



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Dissertação de Mestrado

**Espaço de Fock e Dinâmica de Campos
Térmicos: Um Desenvolvimento para Átomos,
Moléculas e Sólidos**

Caio Guimarães da Ressureição

Salvador

2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Espaço de Fock e Dinâmica de Campos Térmicos: Um Desenvolvimento para Átomos, Moléculas e Sólidos

Caio Guimarães da Ressureição

Orientador: Dr. José David Manguiera Vianna

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física.

Salvador

2016

Caio Guimarães da Ressureição

Espaço de Fock e Dinâmica de Campos Térmicos: Um Desenvolvimento para Átomos, Moléculas e Sólidos/ Caio Guimarães da Ressureição– Salvador, 2016-
84 p. : il.

Orientador: Dr. José David Manguiera Vianna

Dissertação de Mestrado – Universidade Federal da Bahia – UFBA

Instituto de Física

Programa de Pós-Graduação em Física, 2016.

1. Dinâmica de Campos Térmicos. 2. Espaço de Fock. 3. Átomos e Moléculas. I. José David Manguiera Vianna. II. Universidade Federal da Bahia. III. Instituto de Física. IV. Espaço de Fock e Dinâmica de Campos Térmicos: Um Desenvolvimento para Átomos, Moléculas e Sólidos

CDU 530.145

Espaço de Fock e Dinâmica de Campos Térmicos: Um Desenvolvimento para Átomos, Moléculas e Sólidos

Caio Guimarães da Ressureição

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física.

Banca Examinadora:

Dr. José David Manguiera Vianna
Orientador – UFBA/UnB

Professor
Convidado 2

Professor
Convidado 3

Salvador

Agradecimentos

Ao Professor David Vianna pela orientação, paciência e pela preocupação com minha formação desde a iniciação científica.

A minha mãe e meus familiares por sempre acreditarem em mim, pelo incentivo constante e por seu amor.

Aos amigos os quais compartilhei momentos agradáveis de aprendizagem e descontração, em especial a Andréia, pelo companheirismo e colaboração.

Aos professores e funcionários do Instituto de física, em especial à Professora Graça Martins pela amizade, apoio e preocupação.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

A todos o meu mais sincero obrigado!

Resumo

Neste trabalho, consideramos uma forma sistemática de usar o espaço de Fock para aplicar a Dinâmica de Campos Térmicos (DCT) em física atômica, molecular e de estado sólido. Partimos da equação de Schrödinger como uma equação de campo não relativístico; o espaço de Fock é construído na descrição direta e na descrição dual do campo e a transformação de Bogoliubov é usada para determinar observáveis quânticos à temperatura finita. Nosso desenvolvimento nos permitiu obter, à temperatura finita, as funções de Green de uma partícula, a equação de Dyson e fazer aplicações. Equações de Hartree-Fock para átomos e moléculas, propriedades de férmions livres e a aproximação de Hartree-Fock dentro da análise diagramática usando DCT são as aplicações realizadas.

Palavras-chaves: 1. Dinâmica de Campos Térmicos. 2. Espaço de Fock. 3. Átomos e Moléculas.

Abstract

In this work we consider a systematic way to use the Fock space in order to apply the Thermofield Dynamics (TFD) to atomic, molecular and solid state physics. We start from the Schrödinger equation as a non-relativistic field equation, Fock space is constructed for the direct and dual pictures of the field, and the Bogoliubov transformation is used to determine finite temperature quantum observables. Our development has allowed to us to obtain single-particle Green's functions, Dyson equation and to make applications: Hartree-Fock equations for atoms and molecules, free fermions proprieties and Hartree-Fock approximation inside the diagrammatic analysis, using TFD, are presented.

Keywords: 1. Thermofield Dynamics. 2. Fock Space. 3. Atomic and Molecular Physics.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Contribuição de primeira ordem da função de Green	28
Figura 2 – Fatoração da contribuição de primeira ordem de $\bar{G}_{\alpha\beta}(x, y)$	29
Figura 3 – Denominador de $G_{\alpha\beta}(x, y)$	29
Figura 4 – Função de Green e a autoenergia	30
Figura 5 – Autoenergia própria	30
Figura 6 – Primeira ordem da autoenergia própria	62
Figura 7 – Série para a autoenergia própria na aproximação Hartree-Fock	63
Figura 8 – Autoenergia própria autoconsistente na aproximação Hartree-Fock	63
Figura 9 – Equação de Dyson para função de Green	63

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	DINÂMICA DE CAMPOS TÉRMICOS (DCT)	3
2.1	Introdução	3
2.2	Oscilador Harmônico Bosônico	4
2.3	Oscilador Harmônico Fermiônico	8
2.4	Notação Matricial	10
2.5	Campo de Schrödinger	12
3	SEGUNDA QUANTIZAÇÃO E O CAMPO DE SCHRÖDINGER	14
3.1	Espaço de Fock	14
3.2	Segunda Quantização	17
3.3	Evolução Temporal e as Descrições da Teoria Quântica	19
3.3.1	Descrição de Schrödinger	20
3.3.2	Descrição de Interação	20
3.3.3	Descrição de Heisenberg	22
3.3.4	Evolução Adiabática	23
3.4	Teoria de Perturbação no Espaço de Fock	24
3.5	Diagramas de Feynman no Espaço de Fock	26
4	SEGUNDA QUANTIZAÇÃO E O CAMPO DE SCHRÖDINGER DUAL	32
4.1	Espaço de Fock Dual	32
4.2	Segunda Quantização no Espaço de Fock Dual	35
4.3	Evolução Temporal e as Descrições da Teoria Quântica na Formulação Dual	36
4.3.1	Descrição de Schrödinger Dual	37
4.3.2	Descrição de Interação Dual	38
4.3.3	Descrição de Heisenberg Dual	39
4.3.4	Evolução Adiabática Dual	40
4.4	Teoria de Perturbação Dual	41
4.5	Diagramas de Feynman na Formulação Dual	42
5	FUNÇÃO DE GREEN NA DCT	45
5.1	Espaço de Fock Duplicado	45
5.2	Evolução Temporal e as Descrições da Teoria Quântica em $\hat{\mathcal{F}}^\pm$	46

5.3	Teoria de Perturbação	48
6	APLICAÇÕES	51
6.1	Aplicação direta da DCT para o Hartree-Fock	51
6.2	Férmions Livres	55
6.2.1	Férmions Livres no Espaço Direto	55
6.2.2	Férmions Livres no Espaço Dual	57
6.2.3	Férmions Livres em DCT	58
6.3	Aproximação de Primeira Ordem	60
6.4	Aproximação Hartree-Fock	62
6.5	Aproximação de Primeira Ordem no Espaço Dual	67
6.6	Aproximação Hartree-Fock no Espaço Dual	69
6.7	Aproximação de Primeira Ordem em DCT	72
6.8	Aproximação Hartree-Fock em DCT	73
7	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	74
	APÊNDICE A – TEOREMA DE GELL-MANN E LOW	75
A.1	Espaço Direto	75
A.2	Espaço Dual	77
	APÊNDICE B – TEOREMA DE WICK	80
B.1	Espaço Direto	80
	REFERÊNCIAS	83

1 Introdução

Normalmente no estudo de átomos, moléculas e sólidos (em menor proporção) não se considera a influência da temperatura. Os métodos de Hartree [1–3] e Hartree-Fock [1–4], o método de interação de configurações [1–3, 5], a teoria do funcional da densidade (DFT) [1–3, 6], a teoria de perturbação [1–3, 7], o método das ondas planas [1–3, 8] e o método do pseudopotencial [1–3] são alguns dos procedimentos usados nesses estudos. Sabe-se, no entanto, que a temperatura pode ser um fator importante na determinação de propriedades de interesse [9, 10]. Contendo os referidos sistemas muitas partículas, uma forma de tratá-los é com métodos da teoria quântica de campos, o que ocorre em alguns textos [11, 12]. Neste contexto, a inclusão da temperatura deve ser realizada via teoria quântica de campos à temperatura finita, teoria onde as partículas interagem com um reservatório térmico (banho térmico).

De acordo com Le Bellac [13], a teoria de campos à temperatura finita tem origem na década de cinquenta do século passado, sendo Matsubara [14] o primeiro a estudá-la em um desenvolvimento não relativístico; a teoria relativística foi iniciada com Fradkin [15] na década de sessenta do mesmo século e desde então vários desenvolvimentos formais e fenomenológicos ocorreram, podendo classificá-los em dois grupos: o formalismo do tempo real e o formalismo do tempo imaginário. Como formalismo de tempo real podemos citar o procedimento de Schwinger [16] que utiliza as integrais de trajetória e o desenvolvimento de Takahashi e Umezawa [17] que usa o método de quantização canônica e é conhecido como Dinâmica de Campos Térmicos (DCT). Tendo tantas formulações, o objetivo físico é o determinante na escolha do procedimento a ser utilizado.

A Dinâmica de Campos Térmicos tem sido apresentada sob várias formas e explorada em diferentes aspectos [9, 18–22]. Nosso interesse no presente trabalho é seguindo o desenvolvimento formal apresentado por Queiroz [23] no caso relativístico estendê-lo ao caso não relativístico de forma a termos uma teoria à temperatura finita matemática e formalmente consistente para aplicação a átomos, moléculas e sólidos. A característica desse desenvolvimento é a construção do espaço de Fock considerando o campo de Schrödinger tanto no espaço direto quanto no espaço dual para, a partir desses espaços, obter os resultados na Dinâmica de Campos Térmicos; é de interesse observar que, no que se refere a sistemas do estado sólido, há texto sobre DCT [18] que trata do formalismo mas não desenvolve de forma sistemática sua relação com o espaço de Fock.

Este trabalho está organizado da seguinte forma: no capítulo 2 introduzimos o formalismo da Dinâmica de Campos Térmicos, descrevendo os sistemas de osciladores bosônicos e fermiônicos com as respectivas transformações de Bogoliubov e operadores

térmicos. Apresentamos também uma representação de dubleto e a forma matricial da transformação de Bogoliubov e encerramos apresentando o campo de Schrödinger neste formalismo.

No capítulo 3, introduziremos os conceitos de segunda quantização e o espaço de Fock, considerando o modelo de mar de Fermi onde podemos criar e aniquilar tanto buracos quanto partículas. Iremos exibir o operador evolução temporal e as descrições de Schrödinger, de Heisenberg e de Interação nesta formulação. Em seguida, apresentamos a teoria de perturbação no espaço de Fock com a linguagem das regras e diagramas de Feynman, chegando até a equação de Dyson.

No capítulo 4 construiremos o espaço dual necessário para a Dinâmica de Campos Térmicos. Para tanto, repetiremos os passos do Capítulo 3 usando, sempre que necessário, as regras de conjugação til.

No capítulo 5, juntaremos as informações dos capítulos anteriores para construir o espaço de Fock duplicado e o operador evolução temporal. Concluiremos construindo o propagador na notação de dubleto e mostraremos como introduzir o efeito da temperatura usando a matriz de Bogoliubov.

No capítulo 6, trataremos alguns sistemas físicos. Inicialmente, estudaremos uma aplicação direta da DCT fazendo uma variação no estado térmico para encontrar uma equação do tipo Hartree-Fock. Em seguida, usaremos a teoria do propagador para tratar dois casos de interesse: aproximação de primeira ordem e a aproximação Hartree-Fock na formulação de Diagramas de Feynman.

No capítulo 7, apresentaremos nossas conclusões e perspectivas.

2 Dinâmica de Campos Térmicos (DCT)

Existem diversos formalismos para se introduzir temperatura em teoria de campos. Neste capítulo, apresentaremos o formalismo da Dinâmica de Campos Térmicos (DCT) desenvolvido inicialmente por Umezawa e Takahashi em 1975 [17, 18], que consiste basicamente em expressar a média estatística [24] de uma variável representada por um operador hermitiano A , como valor esperado deste operador em um estado de vácuo dependente da temperatura.

2.1 Introdução

Para um sistema em equilíbrio térmico, a média estatística de um observável A é dada por

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(Ae^{-\beta H})}{Z(\beta)}, \quad (2.1)$$

onde Tr é o traço, H é o hamiltoniano, $Z(\beta)$ é a função partição, $\beta = \frac{1}{k_b T}$, k_b é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. Seja $|n\rangle$ autoestado de H com autovalor E_n , $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, então podemos escrever

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n|A|n\rangle. \quad (2.2)$$

A proposta da DCT é substituir a média estatística pelo valor esperado em um estado $|0(\beta)\rangle$ chamado de estado térmico. Assim sendo,

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle 0(\beta)|A|0(\beta)\rangle \\ &= \frac{1}{Z(\beta)} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n|A|n\rangle. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Para isso, $|0(\beta)\rangle$ não pode ser um vetor do espaço de Hilbert pois, caso contrário,

$$\begin{aligned} |0(\beta)\rangle &= \sum_n |n\rangle \langle n|0(\beta)\rangle \\ &= \sum_n g_n(\beta) |n\rangle, \end{aligned} \quad (2.4)$$

o que daria

$$\begin{aligned} \langle 0(\beta)|A|0(\beta)\rangle &= \sum_{n,m} g_n^*(\beta) \langle n|A|m\rangle g_m(\beta) \\ &= \frac{1}{Z(\beta)} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n|A|n\rangle, \end{aligned} \quad (2.5)$$

e conseqüentemente

$$g_n^*(\beta)g_m(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)}e^{-\beta E_n}\delta_{nm}, \quad (2.6)$$

que é um absurdo pois funções g_n não satisfazem condições de ortogonalidade deste tipo. A solução para que (2.6) seja satisfeita é considerar $g_n(\beta)$ como sendo um vetor de um espaço de Hilbert \tilde{H} , ou seja, $g_n(\beta) = f_n(\beta)|\tilde{n}\rangle$, com $|\tilde{n}\rangle \in \tilde{H}$. Assim, (2.4) torna-se

$$|0(\beta)\rangle = \sum_n f_n(\beta)|n, \tilde{n}\rangle, \quad (2.7)$$

onde $|n, \tilde{n}\rangle = |n\rangle \otimes |\tilde{n}\rangle$ é uma base do espaço de Hilbert duplicado, $H \otimes \tilde{H}$; e calculando (2.5) com (2.7) encontramos

$$f_n(\beta) = \frac{e^{-\frac{\beta E_n}{2}}}{\sqrt{Z(\beta)}}, \quad (2.8)$$

resultando no estado térmico

$$|0(\beta)\rangle = \sum_n \frac{e^{-\frac{\beta E_n}{2}}}{\sqrt{Z(\beta)}}|n, \tilde{n}\rangle. \quad (2.9)$$

Portanto, para ter um estado térmico satisfazendo (2.3) precisamos duplicar o espaço de Hilbert, ou seja, precisamos criar um sistema que denominaremos dual, cujo espaço de Hilbert é idêntico ao espaço de Hilbert original e os observáveis \tilde{A}_i se relacionam com o sistema original da seguinte forma:

$$(A_i A_j)_{\sim} = \tilde{A}_i \tilde{A}_j, \quad (2.10)$$

$$(cA_i + A_j)_{\sim} = c^* \tilde{A}_i + \tilde{A}_j, \quad (2.11)$$

$$(A_i^\dagger)_{\sim} = \tilde{A}_i^\dagger, \quad (2.12)$$

$$(\tilde{A}_i)_{\sim} = A_i, \quad (2.13)$$

$$[A_i, \tilde{A}_j]_{\sim} = 0, \quad (2.14)$$

onde $[A, B]_{\sim} = AB - BA$ é o comutador. Este formalismo é denominado Dinâmica de Campos Térmicos (DCT). Com o objetivo de elucidar a Dinâmica de Campos Térmicos e introduzir nossa notação, trataremos dois casos específicos: o oscilador harmônico bosônico e o oscilador harmônico fermiônico.

2.2 Oscilador Harmônico Bosônico

O hamiltoniano do oscilador bosônico é

$$H = \omega a^\dagger a, \quad (\hbar = 1), \quad (2.15)$$

onde os operadores de criação e de destruição, a^\dagger e a , respectivamente, satisfazem a álgebra

$$[a, a^\dagger]_{\sim} = 1, \quad (2.16)$$

$$[a, a]_{\sim} = [a^\dagger, a^\dagger]_{\sim} = 0. \quad (2.17)$$

Os autoestados e autovalores de H se relacionam através de:

$$H|n\rangle = n\omega|n\rangle, \quad (2.18)$$

e obedecem as relações

$$a|0\rangle = 0, \quad (2.19)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (2.20)$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (2.21)$$

$$\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = |n\rangle. \quad (2.22)$$

O estado $|0\rangle$ é o estado de vácuo, os estados $|n\rangle$ são ortonormais e o operador número, $N = a^\dagger a$, é tal que

$$N|n\rangle = n|n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.23)$$

Agora, usando as regras (2.10-2.14) obtemos o sistema dual dado pelo Hamiltoniano

$$\tilde{H} = \omega\tilde{a}^\dagger\tilde{a}, \quad (2.24)$$

com os operadores de criação e de destruição obedecendo as relações de comutação

$$[\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger]_- = 1, \quad (2.25)$$

$$[\tilde{a}, \tilde{a}]_- = [\tilde{a}^\dagger, \tilde{a}^\dagger]_- = 0, \quad (2.26)$$

e

$$[a, \tilde{a}]_- = [a^\dagger, \tilde{a}^\dagger]_- = [a, \tilde{a}^\dagger]_- = [a^\dagger, \tilde{a}]_- = 0. \quad (2.27)$$

Tendo o espaço original e o duplicado, podemos reescrever o estado térmico

$$\begin{aligned} |0(\beta)\rangle &= \sum_n \frac{e^{-\frac{\beta\omega n}{2}}}{\sqrt{Z(\beta)}} |n, \tilde{n}\rangle \\ &= \sum_n \frac{e^{-\frac{\beta\omega n}{2}}}{\sqrt{Z(\beta)}} \frac{(a^\dagger)^n (\tilde{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}\sqrt{n!}} |0, \tilde{0}\rangle. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Para encontrar uma expressão para a função partição exigimos que o estado térmico seja normalizado, isto é,

$$\begin{aligned} \langle 0(\beta)|0(\beta)\rangle &= \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{n,m} \langle \tilde{m}, m | e^{-\frac{\beta\omega(m+n)}{2}} |n, \tilde{n}\rangle \\ &= \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{n,m} e^{-\frac{\beta\omega(m+n)}{2}} \delta_{nm} \delta_{nm} \\ &= \frac{1}{Z(\beta)} \sum_n e^{-\beta\omega n} \\ &= 1, \end{aligned} \quad (2.29)$$

e, usando a expansão $\sum_n x^n = \frac{1}{1-x}$, obtemos

$$Z(\beta) = \sum_n (e^{-\beta\omega})^n = \frac{1}{1 - e^{-\beta\omega}}. \quad (2.30)$$

Assim, o estado térmico do oscilador bosônico fica

$$|0(\beta)\rangle = \sqrt{1 - e^{-\beta\omega}} \sum_n \frac{e^{-\frac{n\beta\omega}{2}}}{n!} (a^\dagger)^n (\tilde{a}^\dagger)^n |0, \tilde{0}\rangle. \quad (2.31)$$

Definindo as funções hiperbólicas

$$\begin{aligned} \cosh \theta(\beta) &= \frac{1}{\sqrt{1 - e^{-\beta\omega}}} \equiv u(\beta), \\ \sinh \theta(\beta) &= \frac{e^{-\frac{\beta\omega}{2}}}{\sqrt{1 - e^{-\beta\omega}}} \equiv v(\beta), \end{aligned} \quad (2.32)$$

(2.31) pode ser escrito como

$$|0(\beta)\rangle = \sqrt{1 - e^{-\beta\omega}} e^{e^{-\frac{\beta\omega}{2}} a^\dagger \tilde{a}^\dagger} |0, \tilde{0}\rangle \quad (2.33)$$

$$= \cosh^{-1} \theta(\beta) e^{\tanh \theta(\beta) a^\dagger \tilde{a}^\dagger} |0, \tilde{0}\rangle; \quad (2.34)$$

usando $[\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger] = 1$ e

$$e^{f(\theta) \tilde{a}^\dagger \tilde{a}} |0, \tilde{0}\rangle = e^0 |0, \tilde{0}\rangle = |0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.35)$$

onde $f(\theta)$ é uma função qualquer de θ , segue que

$$|0(\beta)\rangle = e^{\tanh \theta(\beta) a^\dagger \tilde{a}^\dagger} e^{-\ln \cosh \theta(\beta) (\tilde{a} \tilde{a}^\dagger + a^\dagger a)} e^{\tanh \theta(\beta) (-\tilde{a} a)} |0, \tilde{0}\rangle. \quad (2.36)$$

Da identidade de Baker-Campbell-Hausdorff [25],

$$e^{\theta(A+B)} = e^{\tanh \theta(\beta) B} e^{\ln \cosh \theta(\beta) [A, B]_-} e^{\tanh \theta(\beta) A},$$

chamando

$$\begin{aligned} A &= -\tilde{a} a, \\ B &= a^\dagger \tilde{a}^\dagger, \end{aligned} \quad (2.37)$$

temos

$$[A, B]_- = -\tilde{a} \tilde{a}^\dagger - a^\dagger a,$$

e com isso, nosso estado térmico pode ser escrito na forma

$$|0(\beta)\rangle = \mathbb{U}(\beta) |0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.38)$$

onde, $\mathbb{U}(\beta)$ é dada por

$$\mathbb{U}(\beta) = e^{-\theta(\beta) (\tilde{a} a - a^\dagger a^\dagger)} \quad (2.39)$$

$$= e^{-iG(\beta)}, \quad (2.40)$$

com $G(\beta) = -i\theta(\beta)(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)$. A transformação (2.40) é uma transformação que leva um estado $|0, \tilde{0}\rangle$ no estado térmico $|0(\beta)\rangle$. Essa transformação é chamada transformação de Bogoliubov [19].

Tendo a transformação de Bogoliubov, podemos definir os operadores térmicos

$$a(\beta) = \mathbb{U}(\beta)a\mathbb{U}^\dagger(\beta), \quad (2.41)$$

$$a^\dagger(\beta) = \mathbb{U}(\beta)a^\dagger\mathbb{U}^\dagger(\beta), \quad (2.42)$$

$$\tilde{a}(\beta) = \mathbb{U}(\beta)\tilde{a}\mathbb{U}^\dagger(\beta), \quad (2.43)$$

$$\tilde{a}^\dagger(\beta) = \mathbb{U}(\beta)\tilde{a}^\dagger\mathbb{U}^\dagger(\beta). \quad (2.44)$$

Aplicando os operadores (2.41) e (2.43) em (2.38) vem

$$a(\beta)|0(\beta)\rangle = \mathbb{U}(\beta)a\mathbb{U}^\dagger(\beta)\mathbb{U}(\beta)|0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.45)$$

$$= \mathbb{U}(\beta)a|0, \tilde{0}\rangle = 0, \quad (2.46)$$

e

$$\tilde{a}(\beta)|0(\beta)\rangle = 0, \quad (2.47)$$

mostrando que o estado $|0(\beta)\rangle$ é o estado de vácuo térmico dos operadores $a(\beta)$ e $\tilde{a}(\beta)$.

