+ \psi_4^+ \psi_4 \psi_3] \rangle_0$$

As contrações possíveis são:

$$\begin{aligned} \langle T[\psi_1 \psi_2^+ \psi_3^+ \psi_4^+ \psi_4 \psi_3] \rangle_0 &\rightarrow \underbrace{\psi_1 \psi_2^+}_{(-iG_{12}^{(0)})} \underbrace{\psi_3^+ \psi_4^+ \psi_4 \psi_3}_{(iG_{34}^{(0)})} + \underbrace{\psi_1 \psi_2^+ \psi_3^+}_{(-iG_{12}^{(0)} iG_{43}^{(0)})} \underbrace{\psi_4^+ \psi_4 \psi_3}_{(iG_{34}^{(0)})} \\ &+ \underbrace{\psi_1 \psi_2^+ \psi_3^+ \psi_4^+}_{(-iG_{12}^{(0)} iG_{43}^{(0)} iG_{34}^{(0)})} \underbrace{\psi_4 \psi_3}_{(iG_{34}^{(0)})} + \underbrace{\psi_1 \psi_2^+ \psi_3^+ \psi_4^+ \psi_4}_{(-iG_{12}^{(0)} iG_{43}^{(0)} iG_{34}^{(0)} iG_{33}^{(0)})} \psi_3 \\ &+ \underbrace{\psi_1 \psi_2^+ \psi_3^+ \psi_4^+ \psi_4 \psi_3}_{(-iG_{12}^{(0)} iG_{43}^{(0)} iG_{34}^{(0)} iG_{33}^{(0)})} = -iG_{12}^{(0)} iG_{43}^{(0)} iG_{34}^{(0)} + iG_{12}^{(0)} iG_{33}^{(0)} iG_{44}^{(0)} \\ &+ iG_{13}^{(0)} iG_{42}^{(0)} iG_{34}^{(0)} - iG_{13}^{(0)} iG_{44}^{(0)} iG_{32}^{(0)} - iG_{14}^{(0)} iG_{42}^{(0)} iG_{33}^{(0)} \\ &+ iG_{14}^{(0)} iG_{43}^{(0)} iG_{32}^{(0)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow iG_{12}^{(1)} &= +\frac{1}{2} \int d^4x_3 d^4x_4 U_{34} \left[ G_{12}^{(0)} (G_{43}^{(0)} G_{34}^{(0)} - G_{33}^{(0)} G_{44}^{(0)}) \right. \\ &\quad \left. + G_{13}^{(0)} (G_{44}^{(0)} G_{32}^{(0)} - G_{42}^{(0)} G_{34}^{(0)}) + G_{14}^{(0)} (G_{42}^{(0)} G_{33}^{(0)} - G_{43}^{(0)} G_{32}^{(0)}) \right] \end{aligned}$$

Várias observações devem ser feitas:

(i) Quando os argumentos da contração coincidem é preciso saber como se toma o limite de variáveis temporais. Por exemplo, o terceiro termo acima contém  $G_{33}^{(0)}$ :

$$G_{33}^{(0)} = \begin{cases} \lim_{t_3' \rightarrow t_3^+} -i \langle T[\psi(x_3) \psi^\dagger(x_3')] \rangle_0 \\ \text{ou} \\ \lim_{t_3' \rightarrow t_3^-} -i \langle T[\psi(x_3) \psi^\dagger(x_3')] \rangle_0 \end{cases} \quad ??$$

Uma inspeção cuidadosa da fórmula original mostra que operadores com variáveis temporais iguais provêm do Hamiltoniano de interação  $H_2(t)$  em que operadores de criação sempre aparecem para a esquerda do operador de destruição. Portanto, o limite

$$t_i^- \rightarrow t_i^+$$

é o correto. Além disso, :

$$i G_{33}^{(0)} = - \langle \psi^\dagger(3) \psi(3) \rangle_0 = -n^{(0)} = \text{densidade de partículas no gás ideal (independente de } t \text{)}$$

$$\boxed{G_{ii}^{(0)} = i n^{(0)}}$$

(ii) Note ~~que~~ que, fazendo  $x_3 \leftrightarrow x_4$ , o terceiro termo é igual ao quinto e o quarto ao sexto. Isso é uma simetria presente na forma original e cancela o fator de  $\frac{1}{2}$  da expressão, para os quatro últimos termos

(iii) Os dois ~~últimos~~ <sup>primeiros</sup> termos têm uma forma peculiar, pois o fator  $G_{12}^{(0)}$  fator para fora da integração. Está claro que a sua origem está na contração interna ao  $H_2(t)$  e não se mistura com as variáveis 1 e 2. Isso sempre acontecerá em todas as ordens em  $H_2(t)$ . Teremos mais a dizer sobre esse tipo de termos mais adiante.