Usando a identidade

$$e^{-iB}Ae^{iB} = A + (-i)[B, A]_- + \frac{(-i)^2}{2!}[B, [B, A]_-]_- + \dots, \quad (2.48)$$

e as relações de comutação

$$[G, a]_- = -i\theta(\beta)\tilde{a}^\dagger, \quad (2.49)$$

$$[G, \tilde{a}]_- = -i\theta(\beta)a^\dagger, \quad (2.50)$$

$$[G, a^\dagger]_- = -i\theta(\beta)\tilde{a}, \quad (2.51)$$

$$[G, \tilde{a}^\dagger]_- = -i\theta(\beta)a, \quad (2.52)$$

as equações (2.41)-(2.44) podem ser reescritas como

$$a(\beta) = u(\beta)a - v(\beta)\tilde{a}^\dagger, \quad (2.53)$$

$$a^\dagger(\beta) = u(\beta)a^\dagger - v(\beta)\tilde{a}, \quad (2.54)$$

$$\tilde{a}(\beta) = u(\beta)\tilde{a} - v(\beta)a^\dagger, \quad (2.55)$$

$$\tilde{a}^\dagger(\beta) = u(\beta)\tilde{a}^\dagger - v(\beta)a, \quad (2.56)$$

e as inversas

$$a = u(\beta)a(\beta) + v(\beta)\tilde{a}^\dagger(\beta), \quad (2.57)$$

$$a^\dagger = u(\beta)a^\dagger(\beta) + v(\beta)\tilde{a}(\beta), \quad (2.58)$$

$$\tilde{a} = u(\beta)\tilde{a}(\beta) + v(\beta)a^\dagger(\beta), \quad (2.59)$$

$$\tilde{a}^\dagger = u(\beta)\tilde{a}^\dagger(\beta) + v(\beta)a(\beta). \quad (2.60)$$

Concluindo esta seção, calculemos o valor médio do operador número, ou seja,

$$\begin{aligned}\langle N \rangle_\beta &= \langle 0(\beta) | a^\dagger a | 0(\beta) \rangle \\ &= v^2(\beta) \\ &= \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1}.\end{aligned}\tag{2.61}$$

onde foram usadas (2.57), (2.58) e (2.46). O valor médio do operador número é exatamente a função distribuição de Bose-Einstein para um sistema em equilíbrio térmico, conforme esperado.

2.3 Oscilador Harmônico Fermiônico

O hamiltoniano do oscilador fermiônico é

$$H = \omega a^\dagger a, \quad \hbar = 1\tag{2.62}$$

com os operadores a^\dagger e a satisfazendo a álgebra

$$[a, a^\dagger]_+ = 1,\tag{2.63}$$

$$[a, a]_+ = [a^\dagger, a^\dagger]_+ = 0,\tag{2.64}$$

onde $[A, B]_+ = AB + BA$ é o anticomutador. Com isso, temos que $a|0\rangle = 0$, $a|1\rangle = |0\rangle$, $a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$ e $a^\dagger|1\rangle = 0$, de modo que o espaço de Hilbert é constituído apenas pelos vetores $|0\rangle$ e $|1\rangle$. A equação de autovalor para o hamiltoniano é dada por

$$H|0\rangle = 0,\tag{2.65}$$

$$H|1\rangle = \omega|1\rangle.\tag{2.66}$$

Para construir a DCT desse sistema, introduzimos os operadores til obedecendo a álgebra:

$$[\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger]_+ = 1,\tag{2.67}$$

$$[\tilde{a}, \tilde{a}]_+ = [\tilde{a}^\dagger, \tilde{a}^\dagger]_+ = 0,\tag{2.68}$$

e o vácuo térmico fica

$$\begin{aligned}|0(\beta)\rangle &= \sum_n \frac{e^{-\frac{\beta\omega n}{2}}}{\sqrt{Z(\beta)}} |n, \tilde{n}\rangle, \\ &= \frac{1}{\sqrt{Z(\beta)}} (|0, \tilde{0}\rangle + e^{-\frac{\beta\omega}{2}} |1, \tilde{1}\rangle), \\ &= \frac{1}{\sqrt{Z(\beta)}} (1 + e^{-\frac{\beta\omega}{2}} a^\dagger \tilde{a}^\dagger) |0, \tilde{0}\rangle, \\ &= \frac{1}{\sqrt{1 + e^{-\beta\omega}}} (1 + e^{-\frac{\beta\omega}{2}} a^\dagger \tilde{a}^\dagger) |0, \tilde{0}\rangle,\end{aligned}\tag{2.69}$$

onde consideramos $Z(\beta) = 1 + e^{-\beta\omega}$ para que $|0(\beta)\rangle$ seja normalizado.

Definindo as funções

$$u(\beta) = \cos \theta(\beta) = \frac{1}{\sqrt{1 + e^{-\beta\omega}}}, \quad (2.70)$$

$$v(\beta) = \sin \theta(\beta) = \frac{1}{\sqrt{1 + e^{\beta\omega}}} \quad (2.71)$$

e usando as propriedades

$$(-1)^n |0, \tilde{0}\rangle = (\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)^{2n} |0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.72)$$

$$(-1)^{n+1} |1, \tilde{1}\rangle = (\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)^{2n+1} |0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.73)$$

podemos escrever de (2.69) a transformação de Bogoliubov neste caso como

$$|0(\beta)\rangle = (\cos \theta + \sin \theta a^\dagger \tilde{a}^\dagger) |0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.74)$$

$$= e^{-\theta(\beta)(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)} |0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.75)$$

$$= \mathbb{U}(\beta) |0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.76)$$

onde $\mathbb{U}(\beta) = e^{-iG(\beta)}$ com $G(\beta) = -i\theta(\beta)(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)$. Os operadores térmicos são definidos pelas relações:

$$a(\beta) = \mathbb{U}(\beta) a \mathbb{U}^\dagger(\beta), \quad (2.77)$$

$$a^\dagger(\beta) = \mathbb{U}(\beta) a^\dagger \mathbb{U}^\dagger(\beta), \quad (2.78)$$

$$\tilde{a}(\beta) = \mathbb{U}(\beta) \tilde{a} \mathbb{U}^\dagger(\beta), \quad (2.79)$$

$$\tilde{a}^\dagger(\beta) = \mathbb{U}(\beta) \tilde{a}^\dagger \mathbb{U}^\dagger(\beta). \quad (2.80)$$

Aplicando os operadores (2.77) e (2.79) em (2.76) vem

$$a(\beta) |0(\beta)\rangle = \mathbb{U}(\beta) a \mathbb{U}^\dagger(\beta) \mathbb{U}(\beta) |0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.81)$$

$$= \mathbb{U}(\beta) a |0, \tilde{0}\rangle = 0, \quad (2.82)$$

e

$$\tilde{a}(\beta) |0(\beta)\rangle = 0; \quad (2.83)$$

então $|0(\beta)\rangle$ é o estado de vácuo térmico fermiônico. Usando a identidade (2.48) e as relações de comutação

$$[G, a]_- = -i\theta(\beta) \tilde{a}^\dagger, \quad (2.84)$$

$$[G, \tilde{a}]_- = i\theta(\beta) a^\dagger, \quad (2.85)$$

$$[G, a^\dagger]_- = -i\theta(\beta) \tilde{a}, \quad (2.86)$$

$$[G, \tilde{a}^\dagger]_- = i\theta(\beta) a, \quad (2.87)$$

as equações (2.77)-(2.80) podem ser reescritas como

$$a(\beta) = u(\beta)a - v(\beta)\tilde{a}^\dagger, \quad (2.88)$$

$$a^\dagger(\beta) = u(\beta)a^\dagger - v(\beta)\tilde{a}, \quad (2.89)$$

$$\tilde{a}(\beta) = u(\beta)\tilde{a} + v(\beta)a^\dagger, \quad (2.90)$$

$$\tilde{a}^\dagger(\beta) = u(\beta)\tilde{a}^\dagger + v(\beta)a, \quad (2.91)$$

e as inversas

$$a = u(\beta)a(\beta) + v(\beta)\tilde{a}^\dagger(\beta), \quad (2.92)$$

$$a^\dagger = u(\beta)a^\dagger(\beta) + v(\beta)\tilde{a}(\beta), \quad (2.93)$$

$$\tilde{a} = u(\beta)\tilde{a}(\beta) - v(\beta)a^\dagger(\beta), \quad (2.94)$$

$$\tilde{a}^\dagger = u(\beta)\tilde{a}^\dagger(\beta) - v(\beta)a(\beta). \quad (2.95)$$

Com isso, o valor médio do operador número fica

$$\begin{aligned} \langle N \rangle_\beta &= \langle 0(\beta) | a^\dagger a | 0(\beta) \rangle \\ &= v^2(\beta) \\ &= \frac{1}{1 + e^{\beta\omega}}, \end{aligned} \quad (2.96)$$

que é a função distribuição para férmions.

2.4 Notação Matricial

As equações (2.53)-(2.56) e (2.88)-(2.91), escritas em notação matricial [19, 20], são

$$\begin{pmatrix} a(\beta) \\ \tilde{a}^\dagger(\beta) \end{pmatrix} = \mathbb{B}(\beta) \begin{pmatrix} a \\ \tilde{a}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.97)$$

e

$$\begin{pmatrix} a^\dagger(\beta) \\ \tilde{a}(\beta) \end{pmatrix} = \mathbb{B}(\beta) \begin{pmatrix} a^\dagger \\ \tilde{a} \end{pmatrix}, \quad (2.98)$$

onde

$$\mathbb{B}(\beta) = \begin{pmatrix} u(\beta) & -v(\beta) \\ -\sigma v(\beta) & u(\beta) \end{pmatrix}, \quad (2.99)$$

com $\sigma = 1$ no caso de bósons e $\sigma = -1$ no caso de férmions.

Definindo um operador A , na forma de dubleto, temos:

$$\underline{A}^i = \begin{pmatrix} A^i \\ \tilde{A}^{i\dagger} \end{pmatrix}, \quad (2.100)$$

onde o índice $i = 1, 2$ (sendo $A^1 = A$ e $A^2 = A^\dagger$) e sua transposição til definida por

$$\underline{A}^{i\dagger} = (A^{i\dagger}, -\sigma \tilde{A}^i). \quad (2.101)$$

Para o operador A sendo o operador de criação, $A^1 = a$ e $A^2 = a^\dagger$, temos

$$\underline{a}^i = \begin{pmatrix} a^i \\ \tilde{a}^{i\dagger} \end{pmatrix}, \quad (2.102)$$

e

$$\underline{a}^{i\dagger} = (a^{i\dagger}, -\sigma\tilde{a}^i). \quad (2.103)$$

Com isso, conseguimos escrever as relações de comutação e anticomutação como

$$[\underline{a}^i, \underline{a}^{j\dagger}]_{\pm} = \delta^{ij}, \quad (2.104)$$

com $i, j = 1, 2$, e as equações (2.97) e (2.98) tornam-se

$$\underline{a}^i(\beta) = \mathbb{B}(\beta)\underline{a}^i \quad (2.105)$$

ou

$$\underline{a}^{i\dagger}(\beta) = \underline{a}^{i\dagger}\mathbb{B}^{-1}(\beta), \quad (2.106)$$

cuja transformação inversa é

$$\underline{a}^i = \mathbb{B}^{-1}(\beta)\underline{a}^i(\beta) \quad (2.107)$$

ou

$$\underline{a}^{i\dagger} = \underline{a}^{i\dagger}(\beta)\mathbb{B}(\beta), \quad (2.108)$$

com

$$\mathbb{B}^{-1}(\beta) = \begin{pmatrix} u(\beta) & v(\beta) \\ \sigma v(\beta) & u(\beta) \end{pmatrix}. \quad (2.109)$$

Essas são as transformações de Bogoliubov para dubletos [18, 19].

Com essa notação, o operador número é definido como

$$\mathbf{N} = \underline{(a^\dagger)(a^\dagger)^\dagger} = \begin{pmatrix} a^\dagger a & -\sigma a^\dagger \tilde{a}^\dagger \\ \tilde{a} a & -\sigma \tilde{a} \tilde{a}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.110)$$

e seu valor esperado no vácuo térmico fica

$$\langle \mathbf{N} \rangle_\beta = \begin{pmatrix} \langle 0(\beta) | a^\dagger a | 0(\beta) \rangle & -\sigma \langle 0(\beta) | a^\dagger \tilde{a}^\dagger | 0(\beta) \rangle \\ \langle 0(\beta) | \tilde{a} a | 0(\beta) \rangle & -\sigma \langle 0(\beta) | \tilde{a} \tilde{a}^\dagger | 0(\beta) \rangle \end{pmatrix}, \quad (2.111)$$

onde apenas o primeiro elemento tem significado físico e representa a função distribuição para um sistema em equilíbrio, como em (2.61) no caso dos bósons e (2.96) no caso dos férmions.

Por outro lado, podemos escrever a equação (2.111) como

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{N} \rangle_\beta &= \langle \underline{(a^\dagger)(a^\dagger)^\dagger} \rangle_\beta \\ &= \mathbb{B}^{-1}(\beta) \langle \underline{(a^\dagger)(a^\dagger)^\dagger} \rangle \mathbb{B}(\beta) \\ &= \begin{pmatrix} v^2(\beta) & -\sigma v(\beta)u(\beta) \\ v(\beta)u(\beta) & -\sigma u^2(\beta) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.112)$$

Como as equações (2.111) e (2.112) são equivalentes, temos que apenas o primeiro termo de (2.111) terá significado físico. Como esperado, este último resultado também está de acordo com as expressões (2.61) e (2.96).

2.5 Campo de Schrödinger

Em uma teoria de campo local a Lagrangiana pode ser escrita em função do campo e de suas derivadas. Desse modo, no caso não relativístico, nós temos a ação [26]

$$W = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(\Psi, \partial_i \Psi, \dot{\Psi}, t) dt, \quad (2.113)$$

onde $i = 1, 2$ e 3 e

$$\mathcal{L} = \int L(\Psi(\mathbf{x}, t), \partial_i \Psi(\mathbf{x}, t), \dot{\Psi}(\mathbf{x}, t), t) d^3x, \quad (2.114)$$

sendo \mathcal{L} a Lagrangiana, L a densidade Lagrangiana, $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x^i}$ e x^i uma das componentes de \mathbf{x} . Usando o cálculo variacional e a condição $\delta\Psi = 0$, para t_1 e t_2 , obtemos [26]

$$\frac{\partial L}{\partial \Psi} - \partial_i \frac{\partial L}{\partial (\partial_i \Psi)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{\Psi}} = 0, \quad (2.115)$$

e de forma análoga

$$\frac{\partial L}{\partial \Psi^*} - \partial_i \frac{\partial L}{\partial (\partial_i \Psi^*)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{\Psi}^*} = 0. \quad (2.116)$$

Para a densidade Lagrangiana dada por:

$$L = i\hbar\Psi^*\dot{\Psi} - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_i\Psi^*\partial_i\Psi - V\Psi^*\Psi, \quad (2.117)$$

onde m é a massa e V o potencial, obtemos da equação (2.116) que

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi - V\Psi = -i\hbar\dot{\Psi}, \quad (2.118)$$

que é a equação de Schrödinger para o Ψ com momento canonicamente conjugado dado por

$$\Pi(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\Psi}} = i\hbar\Psi^*(\mathbf{x}, t). \quad (2.119)$$

Com isso, obtemos o hamiltoniano do campo de matéria como sendo

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \int \Pi(\mathbf{x}, t)\dot{\Psi}(\mathbf{x}, t)d^3x - \mathcal{L} \\ &= \int (i\hbar\Psi^*\dot{\Psi} - i\hbar\Psi^*\dot{\Psi} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\Psi^*\nabla\Psi + V\Psi^*\Psi)d^3x \\ &= \int (\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\Psi^*\nabla\Psi + V\Psi^*\Psi)d^3x, \end{aligned} \quad (2.120)$$

que tem relação com o hamiltoniano de uma partícula

$$H = \frac{P^2}{2m} + V. \quad (2.121)$$

A DCT exige a criação do sistema til; então usando as regras de conjugação til, temos

$$\tilde{\mathcal{L}}(\Psi, \partial_i \Psi, \dot{\Psi}, t) = \mathcal{L}^*(\tilde{\Psi}, \partial_i \tilde{\Psi}, \dot{\tilde{\Psi}}, t), \quad (2.122)$$

o que dá:

$$\tilde{L} = -i\hbar\tilde{\Psi}^*\dot{\tilde{\Psi}} - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_i\tilde{\Psi}^*\partial_i\tilde{\Psi} - V\tilde{\Psi}^*\tilde{\Psi}. \quad (2.123)$$

Substituindo na equação de Lagrange

$$\frac{\partial\tilde{L}}{\partial\tilde{\Psi}^*} - \partial_i\frac{\partial\tilde{L}}{\partial(\partial_i\tilde{\Psi}^*)} - \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial\tilde{L}}{\partial\dot{\tilde{\Psi}}^*} = 0, \quad (2.124)$$

obtemos:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\tilde{\Psi} - V\tilde{\Psi} = i\hbar\dot{\tilde{\Psi}}, \quad (2.125)$$

a equação de Schrödinger para $\tilde{\Psi}$ com momento canonicamente conjugado:

$$\tilde{\Pi}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial\tilde{L}}{\partial\dot{\tilde{\Psi}}} = -i\hbar\tilde{\Psi}^*(\mathbf{x}, t), \quad (2.126)$$

dando:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} &= \int \tilde{\Pi}(\mathbf{x}, t)\dot{\tilde{\Psi}}(\mathbf{x}, t)d^3x - \tilde{\mathcal{L}} \\ &= \int (-i\hbar\tilde{\Psi}^*\dot{\tilde{\Psi}} + i\hbar\tilde{\Psi}^*\dot{\tilde{\Psi}} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\tilde{\Psi}^*\nabla\tilde{\Psi} + V\tilde{\Psi}^*\tilde{\Psi})d^3x \\ &= \int (\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\tilde{\Psi}^*\nabla\tilde{\Psi} + V\tilde{\Psi}^*\tilde{\Psi})d^3x, \end{aligned} \quad (2.127)$$

que é o hamiltoniano do campo de matéria denominado dual.

A descrição do sistema duplicado formado pelo campo original $\Psi(\mathbf{x}, t)$ e seu dual $\tilde{\Psi}(\mathbf{x}, t)$ é dada pela densidade Lagrangiana

$$\begin{aligned} \hat{L} &= L - \tilde{L} \\ &= i\hbar\Psi^*\dot{\Psi} - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_i\Psi^*\partial_i\Psi - V\Psi^*\Psi + i\hbar\tilde{\Psi}^*\dot{\tilde{\Psi}} + \frac{\hbar^2}{2m}\partial_i\tilde{\Psi}^*\partial_i\tilde{\Psi} + V\tilde{\Psi}^*\tilde{\Psi}, \end{aligned} \quad (2.128)$$

e sua evolução temporal, pelo hamiltoniano

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \mathcal{H} - \tilde{\mathcal{H}} \\ &= \int (\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\Psi^*\nabla\Psi + V\Psi^*\Psi)d^3x - \int (\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\tilde{\Psi}^*\nabla\tilde{\Psi} + V\tilde{\Psi}^*\tilde{\Psi})d^3x. \end{aligned} \quad (2.129)$$

3 Segunda Quantização e o Campo de Schrödinger

A segunda quantização e o espaço de Fock são elementos essenciais para o tratamento de uma teoria de muitas partículas. Inicialmente, apresentaremos o espaço de Fock de forma geral e, em seguida, trataremos o caso da equação de Schrödinger discutindo a função de Green (ou propagador) e os diagramas de Feynman.

Existem diversas razões para se estudar funções de Green. Por exemplo, as regras de Feynman para encontrar a contribuição de n -ésimo ordem da teoria de perturbação são mais simples para a função de Green do que para outras combinações dos operadores de campo. Nosso desenvolvimento seguirá principalmente as referências [12, 27].

3.1 Espaço de Fock

O sistema de uma partícula tem seus estados na representação das coordenadas descritos por funções $\phi_1(\mathbf{x})$ pertencentes ao espaço de Hilbert \mathcal{H}_1 . O estado de n partículas é descrito por funções $\phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$, tais que

$$\phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \in \mathcal{H}^{\otimes n} = \underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1}_{n \text{ vezes}}. \quad (3.1)$$

Em um sistema que contém n partículas idênticas, seus estados devem ser ou simétricos ou antissimétricos em relação a permutação de duas partículas. Os estados simétricos, com r significando um dos elementos do grupo de permutação, dados por

$$\phi_n^+ = S_n^+ \phi_n = \frac{1}{n!} \sum_r \phi_n(\mathbf{x}_{r_1}, \dots, \mathbf{x}_{r_n}), \quad (3.2)$$

descrevem bósons, e os estados antissimétricos

$$\phi_n^- = S_n^- \phi_n = \frac{1}{n!} \sum_r (-1)^r \phi_n(\mathbf{x}_{r_1}, \dots, \mathbf{x}_{r_n}), \quad (3.3)$$

descrevem férmions. O operador simetrizador, S_n^+ , e o antisimetrizador, S_n^- , têm como propriedade que $(S_n^\pm)^2 = S_n^\pm$, ou seja, são operadores de projeção. Com isso, definimos o espaço de Hilbert simetrizado (antissimetrizado) como

$$\mathcal{H}_n^\pm = S_n^\pm \mathcal{H}^{\otimes n}. \quad (3.4)$$

Se um sistema não tiver um número fixo de partículas, seu estado será descrito como uma superposição dos estados correspondentes a cada valor possível de n . Para tanto, define-se

o espaço de Fock:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}^\pm &= \bigoplus_{i=0}^{\infty} \mathcal{H}_i^\pm \\ &= (\mathcal{H}_0) \oplus (\mathcal{H}_1) \oplus (\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1)_2^\pm \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_n^\pm \oplus \dots,\end{aligned}\quad (3.5)$$

onde o espaço (\mathcal{H}_0) é o espaço que descreve zero partículas (vácuo).

O estado do espaço de Fock é dado por

$$\begin{aligned}|\Phi\rangle &= |\phi_0\rangle \oplus |\phi_1\rangle \oplus |\phi_2\rangle \oplus \dots \oplus |\phi_n\rangle \oplus \dots \\ &= |\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n, \dots\rangle \in \mathcal{F},\end{aligned}\quad (3.6)$$

com $\phi_n \in \mathcal{H}_n$ e, por simplicidade de notação, deixamos de indicar o sinal \pm . Definimos o produto escalar de dois estados do espaço de Fock como

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \phi_n | \psi_n \rangle. \quad (3.7)$$

e exigimos que $\langle \Phi | \Phi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \phi_n | \phi_n \rangle < \infty$. Definimos também, o operador de criação de uma partícula no estado $\xi \in \mathcal{H}_1$, por [27]

$$a^\dagger(\xi)\phi_0 = \xi, \quad (3.8)$$

$$(a^\dagger(\xi)\Phi)_n = \sqrt{n}S_n^\pm(\xi \otimes \phi_{n-1}), \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.9)$$

onde n é o número de partículas. Junto dos operadores de criação, definimos o chamado operador de campo $a^\dagger(\mathbf{x})$, que é um funcional a valor operador que expressa o mapeamento $\xi \rightarrow a^\dagger(\xi)$ da seguinte forma [27]:

$$a^\dagger(\xi) = \int d^3x a^\dagger(\mathbf{x})\xi(\mathbf{x}). \quad (3.10)$$

Se consideramos o conjunto dos vetores $\{\xi_j\}$ que formam uma base ortonormal completa de \mathcal{H}_1 , e $\{\xi_j^\dagger\}$ seus conjugados, então podemos escrever os operadores de campo sendo a soma [27]

$$a^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_j a^\dagger(\xi_j)\xi_j^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_j a^\dagger(\xi_j^\dagger)\xi_j(\mathbf{x}), \quad (3.11)$$

os quais não dependem da base.