Nesse ponto é útil verificarmos que as contrações acima têm uma óboa representação gráfica. Se escrevermos

$$\begin{array}{c} \bullet \xrightarrow{\quad} \bullet \\ 1 \qquad 2 \end{array} \rightsquigarrow i G_{12}^{(0)}$$

$$\begin{array}{c} \text{2} \\ \begin{array}{c} \nearrow \quad \nwarrow \\ 3 \quad 4 \\ \nwarrow \quad \nearrow \\ 3 \quad 4 \end{array} \end{array} \rightsquigarrow -i U_{34}$$

podemos escrever:

$$\begin{aligned} i G_{12}^{(1)} = & \left(-\frac{1}{2}\right) \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array} + \left(\frac{1}{2}\right) \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array} \\ & + \left(-\frac{1}{2}\right) \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array} + \left(-\frac{1}{2}\right) \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array} \\ & + \frac{1}{2} \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array} + \frac{1}{2} \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array} \end{aligned}$$

A simetria  $3 \leftrightarrow 4$  permite que escrevamos:

$$-\frac{1}{2} \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array} - \frac{1}{2} \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array} = -\frac{1}{2} \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array}$$

$$\frac{1}{2} \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array} + \frac{1}{2} \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array} = \frac{1}{2} \begin{array}{c} 2 \\ \uparrow \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \text{3} \\ \text{4} \end{array}$$

O mesmo não pode ser feito com os 2 primeiros diagramas

Os sinais de  $(-)$  acima aparecem apenas nos diagramas com circuitos fechados de linhas de propagadores eletrônicos ("loops"). Esse é um caso particular de uma regra geral. Um fator de  $(-1)$  deve ser introduzido para cada circuito fechado de propagadores de FÉRMIONS do diagrama (ou prova mais adiante).

Voltando agora aos dois primeiros diagramas, que chamaremos de "desconectados", por terem ~~pedaços~~ não conectados à linha principal de  $1 \rightarrow 2$ , afirmamos que eles fazem parte de um conjunto mais geral, que aparece em ordens superiores. Podemos fatorar a expansão acima em:

$$iG_{12} = \left[ \text{diagrama 1} + \text{diagrama 2} + \text{diagrama 3} + \text{diagrama 4} + \text{diagrama 5} + \dots \right] \times \\ \times \left[ \text{diagrama 6} + \text{diagrama 7} + \text{diagrama 8} + \text{diagrama 9} + \dots \right]$$

Pode-se provar facilmente (F+W, p. 95-96) que o termo entre o segundo par de colchetes acima, cancela exatamente o denominador da fórmula geral de  $iG_{12}$  derivada antes. Seque que a expansão perturbativa de  $iG_{12}$  envolve apenas diagramas CONECTADOS, os desconectados sendo cancelados pelo termo  $\langle \Phi_0 | \tilde{U}(+\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle$ . Daqui em diante, falaremos apenas de  $\mathcal{G}$  diagramas conectados para  $iG_{12}$ .

Só resta mais uma característica dos diagramas para que possamos estabelecer todas as regras de sua construção. Ela só aparece em ordens superiores e diz respeito ao fator  $\left(\frac{1}{n!}\right)$  da expansão de  $iG_{12}$ .

Note primeiro que o fator  $\frac{1}{n!}$  aparece sempre

associado a  $n$  linhas de interação  $U$  (ou  $H_1(t)$ ). Cada linha  $U$  tem associada a ela um par de coordenadas (3 e 4 no exemplo acima de primeira ordem). Haverá portanto uma série de diagramas, cujos pares de índices de  $U$  são permutações distintas mas que são idênticos em todos os outros aspectos, que contribuirão o mesmo valor para  $iG_{12}$ , POIS os pares de índices são VARIÁVEIS MUPAS DE INTEGRAÇÃO. Há  $(n!)$  permutações possíveis de  $n$  pares de índices. Isso cancela o fator  $(n!)$  e não é preciso incluir todos esses diagramas idênticos.

Podemos agora enumerar as regras para construção dos diagramas de Feynman ~~para~~ de ordem  $n$ :

(i) Desenhe todos os diagramas <sup>conectados</sup> topologicamente distintos com  $n$  linhas de interação e com início em 1 e final em 2. Associe um rótulo qualquer (3, 4, ...) a cada vértice.

(ii) A cada linha <sup>continua</sup> de  $i$  a  $j$  associe  $iG_{ij}^{(0)}$  e a cada linha de interação ~~em~~ associe  $-iU_{\alpha\beta}$ .

(iii) Some (integre) sobre todos os rótulos que não 1 ou 2. Para o exemplo de interação acima, o spin é conservado

ao longo de uma linha contínua.