Definimos o operador de destruição como [27]

$$a(\xi) = (a^\dagger(\xi))^\dagger \quad (3.12)$$

com

$$a(\xi)\phi_0 = 0, \quad (3.13)$$

$$(a(\xi)\Phi)_n(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \sqrt{n+1} \int d^3x \xi^\dagger(\mathbf{x})\phi_{n+1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n), \quad (3.14)$$

onde $n = 1, 2, \dots$ e $\xi \in \mathcal{H}_1$. Esse operador destrói uma partícula no estado ξ . Assim, os operadores de campo correspondentes ao operador aniquilação são [27]

$$a(\xi) = \int d^3x \xi^\dagger(\mathbf{x})a(\mathbf{x}), \quad (3.15)$$

$$a(\mathbf{x}) = \sum_j \xi_j(\mathbf{x})a(\xi_j) = \sum_j \xi_j^\dagger(\mathbf{x})a(\xi_j^\dagger). \quad (3.16)$$

É possível expressar um operador arbitrário no espaço de Fock em termos dos operadores de criação e aniquilação; por exemplo, o operador número de partículas pode ser definido como

$$\mathbf{N} = \int d^3x a^\dagger(\mathbf{x})a(\mathbf{x}) = \sum_j a^\dagger(\xi_j)a(\xi_j), \quad (3.17)$$

onde estamos escrevendo em negrito os operadores que atuam no espaço de Fock. Esse operador é tal que

$$(\mathbf{N}\Phi)_n = nS_n^\pm \phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = n(\Phi)_n, \quad (3.18)$$

não muda o número de partículas, e todos os operadores \mathbf{A} que comutam com ele,

$$[\mathbf{A}, \mathbf{N}] = 0, \quad (3.19)$$

também não alteram o número de partículas do sistema.

Da mesma forma, qualquer operador $A(\mathbf{x})$ de uma partícula, limitado no espaço de Hilbert, pode ser associado a um operador no espaço de Fock segundo a fórmula [27]

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \int d^3x a^\dagger(\mathbf{x})A(\mathbf{x})a(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{jk} (\xi_j, A(\mathbf{x})\xi_k) a^\dagger(\xi_j)a(\xi_k), \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde (\cdot, \cdot) representa o produto escalar em \mathcal{H}_1 . Esse operador é tal que

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}\Phi)_n &= nS_n^\pm A(\mathbf{x}_1)\phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \\ &= \sum_{m=1}^n A(\mathbf{x}_m)\phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n). \end{aligned} \quad (3.21)$$

De forma análoga, podemos definir um operador de duas partículas no espaço de Fock

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \int d^3x d^3x' a^\dagger(\mathbf{x}')a^\dagger(\mathbf{x})V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')a(\mathbf{x})a(\mathbf{x}') \\ &= \sum_{jkj'k'} (\xi_j\xi_k, V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\xi_{k'}\xi_{j'}) a^\dagger(\xi_j)a^\dagger(\xi_k)a(\xi_{k'})a(\xi_{j'}), \end{aligned} \quad (3.22)$$

aplicando no setor de n partículas como:

$$(\mathbf{V}\Phi)_n = \sum_{j < k} V(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k)\phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n). \quad (3.23)$$

As expressões (3.20) e (3.22) são formalmente semelhantes aos elementos de matriz da mecânica quântica e se apresentam na forma normalmente ordenada, na qual os operadores

de aniquilação aparecem à direita dos operadores de criação. Portanto, o valor esperado no vácuo dos operadores \mathbf{A} e \mathbf{V} é zero. Este ordenamento normal, também chamado de ordenamento de Wick, aparecerá diversas vezes neste trabalho.

Uma das propriedades mais importantes dos operadores de criação e aniquilação são suas relações de comutação no caso dos bósons ou anticomutação no caso dos férmions. Usando as definições (3.9) e (3.14), obtemos

$$[a(\xi_1), a^\dagger(\xi_2)]_{\pm} \Phi = (\xi_1, \xi_2) \Phi, \quad (3.24)$$

$$[a(\xi_1), a(\xi_2)]_{\pm} \Phi = 0 = [a^\dagger(\xi_1), a^\dagger(\xi_2)]_{\pm} \Phi. \quad (3.25)$$

As relações (3.24 - 3.25) são equivalentes às relações

$$[a(\mathbf{x}_1), a^\dagger(\mathbf{x}_2)]_{\pm} = \delta(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \quad (3.26)$$

$$[a(\mathbf{x}_1), a(\mathbf{x}_2)]_{\pm} = 0 = [a^\dagger(\mathbf{x}_1), a^\dagger(\mathbf{x}_2)]_{\pm}, \quad (3.27)$$

para os operadores de campo.

3.2 Segunda Quantização

A partir dessa seção iremos considerar apenas o caso de férmions não relativísticos. A dinâmica de uma partícula é dada pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \xi = H\xi. \quad (3.28)$$

Considerando o espaço fundamental de um sistema de N partículas, podemos usar o conceito de mar de Fermi [24] e dividir o espectro do hamiltoniano em duas partes: sendo ϵ_F o último nível de energia do mar de Fermi ou, no caso de átomos e moléculas, o último orbital ocupado no estado fundamental, uma parte correspondente aos estados no mar de Fermi ξ_- (estados com $\epsilon < \epsilon_F$) e outra "fora" do mar de Fermi ξ_+ (estados com $\epsilon > \epsilon_F$). Assim, podemos considerar o espaço de Hilbert de uma partícula decomposto como

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-, \quad (3.29)$$

onde \mathcal{H}_+ corresponde ao subespaço com $\epsilon > \epsilon_F$ e \mathcal{H}_- ao subespaço com $\epsilon < \epsilon_F$. Esta decomposição espectral pode ser levada aos operadores de criação e aniquilação, resultando em

$$\begin{aligned} a^\dagger(\xi) &= b^\dagger(\xi_+) + d^\dagger(\xi_-), \\ a(\xi) &= b(\xi_+) + d(\xi_-), \end{aligned} \quad (3.30)$$

estando b e b^\dagger associados ao espectro com $\epsilon > \epsilon_F$, e d e d^\dagger ao espectro com $\epsilon < \epsilon_F$, onde estamos assumindo

$$b(\xi_-) = 0 = d(\xi_+) \quad (3.31)$$

com $\xi_{\pm} \in \mathcal{H}_{\pm}$. Como \mathcal{H}_{\pm} são subespaços invariantes com respeito a H , o operador hamiltoniano no espaço de Fock corresponderá a

$$\mathbf{H}' = \sum_{jk > F} [(f_j, H(\mathbf{x})f_k)b^{\dagger}(f_j)b(f_k)] + \sum_{jk < F} [(g_j, H(\mathbf{x})g_k)d^{\dagger}(g_j)d(g_k)], \quad (3.32)$$

onde f_j é uma base de \mathcal{H}_+ , g_j uma base de \mathcal{H}_- e f_F indica o último nível do mar de Fermi ou último orbital ocupado do estado fundamental no caso de átomos e moléculas. Para ficar coerente com a idéia de que a absorção de energia pelo sistema ocorre de dois modos: ou pela excitação de um quantum adicional ou pela aniquilação de um buraco (de partícula) é conveniente trocar os papéis dos operadores d e d^{\dagger} , mudando simultaneamente a dependência em ξ , ou seja,

$$\begin{aligned} d^{\dagger}(\xi_-) &\rightarrow d(\xi_-^{\dagger}), \\ d(\xi_-) &\rightarrow d^{\dagger}(\xi_-^{\dagger}), \end{aligned} \quad (3.33)$$

que passam assim a criar e destruir buracos. Então, teremos

$$d^{\dagger}(\xi_-^{\dagger}) = \int d^3x d^{\dagger}(\mathbf{x})\xi_-^{\dagger}(\mathbf{x}), \quad (3.34)$$

$$d(\xi_-^{\dagger}) = \int d^3x \xi_-^{\dagger}(\mathbf{x})d(\mathbf{x}), \quad (3.35)$$

e

$$b^{\dagger}(\xi_+) = \int d^3x b^{\dagger}(\mathbf{x})\xi_+(\mathbf{x}), \quad (3.36)$$

$$b(\xi_+) = \int d^3x \xi_+(\mathbf{x})b(\mathbf{x}), \quad (3.37)$$

onde foram usadas as equações (3.10) e (3.15). Com esta mudança, os operadores de criação e aniquilação ficam

$$\Psi^{\dagger}(\xi) = b^{\dagger}(\xi_+) + d(\xi_-^{\dagger}), \quad (3.38)$$

$$\Psi(\xi) = b(\xi_+) + d^{\dagger}(\xi_-^{\dagger}), \quad (3.39)$$

onde b^{\dagger} e b criam e destroem partículas acima do mar de Fermi ($\epsilon > \epsilon_F$), e d^{\dagger} e d criam e destroem buracos (falta de partícula) dentro do mar de Fermi ($\epsilon < \epsilon_F$). Em concordância com as relações de anticomutação, temos

$$[\Psi(\xi), \Psi^{\dagger}(\xi')]_+ = (\xi, \xi'), \quad (3.40)$$

$$[\Psi(\xi), \Psi(\xi')]_+ = 0 = [\Psi^{\dagger}(\xi), \Psi^{\dagger}(\xi')]_+. \quad (3.41)$$

As expressões (3.38 - 3.39) definem os operadores na formulação de segunda quantização e também podem ser escritas como

$$\Psi^{\dagger}(\xi) = \Psi^{(+)\dagger}(\xi_+) + \Psi^{(-)}(\xi_-), \quad (3.42)$$

$$\Psi(\xi) = \Psi^{(+)}(\xi_+) + \Psi^{(-)\dagger}(\xi_-), \quad (3.43)$$

sendo $\Psi^{(+)}$ o operador que aniquila partícula e $\Psi^{(-)}$ o operador que aniquila buraco. Consequentemente, os operadores $\Psi^{(+)}$ e $\Psi^{(-)}$ devem satisfazer as relações de anticomutação

$$[\Psi^{(+)}(\xi), \Psi^{(+)\dagger}(\xi')]_+ = (\xi_+, \xi'_+), \quad [\Psi^{(+)}(\xi), \Psi^{(+)}(\xi')]_+ = 0, \quad (3.44)$$

$$[\Psi^{(-)}(\xi), \Psi^{(-)\dagger}(\xi')]_+ = (\xi'_-, \xi_-), \quad [\Psi^{(-)}(\xi), \Psi^{(-)}(\xi')]_+ = 0 \quad (3.45)$$

e as demais nulas. Analogamente a (3.10 - 3.11) e (3.15 - 3.16), podemos introduzir os operadores de campo

$$\Psi(\xi) = \int d^3x \Psi(\mathbf{x}) \xi^\dagger(\mathbf{x}), \quad (3.46)$$

$$\Psi^\dagger(\xi) = \int d^3x \xi(\mathbf{x}) \Psi^\dagger(\mathbf{x}). \quad (3.47)$$

ou

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_j \Psi(\xi_j) \xi_j^\dagger(\mathbf{x}), \quad (3.48)$$

$$\Psi^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_j \xi_j(\mathbf{x}) \Psi^\dagger(\xi_j). \quad (3.49)$$

Com a alteração (3.33), o hamiltoniano no espaço de Fock (3.32) fica

$$\mathbf{H} = \sum_{jk>F} (f_j, H(\mathbf{x})f_k) b^\dagger(f_j) b(f_k) - \sum_{jk<F} (g_j, H(\mathbf{x})g_k) d^\dagger(g_k) d(g_j), \quad (3.50)$$

a menos de uma constante aditiva que associamos, no caso de sólidos, ao mar de Fermi. Criação de buracos reduz a energia, enquanto criação de partículas aumenta a energia. No entanto, se o número de férmions é fixado, então partículas e buracos ocorrem em par e cada par de partícula-buraco tem energia positiva. Esta é a representação do hamiltoniano H em segunda quantização, [12].

3.3 Evolução Temporal e as Descrições da Teoria Quântica

Construiremos nesta seção o operador evolução temporal no espaço de Fock. A dinâmica de uma partícula no espaço de Hilbert \mathcal{H}_1 é dada pela equação de Schrödinger (3.28), cuja solução é dada pela transformação unitária

$$\xi(t) = e^{-iHt/\hbar} \xi(0) = U\xi, \quad (3.51)$$

onde $\xi \in \mathcal{H}_1$. Tomando as funções $\xi(t)$ como função teste dos operadores de campo, temos:

$$\begin{aligned} a^\dagger(\xi(t))\Phi &= a^\dagger(U\xi)\Phi, \\ a(\xi(t))\Phi &= a(U\xi)\Phi. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Como o espaço de Fock é composto por todos os espaços de Hilbert de n partículas, é conveniente definir o operador unitário \mathbf{U} , tal que [27]

$$\begin{aligned} (\mathbf{U}\Phi)_n &= (\otimes_{j=1}^n U)\phi_n \\ &= S_n^\pm(U\xi_1 \otimes U\xi_2 \otimes \dots \otimes U\xi_n), \end{aligned} \quad (3.53)$$

onde

$$\phi_n = S_n^\pm(\xi_1 \otimes \xi_2 \otimes \dots \otimes \xi_n), \quad (3.54)$$

o qual mantém o vácuo invariante

$$\mathbf{U}\Phi_0 = \Phi_0. \quad (3.55)$$

O operador \mathbf{U} no espaço de Fock é conhecido [27] como a segunda quantização do operador U do espaço de Hilbert. Desta forma, a evolução temporal dos operadores de férmions fica

$$a^\dagger(\xi(t)) = a^\dagger(U\xi) = \mathbf{U}a^\dagger(\xi)\mathbf{U}^{-1}, \quad (3.56)$$

$$a(\xi(t)) = a(U\xi) = \mathbf{U}a(\xi)\mathbf{U}^{-1}. \quad (3.57)$$

Derivando (3.53) com relação ao tempo obtemos

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{H} = \mathbf{H}\mathbf{U}, \quad (3.58)$$

onde

$$\begin{aligned} (\mathbf{H}\Phi)_n &= \sum_{j=1}^n (1 \otimes \dots \otimes H_{(j)} \otimes \dots \otimes 1) \phi_n \\ &= \sum_{j=1}^n H(x_j) \phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n), \end{aligned} \quad (3.59)$$

e pode ser escrito como (3.50).

No que segue, por razão de completeza e para firmar a notação, apresentaremos as descrições bem conhecidas da teoria quântica usual.

3.3.1 Descrição de Schrödinger

Na descrição de Schrödinger os estados são dependentes do tempo e a evolução temporal de um estado físico é dado pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_s(t)\rangle = \mathbf{H} |\Psi_s(t)\rangle, \quad (3.60)$$

onde o hamiltoniano no espaço de Fock \mathbf{H} não tem dependência explícita no tempo e $|\Psi_s(t)\rangle \in \mathcal{F}$ é um estado na descrição de Schrödinger. Conhecendo um estado inicial, $|\Psi_s(t_0)\rangle$, podemos escrever a solução da equação (3.60), em um instante t , como

$$|\Psi_s(t)\rangle = e^{-i\mathbf{H}(t-t_0)/\hbar} |\Psi_s(t_0)\rangle. \quad (3.61)$$

3.3.2 Descrição de Interação

Escrevendo o hamiltoniano independente do tempo como a soma

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1, \quad (3.62)$$

onde \mathbf{H}_0 é a parte com solução conhecida, definimos um estado na descrição de interação como sendo

$$|\Psi_I(t)\rangle = e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} |\Psi_s(t)\rangle, \quad (3.63)$$

onde o índice I indica que o estado está na descrição de Interação; esse estado tem como equação do movimento

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} |\Psi_s(t)\rangle) \quad (3.64)$$

$$= \mathbf{H}_1(t) |\Psi_I(t)\rangle, \quad (3.65)$$

sendo

$$\mathbf{H}_1(t) = e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} \mathbf{H}_1 e^{-i\mathbf{H}_0 t/\hbar}. \quad (3.66)$$

Um elemento de matriz arbitrário de um observável \mathbf{O}_s do espaço de Fock na descrição de Schrödinger pode ser escrito como

$$\langle \Psi'_s(t) | \mathbf{O}_s | \Psi_s(t) \rangle = \langle \Psi'_I(t) | e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} \mathbf{O}_s e^{-i\mathbf{H}_0 t/\hbar} | \Psi_I(t) \rangle, \quad (3.67)$$

sugerindo a definição de um observável na descrição de interação como

$$\mathbf{O}_I(t) = e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} \mathbf{O}_s e^{-i\mathbf{H}_0 t/\hbar}, \quad (3.68)$$

com a dependência temporal dada por

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}_I(t) &= e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} (\mathbf{O}_s \mathbf{H}_0 - \mathbf{H}_0 \mathbf{O}_s) e^{-i\mathbf{H}_0 t/\hbar} \\ &= [\mathbf{O}_I(t), \mathbf{H}_0]_-. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Em geral, \mathbf{H}_0 não comuta com \mathbf{H}_1 . A solução de (3.65) pode ser obtida a partir de um estado $|\Psi_I(t_0)\rangle$ definindo-se uma transformação unitária $\mathbf{U}(t, t_0)$ tal que

$$|\Psi_I(t)\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle, \quad (3.70)$$

sendo $\mathbf{U}(t, t_0)$ denominado operador evolução temporal no espaço de Fock. De fato, usando a descrição de Schrödinger temos

$$\begin{aligned} |\Psi_I(t)\rangle &= e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} |\Psi_s(t)\rangle \\ &= e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} e^{-i\mathbf{H}(t-t_0)/\hbar} |\Psi_s(t_0)\rangle \\ &= e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} e^{-i\mathbf{H}(t-t_0)/\hbar} e^{-i\mathbf{H}_0 t_0/\hbar} |\Psi_I(t_0)\rangle, \end{aligned} \quad (3.71)$$

que dá

$$\mathbf{U}(t, t_0) = e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} e^{-i\mathbf{H}(t-t_0)/\hbar} e^{-i\mathbf{H}_0 t_0/\hbar}. \quad (3.72)$$

Como, em geral, \mathbf{H} e \mathbf{H}_0 não comutam, a ordem em (3.72) deve ser mantida fazendo com que essa equação não seja muito usada em razão de cálculos. Portanto, determinemos uma equação para \mathbf{U} que possa ser resolvida por integração. De (3.65) e (3.70) temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\mathbf{U}(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle] = \mathbf{H}_1(t) [\mathbf{U}(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle] \quad (3.73)$$

implicando em

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{H}_1(t) \mathbf{U}(t, t_0). \quad (3.74)$$

Integrando de t_0 até t

$$\mathbf{U}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathbf{H}_1(t') \mathbf{U}(t', t_0), \quad (3.75)$$

onde foi usada a propriedade $\mathbf{U}(t_0, t_0) = 1$. Por interação,

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathbf{H}_1(t') \left\{ 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} dt'' \mathbf{H}_1(t'') \{ \dots \} \right\} \\ &= 1 + \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathbf{H}_1(t') + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \mathbf{H}_1(t') \mathbf{H}_1(t'') + \dots \end{aligned} \quad (3.76)$$

O terceiro termo da expansão pode ser escrito como

$$\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \mathbf{H}_1(t') \mathbf{H}_1(t'') = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \mathbf{H}_1(t') \mathbf{H}_1(t'') + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt'' \int_{t''}^t dt' \mathbf{H}_1(t') \mathbf{H}_1(t''). \quad (3.77)$$

Trocando t' e t'' no último termo, temos, com a função $\theta(t-t') = 1$ para $t > t'$ e $\theta(t-t') = 0$ para $t < t'$, que

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \mathbf{H}_1(t') \mathbf{H}_1(t'') &= \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \mathbf{H}_1(t') \mathbf{H}_1(t'') + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t'}^t dt'' \mathbf{H}_1(t'') \mathbf{H}_1(t') \\ &= \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' [\mathbf{H}_1(t') \mathbf{H}_1(t'') \theta(t' - t'') \\ &\quad + \mathbf{H}_1(t'') \mathbf{H}_1(t') \theta(t'' - t')], \end{aligned} \quad (3.78)$$

ou usando o operador ordenador temporal, T , [vide Apêndice B]

$$\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \mathbf{H}_1(t') \mathbf{H}_1(t'') = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' T[\mathbf{H}_1(t') \mathbf{H}_1(t'')]. \quad (3.79)$$

Desenvolvimento similar pode ser realizado para os outros termos de (3.76) e a expansão para \mathbf{U} torna-se

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_n)]. \quad (3.80)$$

3.3.3 Descrição de Heisenberg

Na descrição de Heisenberg, o estado é definido como

$$|\Psi_H(t)\rangle = e^{i\mathbf{H}t/\hbar} |\Psi_s(t)\rangle, \quad (3.81)$$

cuja derivada temporal é

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_H(t)\rangle = 0, \quad (3.82)$$

mostrando que $|\Psi_H(t)\rangle$ é independente do tempo. Um elemento de matriz arbitrário, de um observável \mathbf{O}_s , pode ser escrito como

$$\langle \Psi'_s(t) | \mathbf{O}_s | \Psi_s(t) \rangle = \langle \Psi'_H | e^{i\mathbf{H}t/\hbar} \mathbf{O}_s e^{-i\mathbf{H}t/\hbar} | \Psi_H \rangle, \quad (3.83)$$

sugerindo para um observável na descrição de Heisenberg a expressão

$$\mathbf{O}_H(t) = e^{i\mathbf{H}t/\hbar} \mathbf{O}_s e^{-i\mathbf{H}t/\hbar}, \quad (3.84)$$

com a dependência temporal dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}_H(t) = [\mathbf{O}_H(t), \mathbf{H}]_-. \quad (3.85)$$

A equação (3.84) pode ser escrita em relação a descrição de interação como

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_H(t) &= e^{i\mathbf{H}t/\hbar} e^{-i\mathbf{H}_0 t/\hbar} \mathbf{O}_I(t) e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} e^{-i\mathbf{H}t/\hbar} \\ &= \mathbf{U}(0, t) \mathbf{O}_I(t) \mathbf{U}(t, 0). \end{aligned} \quad (3.86)$$

Em adição a esses resultados, tem-se

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_s(0)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle, \quad (3.87)$$

$$\mathbf{O}_s = \mathbf{O}_H(0) = \mathbf{O}_I(0), \quad (3.88)$$

ou seja, as três descrições coincidem em $t = 0$.