(iv) Multiplique cada diagrama por  $(-1)^F$  onde  $F$  é o número de circuitos fechados FERMIÔNICOS

(v) A cada função de Green com índices <sup>temporais</sup> iguais faça  $i G^\circ(x, x^\circ) \Rightarrow i G^\circ_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x}'t')$

Como afirmado anteriormente a regra (iv) acima é geral. Ela provém da seguinte constatação. Um circuito fechado fermiônico provém da série de contrações de operadores da forma:

$$\psi_1^\dagger \psi_1 \psi_2^\dagger \psi_2 \dots \psi_k^\dagger \psi_k$$

pois ele provém dos  $H_1(t)$ 's. Todas as contrações internas (entre  $\psi_1^\dagger$  e  $\psi_k$ ) acima contribuem:

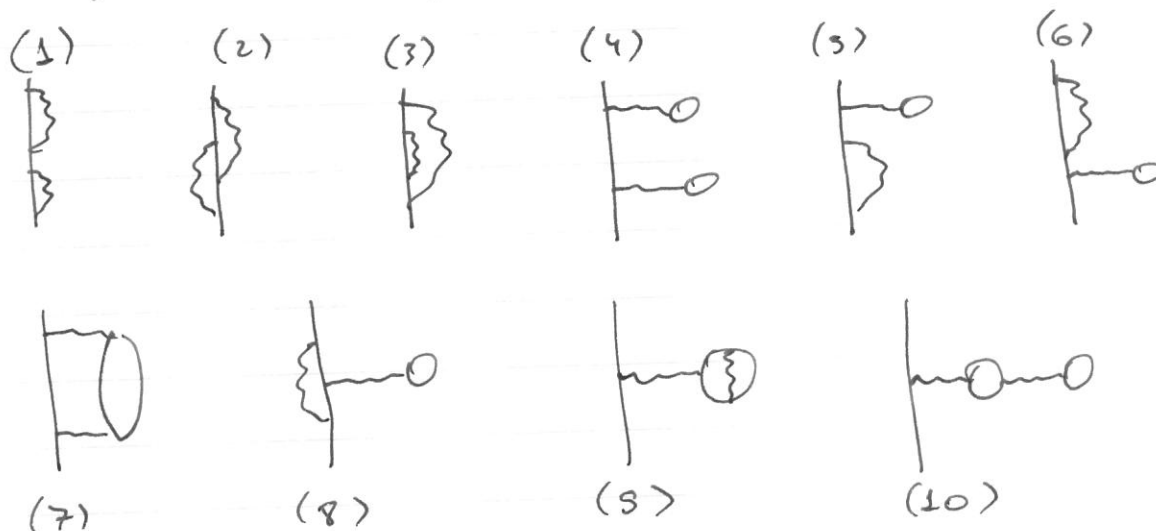
$$i G_{12}^{(0)} i G_{23}^{(0)} \dots i G_{k-1, k}^{(0)}$$

enquanto que a última contração (entre  $\psi_1^\dagger$  e  $\psi_k$ ) nos dá:

$$-i G_{1k}^{(0)}$$

Daí o sinal de menos.

Como exemplo das regras acima, vejamos os diagramas de segunda ordem:



Os diagramas (4) e (10) têm dois circuitos fechados (fator  $(-1)^2$ ) e os diagramas (5), (6), (7), (8) e (9) têm um (fator  $(-1)$ ). Todos os elementos da forma:



envolvem  $iG^{(0)}$ 's com mesmo índice temporal.

Note que (5) e (6) não são considerados topologicamente distintos pois a posição relativa dos elementos com relação a  $\underline{1}$  e  $\underline{2}$  é diferente.

Para sistemas homogêneos é muito mais fácil trabalhar no espaço  $(\vec{k}, \omega)$ . Para isso, note que:

$$G(\vec{x}) = \int G(p) e^{-i p x} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4}; \quad G(p) = \int d^4 x G(x) e^{i p x}$$

$$G^{(0)}(x) = \int G^{(0)}(p) e^{-i p x} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4}; \quad G^{(0)}(p) = \int d^4 x G^{(0)}(x) e^{i p x}$$

onde estamos usando "notação covariante" ( $d^4 p = d^3 k d\omega$  etc.) e  $p x \equiv \omega t - \vec{k} \cdot \vec{x}$ . Além disso:

$$U(x) = \delta(t) V(\vec{x}) = \int U(\vec{q}) e^{-i \vec{q} \cdot \vec{x}} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}$$

e:

$$U(q) \equiv U(\vec{q}) = \int V(\vec{x}) e^{-i \vec{q} \cdot \vec{x}} d^3 x$$

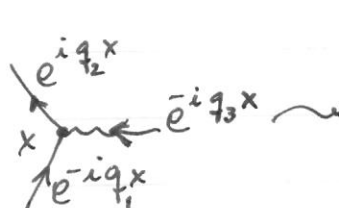
Calculamos, p. ex. o termo:

$$\begin{aligned} i G_{12}^{(Ex)} &= - \int d^4 x_3 d^4 x_4 \int \frac{d^4 q d^4 k d^4 p d^4 p'}{(2\pi)^{16}} e^{-i q(x_3 - x_4)} e^{-i k(x_3 - x_1)} e^{-i p(x_4 - x_2)} e^{-i \omega_p(t_4 - t_3)} \\ &\quad e^{-i p'(x_2 - x_4)} U(q) G^{(0)}(k) G^{(0)}(p) G^{(0)}(p') \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \rightarrow e^{-i \omega_p(t_4 - t_3)} e^{-i \omega_{p'}(t_4 - t_3)} \\ &= - \int \frac{d^4 q d^4 k d^4 p d^4 p'}{(2\pi)^{16}} (2\pi)^4 \delta^{(4)}(p - q - k) (2\pi)^4 \delta^{(4)}(p - q - p') \\ &\quad U(q) G^{(0)}(k) G^{(0)}(p) G^{(0)}(p') e^{i k x_1} e^{-i p(x_2)} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \\ &= - \int \frac{d^4 k d^4 p}{(2\pi)^4 (2\pi)^4} e^{i k(x_1 - x_2)} U(p - k) G^{(0)}(k) G^{(0)}(p) G^{(0)}(k) \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \end{aligned}$$

onde o fator  $\delta_{\lambda_1 \lambda_2}$  diz respeito aos índices de spin de  $\underline{1}$  e  $\underline{2}$ . Da definição:

$$i G^{(Ek)}(k) = - \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} U(p-k) G^{(0)}(p) [G^{(0)}(k)]^2$$

Deste exemplo é possível achar a generalização para outros termos. Em cada vértice tem-se:



\* Note que a seta em um e' convencional pois  $U(q) = U(-q)$

sendo que  $e^{-iq_1 x}$  e  $e^{iq_2 x}$  são das duas funções de Green e  $e^{-iq_3 x}$  são da linha de interação. A variável  $x$  é muda e deve ser integrada, gerando:

$$(2\pi)^4 \delta(q_1 + q_3 - q)$$

ou seja, o quadri-momento é conservado em cada vértice. Para isso, é importante associar a seta a  $U(q)$  pois a interação  $q$  transfere momento  $q$  de uma ponta de um à outra.

Uma vez integradas todas as variáveis mu só restam os pontos externos e termos:



$$e^{-ik(x_2)} e^{ik(x_1)} = e^{-ik(x_2 - x_1)}$$

\* Note que os  $k$ 's são iguais devido ao delta

que é o fator que aparece na definição de  $G(k)$  a partir de  $G_{12}$ .

As regras dos diagramas agora ficam

(i) Desenhe todos os diagramas conectados topologicamente distintos com n linhas de interação

(ii) Associe momentos a cada linha de interação (direcionada) e a cada propagador, conservando momento nos vértices.

(iii) Associe  $iG^{(0)}(k)$  às linhas contínuas e  $-iU(q)$  às linhas de interação. Some sobre os momentos internos e índices de spin internos.  $(\int d^4p/(2\pi)^4)$

(iv) ~~Multiplique~~ Multiplique por  $(-1)^F$  como antes

(v) A cada propagador proveniente de índices temporais iguais multiplique por:

$$e^{i\omega\eta} \quad \eta \rightarrow 0^+$$

Essa última regra vem de:

$$iG^{(0)}(\vec{x}t; \vec{x}'t') = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{(2\pi)} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} G^{(0)}(\vec{k}, \omega) \underbrace{e^{-i\omega(t-t')}}_{e^{i\omega\eta} \quad \eta \rightarrow 0^+}$$

Vamos escrever agora a função de Green em primeira ordem no espaço  $(\vec{k}, \omega)$ .

$$i G_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k}, \omega) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2}$$

onde retornamos à notação trivectorial para maior clareza.

$$i G_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} i G^{(1)}(\vec{k}, \omega)$$

$$i G^{(1)}(\vec{k}, \omega) = (-1) \int \frac{d^3 q d\omega'}{(2\pi)^4} \left[ - [G^{(0)}(\vec{k}, \omega)]^2 U(0) G^{(0)}(\vec{q}, \omega') e^{i\omega' \eta} \right. \\ \left. + [G^{(0)}(\vec{k}, \omega)]^2 U(\vec{q}) G^{(0)}(\vec{k}-\vec{q}, \omega-\omega') e^{i(\omega-\omega')\eta} \right]$$

$$= [G^{(0)}(\vec{k}, \omega)]^2 \left\{ + \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^4} V(\vec{q}) G^{(0)}(\vec{q}) e^{i\omega' \eta} \right. \\ \left. - \int \frac{d^3 q d\omega'}{(2\pi)^4} V(\vec{q}) G^{(0)}(\vec{k}-\vec{q}, \omega-\omega') e^{i(\omega-\omega')\eta} \right\}$$

Note que, no caso do gás uniforme de elétrons, o efeito do "background" positivo foi de cancelar exatamente os termos de transferência de momento nulo ( $V(\vec{q}=\vec{0})$ ). Portanto, o primeiro termo acima não está presente nesse caso.