3.3.4 Evolução Adiabática

Consideremos o hamiltoniano perturbado

$$\mathbf{H}' = \mathbf{H}_0 + e^{-\epsilon|t|} \mathbf{H}_1, \quad (3.89)$$

com ϵ pequeno e positivo. O hamiltoniano (3.89) é tal que, no limite para $\epsilon \rightarrow 0$, reduz-se ao hamiltoniano (3.62). Dessa forma, o operador evolução temporal (3.80) será

$$\mathbf{U}_\epsilon(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_n|)} T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_n)], \quad (3.90)$$

mas no limite $t \rightarrow -\infty \Rightarrow \mathbf{H}' \rightarrow \mathbf{H}_0$ e o autoestado do hamiltoniano é o da teoria não perturbada. Portanto, sendo $|\Phi_0\rangle$ o autoestado do hamiltoniano não perturbado, temos

$$\mathbf{H}_0 |\Phi_0\rangle = E_0 |\Phi_0\rangle. \quad (3.91)$$

Considerando o limite $t \rightarrow -\infty$, o estado na descrição de interação nos dá

$$\begin{aligned} |\Psi_I(t)\rangle &= e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} |\Psi_s(t)\rangle \\ &= e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} e^{-i\mathbf{H}_0 t/\hbar} |\Phi_0\rangle \\ &= |\Phi_0\rangle, \end{aligned} \quad (3.92)$$

ou seja, é independente do tempo, i. e., para $t \rightarrow -\infty$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle = e^{-\epsilon|t|} \mathbf{H}_I(t) |\Psi_I(t)\rangle \rightarrow 0. \quad (3.93)$$

Com esse resultado, é possível obter estados de \mathbf{H} a partir de autoestados de \mathbf{H}_0 usando o operador de evolução temporal (3.90) como, por exemplo,

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_I(0)\rangle = \mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle, \quad (3.94)$$

já que os estados de \mathbf{H}_0 são conhecidos. Faz-se necessário, no entanto, determinar o que acontece quando $\epsilon \rightarrow 0$ e t é finito. O resultado é dado pelo teorema de Gell-Mann e Low (Apêndice A.1) que diz: Se o limite

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle} = \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} \quad (3.95)$$

existir para todas as ordens da teoria de perturbação, então este é o autoestado de \mathbf{H} , ou seja,

$$\frac{\mathbf{H}|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} = \frac{E|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}, \quad (3.96)$$

permitindo escrever um estado do hamiltoniano perturbado a partir do estado não perturbado.

3.4 Teoria de Perturbação no Espaço de Fock

A função de Green de uma partícula no espaço de Fock é definida pela equação [12, 28]

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{\langle\Psi_0|T[\Psi_{H\alpha}(\mathbf{x}, t)\Psi_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t')]| \Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}, \quad (3.97)$$

onde $|\Psi_0\rangle$ é o estado fundamental na descrição de Heisenberg de um sistema com interação, isto é,

$$\mathbf{H}|\Psi_0\rangle = E|\Psi_0\rangle \quad (3.98)$$

e $\Psi_{H\alpha}(\mathbf{x}, t)$ é um operador de Heisenberg com dependência temporal dado por (3.85), α e β referem-se às componentes do operador de campo associadas ao spin. Dessa forma, a função de Green (3.97) é um elemento de matriz do operador de Heisenberg no estado fundamental de um sistema interagente. De forma geral, vamos reescrever a expressão

$$\frac{\langle\Psi_0|\mathbf{O}_H(t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}. \quad (3.99)$$

Usando o teorema de Gell-Mann e Low, temos para o denominador de (3.99)

$$\begin{aligned} \frac{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}{|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2} &= \frac{\langle\Phi_0|\mathbf{U}_\epsilon^\dagger(0, +\infty)\mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle}{|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2} \\ &= \frac{\langle\Phi_0|\mathbf{U}_\epsilon(+\infty, 0)\mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle}{|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2} \\ &= \frac{\langle\Phi_0|\mathbf{U}_\epsilon(+\infty, -\infty)|\Phi_0\rangle}{|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2} \\ &= \frac{\langle\Phi_0|\mathbf{S}|\Phi_0\rangle}{|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2}, \end{aligned} \quad (3.100)$$

onde $\mathbf{S} = \mathbf{U}_\epsilon(+\infty, -\infty)$. E para o numerador de (3.99)

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Psi_0 | \mathbf{O}_H(t) | \Psi_0 \rangle}{|\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle|^2} &= \frac{\langle \Phi_0 | \mathbf{U}_\epsilon(+\infty, 0) \mathbf{U}_\epsilon(0, t) \mathbf{O}_I(t) \mathbf{U}_\epsilon(t, 0) \mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{|\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle|^2} \\ &= \frac{\langle \Phi_0 | \mathbf{U}_\epsilon(+\infty, t) \mathbf{O}_I(t) \mathbf{U}_\epsilon(t, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{|\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle|^2}. \end{aligned} \quad (3.101)$$

Considerando (3.100) e (3.101) segue que

$$\frac{\langle \Psi_0 | \mathbf{O}_H(t) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = \frac{\langle \Phi_0 | \mathbf{U}_\epsilon(+\infty, t) \mathbf{O}_I(t) \mathbf{U}_\epsilon(t, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \mathbf{S} | \Phi_0 \rangle}. \quad (3.102)$$

Para o operador $\mathbf{U}_\epsilon(t, t_0)$ dado pela equação (3.90) temos

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_\epsilon(+\infty, t) \mathbf{O}_I(t) \mathbf{U}_\epsilon(t, -\infty) &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_t^{+\infty} dt_1 \dots \int_t^{+\infty} dt_n e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_n|)} \\ &\times T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_n)] \mathbf{O}_I(t) \\ &\times \sum_{m=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!} \int_{-\infty}^t dt_1 \dots \int_{-\infty}^t dt_m e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_m|)} T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_m)] \\ &= \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \sum_{m,n=0}^{\infty} \delta_{\nu, m+n} \frac{\nu!}{m!n!} \int_t^{+\infty} dt_1 \dots \int_t^{+\infty} dt_n e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_n|)} \\ &\times T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_n)] \mathbf{O}_I(t) \\ &\times \int_{-\infty}^t dt_1 \dots \int_{-\infty}^t dt_m e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_m|)} T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_m)] \end{aligned} \quad (3.103)$$

e assim (3.99) fica

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Psi_0 | \mathbf{O}_H(t) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} &= \frac{1}{\langle \Phi_0 | \mathbf{S} | \Phi_0 \rangle} \langle \Phi_0 | \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_\nu e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_\nu|)} \\ &\times T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_\nu) \mathbf{O}_I(t)] | \Phi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.104)$$

Por um procedimento similar

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Psi_0 | T[\mathbf{O}_H(t) \mathbf{O}_H(t')] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} &= \frac{1}{\langle \Phi_0 | \mathbf{S} | \Phi_0 \rangle} \langle \Phi_0 | \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_\nu e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_\nu|)} \\ &\times T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_\nu) \mathbf{O}_I(t) \mathbf{O}_I(t')] | \Phi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.105)$$

Com isso, podemos escrever a função de Green (3.97) como

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}(x, y) &= \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_\nu \\ &\times \frac{\langle \Phi_0 | T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_\nu) \Psi_\alpha(x) \Psi_\beta^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \mathbf{S} | \Phi_0 \rangle}, \end{aligned} \quad (3.106)$$

onde $x = (\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{H}_1(t)$ é dado pela equação (3.66) e os operadores de campo estão na descrição de interação.

Observemos que, sendo

$$\mathbf{H}_1 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha', \beta, \beta'} \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{x}' \Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')_{\alpha\alpha', \beta\beta'} \Psi_{\beta'}(\mathbf{x}') \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}), \quad (3.107)$$

com $\mathcal{U}(x_1, x_2) = \mathbf{V}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\delta(t_1 - t_2)$ e expandindo a soma em (3.106), o numerador, que notamos por G^\dagger , torna-se

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}^\dagger(x, y) &= iG_{\alpha\beta}^0(x, y) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{\lambda\lambda', \mu\mu'} \frac{1}{2} \int d^4x_1 d^4x'_1 \mathcal{U}(x_1, x'_1)_{\lambda\lambda', \mu\mu'} \\ &\times \langle \Phi_0 | T[\Psi_\lambda^\dagger(x_1) \Psi_\mu^\dagger(x'_1) \Psi_{\mu'}(x'_1) \Psi_{\lambda'}(x_1) \Psi_\alpha(x) \Psi_\beta^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle + \dots, \end{aligned} \quad (3.108)$$

onde

$$iG_{\alpha\beta}^0(x, y) = \langle \Phi_0 | T[\Psi_\alpha(x) \Psi_\beta^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle, \quad (3.109)$$

refere-se ao sistema sem interação. A expressão (3.108) mostra que para se obter a função de Green do sistema interagente é necessário calcular valores esperados no estado fundamental do sistema sem interação de produtos de operadores de criação e destruição. Com esse objetivo, o procedimento é passar os operadores de destruição para a direita, já que, $\Psi(x)|\Phi_0\rangle = 0$, o que é realizado com o uso do teorema de Wick (Apêndice B).

3.5 Diagramas de Feynman no Espaço de Fock

No nosso caso, os operadores são $\Psi_\beta^\dagger(x)$ e $\Psi_\beta(x)$, e vamos considerar um sistema de férmions. Usando a descrição de partículas e buracos, $\Psi(x)$ pode ser escrito como a soma de um operador que aniquila partícula, $\Psi^{(+)}(x)$, e um operador que cria buracos, $\Psi^{(-)\dagger}(x)$ como em (3.42 - 3.43), isto é,

$$\Psi(x) = \Psi^{(+)}(x) + \Psi^{(-)\dagger}(x). \quad (3.110)$$

Consequentemente seu adjunto é

$$\Psi^\dagger(x) = \Psi^{(+)\dagger}(x) + \Psi^{(-)}(x). \quad (3.111)$$

Sendo $|\Phi_0\rangle$ o estado fundamental, temos

$$\Psi^{(+)}(x)|\Phi_0\rangle = 0, \quad (3.112)$$

$$\Psi^{(-)}(x)|\Phi_0\rangle = 0, \quad (3.113)$$

pois $|\Phi_0\rangle$ sendo o mar de Fermi, no caso de sólido, não há partículas acima do mar ou buracos no mar.

Dentre as possíveis contrações (vide Apêndice B), as únicas que não dão zero são

$$\Psi_\alpha^{(+)}(x) \cdot \Psi_\beta^{(+)\dagger}(y) = \begin{cases} 0 & \text{se } t_x < t_y \\ iG_{\alpha\beta}^0(x, y) & \text{se } t_x > t_y \end{cases} \quad (3.114)$$

$$\Psi_\alpha^{(-)\dagger}(x) \cdot \Psi_\beta^{(-)}(y) = \begin{cases} iG_{\alpha\beta}^0(x, y) & \text{se } t_x < t_y \\ 0 & \text{se } t_x > t_y, \end{cases} \quad (3.115)$$

onde estamos notando a contração de dois operadores AB por $A \cdot B$. Com tais resultados, usando o teorema de Wick e sabendo que o valor esperado do ordenador normal (vide Apêndice B) dos operadores no estado $|\Phi_0\rangle$ é zero, o segundo termo da expansão (3.108) nos dá

$$\begin{aligned}
 iG_{\alpha\beta}^{\uparrow(1)}(x, y) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\lambda\lambda', \mu\mu'} \frac{1}{2} \int d^4x_1 d^4x'_1 \mathcal{U}(x_1, x'_1)_{\lambda\lambda', \mu\mu'} \\
 &\times \{iG_{\alpha\beta}^0(x, y)[iG_{\mu'\mu}^0(x'_1, x'_1)iG_{\lambda'\lambda}^0(x_1, x_1) - iG_{\mu'\lambda}^0(x'_1, x_1)iG_{\lambda'\mu}^0(x_1, x'_1)] \\
 &+ iG_{\alpha\lambda}^0(x, x_1)[iG_{\lambda'\mu}^0(x_1, x'_1)iG_{\mu'\beta}^0(x'_1, y) - iG_{\lambda'\beta}^0(x_1, y)iG_{\mu'\mu}^0(x'_1, x'_1)] \\
 &+ iG_{\alpha\mu}^0(x, x'_1)[iG_{\mu'\lambda}^0(x'_1, x_1)iG_{\lambda'\beta}^0(x_1, y) \\
 &- iG_{\mu'\beta}^0(x'_1, y)iG_{\lambda'\lambda}^0(x_1, x_1)]\}. \tag{3.116}
 \end{aligned}$$

Em (3.116) cada termo pode ser associado a um diagrama conhecido como diagrama de Feynman no espaço de configurações [12, 29]. A função de Green G^0 é representada por uma linha lisa dirigida do segundo argumento para o primeiro e o potencial de interação é denotado por uma linha ondulada. Neste contexto, para termos a representação da função de Green é preciso observar alguns pontos e nomenclaturas importantes:

Primeiro: os termos A e B da Figura 1 são ditos diagramas desconectados. A equação (3.116) mostra que tais termos têm função de Green e interação com argumentos fechados neles mesmos (esses dois termos não têm função de Green que relacione x_1 ou x'_1 com x ou y); como resultado, podemos separar essas unidades na expressão de G^\uparrow . Desse modo, $iG_{\alpha\beta}^0(x, y)$ representa um fator e a integral representa outro fator. Em termos de diagrama, o numerador fatorado fica como na Figura 2.

Segundo: usando o teorema de Wick no denominador encontramos os diagramas da Figura 3 que, pelo menos em primeira ordem na interação, mostram-se iguais ao termo desconectado do numerador.

Terceiro: o ν -ésimo termo do numerador de (3.106) pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
 iG_{\alpha\beta}^{\uparrow(\nu)}(x, y) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n+m} \delta_{n+m, \nu} \frac{1}{\nu!} \frac{\nu!}{n!m!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_m \\
 &\times \langle \Phi_0 | T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_m) \Psi_\alpha(x) \Psi_\beta^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle_{\text{conectado}} \\
 &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dt_{m+1} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_\nu \langle \Phi_0 | T[\mathbf{H}_1(t_{m+1}) \dots \mathbf{H}_1(t_\nu)] | \Phi_0 \rangle. \tag{3.117}
 \end{aligned}$$

Fazendo o somatório em ν , segue então que

$$\begin{aligned}
 iG_{\alpha\beta}^{\uparrow}(x, y) &= \sum_{m=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_m \\
 &\times \langle \Phi_0 | T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_m) \Psi_\alpha(x) \Psi_\beta^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle_{\text{conectado}} \\
 &\times \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_n \langle \Phi_0 | T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_n)] | \Phi_0 \rangle. \tag{3.118}
 \end{aligned}$$

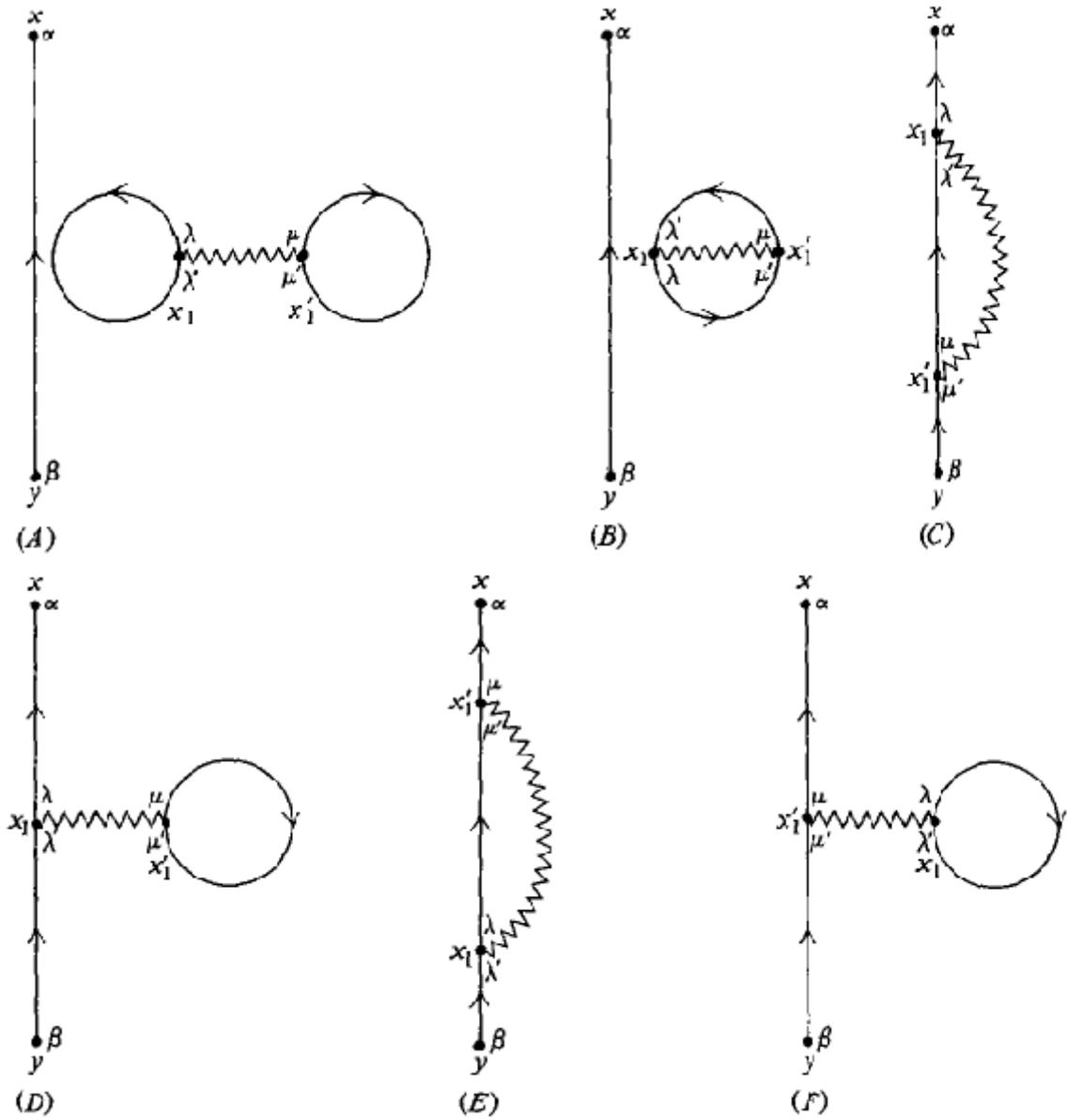
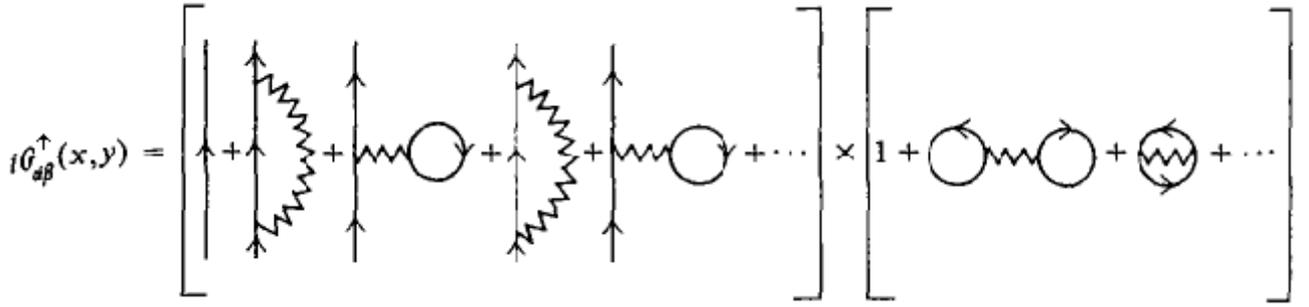


Figura 1 – Contribuição de primeira ordem da função de Green

A primeira soma é sobre os diagramas conectados e a segunda é idêntica ao denominador $\langle \Phi_0 | \mathbf{S} | \Phi_0 \rangle$ [12, 30]. Assim, pode-se escrever

$$iG_{\alpha\beta}(x, y) = \sum_{m=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_m \times \langle \Phi_0 | T[\mathbf{H}_1(t_1) \dots \mathbf{H}_1(t_m) \Psi_{\alpha}(x) \Psi_{\beta}^{\dagger}(y)] | \Phi_0 \rangle_{\text{conectado}}, \quad (3.119)$$

com um somatório implícito sobre os índices de spin e onde são ignorados os diagramas desconectados.


 Figura 2 – Fatoração da contribuição de primeira ordem de $\tilde{G}_{\alpha\beta}(x, y)$

$$\langle \Phi_0 | \hat{S} | \Phi_0 \rangle = 1 + \text{diagrama 1} + \text{diagrama 2} + \dots$$

 Figura 3 – Denominador de $G_{\alpha\beta}(x, y)$

Quarto: a contribuição para a função de Green é idêntica para todos os diagramas similares que diferem apenas por permutação de índices; em m -ésima ordem existem $m!$ possíveis intertrocas desse tipo. Assim, podemos cancelar o $(m!)^{-1}$ e contar apenas uma vez cada diagrama.

Quinto: comparando a equação (3.116) com os diagramas da Figura 1 podemos notar que cada vez que as linhas fecham nelas mesmas, surge um sinal de menos.

Sexto: a n -ésima ordem da função de Green tem um fator explícito $(-\frac{i}{\hbar})^n$, enquanto as contrações dão um fator i^{2n+1} e, portanto, obtemos um fator

$$(-i)\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n (i)^{2n+1} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n, \quad (3.120)$$

o $-i$ vem da função de Green total (lado esquerdo da equação).

Com essas seis observações, a primeira ordem da função de Green é

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^{(1)}(x, y) &= \frac{i}{\hbar} \int d^4x_1 d^4x'_1 \{ -G_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \mathcal{U}(x_1, x'_1)_{\lambda\lambda', \mu\mu'} G_{\lambda'\beta}^0(x_1, y) G_{\mu'\mu}^0(x'_1, x'_1) \\ &+ G_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \mathcal{U}(x_1, x'_1)_{\lambda\lambda', \mu\mu'} G_{\lambda'\mu}^0(x'_1, x_1) G_{\mu'\beta}^0(x'_1, y) \}, \end{aligned} \quad (3.121)$$

com um implícito somatório sobre os índices de spin. Podemos arrumar essa equação da seguinte forma

$$G_{\alpha\beta}^{(1)}(x, y) = \int d^4x_1 d^4x'_1 G_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \Sigma^{(1)}(x_1, x'_1)_{\lambda\mu} G_{\mu\beta}^0(x'_1, y), \quad (3.122)$$

onde

$$\begin{aligned} \hbar \Sigma^{(1)}(x_1, x'_1)_{\lambda\mu} &= i \int d^4x_2 \left[-\mathcal{U}(x_1, x_2)_{\lambda\mu', \nu\lambda'} G_{\mu'\nu}^0(x_2, x_2) \delta(x'_1 - x_1) \delta_{\lambda'\mu} \right. \\ &+ \left. \mathcal{U}(x_1, x_2)_{\lambda\lambda', \nu\mu'} G_{\lambda'\nu}^0(x_1, x_2) \delta(x'_1 - x_2) \delta_{\mu'\mu} \right]. \end{aligned} \quad (3.123)$$

Generalizando temos, então,

$$G_{\alpha\beta}(x, y) = G_{\alpha\beta}^0(x, y) + \int d^4x_1 d^4x'_1 G_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x'_1)_{\lambda\mu} G_{\mu\beta}^0(x'_1, y), \quad (3.124)$$

sendo $\Sigma(x_1, x'_1)_{\lambda\mu}$ o termo denominado autoenergia. Em diagrama, obtemos a Figura 4.

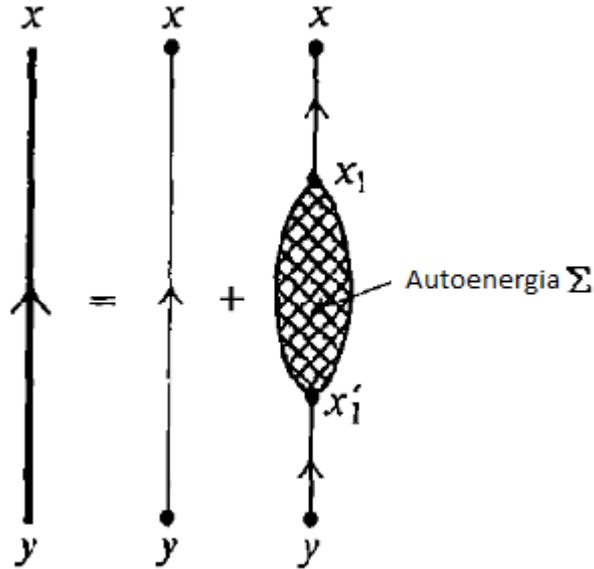


Figura 4 – Função de Green e a autoenergia

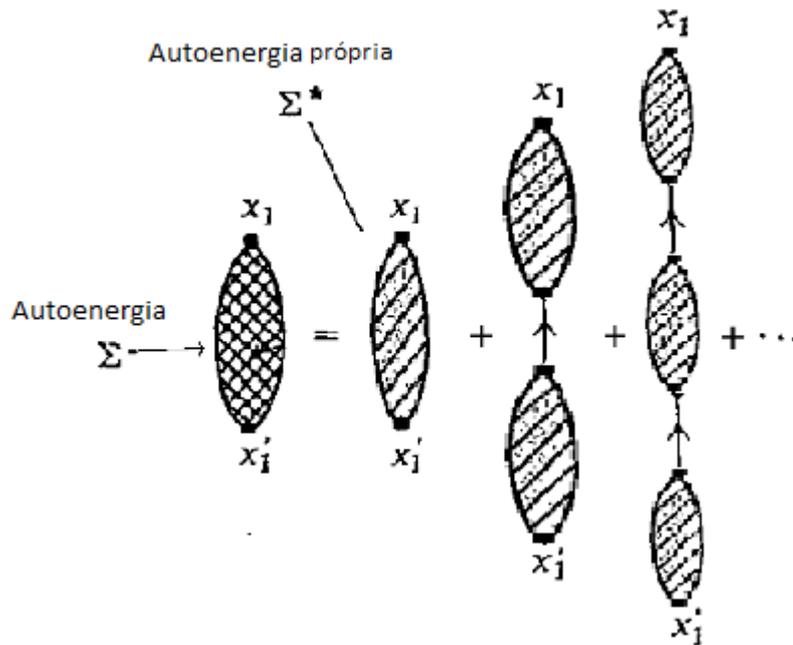


Figura 5 – Autoenergia própria

Mostra-se [12] que a autoenergia tem termos que podem ser escritos como duas partes ligadas apenas por uma função de Green G^0 como no diagrama da Figura 5. Dessa forma,

podemos escrever a autoenergia como

$$\begin{aligned}\Sigma(x_1, x'_1) &= \Sigma^*(x_1, x'_1) + \int d^4x_2 d^4x'_2 \Sigma^*(x_1, x_2) G^0(x_2, x'_2) \Sigma^*(x'_2, x'_1) \\ &+ \int d^4x_2 d^4x'_2 \int d^4x_3 d^4x'_3 \Sigma^*(x_1, x_2) G^0(x_2, x'_2) \Sigma^*(x'_2, x_3) \\ &\times G^0(x_3, x'_3) \Sigma^*(x'_3, x'_1) + \dots\end{aligned}\quad (3.125)$$

e substituindo em (3.124), encontramos

$$\begin{aligned}G_{\alpha\beta}(x, y) &= G_{\alpha\beta}^0(x, y) + \int d^4x_1 d^4x'_1 G_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \Sigma^*(x_1, x'_1)_{\lambda\mu} G_{\mu\beta}^0(x'_1, y) \\ &+ \int d^4x_1 d^4x'_1 \int d^4x_2 d^4x'_2 G_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \Sigma^*(x_1, x'_1)_{\lambda\lambda'} G_{\lambda'\mu'}^0(x'_1, x_2) \\ &\times \Sigma^*(x_2, x'_2)_{\mu'\mu} G_{\mu\beta}^0(x'_2, y) + \dots\end{aligned}\quad (3.126)$$

Notando que as integrais têm termos repetidos e, ao colocá-los em evidência o que sobra é uma função de Green total, segue que

$$G_{\alpha\beta}(x, y) = G_{\alpha\beta}^0(x, y) + \int d^4x_1 d^4x'_1 G_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \Sigma^*(x_1, x'_1)_{\lambda\mu} G_{\mu\beta}(x'_1, y). \quad (3.127)$$

Essa é a equação de Dyson no espaço de configuração [12, 31].

A equação de Dyson torna-se mais simples se a interação for invariante sob translação e o sistema espacialmente uniforme. Neste caso, é possível introduzir as transformadas de Fourier

$$G_{\alpha\beta}(x, y) = (2\pi)^{-4} \int d^4k e^{ik(x-y)} G_{\alpha\beta}(k), \quad (3.128)$$

$$G_{\alpha\beta}^0(x, y) = (2\pi)^{-4} \int d^4k e^{ik(x-y)} G_{\alpha\beta}^0(k), \quad (3.129)$$

$$\Sigma^*(x, y)_{\alpha\beta} = (2\pi)^{-4} \int d^4k e^{ik(x-y)} \Sigma^*(k)_{\alpha\beta}. \quad (3.130)$$

Assim,

$$G_{\alpha\beta}(k) = G_{\alpha\beta}^0(k) + G_{\alpha\lambda}^0(k) \Sigma^*(k)_{\lambda\mu} G_{\mu\beta}(k). \quad (3.131)$$

Geralmente G , G^0 e Σ^* são diagonais e a equação de Dyson fica

$$G(k) = \frac{1}{[G^0(k)]^{-1} - \Sigma^*(k)}. \quad (3.132)$$

4 Segunda Quantização e o Campo de Schrödinger Dual

Com o objetivo de introduzir o formalismo de DCT usando o espaço de Fock, precisamos construir a teoria de segunda quantização no espaço dual (til). Para tanto, usaremos as regras de conjugação til, definidas no Capítulo 2, para obter alguns elementos a partir do espaço direto.

Apesar do espaço dual ser uma "cópia" do espaço direto, surgem algumas diferenças como, por exemplo, a inversão temporal no estado de energia, o que justifica seu desenvolvimento; seguiremos, em linhas gerais, as referências [20, 23].

4.1 Espaço de Fock Dual

Um elemento do espaço dual $\tilde{\mathcal{H}}_1$ ao espaço de Hilbert de uma partícula é representado por $\tilde{\phi}_1(\mathbf{x})$, e o dual ao espaço de Hilbert de n partículas o notaremos como:

$$\tilde{\phi}_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \in \tilde{\mathcal{H}}^{\otimes n} = \underbrace{\tilde{\mathcal{H}}_1 \otimes \tilde{\mathcal{H}}_1 \otimes \dots \otimes \tilde{\mathcal{H}}_1}_{n \text{ vezes}}. \quad (4.1)$$

Estados que representam muitas partículas idênticas devem ser simétricos ou antissimétricos em relação à permutação de duas partículas. Os estados simétricos

$$\tilde{\phi}_n^+ = S_n^+ \tilde{\phi}_n = \frac{1}{n!} \sum_r \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}_{r_1}, \dots, \mathbf{x}_{r_n}), \quad (4.2)$$

sendo dual aos estados que descrevem os bósons, e os estados antissimétricos

$$\tilde{\phi}_n^- = S_n^- \tilde{\phi}_n = \frac{1}{n!} \sum_r (-1)^r \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}_{r_1}, \dots, \mathbf{x}_{r_n}), \quad (4.3)$$

dual aos que descrevem os férmions. Os operadores S_n^\pm são os mesmos do capítulo anterior. Com isso, definimos o espaço dual de Hilbert simetrizado (antissimetrizado) como

$$\tilde{\mathcal{H}}_n^\pm = S_n^\pm \tilde{\mathcal{H}}^{\otimes n}. \quad (4.4)$$

O espaço de Fock dual é definido como a soma direta de todos os espaços duais aos espaços de Hilbert de muitas partículas, ou seja, o espaço

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{F}}^\pm &= \bigoplus_{i=0}^{\infty} \tilde{\mathcal{H}}_i^\pm \\ &= (\tilde{\mathcal{H}}_0) \oplus (\tilde{\mathcal{H}}_1) \oplus (\tilde{\mathcal{H}}_1 \otimes \tilde{\mathcal{H}}_1)_2^\pm \oplus \dots \oplus \tilde{\mathcal{H}}_n^\pm \oplus \dots, \end{aligned} \quad (4.5)$$

onde o espaço $(\tilde{\mathcal{H}}_0)$ é o espaço dual ao espaço que descreve o vácuo. Um elemento do espaço $\tilde{\mathcal{F}}^\pm$ é dado por

$$\begin{aligned} |\tilde{\Phi}\rangle &= |\tilde{\phi}_0\rangle \oplus |\tilde{\phi}_1\rangle \oplus |\tilde{\phi}_2\rangle \oplus \dots \oplus |\tilde{\phi}_n\rangle \oplus \dots \\ &= |\tilde{\phi}_0, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_n, \dots\rangle \in \tilde{\mathcal{F}}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

com $\tilde{\phi}_n \in \tilde{\mathcal{H}}_n$ e, por simplicidade, deixamos de indicar o sinal \pm . Definimos o produto escalar entre dois estados do espaço de Fock dual como

$$\langle \tilde{\Phi} | \tilde{\Psi} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \tilde{\phi}_n | \tilde{\psi}_n \rangle, \quad (4.7)$$

e exigimos que $\langle \tilde{\Phi} | \tilde{\Phi} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \tilde{\phi}_n | \tilde{\phi}_n \rangle < \infty$. Definimos também o operador de criação de uma partícula no estado $\tilde{\xi}$ por

$$\tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi})\tilde{\phi}_0 = \tilde{\xi} \in \tilde{\mathcal{H}}_1, \quad (4.8)$$

$$(\tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi})\tilde{\Phi})_n = \sqrt{n}S_n^\pm(\tilde{\xi} \otimes \tilde{\phi}_{n-1}), \quad (4.9)$$

onde n é o número de partículas. Esse operador de criação se relaciona com o operador de campo dual da seguinte forma

$$\tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}) = \int d^3x \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x})\tilde{\xi}(\mathbf{x}). \quad (4.10)$$

Se considerarmos os vetores $\tilde{\xi}_j$ que formam uma base ortonormal completa de $\tilde{\mathcal{H}}_1$, e $\tilde{\xi}_j^\dagger$ seus conjugados, então podemos escrever os operadores de campo dual sendo a soma

$$\tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}_j)\tilde{\xi}_j^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}_j^\dagger)\tilde{\xi}_j(\mathbf{x}), \quad (4.11)$$

os quais não dependem da base.

O operador de destruição é definido como

$$(\tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}))^\dagger = \tilde{a}(\tilde{\xi}), \quad (4.12)$$

com

$$\tilde{a}(\tilde{\xi})\tilde{\phi}_0 = 0, \quad (4.13)$$

$$(\tilde{a}(\tilde{\xi})\tilde{\Phi})_n(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \sqrt{n+1}S_n^\pm\tilde{\xi}^\dagger(\mathbf{x})\tilde{\phi}_{n+1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n), \quad (4.14)$$

onde $n = 1, 2, \dots$ e $\tilde{\xi} \in \tilde{\mathcal{H}}_1$. Esse operador destrói uma partícula no estado $\tilde{\xi}$. Os operadores de campo correspondentes ao operador aniquilação são

$$\tilde{a}(\tilde{\xi}) = \int d^3x \tilde{\xi}^\dagger(\mathbf{x})\tilde{a}(\mathbf{x}), \quad (4.15)$$

$$\tilde{a}(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{\xi}_j(\mathbf{x})\tilde{a}(\tilde{\xi}_j) = \sum_j \tilde{\xi}_j^\dagger(\mathbf{x})\tilde{a}(\tilde{\xi}_j^\dagger). \quad (4.16)$$

Um operador qualquer no espaço de Fock dual pode ser expresso em termos dos operadores de criação e aniquilação; por exemplo, o operador número de partículas pode ser escrito como

$$\tilde{\mathbf{N}} = \int d^3x \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{a}(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}_j) \tilde{a}(\tilde{\xi}_j), \quad (4.17)$$

onde estamos escrevendo em negrito os operadores que atuam no espaço de Fock. O operador $\tilde{\mathbf{N}}$ tem a propriedade de determinar o número de partículas do estado. De fato,

$$(\tilde{\mathbf{N}}\tilde{\Phi})_n = n S_n^\pm \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = n(\tilde{\Phi})_n, \quad (4.18)$$

e todo operador $\tilde{\mathbf{A}}$ que comuta com ele,

$$[\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\mathbf{N}}] = 0, \quad (4.19)$$

não altera o número de partículas do sistema.

Qualquer operador $A(\mathbf{x})$ de uma partícula, limitado no espaço de Hilbert, é promovido a operador no espaço de Fock dual segundo a fórmula

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{A}} &= \int d^3x \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{A}(\mathbf{x}) \tilde{a}(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{jk} (\tilde{\xi}_j, \tilde{A}(\mathbf{x}) \tilde{\xi}_k) \tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}_j) \tilde{a}(\tilde{\xi}_k), \end{aligned} \quad (4.20)$$

onde $(,)$ representa o produto escalar em $\tilde{\mathcal{H}}_1$. Esse operador é tal que

$$(\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\Phi})_n = \sum_{m=1}^n \tilde{A}(\mathbf{x}_m) \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n). \quad (4.21)$$

Analogamente, definimos um operador de duas partículas $\tilde{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ no espaço de Fock dual como

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{V}} &= \int d^3x d^3x' \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}') \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \tilde{a}(\mathbf{x}) \tilde{a}(\mathbf{x}') \\ &= \sum_{jkj'k'} (\tilde{\xi}_j \tilde{\xi}_k, \tilde{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \tilde{\xi}_{k'} \tilde{\xi}_{j'}) \tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}_j) \tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}_k) \tilde{a}(\tilde{\xi}_{k'}) \tilde{a}(\tilde{\xi}_{j'}), \end{aligned} \quad (4.22)$$

onde

$$(\tilde{\mathbf{V}}\tilde{\Phi})_n = \sum_{j < k} \tilde{V}(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) \tilde{\phi}_n(x_1, \dots, x_n). \quad (4.23)$$

Deve-se observar que as expressões (4.20) e (4.22) se apresentam em geral na forma normalmente ordenada.

Os operadores de criação e aniquilação bosônicos (fermiônicos) devem satisfazer as relações de (anti)comutação, ou seja,

$$[\tilde{a}(\xi_1), \tilde{a}^\dagger(\xi_2)]_{\pm} \tilde{\Phi} = (\xi_1, \xi_2) \tilde{\Phi}, \quad (4.24)$$

$$[\tilde{a}(\tilde{\xi}_1), \tilde{a}(\tilde{\xi}_2)]_{\pm} \tilde{\Phi} = 0 = [\tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}_1), \tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}_2)]_{\pm} \tilde{\Phi}, \quad (4.25)$$

que são equivalentes às relações

$$[\tilde{a}(\mathbf{x}_1), \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}_2)]_\pm = \delta(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \quad (4.26)$$

$$[\tilde{a}(\mathbf{x}_1), \tilde{a}(\mathbf{x}_2)]_\pm = 0 = [\tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}_1), \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}_2)]_\pm, \quad (4.27)$$

para os operadores de campo no espaço de Fock dual.

4.2 Segunda Quantização no Espaço de Fock Dual

A partir dessa seção iremos considerar apenas o caso de férmions. O formalismo da DCT [17, 18] estabelece que os operadores do sistema dual devem ser obtidos do sistema original, através das regras de conjugação dual(til) (2.10-2.14). Assim, à dinâmica de um sistema dada por (3.28) corresponderá um sistema dual com dinâmica dada pela equação

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\xi} = -\tilde{H}\tilde{\xi}, \quad (4.28)$$

onde o sinal de menos sugere uma inversão nos níveis de energia (ou inversão temporal). Portanto, o espaço $\tilde{\mathcal{H}}_1$ pode ser decomposto nos subespaços

$$\tilde{\mathcal{H}}_1 = \tilde{\mathcal{H}}_+ \oplus \tilde{\mathcal{H}}_- \quad (4.29)$$

onde convencionamos que os estados com $\epsilon < \epsilon_F$ pertencem a $\tilde{\mathcal{H}}_-$, e os estados com $\epsilon > \epsilon_F$ pertencem a $\tilde{\mathcal{H}}_+$. Esta decomposição espectral pode ser levada aos operadores de criação e aniquilação, resultando em

$$\begin{aligned} \tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}) &= \tilde{b}^\dagger(\tilde{\xi}_-) + \tilde{d}^\dagger(\tilde{\xi}_+), \\ \tilde{a}(\tilde{\xi}) &= \tilde{b}(\tilde{\xi}_-) + \tilde{d}(\tilde{\xi}_+), \end{aligned} \quad (4.30)$$

estando \tilde{d} e \tilde{d}^\dagger associados aos estados com $\epsilon > \epsilon_F$, e \tilde{b} e \tilde{b}^\dagger associados aos estados com $\epsilon < \epsilon_F$, onde estamos assumindo

$$\tilde{b}(\tilde{\xi}_+) = 0 = \tilde{d}(\tilde{\xi}_-) \quad (4.31)$$

com $\tilde{\xi}_\pm \in \tilde{\mathcal{H}}_\pm$. Das equações (4.20) e (4.22), o operador hamiltoniano no espaço de Fock dual fica

$$\tilde{\mathbf{H}}' = \sum_{jk < F} [(\tilde{g}_j, \tilde{H}(\mathbf{x})\tilde{g}_k)\tilde{b}^\dagger(\tilde{g}_j)\tilde{b}(\tilde{g}_k)] + \sum_{jk > F} [(\tilde{f}_j, \tilde{H}(\mathbf{x})\tilde{f}_k)\tilde{d}^\dagger(\tilde{f}_j)\tilde{d}(\tilde{f}_k)], \quad (4.32)$$

onde \tilde{f}_j é uma base de $\tilde{\mathcal{H}}_+$, \tilde{g}_j uma base de $\tilde{\mathcal{H}}_-$ e \tilde{f}_F indica, no caso de sólidos, o primeiro nível do mar de Fermi dual. Para introduzir o conceito de buraco, trocaremos os papéis dos operadores \tilde{d} e \tilde{d}^\dagger , trocando simultaneamente a dependência em $\tilde{\xi}$. Assim, os operadores de criação e aniquilação ficam

$$\tilde{\Psi}^\dagger(\tilde{\xi}) = \tilde{b}^\dagger(\tilde{\xi}_-) + \tilde{d}(\tilde{\xi}_+), \quad (4.33)$$

$$\tilde{\Psi}(\tilde{\xi}) = \tilde{b}(\tilde{\xi}_-) + \tilde{d}^\dagger(\tilde{\xi}_+). \quad (4.34)$$

Em concordância com as relações de anticomutação, temos

$$[\tilde{\Psi}(\tilde{\xi}), \tilde{\Psi}^\dagger(\tilde{\xi}')]_+ = (\tilde{\xi}, \tilde{\xi}'), \quad (4.35)$$

$$[\tilde{\Psi}(\tilde{\xi}), \tilde{\Psi}(\tilde{\xi}')]_+ = 0 = [\tilde{\Psi}^\dagger(\tilde{\xi}), \tilde{\Psi}^\dagger(\tilde{\xi}')]_+. \quad (4.36)$$

As expressões (4.33 - 4.34) definem os operadores na formulação de segunda quantização e também podem ser escritas como

$$\tilde{\Psi}^\dagger(\tilde{\xi}) = \tilde{\Psi}^{(+)\dagger}(\tilde{\xi}_-) + \tilde{\Psi}^{(-)}(\tilde{\xi}_+), \quad (4.37)$$

$$\tilde{\Psi}(\tilde{\xi}) = \tilde{\Psi}^{(+)}(\tilde{\xi}_-) + \tilde{\Psi}^{(-)\dagger}(\tilde{\xi}_+), \quad (4.38)$$

onde $\tilde{\Psi}^{(+)}$ e $\tilde{\Psi}^{(+)\dagger}$ estão associados à partícula dual, $\tilde{\Psi}^{(-)}$ e $\tilde{\Psi}^{(-)\dagger}$ estão associados ao buraco dual e satisfazem as relações de anticomutação

$$[\tilde{\Psi}^{(+)}(\tilde{\xi}), \tilde{\Psi}^{(+)\dagger}(\tilde{\xi}')]_+ = (\tilde{\xi}_-, \tilde{\xi}'_-), \quad [\tilde{\Psi}^{(+)}(\tilde{\xi}), \tilde{\Psi}^{(+)}(\tilde{\xi}')]_+ = 0, \quad (4.39)$$

$$[\tilde{\Psi}^{(-)}(\tilde{\xi}), \tilde{\Psi}^{(-)\dagger}(\tilde{\xi}')]_+ = (\tilde{\xi}'_+, \tilde{\xi}_+), \quad [\tilde{\Psi}^{(-)}(\tilde{\xi}), \tilde{\Psi}^{(-)}(\tilde{\xi}')]_+ = 0 \quad (4.40)$$

sendo as demais nulas. Usando (4.10) e (4.15), podemos introduzir os operadores de campo dual

$$\tilde{\Psi}(\tilde{\xi}) = \int d^3x \tilde{\Psi}(\mathbf{x}) \tilde{\xi}^\dagger(\mathbf{x}), \quad (4.41)$$

$$\tilde{\Psi}^\dagger(\tilde{\xi}) = \int d^3x \tilde{\xi}(\mathbf{x}) \tilde{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}). \quad (4.42)$$

O hamiltoniano no espaço de Fock dual (4.32) torna-se

$$\tilde{\mathbf{H}} = \sum_{jk < F} (\tilde{g}_j, \tilde{H}(\mathbf{x}) \tilde{g}_k) \tilde{b}^\dagger(\tilde{g}_j) \tilde{b}(\tilde{g}_k) - \sum_{jk > F} (\tilde{f}_j, \tilde{H}(\mathbf{x}) \tilde{f}_k) \tilde{d}^\dagger(\tilde{f}_k) \tilde{d}(\tilde{f}_j), \quad (4.43)$$

a menos de uma constante aditiva que associamos ao mar de Fermi dual. Comparando (4.43) com (3.50) notamos que a diferença é que, no caso de sólidos, os operadores associados a partículas $\tilde{b}, \tilde{b}^\dagger$ agora referem-se a estados com $\epsilon < \epsilon_F$, e os operadores associados ao buraco $\tilde{d}, \tilde{d}^\dagger$ agora referem-se a estados com $\epsilon > \epsilon_F$. O hamiltoniano (4.43) é a representação do hamiltoniano dual \tilde{H} em segunda quantização.