Podemos fazer a soma sobre frequências do segundo termo acima. Fazendo primeiro:

$$\begin{aligned} \vec{q} &\rightarrow \vec{k} - \vec{q} \\ \omega' &\rightarrow \omega - \omega' \\ &(\vec{k} - \vec{q}) \\ \sim \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} V(\vec{q}) &\underbrace{\int \frac{d\omega'}{(2\pi)} e^{i\omega' n} G^{(0)}(\vec{q}, \omega')}_I \end{aligned}$$

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{(2\pi)} e^{i\omega' n} \left[ \frac{\Theta(k_F - q)}{\omega' - \epsilon_q - i\eta} + \frac{\Theta(q - k_F)}{\omega' - \epsilon_q + i\eta} \right]$$

Usando o lema de Jordan, podemos ~~se~~ escrever:

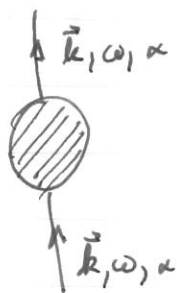
$$\int_{-\infty}^{+\infty} = \int_{\odot} - \int_{\ominus}$$

Onde os contornos esquematizados acima correspondem a fechar as curvas no semi-plano superior do plano complexo ( $\text{Re } \omega'$ ,  $\text{Im } \omega'$ ), pois o fator  $e^{i\omega' n}$  (ou melhor, sua continuação analítica) só nos dá uma contribuição exponencialmente pequena no semi-plano superior ( $\text{Im } \omega' > 0$ ). Calculando a ~~primeira~~ integral em  $\odot$  pelo método dos resíduos, o segundo termo acima dá contribuição nula e o primeiro dá:

$$I = 2\pi i \text{Res} \left[ \frac{\Theta(k_F - q)/2\pi}{\omega' - \epsilon_q - i\eta} \right] = i \Theta(k_F - q)$$

$$\Rightarrow i G^{(4)}(\vec{k}, \omega) = [G^{(0)}(\vec{k}, \omega)]^2 \times \left\{ i n V(\vec{0}) - i \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} V(\vec{k} - \vec{q}) \theta(k_F - q) \right\}$$

Notamos acima que a estrutura de  $G^{(4)}(\vec{k}, \omega)$  sugere que o fator  $[G^{(0)}(\vec{k}, \omega)]^2$  aparece em todos os termos de teoria de perturbação (exceto o termo de ordem zero  $G^{(0)}(\vec{k}, \omega)$ ), pois corresponde às "pernas" externas do diagrama.



Parametrizaremos esse fator definindo a auto-energia (imprópria)

$$G(\vec{k}, \omega) = G^{(0)}(\vec{k}, \omega) + [G^{(0)}(\vec{k}, \omega)]^2 \tilde{\Sigma}(\vec{k}, \omega)$$

onde já supusemos por simplicidade que a interação independe do spin e, portanto,  $G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} G(\vec{k}, \omega)$

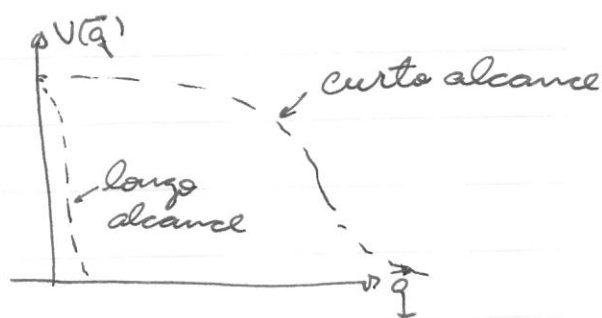
Graficamente, a definição acima corresponde a escrever:

$$-i \tilde{\Sigma}(\vec{k}, \omega) = \text{diagrama com um círculo hachurado}$$

Observante:

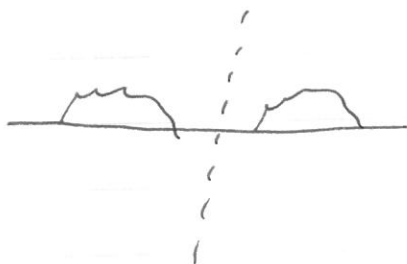
$$\tilde{\Sigma}^{(4)}(\vec{k}, \omega) = n V(\vec{0}) - \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} V(\vec{k} - \vec{q}) \theta(k_F - q)$$

O primeiro termo corresponde à interação direta da partícula com o meio (em primeira aproximação) e o segundo termo é o termo de troca ("exchange"). Note que para potenciais de longo alcance o termo de exchange contribui menos que o termo direto e para ~~em~~ potenciais de curto alcance as contribuições são similares. Para ver isso, lembre-se de que:



e note que o primeiro termo envolve  $V(\vec{q})$  na origem e o segundo uma média de  $V(\vec{q})$  entre 0 e  $k_F$ .