4.3 Evolução Temporal e as Descrições da Teoria Quântica na Formulação Dual

A dinâmica de uma partícula no espaço de Hilbert dual $\tilde{\mathcal{H}}_1$ é dada pela equação de Schrödinger (4.28), cuja solução é dada pela transformação unitária

$$\tilde{\xi}(t) = e^{i\tilde{H}t/\hbar} \tilde{\xi}(0) = \tilde{U} \tilde{\xi}, \quad (4.44)$$

onde $\tilde{\xi} \in \tilde{\mathcal{H}}_1$, \tilde{H} é o hamiltoniano do sistema dual e \tilde{U} é o operador evolução temporal. Comparando as expressões (4.44) e (3.51), vemos que a evolução temporal de $\tilde{\xi}$ se dá

no sentido inverso da evolução de ξ . Tomando as funções $\tilde{\xi}(t)$ como função teste dos operadores de campo, segue que

$$\begin{aligned}\tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}(t))\tilde{\Phi} &= \tilde{a}^\dagger(\tilde{U}\tilde{\xi})\tilde{\Phi}, \\ \tilde{a}(\tilde{\xi}(t))\tilde{\Phi} &= \tilde{a}(\tilde{U}\tilde{\xi})\tilde{\Phi}.\end{aligned}\quad (4.45)$$

Como o espaço de Fock é composto por todos os espaços de Hilbert de n partículas, é conveniente definir o operador unitário $\tilde{\mathbf{U}}$, tal que

$$\begin{aligned}(\tilde{\mathbf{U}}\tilde{\Phi})_n &= (\otimes_{j=1}^n \tilde{U})\tilde{\phi}_n \\ &= S_n^\pm(\tilde{U}\tilde{\xi}_1 \otimes \tilde{U}\tilde{\xi}_2 \otimes \dots \otimes \tilde{U}\tilde{\xi}_n),\end{aligned}\quad (4.46)$$

onde

$$\tilde{\phi}_n = S_n^\pm(\tilde{\xi}_1 \otimes \tilde{\xi}_2 \otimes \dots \otimes \tilde{\xi}_n). \quad (4.47)$$

O operador $\tilde{\mathbf{U}}$ é um operador definido no espaço de Fock dual e mantém o vácuo invariante, ou seja,

$$\tilde{\mathbf{U}}\tilde{\Phi}_0 = \tilde{\Phi}_0; \quad (4.48)$$

$\tilde{\mathbf{U}}$ é chamado [23] de segunda quantização do operador \tilde{U} do espaço de Hilbert. Desta forma, a evolução temporal dos operadores de férmions fica

$$\tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi}(t)) = \tilde{a}^\dagger(\tilde{U}\tilde{\xi}) = \tilde{\mathbf{U}}\tilde{a}^\dagger(\tilde{\xi})\tilde{\mathbf{U}}^{-1}, \quad (4.49)$$

$$\tilde{a}(\tilde{\xi}(t)) = \tilde{a}(\tilde{U}\tilde{\xi}) = \tilde{\mathbf{U}}\tilde{a}(\tilde{\xi})\tilde{\mathbf{U}}^{-1}. \quad (4.50)$$

A derivada temporal de (4.46) nos dá

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\mathbf{U}} = -\tilde{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{H}} = -\tilde{\mathbf{H}}\tilde{\mathbf{U}}, \quad (4.51)$$

onde

$$\begin{aligned}(\tilde{\mathbf{H}}\tilde{\Phi})_n &= \sum_{j=1}^n (1 \otimes \dots \otimes \tilde{H}_{(j)} \otimes \dots \otimes 1)\tilde{\phi}_n \\ &= \sum_{j=1}^n \tilde{H}(\mathbf{x}_j)\tilde{\phi}_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n),\end{aligned}\quad (4.52)$$

e pode ser escrito como (4.43).

4.3.1 Descrição de Schrödinger Dual

Na descrição de Schrödinger os estados são dependentes do tempo e a dinâmica de um sistema dual é dado pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Psi}_s(t)\rangle = -\tilde{\mathbf{H}}|\tilde{\Psi}_s(t)\rangle, \quad (4.53)$$

que tem como solução a transformação unitária

$$|\tilde{\Psi}_s(t)\rangle = e^{i\tilde{\mathbf{H}}(t-t_0)/\hbar} |\tilde{\Psi}_s(t_0)\rangle. \quad (4.54)$$

4.3.2 Descrição de Interação Dual

Agora, escrevemos o hamiltoniano independente do tempo como a soma

$$\tilde{\mathbf{H}} = \tilde{\mathbf{H}}_0 + \tilde{\mathbf{H}}_1, \quad (4.55)$$

onde $\tilde{\mathbf{H}}_0$ é a parte com solução conhecida. O estado dual na descrição de interação é

$$|\tilde{\Psi}_I(t)\rangle = e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} |\tilde{\Psi}_s(t)\rangle, \quad (4.56)$$

que tem como equação de movimento

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Psi}_I(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} |\tilde{\Psi}_s(t)\rangle) \quad (4.57)$$

$$= -\tilde{\mathbf{H}}_1(t) |\tilde{\Psi}_I(t)\rangle, \quad (4.58)$$

sendo

$$\tilde{\mathbf{H}}_1(t) = e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} \tilde{\mathbf{H}}_1 e^{i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar}. \quad (4.59)$$

Um elemento de matriz arbitrário de um observável $\tilde{\mathbf{O}}_s$ na descrição de Schrödinger pode ser escrito como

$$\langle \tilde{\Psi}'_s(t) | \tilde{\mathbf{O}}_s | \tilde{\Psi}_s(t) \rangle = \langle \tilde{\Psi}'_I(t) | e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} \tilde{\mathbf{O}}_s e^{i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} | \tilde{\Psi}_I(t) \rangle, \quad (4.60)$$

sugerindo a definição de um observável na descrição de interação dual como

$$\tilde{\mathbf{O}}_I(t) = e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} \tilde{\mathbf{O}}_s e^{i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar}, \quad (4.61)$$

com a dependência temporal dada por

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{O}}_I(t) &= e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} (\tilde{\mathbf{H}}_0 \tilde{\mathbf{O}}_s - \tilde{\mathbf{O}}_s \tilde{\mathbf{H}}_0) e^{i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} \\ &= [\tilde{\mathbf{H}}_0, \tilde{\mathbf{O}}_I(t)]_-. \end{aligned} \quad (4.62)$$

A solução de (4.58) pode ser obtida definindo-se uma transformação unitária $\tilde{\mathbf{U}}(t, t_0)$ tal que

$$|\tilde{\Psi}_I(t)\rangle = \tilde{\mathbf{U}}(t, t_0) |\tilde{\Psi}_I(t_0)\rangle, \quad (4.63)$$

sendo $\tilde{\mathbf{U}}(t, t_0)$ denominado operador evolução temporal dual. De fato, usando a descrição de Schrödinger temos

$$\begin{aligned} |\tilde{\Psi}_I(t)\rangle &= e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} |\tilde{\Psi}_s(t)\rangle \\ &= e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} e^{i\tilde{\mathbf{H}}(t-t_0)/\hbar} |\tilde{\Psi}_s(t_0)\rangle \\ &= e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} e^{i\tilde{\mathbf{H}}(t-t_0)/\hbar} e^{i\tilde{\mathbf{H}}_0 t_0/\hbar} |\tilde{\Psi}_I(t_0)\rangle, \end{aligned} \quad (4.64)$$

que dá

$$\tilde{\mathbf{U}}(t, t_0) = e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} e^{i\tilde{\mathbf{H}}(t-t_0)/\hbar} e^{i\tilde{\mathbf{H}}_0 t_0/\hbar}. \quad (4.65)$$

Como, em geral, \mathbf{H} e \mathbf{H}_0 não comutam, então $\tilde{\mathbf{H}}$ e $\tilde{\mathbf{H}}_0$ também não devem comutar. Dessa forma, a ordem em (4.65) deve ser mantida fazendo com que essa equação não seja muito usada em questão de cálculos. Portanto, vamos construir uma equação para $\tilde{\mathbf{U}}$ que possa ser resolvida por integração. De (4.58) e (4.63) temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\tilde{\mathbf{U}}(t, t_0) |\tilde{\Psi}_I(t_0)\rangle] = -\tilde{\mathbf{H}}_1(t) [\tilde{\mathbf{U}}(t, t_0) |\tilde{\Psi}_I(t_0)\rangle] \quad (4.66)$$

implicando em

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{U}}(t, t_0) = -\tilde{\mathbf{H}}_1(t) \tilde{\mathbf{U}}(t, t_0). \quad (4.67)$$

Integrando de t_0 até t , temos

$$\tilde{\mathbf{U}}(t, t_0) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \tilde{\mathbf{H}}_1(t') \tilde{\mathbf{U}}(t', t_0), \quad (4.68)$$

onde foi usada a propriedade $\tilde{\mathbf{U}}(t_0, t_0) = 1$. Por interação,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{U}}(t, t_0) &= 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \tilde{\mathbf{H}}_1(t') \left\{ 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} dt'' \tilde{\mathbf{H}}_1(t'') \{ \dots \} \right\} \\ &= 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \tilde{\mathbf{H}}_1(t') + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \tilde{\mathbf{H}}_1(t') \tilde{\mathbf{H}}_1(t'') + \dots \end{aligned} \quad (4.69)$$

Por um processo similar ao realizado para encontrar (3.80), encontramos

$$\tilde{\mathbf{U}}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1) \dots \tilde{\mathbf{H}}_1(t_n)]. \quad (4.70)$$

4.3.3 Descrição de Heisenberg Dual

Na descrição de Heisenberg, o estado é definido como

$$|\tilde{\Psi}_H(t)\rangle = e^{-i\tilde{\mathbf{H}}t/\hbar} |\tilde{\Psi}_s(t)\rangle, \quad (4.71)$$

cuja derivada temporal é

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Psi}_H(t)\rangle = 0, \quad (4.72)$$

portanto $|\tilde{\Psi}_H(t)\rangle$ é independente do tempo. Um elemento de matriz arbitrário, de um observável $\tilde{\mathbf{O}}_s$, pode ser escrito como

$$\langle \tilde{\Psi}'_s(t) | \tilde{\mathbf{O}}_s | \tilde{\Psi}_s(t) \rangle = \langle \tilde{\Psi}'_H | e^{-i\tilde{\mathbf{H}}t/\hbar} \tilde{\mathbf{O}}_s e^{i\tilde{\mathbf{H}}t/\hbar} | \tilde{\Psi}_H \rangle, \quad (4.73)$$

sugerindo para um observável na descrição de Heisenberg dual a expressão

$$\tilde{\mathbf{O}}_H(t) = e^{-i\tilde{\mathbf{H}}t/\hbar} \tilde{\mathbf{O}}_s e^{i\tilde{\mathbf{H}}t/\hbar}, \quad (4.74)$$

com a dependência temporal dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{O}}_H(t) = -[\tilde{\mathbf{O}}_H(t), \tilde{\mathbf{H}}]_{-}. \quad (4.75)$$

A equação (4.74), em relação à descrição de interação, fica

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{O}}_H(t) &= e^{-i\tilde{\mathbf{H}}t/\hbar} e^{i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} \tilde{\mathbf{O}}_I(t) e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} e^{i\tilde{\mathbf{H}}t/\hbar} \\ &= \tilde{\mathbf{U}}(0, t) \tilde{\mathbf{O}}_I(t) \tilde{\mathbf{U}}(t, 0).\end{aligned}\quad (4.76)$$

Em adição a esses resultados, tem-se

$$|\tilde{\Psi}_H\rangle = |\tilde{\Psi}_s(0)\rangle = |\tilde{\Psi}_I(0)\rangle, \quad (4.77)$$

$$\tilde{\mathbf{O}}_s = \tilde{\mathbf{O}}_H(0) = \tilde{\mathbf{O}}_I(0), \quad (4.78)$$

ou seja, as três descrições coincidem em $t = 0$.

4.3.4 Evolução Adiabática Dual

Consideremos o Hamiltoniano

$$\tilde{\mathbf{H}}' = \tilde{\mathbf{H}}_0 + e^{-\epsilon|t|} \tilde{\mathbf{H}}_1, \quad (4.79)$$

com ϵ pequeno e positivo. O hamiltoniano perturbado (4.79) é tal que, no limite para $\epsilon \rightarrow 0$, reduz-se ao hamiltoniano (4.55). Dessa forma, o operador evolução temporal será

$$\tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_n|)} T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1) \dots \tilde{\mathbf{H}}_1(t_n)]. \quad (4.80)$$

Agora, no limite $t \rightarrow -\infty$ temos $\tilde{\mathbf{H}}' \rightarrow \tilde{\mathbf{H}}_0$ e o estado é o da teoria não perturbada. Portanto, podemos escrever o estado na descrição de Schrödinger como

$$|\tilde{\Psi}_s(t)\rangle = e^{iE_0 t/\hbar} |\tilde{\Phi}_0\rangle, \quad (4.81)$$

onde $|\tilde{\Phi}_0\rangle$ é o autoestado do hamiltoniano dual não perturbado, ou seja,

$$\tilde{\mathbf{H}}_0 |\tilde{\Phi}_0\rangle = E_0 |\tilde{\Phi}_0\rangle. \quad (4.82)$$

Ainda no limite $t \rightarrow -\infty$, o estado de interação,

$$\begin{aligned}|\tilde{\Psi}_I(t)\rangle &= e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} |\tilde{\Psi}_s(t)\rangle \\ &= e^{-i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} e^{i\tilde{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} |\tilde{\Phi}_0\rangle \\ &= |\tilde{\Phi}_0\rangle,\end{aligned}\quad (4.83)$$

é independente do tempo, i. e., para $t \rightarrow -\infty$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Psi}_I(t)\rangle = -e^{-\epsilon|t|} \tilde{\mathbf{H}}_1(t) |\tilde{\Psi}_I(t)\rangle \rightarrow 0. \quad (4.84)$$

Com isso, é possível obter estados de $\tilde{\mathbf{H}}$ a partir de autoestados de $\tilde{\mathbf{H}}_0$ usando o operador de evolução temporal (4.80), como, por exemplo,

$$|\tilde{\Psi}_H\rangle = |\tilde{\Psi}_I(0)\rangle = \tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(0, -\infty) |\tilde{\Phi}_0\rangle. \quad (4.85)$$

Aplicando as regras de conjugação til obtemos a relação correspondente para o teorema de Gell-Mann e Low (Apêndice A.2) no espaço dual, i.e., se o limite

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(0, -\infty)|\tilde{\Phi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(0, -\infty)|\tilde{\Phi}_0\rangle} = \frac{|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle} \quad (4.86)$$

existir para todas as ordens da teoria de perturbação, então este é o autoestado de $\tilde{\mathbf{H}}$, ou seja,

$$\frac{\tilde{\mathbf{H}}|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle} = \frac{E|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle}, \quad (4.87)$$

permitindo escrever um estado do hamiltoniano perturbado a partir do estado não perturbado.

4.4 Teoria de Perturbação Dual

Aplicando as regras de conjugação til na equação (3.97) obtemos a função de Green dual

$$-i\tilde{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{\langle\tilde{\Psi}_0|T[\tilde{\Psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t)\tilde{\Psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t')]| \tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Psi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle}, \quad (4.88)$$

onde $|\tilde{\Psi}_0\rangle$ é o estado fundamental na descrição de Heisenberg de um sistema com interação, isto é,

$$\tilde{\mathbf{H}}|\tilde{\Psi}_0\rangle = E|\tilde{\Psi}_0\rangle \quad (4.89)$$

e $\tilde{\Psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t)$ é um operador de Heisenberg com dependência temporal dado por (4.75). Escrevendo de forma geral, temos a expressão

$$\frac{\langle\tilde{\Psi}_0|\tilde{\mathbf{O}}_H(t)|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Psi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle}. \quad (4.90)$$

Usando o teorema de Gell-Mann e Low

$$\frac{\langle\tilde{\Psi}_0|\tilde{\mathbf{O}}_H(t)|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Psi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle} = \frac{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(+\infty, t)\tilde{\mathbf{O}}_I(t)\tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(t, -\infty)|\tilde{\Phi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\mathbf{S}}|\tilde{\Phi}_0\rangle}, \quad (4.91)$$

onde $\tilde{\mathbf{S}} = \tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(+\infty, -\infty)$. Para o operador $\tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(t, t_0)$, dado pela equação (4.80), obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(+\infty, t)\tilde{\mathbf{O}}_I(t)\tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(t, -\infty) &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_t^{+\infty} dt_1 \dots \int_t^{+\infty} dt_n e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_n|)} \\ &\times T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1)\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_n)]\tilde{\mathbf{O}}_I(t) \\ &\times \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!} \int_{-\infty}^t dt_1 \dots \int_{-\infty}^t dt_m e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_m|)} T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1)\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_m)] \\ &= \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \sum_{m,n=0}^{\infty} \delta_{\nu, m+n} \frac{\nu!}{m!n!} \int_t^{+\infty} dt_1 \dots \int_t^{+\infty} dt_n e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_n|)} \\ &\times T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1)\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_n)]\tilde{\mathbf{O}}_I(t) \\ &\times \int_{-\infty}^t dt_1 \dots \int_{-\infty}^t dt_m e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_m|)} T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1)\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_m)] \end{aligned} \quad (4.92)$$

e assim (4.90) fica

$$\begin{aligned} \frac{\langle \tilde{\Psi}_0 | \tilde{\mathbf{O}}_H(t) | \tilde{\Psi}_0 \rangle}{\langle \tilde{\Psi}_0 | \tilde{\Psi}_0 \rangle} &= \frac{1}{\langle \tilde{\Phi}_0 | \tilde{\mathbf{S}} | \tilde{\Phi}_0 \rangle} \langle \tilde{\Phi}_0 | \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_\nu e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_\nu|)} \\ &\times T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1) \dots \tilde{\mathbf{H}}_1(t_\nu) \tilde{\mathbf{O}}_I(t)] | \tilde{\Phi}_0 \rangle. \end{aligned} \quad (4.93)$$

Por um procedimento similar

$$\begin{aligned} \frac{\langle \tilde{\Psi}_0 | T[\tilde{\mathbf{O}}_H(t) \tilde{\mathbf{O}}_H(t')] | \tilde{\Psi}_0 \rangle}{\langle \tilde{\Psi}_0 | \tilde{\Psi}_0 \rangle} &= \frac{1}{\langle \tilde{\Phi}_0 | \tilde{\mathbf{S}} | \tilde{\Phi}_0 \rangle} \langle \tilde{\Phi}_0 | \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_\nu e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_\nu|)} \\ &\times T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1) \dots \tilde{\mathbf{H}}_1(t_\nu) \tilde{\mathbf{O}}_I(t) \tilde{\mathbf{O}}_I(t')] | \tilde{\Phi}_0 \rangle. \end{aligned} \quad (4.94)$$

Com isso, podemos escrever a função de Green dual (4.88) como

$$\begin{aligned} -i\tilde{G}_{\alpha\beta}(x, y) &= \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_\nu \\ &\times \frac{\langle \tilde{\Phi}_0 | T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1) \dots \tilde{\mathbf{H}}_1(t_\nu) \tilde{\Psi}_\alpha(x) \tilde{\Psi}_\beta^\dagger(y)] | \tilde{\Phi}_0 \rangle}{\langle \tilde{\Phi}_0 | \tilde{\mathbf{S}} | \tilde{\Phi}_0 \rangle}, \end{aligned} \quad (4.95)$$

onde $x = (\mathbf{x}, t)$, $\tilde{\mathbf{H}}_1(t)$ é dado pela equação (4.59) e os operadores estão na descrição de interação.

Observemos, que sendo

$$\tilde{\mathbf{H}}_1 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha', \beta, \beta'} \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{x}' \tilde{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') \mathbf{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')_{\alpha\alpha', \beta\beta'} \tilde{\Psi}_{\beta'}(\mathbf{x}') \tilde{\Psi}_{\alpha'}(\mathbf{x}), \quad (4.96)$$

com $\mathcal{U}(x_1, x_2) = \mathbf{V}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \delta(t_1 - t_2)$ e expandindo a soma em (4.95), o numerador, que notaremos por \tilde{G}^\dagger , torna-se

$$\begin{aligned} -i\tilde{G}_{\alpha\beta}^\dagger(x, y) &= -i\tilde{G}_{\alpha\beta}^0(x, y) + \frac{i}{\hbar} \sum_{\lambda\lambda', \mu\mu'} \frac{1}{2} \int d^4x_1 d^4x'_1 \mathcal{U}(x_1, x'_1)_{\lambda\lambda', \mu\mu'} \\ &\times \langle \tilde{\Phi}_0 | T[\tilde{\Psi}_\lambda^\dagger(x_1) \tilde{\Psi}_\mu^\dagger(x'_1) \tilde{\Psi}_{\mu'}(x'_1) \tilde{\Psi}_{\lambda'}(x_1) \tilde{\Psi}_\alpha(x) \tilde{\Psi}_\beta^\dagger(y)] | \tilde{\Phi}_0 \rangle + \dots, \end{aligned} \quad (4.97)$$

onde

$$-i\tilde{G}_{\alpha\beta}^0(x, y) = \langle \tilde{\Phi}_0 | T[\tilde{\Psi}_\alpha(x) \tilde{\Psi}_\beta^\dagger(y)] | \tilde{\Phi}_0 \rangle, \quad (4.98)$$

refere-se ao sistema sem interação.

4.5 Diagramas de Feynman na Formulação Dual

Considerando as partículas sendo férmions e usando a operação til na equação (3.110) para escrever $\tilde{\Psi}(x)$ como a soma de um operador que aniquila partícula dual, $\tilde{\Psi}^{(+)}(x)$, e um operador que cria buracos dual, $\tilde{\Psi}^{(-)\dagger}(x)$, ou seja, sendo

$$\tilde{\Psi}(x) = \tilde{\Psi}^{(+)}(x) + \tilde{\Psi}^{(-)\dagger}(x) \quad (4.99)$$

temos consequentemente

$$\tilde{\Psi}^\dagger(x) = \tilde{\Psi}^{(+)\dagger}(x) + \tilde{\Psi}^{(-)}(x). \quad (4.100)$$

Para o estado fundamental, $|\tilde{\Phi}_0\rangle$, temos

$$\tilde{\Psi}^{(+)\dagger}(x)|\tilde{\Phi}_0\rangle = 0 \quad (4.101)$$

$$\tilde{\Psi}^{(-)\dagger}(x)|\tilde{\Phi}_0\rangle = 0. \quad (4.102)$$

Dentre as possíveis contrações (vide Apêndice B) dos operadores $\tilde{\Psi}_\beta^\dagger(x)$ e $\tilde{\Psi}_\beta(x)$ as únicas não nulas são

$$\tilde{\Psi}_\alpha^{(+)}(x) \cdot \tilde{\Psi}_\beta^{(+)\dagger}(y) = \begin{cases} 0 & \text{se } t_x > t_y \\ -i\tilde{G}^0(x, y) & \text{se } t_x < t_y \end{cases} \quad (4.103)$$

$$\tilde{\Psi}_\alpha^{(-)}(x) \cdot \tilde{\Psi}_\beta^{(-)\dagger}(y) = \begin{cases} 0 & \text{se } t_x > t_y \\ -i\tilde{G}^0(x, y) & \text{se } t_x < t_y. \end{cases} \quad (4.104)$$

Com isso, usando o teorema de Wick e sabendo que o valor esperado do ordenador normal dos operadores no estado $|\tilde{\Phi}_0\rangle$ é zero, o segundo termo da expansão (4.97), ou seja, o termo de primeira ordem, fica

$$\begin{aligned} i\tilde{G}_{\alpha\beta}^{\uparrow(1)}(x, y) &= \frac{i}{\hbar} \sum_{\lambda\lambda', \mu\mu'} \frac{1}{2} \int d^4x_1 d^4x'_1 \mathcal{W}(x_1, x'_1)_{\lambda\lambda', \mu\mu'} \\ &\times \{i\tilde{G}_{\alpha\beta}^0(x, y)[i\tilde{G}_{\mu'\mu}^0(x'_1, x'_1)i\tilde{G}_{\lambda'\lambda}^0(x_1, x_1) - i\tilde{G}_{\mu'\lambda}^0(x'_1, x_1)i\tilde{G}_{\lambda'\mu}^0(x_1, x'_1)] \\ &+ i\tilde{G}_{\alpha\lambda}^0(x, x_1)[i\tilde{G}_{\lambda'\mu}^0(x_1, x'_1)i\tilde{G}_{\mu'\beta}^0(x'_1, y) - i\tilde{G}_{\lambda'\beta}^0(x_1, y)i\tilde{G}_{\mu'\mu}^0(x'_1, x'_1)] \\ &+ i\tilde{G}_{\alpha\mu}^0(x, x'_1)[i\tilde{G}_{\mu'\lambda}^0(x'_1, x_1)i\tilde{G}_{\lambda'\beta}^0(x_1, y) \\ &- i\tilde{G}_{\mu'\beta}^0(x'_1, y)i\tilde{G}_{\lambda'\lambda}^0(x_1, x_1)]\}, \end{aligned} \quad (4.105)$$

Seguindo passos semelhantes ao capítulo anterior, encontramos

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}(x, y) = \tilde{G}_{\alpha\beta}^0(x, y) + \int d^4x_1 d^4x'_1 \tilde{G}_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \tilde{\Sigma}(x_1, x'_1)_{\lambda\mu} \tilde{G}_{\mu\beta}^0(x'_1, y), \quad (4.106)$$

sendo $\tilde{\Sigma}(x_1, x'_1)_{\lambda\mu}$ a autoenergia. Escrevendo a autoenergia em termos da autoenergia própria, $\tilde{\Sigma}^*$, como

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}(x_1, x'_1) &= \tilde{\Sigma}^*(x_1, x'_1) + \int d^4x_2 d^4x'_2 \tilde{\Sigma}^*(x_1, x_2) \tilde{G}^0(x_2, x'_2) \tilde{\Sigma}^*(x'_2, x'_1) \\ &+ \int d^4x_2 d^4x'_2 \int d^4x_3 d^4x'_3 \tilde{\Sigma}^*(x_1, x_2) \tilde{G}^0(x_2, x'_2) \tilde{\Sigma}^*(x'_2, x_3) \\ &\times \tilde{G}^0(x_3, x'_3) \tilde{\Sigma}^*(x'_3, x'_1) + \dots \end{aligned} \quad (4.107)$$

encontramos

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}(x, y) = \tilde{G}_{\alpha\beta}^0(x, y) + \int d^4x_1 d^4x'_1 \tilde{G}_{\alpha\lambda}^0(x, x_1) \tilde{\Sigma}^*(x_1, x'_1)_{\lambda\mu} \tilde{G}_{\mu\beta}^0(x'_1, y), \quad (4.108)$$

que é a equação de Dyson dual no espaço de configuração. Introduzindo a transformada de Fourier, ou seja,

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}(x, y) = (2\pi)^{-4} \int d^4k e^{-ik(x-y)} \tilde{G}_{\alpha\beta}(k), \quad (4.109)$$

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}^0(x, y) = (2\pi)^{-4} \int d^4k e^{-ik(x-y)} \tilde{G}_{\alpha\beta}^0(k), \quad (4.110)$$

$$\tilde{\Sigma}^*(x, y)_{\alpha\beta} = (2\pi)^{-4} \int d^4k e^{-ik(x-y)} \tilde{\Sigma}^*(k)_{\alpha\beta}, \quad (4.111)$$

encontramos

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}(k) = \tilde{G}_{\alpha\beta}^0(k) + \tilde{G}_{\alpha\lambda}^0(k) \tilde{\Sigma}^*(k)_{\lambda\mu} \tilde{G}_{\mu\beta}(k), \quad (4.112)$$

que, na forma matricial, fica

$$\tilde{G}(k) = \frac{1}{[\tilde{G}^0(k)]^{-1} - \tilde{\Sigma}^*(k)}. \quad (4.113)$$

5 Função de Green na DCT

Para obter a função de Green na DCT é preciso construir o espaço de Fock duplicado e desenvolver nesse espaço a evolução temporal, as descrições e a teoria de perturbação. Apresentaremos um desenvolvimento geral e no final indicaremos como esse desenvolvimento deve ser adaptado para o caso de sistemas de férmions.

5.1 Espaço de Fock Duplicado

O formalismo de DCT estabelece [17,18] que a introdução dos efeitos de temperatura em sistemas de campos quânticos é feita através de uma transformação de Bogoliubov sobre o estado das partículas pertencentes ao espaço de Fock duplicado. Este espaço de Fock duplicado é formado pela soma direta de espaços de Hilbert estendidos

$$\hat{\mathcal{H}}_n^\pm = \mathcal{H}_n^\pm \otimes \tilde{\mathcal{H}}_n^\pm, \quad (5.1)$$

correspondentes aos sistemas duplicados de n partículas. Dessa forma, o espaço de Fock duplicado fica

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{F}}^\pm &= \bigoplus_{n=0}^{\infty} (\mathcal{H}_n^\pm \otimes \tilde{\mathcal{H}}_n^\pm) \\ &= [\mathcal{H}_0 \otimes \tilde{\mathcal{H}}_0] \oplus [\mathcal{H}_1 \otimes \tilde{\mathcal{H}}_1] \oplus \dots \oplus [\mathcal{H}_n^\pm \otimes \tilde{\mathcal{H}}_n^\pm] \oplus \dots, \end{aligned} \quad (5.2)$$

com os vetores do espaço de Hilbert estendidos sendo

$$(\hat{\phi})_n = (\phi\tilde{\phi})_n = (\phi(x_1, \dots, x_n) \otimes \tilde{\phi}(x_1, \dots, x_n)) \in [\mathcal{H}_n^\pm \otimes \tilde{\mathcal{H}}_n^\pm]. \quad (5.3)$$

Como vimos no Capítulo 2, os vetores de estado do espaço duplicado, que expandem o vácuo térmico $|0(\beta)\rangle$, possuem os mesmos autovalores de energia, ou seja, $|n, \tilde{n}\rangle$. Dessa forma, o estado do espaço de Fock da DCT será dado por [23]

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle\rangle &= |\phi_0\rangle\rangle \oplus |\phi_1\rangle\rangle \oplus \dots \oplus |\phi_n\rangle\rangle \oplus \dots \\ &= (|\phi_0\rangle \otimes |\tilde{\phi}_0\rangle) \oplus (|\phi_1\rangle \otimes |\tilde{\phi}_1\rangle) \oplus \dots \oplus (|\phi_n\rangle \otimes |\tilde{\phi}_n\rangle) \oplus \dots \\ &= |\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n, \dots; \tilde{\phi}_0, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_n, \dots\rangle \in \hat{\mathcal{F}}^\pm. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Caso o sistema tenha n partículas o estado será definido como

$$|\Psi\rangle\rangle_n = |0, 0, \dots, \phi_n, \dots; \tilde{0}, \tilde{0}, \dots, \tilde{\phi}_n, \dots\rangle. \quad (5.5)$$

O vácuo térmico pode ser escrito como

$$|0(\beta)\rangle = \mathbb{U}(\beta)|\Psi\rangle\rangle_0, \quad (5.6)$$

onde $\mathbb{U}(\beta)$ é a transformação de Bogoliubov definida em (2.39), e

$$|\Psi\rangle\rangle_0 = |\phi_0, 0, \dots; \tilde{\phi}_0, \tilde{0}, \dots\rangle \quad (5.7)$$

é o vácuo no espaço de Fock duplicado. Um estado qualquer em DCT pode ser obtido ao aplicar a transformação de Bogoliubov em um estado qualquer duplicado, ou seja,

$$|\Psi(t; \beta)\rangle\rangle = \mathbb{U}(\beta)|\Psi(t)\rangle\rangle. \quad (5.8)$$

5.2 Evolução Temporal e as Descrições da Teoria Quântica em $\hat{\mathcal{F}}^\pm$

Na descrição de Schrödinger os estados são dependentes do tempo e a dinâmica de um sistema duplicado será

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_s(t)\rangle\rangle &= \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_s(t)\rangle\rangle \right) \otimes |\tilde{\Psi}_s(t)\rangle\rangle + |\Psi_s(t)\rangle\rangle \otimes \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Psi}_s(t)\rangle\rangle \right) \\ &= (\mathbf{H} \otimes 1) |\Psi_s(t)\rangle\rangle \otimes |\tilde{\Psi}_s(t)\rangle\rangle - (1 \otimes \tilde{\mathbf{H}}) |\Psi_s(t)\rangle\rangle \otimes |\tilde{\Psi}_s(t)\rangle\rangle \\ &= \hat{\mathbf{H}} |\Psi_s(t)\rangle\rangle, \end{aligned} \quad (5.9)$$

onde foi usado (3.60) e (4.53), e definimos

$$\hat{\mathbf{H}} = \mathbf{H} \otimes 1 - 1 \otimes \tilde{\mathbf{H}}, \quad (5.10)$$

ou usando os dubletos

$$\underline{a}_k = \begin{pmatrix} a_k \\ \tilde{a}_k^\dagger \end{pmatrix}, \quad (5.11)$$

e

$$\underline{a}_k^\dagger = \begin{pmatrix} a_k^\dagger & -\sigma \tilde{a}_k \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

podemos escrever (5.10), a menos de uma constante aditiva, na forma matricial

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_{kl} \underline{a}_k^\dagger \mathbf{H}_{kl} \underline{a}_l, \quad (5.13)$$

onde

$$\mathbf{H}_{kl} = \begin{pmatrix} H_{kl} & 0 \\ 0 & -\sigma \tilde{H}_{lk} \end{pmatrix}, \quad (5.14)$$

com $\sigma = 1$ no caso de bósons, e $\sigma = -1$ no caso de férmions.

A equação (5.9) tem como solução a transformação

$$|\Psi_s(t)\rangle\rangle = e^{-i\hat{\mathbf{H}}(t-t_0)/\hbar} |\Psi_s(t_0)\rangle\rangle. \quad (5.15)$$

Escrevendo o hamiltoniano independente do tempo como (3.62) e (4.55) temos no espaço duplicado

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}_0 + \hat{\mathbf{H}}_1, \quad (5.16)$$

onde $\hat{\mathbf{H}}_0 = \mathbf{H}_0 \otimes 1 - 1 \otimes \tilde{\mathbf{H}}_0$ e $\hat{\mathbf{H}}_1 = \mathbf{H}_1 \otimes 1 - 1 \otimes \tilde{\mathbf{H}}_1$. Um estado duplicado na descrição de interação será

$$|\Psi_I(t)\rangle\rangle = e^{i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} |\Psi_s(t)\rangle\rangle, \quad (5.17)$$

que tem como equação de movimento

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} |\Psi_s(t)\rangle\rangle \right) \quad (5.18)$$

$$= \hat{\mathbf{H}}_1(t) |\Psi_I(t)\rangle\rangle, \quad (5.19)$$

sendo

$$\hat{\mathbf{H}}_1(t) = e^{i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} \hat{\mathbf{H}}_1 e^{-i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar}. \quad (5.20)$$

Na descrição de Schrödinger em DCT, um elemento de matriz arbitrário de um observável $\hat{\mathbf{O}}_s$ é o elemento de matriz do observável em um estado duplicado e pode ser escrito como

$$\langle\langle \Psi'_s(t) | \hat{\mathbf{O}}_s | \Psi_s(t) \rangle\rangle = \langle\langle \Psi'_I(t) | e^{i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} \hat{\mathbf{O}}_s e^{-i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} | \Psi_I(t) \rangle\rangle, \quad (5.21)$$

sugerindo a definição de um observável na descrição de interação como

$$\hat{\mathbf{O}}_I(t) = e^{i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} \hat{\mathbf{O}}_s e^{-i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar}. \quad (5.22)$$

A dependência temporal do operador (5.22) será

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathbf{O}}_I(t) &= e^{i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} (\hat{\mathbf{O}}_s \hat{\mathbf{H}}_0 - \hat{\mathbf{H}}_0 \hat{\mathbf{O}}_s) e^{-i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} \\ &= [\hat{\mathbf{O}}_I(t), \hat{\mathbf{H}}_0]_-. \end{aligned} \quad (5.23)$$

A solução de (5.19) pode ser obtida usando a descrição de Schrödinger, ou seja,

$$\begin{aligned} |\Psi_I(t)\rangle\rangle &= e^{i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} |\Psi_s(t)\rangle\rangle \\ &= e^{i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} e^{-i\hat{\mathbf{H}}(t-t_0)/\hbar} |\Psi_s(t_0)\rangle\rangle \\ &= e^{i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} e^{-i\hat{\mathbf{H}}(t-t_0)/\hbar} e^{-i\hat{\mathbf{H}}_0 t_0/\hbar} |\Psi_I(t_0)\rangle\rangle \end{aligned} \quad (5.24)$$

$$\begin{aligned} &= e^{i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} e^{-i\hat{\mathbf{H}}(t-t_0)/\hbar} e^{-i\hat{\mathbf{H}}_0 t_0/\hbar} \\ &\times e^{-i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} e^{i\hat{\mathbf{H}}(t-t_0)/\hbar} e^{i\hat{\mathbf{H}}_0 t_0/\hbar} |\Psi_I(t_0)\rangle\rangle, \end{aligned} \quad (5.25)$$

e usando as equações (3.72) e (4.65)

$$|\Psi_I(t)\rangle\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) \tilde{\mathbf{U}}(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle\rangle, \quad (5.26)$$

o que nos leva a definir [23]

$$\hat{\mathbf{U}}(t, t_0) = \mathbf{U}(t, t_0) \tilde{\mathbf{U}}(t, t_0). \quad (5.27)$$

Na descrição de Heisenberg, o estado será dado por

$$|\Psi_H(t)\rangle\rangle = e^{i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar}|\Psi_s(t)\rangle\rangle, \quad (5.28)$$

cuja derivada temporal é

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_H(t)\rangle\rangle = 0, \quad (5.29)$$

mostrando que $|\Psi_H(t)\rangle\rangle$ é independente do tempo. Um elemento de matriz arbitrário, de um observável $\hat{\mathbf{O}}_s$, pode ser escrito como

$$\langle\langle\Psi'_s(t)|\hat{\mathbf{O}}_s|\Psi_s(t)\rangle\rangle = \langle\langle\Psi'_H|e^{i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar}\hat{\mathbf{O}}_se^{-i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar}|\Psi_H\rangle\rangle, \quad (5.30)$$

sugerindo para um observável na descrição de Heisenberg a expressão

$$\hat{\mathbf{O}}_H(t) = e^{i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar}\hat{\mathbf{O}}_se^{-i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar}, \quad (5.31)$$

com a dependência temporal dada por

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathbf{O}}_H(t) = [\hat{\mathbf{O}}_H(t), \hat{\mathbf{H}}]_-. \quad (5.32)$$

A equação (5.31) pode ser escrita em relação a descrição de interação como

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{O}}_H(t) &= e^{i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar}e^{-i\hat{\mathbf{H}}_0t/\hbar}\hat{\mathbf{O}}_I(t)e^{i\hat{\mathbf{H}}_0t/\hbar}e^{-i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar} \\ &= \hat{\mathbf{U}}(0, t)\hat{\mathbf{O}}_I(t)\hat{\mathbf{U}}(t, 0). \end{aligned} \quad (5.33)$$

Em adição a esses resultados, tem-se

$$|\Psi_H\rangle\rangle = |\Psi_s(0)\rangle\rangle = |\Psi_I(0)\rangle\rangle, \quad (5.34)$$

$$\hat{\mathbf{O}}_s = \hat{\mathbf{O}}_H(0) = \hat{\mathbf{O}}_I(0), \quad (5.35)$$

ou seja, as três descrições coincidem em $t = 0$.

5.3 Teoria de Perturbação

A função de Green termalizada de uma partícula é definida pela equação [20]

$$i\hat{G}_{\alpha\beta}(x, y; \beta) = \frac{\langle\Psi_0(\beta)|T[\underline{\Psi}_{H\alpha}(x)\underline{\Psi}_{H\gamma}^\dagger(y)]|\Psi_0(\beta)\rangle\rangle}{\langle\Psi_0(\beta)|\Psi_0(\beta)\rangle\rangle}, \quad (5.36)$$

onde $|\Psi_0(\beta)\rangle\rangle$ é o estado fundamental térmico na descrição de Heisenberg de um sistema com interação, isto é,

$$|\Psi_0(\beta)\rangle\rangle = \mathbb{U}(\beta)|\Psi_0\rangle\rangle, \quad (5.37)$$

e das equações (2.100) e (2.101) temos, respectivamente, os dubletos

$$\underline{\Psi}_{H\alpha}(x) = \begin{pmatrix} \Psi_{H\alpha}(x) \\ \tilde{\Psi}_{H\alpha}^\dagger(x) \end{pmatrix}, \quad (5.38)$$

e

$$\underline{\Psi}_{H\gamma}^\dagger(y) = (\Psi_{H\gamma}^\dagger(y), -\sigma\tilde{\Psi}_{H\gamma}(y)). \quad (5.39)$$

A função de Green à temperatura finita (5.36) pode ser escrita em termos da função de Green à temperatura nula como [18, 20]

$$i\hat{G}_{\alpha\gamma}(x, y; \beta) = \mathbb{B}^{-1}(\beta)i\hat{G}_{\alpha\gamma}(x, y; 0)\mathbb{B}(\beta), \quad (5.40)$$

onde as matrizes $\mathbb{B}(\beta)$ e $\mathbb{B}^{-1}(\beta)$ são dadas por (2.99) e (2.109) e

$$i\hat{G}_{\alpha\gamma}(x, y; 0) = \frac{\langle\langle\Psi_0|T[\Psi_{H\alpha}(x)\underline{\Psi}_{H\gamma}^\dagger(y)]|\Psi_0\rangle\rangle}{\langle\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle\rangle}, \quad (5.41)$$

é a função de Green à temperatura nula, sendo $|\Psi_0\rangle\rangle$ o estado fundamental duplicado. A expressão (5.41) explicitada fica

$$i\hat{G}_{\alpha\gamma}(x, y; 0) = \langle\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle\rangle^{-1}\langle\langle\Psi_0|\left(\begin{array}{cc} T[\Psi_{H\alpha}(x)\Psi_{H\gamma}^\dagger(y)] & -\sigma T[\Psi_{H\alpha}(x)\tilde{\Psi}_{H\gamma}(y)] \\ T[\tilde{\Psi}_{H\alpha}^\dagger(x)\Psi_{H\gamma}^\dagger(y)] & -\sigma T[\tilde{\Psi}_{H\alpha}^\dagger(x)\tilde{\Psi}_{H\gamma}(y)] \end{array}\right)|\Psi_0\rangle\rangle. \quad (5.42)$$

Separando o vetor de estado duplicado e notando que os elementos da diagonal secundária são nulos encontramos

$$i\hat{G}_{\alpha\gamma}(x, y; 0) = \begin{pmatrix} iG_{\alpha\gamma}(x, y) & 0 \\ 0 & i\tilde{G}_{\gamma\alpha}(y, x) \end{pmatrix}, \quad (5.43)$$

onde $iG_{\alpha\beta}(x, y)$ e $-i\tilde{G}_{\gamma\alpha}(y, x)$ são definidos por (3.97) e (4.88).

No espaço dos momentos, das definições (3.128) e (4.109), temos

$$i\hat{G}_{\alpha\gamma}(x, y; 0) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p e^{-ip(x-y)} i\hat{G}_{\alpha\gamma}(p; 0), \quad (5.44)$$

onde

$$i\hat{G}_{\alpha\gamma}(p; 0) = \begin{pmatrix} iG_{\alpha\gamma}(p) & 0 \\ 0 & i\tilde{G}_{\gamma\alpha}(-p) \end{pmatrix}, \quad (5.45)$$

e $p = (\mathbf{k}, \omega)$. Substituindo em (5.40) obtemos

$$i\hat{G}_{\alpha\gamma}(x, y; \beta) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p e^{-ip(x-y)} i\hat{G}_{\alpha\gamma}(p; \beta), \quad (5.46)$$

onde

$$i\hat{G}_{\alpha\gamma}(p; \beta) = \left[\mathbb{B}_p^{-1}(\beta) i\hat{G}(p; 0) \mathbb{B}_p(\beta) \right]_{\alpha\gamma}. \quad (5.47)$$

com

$$\mathbb{B}_p(\beta) = \begin{pmatrix} u_p(\beta) & -v_p(\beta) \\ -\sigma v_p(\beta) & u_p(\beta) \end{pmatrix}, \quad \mathbb{B}_p^{-1}(\beta) = \begin{pmatrix} u_p(\beta) & v_p(\beta) \\ \sigma v_p(\beta) & u_p(\beta) \end{pmatrix}. \quad (5.48)$$

e

$$u_p(\beta) = \frac{1}{\sqrt{1 + e^{-\beta\omega_p}}}, \quad (5.49)$$

$$v_p(\beta) = \frac{1}{\sqrt{1 + e^{\beta\omega_p}}}. \quad (5.50)$$

Usando (5.48) e (5.45) obtemos de (5.47) a função de Green térmica no espaço dos momentos e a utilizando em (5.46) determinamos a função de Green térmica no espaço das coordenadas em termos das funções de Green do espaço direto e do espaço dual.