Vamos agora analisar mais a fundo a estrutura da auto-energia. Por exemplo, se chamarmos as contribuições de segunda ordem, os diagramas (1), (4), (6) podem ser separados em duas partes, colocando-se um propagador fermiônico:



enquanto que os outros não podem. Se chamarmos de auto-energia própria, **APENAS** as contribuições a  $\Sigma$  do segundo tipo, é óbvio que podemos reconstruir toda

a série perturbativa com diagramas da forma:

$$-i\tilde{\Sigma} = \text{[circle with two dots]} + \text{[two circles connected vertically]} + \text{[three circles connected vertically]} + \dots$$

onde  $-i\Sigma = -i(\text{auto-energia própria}) = \text{[circle with two dots]}$   
~~de auto-energia~~. Em termos da função de Green  
 temos:

$$iG \equiv \text{[double line]} = \text{[single line]} + \text{[single line with circle]} + \text{[single line with two circles]} + \text{[single line with three circles]} + \dots$$

$$= \text{[single line]} + \text{[single line with shaded circle]}$$

onde definiremos a função de Green exata por uma linha dupla. Ora, é fácil ver que:

$$\text{[double line]} = \text{[single line]} + \text{[single line with circle]} \times \underbrace{\left[ \text{[single line]} + \text{[single line with circle]} + \text{[single line with two circles]} + \dots \right]}_{\text{[double line]}}$$



que pode ser escrita como:

$$iG = iG^{(0)} + iG^{(0)}(-i\Sigma)iG$$

$$\Rightarrow \boxed{G = G^{(0)} + G^{(0)}\Sigma G \quad (\text{"Equação de Dyson"})}$$

Note que a expressão acima foi deduzida no espaço  $(\vec{k}, \omega)$  (sistema uniforme). A equação análoga no espaço  $(\vec{r}, t)$  é:

$$G^{(1)}(x_1) = G^{(0)}(x_1) + \int d^4x_2 G^{(0)}(x_1 x_2) \Sigma(x_1 x_2) G(x_2 x_1)$$

A equação de Dyson é facilmente resolvida no espaço  $(\vec{k}, \omega)$ , pois é uma equação algébrica:

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{G^{(0)-1}(\vec{k}, \omega) - \Sigma(\vec{k}, \omega)}$$

$$\Rightarrow \boxed{G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, \omega)}}$$

Das figuras anteriores:

$$\bigcirc^{(1)} = \text{---}\bigcirc + \text{---}\text{---}$$

$$\begin{aligned} \bigcirc^{(2)} = & \text{---}\bigcirc\text{---} + \text{---}\bigcirc\text{---}\bigcirc\text{---} + \text{---}\text{---} + \text{---}\text{---} \\ & + \text{---}\text{---} + \text{---}\text{---}\bigcirc \end{aligned}$$

Note como a ~~auto~~-energia própria ( $\Sigma^{(1)}$ ), quando colocada à redução da equação de Dyson, gera uma **RESSONÂNCIA DE TERMOS EM TODAS AS ORDENS PARA  $G$** :

$$\text{---}\text{---} \simeq \text{---} + \text{---}\bigcirc + \text{---}\text{---} + \text{---}\text{---}\bigcirc + \text{---}\text{---}\text{---} + \text{---}\text{---}\text{---} + \text{---}\text{---}\bigcirc + \text{---}\text{---}\text{---} + \dots$$

e simplifica consideravelmente nossa tarefa pois só precisamos nos concentrar em diagramas de auto-energia própria.

Uma análise similar à da auto-energia pode ser feita para as linhas de interação. Definindo-se a interação vestida ou renormalizada:

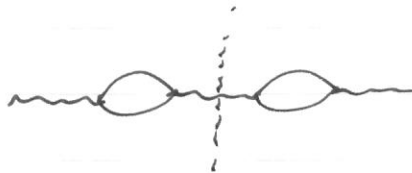
$$\text{wavy line} = \text{bare line} + \text{wavy line} \text{ with polarization loop}$$

$$-i U^R(q) = \text{wavy line with } q$$

$$\Rightarrow U^R(q) = U(q) + [U(q)]^2 \tilde{\pi}(q)$$

onde  $i \tilde{\pi}(q) = \text{polarization loop} = \text{inserção de polarização}.$

Se definirmos agora a polarização própria como aquela que não pode ser separada, cortando-se uma linha de interação:



Requer que:

$$i \pi(q) = \text{polarization loop} = \text{polarização própria}$$

$$\Rightarrow i \tilde{\pi}(q) = \text{polarization loop} + \text{polarization loop with wavy line} + \dots$$

$$\text{wavy line} = \text{bare line} + \text{wavy line with polarization loop} + \text{wavy line with two polarization loops} + \dots$$

$$\Rightarrow U^R(q) = U_0(q) + \pi(q) U^2(q) + \pi^2(q) U^3(q) + \dots$$

$$U^R(q) = \frac{U(q)}{1 - \pi(q) U(q)} = \frac{1}{U^{-1}(q) - \pi(q)}$$

$$\epsilon(q) = 1 - \pi(q) U(q) \Rightarrow \text{constante dielétrica efetiva.}$$

• Interpretação física dos pólos da função de Green:

Para  $t > 0$ :

$$iG(\vec{k}, t) = \langle \Phi_0 | c_{\vec{k}\uparrow}^*(t) c_{\vec{k}\uparrow}^+(0) | \Phi_0 \rangle$$

Cuja interpretação física é de que criamos uma partícula em  $t=0$  no momento  $\vec{k}$  no estado fundamental e calculamos o "overlap" (amplitude) desse estado com o estado em que se cria a partícula em  $\vec{k}$  no tempo  $t$  em  $|\Phi_0\rangle$

$$\left( \langle \Phi_0 | c_{\vec{k}\uparrow}(t) \right)^\dagger = c_{\vec{k}\uparrow}^+(t) | \Phi_0 \rangle$$

Alternativamente:

$$iG(\vec{k}, t) = e^{iE_0 t} \langle \Phi_0 | c_{\vec{k}\uparrow} e^{-iH(t)} c_{\vec{k}\uparrow}^+ | \Phi_0 \rangle$$

ou seja cria-se a excitação em  $t=0$ , deixa-se o sistema evoluir até  $t$  e então calcula-se o overlap com o estado inicial.

Da representação de Lehmann temos que:

$$G(\vec{k}, t) = -iV \sum_{\substack{n \\ n \neq \vec{k}}} |\langle \Phi_n | c_{\vec{k}\uparrow}^+ | \Phi_0 \rangle|^2 e^{-i[E_{n\vec{k}}(N+1) + \mu]t}$$

ou

$$G(\vec{k}, \omega) = V \sum_n \frac{|\langle n\vec{k} | c_{\vec{k}\uparrow}^+ | \Phi_0 \rangle|^2}{\omega - (E_{n\vec{k}}(N+1) + \mu) + i\delta}$$

Vimos também que, se o volume é muito grande e os níveis de energia muito espaçados, podemos definir  $A(\vec{k}, \epsilon)$  tal que:

$$G(\vec{k}, \omega) = \int_0^{\infty} \frac{A(\vec{k}, \epsilon) d\epsilon}{\omega - \epsilon - i\delta}$$

$$G(\vec{k}, t) = -i \int_0^{\infty} A(\vec{k}, \epsilon) e^{-i(\epsilon + \mu)t} d\epsilon$$

Suponhamos agora que:

$$A(\vec{k}, \epsilon) \cong \frac{\gamma_k z_k / \pi}{[\epsilon - \epsilon_k + i\gamma_k]^2 + \gamma_k^2}$$

$$\Rightarrow G(\vec{k}, \omega) = \frac{z_k}{\omega - \epsilon_k + i\gamma_k}$$

que representa um pólo em  $\omega = \epsilon_k - i\gamma_k$  ("pólo complexo"). Esta situação é muito comum e corresponde ao conceito de quasi-partícula, como veremos.

Para esse caso temos que:

$$G(\vec{k}, t) \cong -i z_k e^{-i\epsilon_k t} e^{-\gamma_k t}$$

Da interpretação física de  $G(\vec{k}, t)$  vemos que a excitação criada se propaga com energia  $\epsilon_k$ , constante de amortecimento  $\gamma_k$  e amplitude  $z_k$ .

É interessante notar que a passagem ao limite contínuo gera um pólo complexo a partir de pólos reais ( $i\delta$ ). A explicação é a seguinte. Existem duas energias características aqui

$\gamma_k \Rightarrow$  largura da região de energias  $E_{nk} (n+1)$  que contribuem significativamente para  $A(\vec{k}, E)$

$\Delta E \Rightarrow E_{nk} - E_{(n-1)k} =$  espaçamento entre os níveis.

Se o sistema é finito ~~mas~~ as duas energias têm efeitos bastante distintos, que são bem conhecidos dos fenômenos de "batimentos". Numa escala de tempo

$$\tau_k \sim \frac{1}{\gamma_k}$$

as exponenciais de:

$$G(\vec{k}, t) = -iV \sum_n A_{nk} e^{-i[E_{nk} + \mu]t}$$

começam a sair de fase e  $G(\vec{k}, t)$  tem o decaimento característicos. No entanto, se esperarmos um tempo suficiente, da ordem de:

$$T \sim \frac{1}{\Delta E}$$

as exponenciais voltam a entrar em fase novamente e o sistema retorna à sua configuração inicial, pois ele é periódico. Isso é análogo ao batimento.

Entretanto, quando  $V \rightarrow \infty$ ,  $\Delta E \rightarrow 0$  e o sistema nunca retorna à situação original. Ele é efetivamente periódico, com decaimento irreversível com escala de tempo  $\tau_k$ .

Esse comportamento é o que se chama de "quasi-partícula". Note que, para que a quasi-partícula seja bem definida, devemos ter:

$$\gamma_k \ll (\epsilon_k - \mu) \quad (\text{SUB-AMORTECIMENTO})$$

Isso é o caso nos chamados líquidos de Fermi onde pode-se provar em casos particulares que a desigualdade acima é válida.

Note também que a amplitude  $Z_k$  representa a "probabilidade" de se achar o estado de QP no estado "não-interagente" criado por  $c_k^\dagger$ .

Da solução da equação de Dyson:

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k - \Sigma(\vec{k}, \omega)}$$

os polos de  $G(\vec{k}, \omega)$  ocorrem em  $\epsilon_k + i\gamma_k$  onde: (Exercício 3.)

$$\epsilon_k = \epsilon_k + \text{Re} \Sigma(\vec{k}, \epsilon_k)$$

$$(\text{Se } \gamma_k \ll \epsilon_k)$$

$$\gamma_k = \frac{\text{Im} \Sigma(\vec{k}, \epsilon_k)}{1 - \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re} \Sigma(\vec{k}, \omega) \Big|_{\omega = \epsilon_k}}$$

Pode-se provar que  $E_k \rightarrow 0$  re  $k \rightarrow k_F$  para um sistema limpo homogêneo. Portanto:

$$\left. \begin{aligned} E_k &\simeq V_F^{(0)} (k - k_F) \\ E_k &\simeq V_F (k - k_F) \end{aligned} \right\} \text{ re } k \rightarrow k_F$$

$$\Rightarrow \frac{V_F}{V_F^{(0)}} = \left. \frac{\partial E_k}{\partial k} \right|_{k=k_F} = r$$

$\Rightarrow$  (Chamando de  $\Sigma'(\vec{k}, \omega) \equiv \text{Re } \Sigma(\vec{k}, \omega)$ ):

$$r = 1 + \left[ \frac{\partial \Sigma'(\vec{k}, \omega)}{\partial E_k} + r \frac{\partial \Sigma'(\vec{k}, \omega)}{\partial \omega} \right] \Big|_{\omega = E_{k_F} = 0}$$

$$\Rightarrow r = \frac{V_F}{V_F^{(0)}} \equiv \frac{m}{m^*} = \frac{1 + \frac{\partial \Sigma'(\vec{k}, 0)}{\partial E_k}}{1 - \frac{\partial \Sigma'(k, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0}}$$

onde definimos a massa efetiva  $m^*$  tal que:

$$\frac{V_F^{(0)}}{m} = \frac{k_F}{m} \quad \text{e} \quad V_F = \frac{k_F}{m^*}$$

Equivalentemente, pode-se expandir  $\Sigma(\vec{k}, \omega) = \Sigma(k, \omega)$  para  $k \sim k_F$  e  $\omega \sim 0$ :

$$\Sigma(k, \omega) \sim \frac{\partial \Sigma'}{\partial k}(k - k_F) + \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega} \omega - i \Sigma'' \operatorname{sgn} \omega$$

$$\text{onde: } \frac{\partial \Sigma'}{\partial k} = \left. \frac{\partial \operatorname{Re} \Sigma(\vec{k}, \omega)}{\partial k} \right|_{\substack{k=k_F \\ \omega=0}}; \quad \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega} = \left. \frac{\partial \operatorname{Re} \Sigma(\vec{k}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\substack{k=k_F \\ \omega=0}}$$

$$\text{e } \Sigma'' = \operatorname{Im} \Sigma(\vec{k}_F, \omega) \sim O((k - k_F)^2, \omega^2)$$

$$\Rightarrow G(\vec{k}, \omega) \cong \frac{1}{\omega - \frac{k_F}{m}(k - k_F) - \frac{\partial \Sigma'}{\partial k}(k - k_F) - \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega} \omega - i \Sigma'' \operatorname{sgn} \omega}$$

$$\equiv \frac{Z_k}{\omega - \frac{k_F}{m^*}(k - k_F) - i \gamma_k}$$

$$\text{onde: } \frac{m}{m^*} = \frac{1 + \frac{m}{k_F} \frac{\partial \Sigma'}{\partial k}}{1 - \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega}}; \quad Z = \frac{1}{1 - \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega}}$$

$$\gamma_k = \frac{\Sigma''}{1 - \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega}}$$