A aplicação desse desenvolvimento a sistemas de férmions (sólidos, átomos e moléculas) é realizada no presente trabalho considerando no estado duplicado $|\psi_0\rangle\rangle$ dado por (5.7), $\phi_0 = |\phi_0\rangle$ e $\tilde{\phi}_0 = |\tilde{\phi}_0\rangle$, no caso de sólidos, associados ao mar de Fermi, e os operadores de campo criando e destruindo partículas ou criando e destruindo buracos; já no caso de átomos e moléculas $\phi_0 = |\phi_0\rangle$ e $\tilde{\phi}_0 = |\tilde{\phi}_0\rangle$ referem-se ao estado fundamental desses sistemas e os operadores atuam originando diferentes configurações.

6 Aplicações

Neste capítulo faremos três aplicações do formalismo desenvolvido: apresentaremos a aproximação de campo médio para átomos e moléculas usando diretamente a DCT, mostraremos o uso da função de Green da DCT no estudo de um sistema de férmions livres e obteremos expressões de interesse em moléculas e sólidos em primeira aproximação e na aproximação dita autoconsistente (Hartree-Fock) caracterizada pela autoenergia própria Σ^* .

6.1 Aplicação direta da DCT para o Hartree-Fock

O método Hartree-Fock tem como objetivo encontrar as autofunções de um operador hamiltoniano \mathbf{H} de muitas partículas sob a condição de que a quantidade $\langle \mathbf{H} \rangle$ seja mínima. Portanto, seja o hamiltoniano, no caso de sistemas fermiônicos, no espaço de Fock dado por

$$\mathbf{H} = \int d^3x a^\dagger(\mathbf{x}) H^0(\mathbf{x}) a(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d^3x d^3x' a^\dagger(\mathbf{x}) a^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') a(\mathbf{x}') a(\mathbf{x}), \quad (6.1)$$

onde $H^0(\mathbf{x})$ é o hamiltoniano de uma partícula e $V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ é a interação entre os elétrons. Sendo ξ_j o conjunto ortonormal das autofunções de uma partícula e usando (3.16), podemos escrever o hamiltoniano (6.1) como

$$\mathbf{H} = \sum_{jk} a_j^\dagger H_{jk}^0 a_k + \frac{1}{2} \sum_{jkj'k'} (jk|j'k') a_j^\dagger a_k^\dagger a_{j'} a_{k'}, \quad (6.2)$$

onde $a_j^\dagger = a^\dagger(\xi_j)$,

$$H_{jk}^0 = \int d^3x \xi_j^\dagger(\mathbf{x}) H^0(\mathbf{x}) \xi_k(\mathbf{x}) \quad (6.3)$$

e

$$(jk|j'k') = \int d^3x d^3x' \xi_j^\dagger(\mathbf{x}) \xi_k^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \xi_{j'}(\mathbf{x}') \xi_{k'}(\mathbf{x}). \quad (6.4)$$

Como ponto de partida para o método variacional, vamos escolher o estado fundamental térmico

$$|\Psi_0(\beta)\rangle = |\Psi_0, \tilde{0}; \beta\rangle, \quad (6.5)$$

e considerar a excitação de elétrons como dando origem à variação no estado fundamental, ou seja,

$$|\Psi_0(\beta)\rangle \rightarrow |\Psi'_0(\beta)\rangle = |\Psi_0(\beta)\rangle + \delta|\Psi_0(\beta)\rangle, \quad (6.6)$$

onde

$$\delta|\Psi_0(\beta)\rangle = \sum_{jk} \eta_{jk} a_j^\dagger(\beta) a_k(\beta) |\Psi_0(\beta)\rangle, \quad (6.7)$$

com k sendo um estado ocupado, j um estado desocupado e η_{jk} um número pequeno e obedecendo a condição $\eta_{jk} = -\eta_{jk}^*$ para o novo estado ser ortonormal. Assim, o valor esperado do hamiltoniano (6.2) no estado (6.6) fica

$$\begin{aligned} E' &= \langle \Psi'_0(\beta) | \mathbf{H} | \Psi'_0(\beta) \rangle \\ &= E + \delta E, \end{aligned} \quad (6.8)$$

sendo

$$E = \langle \Psi_0(\beta) | \mathbf{H} | \Psi_0(\beta) \rangle, \quad (6.9)$$

e

$$\begin{aligned} \delta E &= \sum_{jk} \eta_{jk} \langle \Psi_0(\beta) | \mathbf{H} a_j^\dagger(\beta) a_k(\beta) | \Psi_0(\beta) \rangle \\ &+ \sum_{jk} \eta_{jk}^* \langle \Psi_0(\beta) | a_k^\dagger(\beta) a_j(\beta) \mathbf{H} | \Psi_0(\beta) \rangle. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Trocando os índices de uma das somas, a variação no funcional energia (6.10) pode ser reescrita como

$$\delta E = \sum_{jk} \eta_{jk} \langle \Psi_0(\beta) | [\mathbf{H}, a_k^\dagger(\beta) a_j(\beta)]_- | \Psi_0(\beta) \rangle, \quad (6.11)$$

onde $[\cdot]_-$ é o comutador. Para a quantidade $\langle \mathbf{H} \rangle$ ser mínima (ou apresentar um extremo), temos que $\delta E = 0$. Como η_{jk} é arbitrário, segue que

$$\langle \Psi_0(\beta) | [\mathbf{H}, a_k^\dagger(\beta) a_j(\beta)]_- | \Psi_0(\beta) \rangle = 0. \quad (6.12)$$

Para analisar a equação (6.12) vamos dividi-la em duas partes: a primeira, a parte do hamiltoniano não interagente, resulta, usando a transformação de Bogoliubov, em:

$$\begin{aligned} I_{de} &= \sum_{jk} H_{jk}^0 \langle \Psi_0(\beta) | [a_j^\dagger a_k, a_d^\dagger(\beta) a_e(\beta)]_- | \Psi_0(\beta) \rangle \\ &= \sum_{jk} H_{jk}^0 \langle \Psi_0(\beta) | [(u_j a_j^\dagger(\beta) + v_j \tilde{a}_j(\beta)) (u_k a_k(\beta) + v_k \tilde{a}_k^\dagger(\beta)), a_d^\dagger(\beta) a_e(\beta)]_- \\ &\times | \Psi_0(\beta) \rangle, \end{aligned} \quad (6.13)$$

onde foram usadas as relações (2.92 - 2.93) e, por simplicidade de notação, omitimos a dependência em β das funções u e v . Observando que é necessário ter a mesma quantidade de operadores de criação e destruição do espaço direto (ou dual) para que o comutador seja não nulo, ficamos com apenas um termo, ou seja,

$$\begin{aligned} I_{de} &= \sum_{jk} H_{jk}^0 u_j u_k \langle \Psi_0, \tilde{0}; \beta | [a_j^\dagger(\beta) a_k(\beta), a_d^\dagger(\beta) a_e(\beta)]_- | \Psi_0, \tilde{0}; \beta \rangle \\ &= \sum_{jk} H_{jk}^0 u_j u_k \langle \Psi_0, \tilde{0} | [a_j^\dagger a_k, a_d^\dagger a_e]_- | \Psi_0, \tilde{0} \rangle, \end{aligned} \quad (6.14)$$

tendo a transformação de Bogoliubov sido usada na última igualdade. Lembrando as identidades:

$$[AB, C]_- = A[B, C]_{\mp} \pm [A, C]_{\mp} B, \quad (6.15)$$

com as relações de anticomutação (2.63) e (2.64), a equação (6.14) torna-se

$$\begin{aligned} I_{de} &= \sum_{jk} H_{jk}^0 u_j u_k (\delta_{dk} \delta_{je} n_e - \delta_{ej} \delta_{dk} n_d) \\ &= H_{ed}^0 u_e u_d (n_e - n_d), \end{aligned} \quad (6.16)$$

onde consideramos $\langle a_j^\dagger a_e \rangle = \delta_{je} n_e$. Por procedimentos semelhantes, a segunda parte de (6.12), resulta em:

$$\begin{aligned} II_{de} &= \frac{1}{2} \sum_{jkj'k'} (jk|j'k') \langle \Psi_0(\beta) | [a_j^\dagger a_k^\dagger a_{j'} a_{k'}, a_d^\dagger(\beta) a_e(\beta)] | \Psi_0(\beta) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{jkj'k'} (jk|j'k') \langle \Psi_0(\beta) | [(u_j a_j^\dagger(\beta) + v_j \tilde{a}_j(\beta)) (u_k a_k^\dagger(\beta) + v_k \tilde{a}_k(\beta)) (u_{j'} a_{j'}(\beta) + v_{j'} \tilde{a}_{j'}^\dagger(\beta))] \\ &\quad \times (u_{k'} a_{k'}(\beta) + v_{k'} \tilde{a}_{k'}^\dagger(\beta)), a_d^\dagger(\beta) a_e(\beta)] | \Psi_0(\beta) \rangle. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Realizando as multiplicações e usando a transformação de Bogoliubov, obtemos

$$\begin{aligned} II_{de} &= \frac{1}{2} \sum_{jkj'k'} (jk|j'k') \left\{ u_j u_k u_{j'} u_{k'} \langle \Psi_0, \tilde{0} | [a_j^\dagger a_k^\dagger a_{j'} a_{k'}, a_d^\dagger a_e] | \Psi_0, \tilde{0} \rangle \right. \\ &\quad + u_j v_k u_{j'} v_{k'} \langle \Psi_0, \tilde{0} | [a_j^\dagger \tilde{a}_k a_{j'} \tilde{a}_{k'}^\dagger, a_d^\dagger a_e] | \Psi_0, \tilde{0} \rangle \\ &\quad + u_j v_k v_{j'} u_{k'} \langle \Psi_0, \tilde{0} | [a_j^\dagger \tilde{a}_k a_{j'} \tilde{a}_{k'}^\dagger, a_d^\dagger a_e] | \Psi_0, \tilde{0} \rangle \\ &\quad + v_j u_k u_{j'} v_{k'} \langle \Psi_0, \tilde{0} | [\tilde{a}_j a_k^\dagger a_{j'} \tilde{a}_{k'}^\dagger, a_d^\dagger a_e] | \Psi_0, \tilde{0} \rangle \\ &\quad \left. + v_j u_k v_{j'} u_{k'} \langle \Psi_0, \tilde{0} | [\tilde{a}_j a_k^\dagger \tilde{a}_{j'}^\dagger a_{k'}, a_d^\dagger a_e] | \Psi_0, \tilde{0} \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Então, juntando (6.18) com I_{de} , a equação (6.12) resulta em:

$$\begin{aligned} \left\{ H_{ed}^0 + \sum_j ((ej|dj) - (je|dj)) u_j^2(\beta) n_j + \sum_j ((ej|dj) \right. \\ \left. + (je|dj)) v_j^2(\beta) \right\} u_e(\beta) u_d(\beta) (n_e - n_d) = 0. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Estudando os possíveis casos para os estados ξ_e e ξ_d (quando os dois são estados ocupados, os dois desocupados ou um ocupado e o outro desocupado) e sabendo que $n_j = 1$ caso o estado ξ_j esteja ocupado e $n_j = 0$ caso o estado esteja desocupado, encontramos

$$\left\{ H_{er}^0 + \sum_s ((es|rs) - (se|rs)) u_s^2(\beta) + \sum_j ((ej|rj) + (je|rj)) v_j^2(\beta) \right\} u_e(\beta) u_r(\beta) = \epsilon_r \delta_{er}, \quad (6.20)$$

onde ξ_e e $\xi_d = \xi_r$ são estados ocupados e o primeiro somatório é sobre os estados ocupados. Esta é a forma das equações de Hartree-Fock na DCT. Os autovalores ϵ_k podem ser então interpretados como energia de excitação aproximada dos níveis sob efeito de temperatura. Note que H_{er}^0 pode ser formado pelo operador energia cinética e o termo de interação elétron-núcleos, no caso de moléculas.

Seguindo passos semelhantes, encontramos a energia total

$$\begin{aligned} E &= \langle \Psi_0(\beta) | \mathbf{H} | \Psi_0(\beta) \rangle \\ &= \sum_e H_{ee}^0 v_e^2(\beta) + \sum_r u_r^2(\beta) \left\{ H_{rr}^0 + \sum_s ((rs|rs) - (rs|sr)) u_s^2(\beta) \right. \\ &\quad \left. + \sum_e ((re|re) + (re|er)) v_e^2(\beta) \right\}, \end{aligned} \quad (6.21)$$

onde $(rs|rs)$ e $(re|re)$ representam o potencial coulombiano e $(rs|sr)$ e $(re|er)$ são os termos de troca.

É interessante lembrar que na formulação usual (sem incluir temperatura) [3], sendo

$$H = \sum_{i,j} T_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl} a_j^\dagger a_i^\dagger a_k a_l, \quad (6.22)$$

com T_{ij} o elemento de matriz do operador energia cinética, $V_{ij,kl} = V_{ji,lk}$ e $\delta|\Phi\rangle = \eta a_k^\dagger a_i |\Phi\rangle$, a condição $\langle \delta\Phi | H | \Phi \rangle = 0$ resulta, para um sistema de N partículas, em

$$T_{ki} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (V_{jk,ji} - V_{jk,ij} - V_{kj,ji} + V_{kj,ij}) = 0, \quad (6.23)$$

que deve ser verificado para $k > N$ e $i \leq N$, ou seja, k é um orbital desocupado e i um orbital ocupado. Segue que se pode definir um hamiltoniano autoconsistente, operador de uma partícula, dado por:

$$H^{sc} = \sum_{ki} \left[T_{ki} + \sum_{j=1}^N (V_{jk,ij} - V_{kj,ji}) \right] a_k^\dagger a_i, \quad (6.24)$$

onde agora não há restrição sobre os valores de k e i . Mostra-se então [3] que é conveniente mudar para uma representação que diagonaliza H^{sc} e isto é realizado considerando combinação linear de níveis ocupados para obter novos níveis ocupados, e de níveis desocupados para obter novos níveis desocupados. Pela definição de H^{sc} , esse operador é invariante sob essa transformação [3]. Nesta nova representação tem-se de H^{sc} que

$$T_{ki} + \sum_{j=1}^N (V_{jk,ij} - V_{kj,ji}) = \epsilon_i \delta_{ki}, \quad (6.25)$$

onde os ϵ_i são os autovalores de H^{sc} .

As equações (6.25) são a forma usual (sem incluir a temperatura) das equações de Hartree-Fock e interpretadas como uma equação para uma partícula cuja energia potencial é dada pela interação média com todas as outras partículas no sistema [3].

Os autovalores ϵ_i são interpretados como energias de excitação aproximadas dos níveis i e chamados de energia autoconsistente dos níveis.

O cálculo de H no estado-teste $|\phi\rangle$ contendo N partículas é

$$E_0 = \sum_{i=1}^N T_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (V_{ij,ij} - V_{ij,ji}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (T_{ii} + \epsilon_i), \quad (6.26)$$

e, se considerarmos o estado $a_k^\dagger a_i |\phi\rangle$ que é a configuração em que a partícula originalmente no nível i é excitada para o nível k , a energia é

$$\begin{aligned} E_0 &+ T_{kk} - T_{ii} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (V_{kj,kj} - V_{kj,jk} - V_{ij,ij} + V_{ij,ji}) \\ &= E_0 + \epsilon_k - \epsilon_i - V_{ki,ki} + V_{ki,ik}, \end{aligned} \quad (6.27)$$

onde $V_{ki,ki}$ representa o potencial coulombiano e $V_{ki,ik}$ é o termo de troca.

No caso de haver um grande número de partículas no sistema, os dois últimos termos são da ordem $\frac{1}{N}$ e assim a energia de excitação é da ordem de $\epsilon_k - \epsilon_i$, mostrando que os níveis desocupados devem ter energias maiores que os ocupados para que $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$ seja estacionário [3].

6.2 Férmions Livres

Desenvolver a função de Green para um sistema homogêneo não interagente é a aplicação do formalismo desenvolvido neste trabalho que apresentamos nesta seção. Especificamente iremos calcular o valor esperado do número de partículas e da energia considerando a temperatura.

6.2.1 Férmions Livres no Espaço Direto

No modelo de partícula e buraco, tomando b^\dagger e b sendo operadores que criam e destroem partículas "fora" do mar de Fermi, e d^\dagger e d operadores que criam e destroem buracos "dentro" do mar de Fermi, os operadores de campo na descrição de interação podem ser definidos em termo destes operadores, como

$$\Psi_I(x) = \sum_{k>k_F} b_k \xi_k(\mathbf{x}) e^{-i\omega_k t} + \sum_{k<k_F} d_k^\dagger \xi_k(\mathbf{x}) e^{-i\omega_k t}, \quad (6.28)$$

$$\Psi_I^\dagger(x) = \sum_{k>k_F} b_k^\dagger \xi_k^\dagger(\mathbf{x}) e^{i\omega_k t} + \sum_{k<k_F} d_k \xi_k^\dagger(\mathbf{x}) e^{i\omega_k t}, \quad (6.29)$$

onde k_F (ϵ_F) é o último nível do mar de Fermi, e usamos a notação $b_k = b(\xi_k)$ sendo $\xi_k \in \mathcal{H}_1$ o autoestado do hamiltoniano de uma partícula livre, isto é,

$$H_0 \xi_k = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \xi_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \xi_k. \quad (6.30)$$

Com isso, o hamiltoniano (3.50) torna-se

$$\mathbf{H} = \sum_{k>k_F} \hbar \omega_k b_k^\dagger b_k - \sum_{k<k_F} \hbar \omega_k d_k^\dagger d_k + \sum_{k<k_F} \hbar \omega_k, \quad (6.31)$$

onde o último termo representa a energia do mar de Fermi.

Definimos a função de Green para férmions não interagentes como

$$iG_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \langle \Phi_0 | T[\Psi_{I\alpha}(\mathbf{x}, t) \Psi_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t')] | \Phi_0 \rangle, \quad (6.32)$$

sendo $|\Phi_0\rangle$ o estado fundamental não interagente normalizado pertencente ao espaço de Fock. Substituindo (6.28 - 6.29) em (6.32) tem-se

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= \sum_{k,k'>k_F} \delta_{\alpha\beta} \xi_k(\mathbf{x}) \xi_{k'}^\dagger(\mathbf{x}') e^{-i\omega_k t + i\omega_{k'} t'} \langle \Phi_0 | T[b_k(t) b_{k'}^\dagger(t')] | \Phi_0 \rangle \\ &+ \sum_{k,k'<k_F} \delta_{\alpha\beta} \xi_k(\mathbf{x}) \xi_{k'}^\dagger(\mathbf{x}') e^{-i\omega_k t + i\omega_{k'} t'} \langle \Phi_0 | T[d_{k'}^\dagger(t') d_k(t)] | \Phi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Sabendo que

$$d_k(t)|\Phi_0\rangle = b_k(t)|\Phi_0\rangle = 0, \quad (6.34)$$

a função de Green (6.33) torna-se

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= \delta_{\alpha\beta} \sum_k \xi_k(\mathbf{x}) \xi_k^\dagger(\mathbf{x}') e^{-i\omega_k(t-t')} \\ &\times [\theta(t-t')\theta(\epsilon_k - \epsilon_F) - \theta(t'-t)\theta(\epsilon_F - \epsilon_k)], \end{aligned} \quad (6.35)$$

ou, usando a representação integral para função degrau,

$$\theta(\nu) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega e^{-i\omega\nu}}{2\pi i(\omega + i\eta)}, \quad (6.36)$$

escrevemos (6.35) como

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= \frac{\delta_{\alpha\beta}}{2\pi} \sum_k \xi_k(\mathbf{x}) \xi_k^\dagger(\mathbf{x}') \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \\ &\times \left[\frac{\theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right], \end{aligned} \quad (6.37)$$

nos levando a definir

$$G_{\alpha\beta}^0(\mathbf{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} \left[\frac{\theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right]. \quad (6.38)$$

Agora, podemos calcular o número total de partículas no estado fundamental não perturbado $|\Phi_0\rangle$

$$\begin{aligned} \mathbf{N} &= \int d^3x n(\mathbf{x}) = \int d^3x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha=1}^{2s+1} \frac{\langle \Phi_0 | \Psi_\alpha^\dagger(x') \Psi_\alpha(x) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} \\ &= - \int d^3x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha=1}^{2s+1} iG_{\alpha\alpha}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \\ &= (2s+1) \sum_k \theta(\epsilon_F - \epsilon_k). \end{aligned} \quad (6.39)$$

sendo s o spin da partícula. Cada valor de $\epsilon_k < \epsilon_F$ contribui com $\theta(\epsilon_F - \epsilon_k) = 1$ para o somatório. Portanto, o fator de spin juntamente com o somatório nos diz quantas partículas estão no mar de Fermi que, por hipótese, é o número total de partículas.

A energia, em termos da função de Green, pode ser escrita como

$$\begin{aligned} E_0 &= - \int d^3x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha=1}^{2s+1} \left(- \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) iG_{\alpha\alpha}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \\ &= - \sum_{\alpha=1}^{2s+1} \lim_{t' \rightarrow t^+} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \left(- \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) iG_{\alpha\alpha}^0(\mathbf{k}\omega). \end{aligned} \quad (6.40)$$

Usando (6.30) e (6.38), a equação (6.40) torna-se:

$$E_0 = (2s+1) \sum_k \epsilon_k \theta(\epsilon_F - \epsilon_k). \quad (6.41)$$

O termo $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ é a energia de uma partícula com momento k . Portanto, a equação (6.41) é a soma da energia de todas as partículas, como esperado.

6.2.2 Férmions Livres no Espaço Dual

No espaço dual, definimos os operadores \tilde{b}^\dagger e \tilde{b} como sendo operadores que criam e destroem partículas "fora" do mar de Fermi dual, e \tilde{d}^\dagger e \tilde{d} operadores que criam e destroem buracos "dentro" do mar de Fermi. Assim, os operadores de campo na descrição de interação são

$$\tilde{\Psi}_I(x) = \sum_{k < k_F} \tilde{b}_k \tilde{\xi}_k(\mathbf{x}) e^{i\omega_k t} + \sum_{k > k_F} \tilde{d}_k^\dagger \tilde{\xi}_k(\mathbf{x}) e^{i\omega_k t}, \quad (6.42)$$

$$\tilde{\Psi}_I^\dagger(x) = \sum_{k < k_F} \tilde{b}_k^\dagger \tilde{\xi}_k^\dagger(\mathbf{x}) e^{-i\omega_k t} + \sum_{k > k_F} \tilde{d}_k \tilde{\xi}_k^\dagger(\mathbf{x}) e^{-i\omega_k t}, \quad (6.43)$$

onde k_F (ϵ_F) é o primeiro nível do mar de Fermi dual, e usamos a notação $\tilde{b}_k = \tilde{b}(\tilde{\xi}_k)$ sendo $\tilde{\xi}_k \in \tilde{\mathcal{H}}_1$ o autoestado do hamiltoniano de uma partícula livre, isto é,

$$\tilde{H}_0 \tilde{\xi}_k = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \tilde{\xi}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\xi}_k. \quad (6.44)$$

Com isso, o hamiltoniano (4.43) torna-se

$$\tilde{\mathbf{H}} = \sum_{k < k_F} \hbar \omega_k \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k - \sum_{k > k_F} \hbar \omega_k \tilde{d}_k^\dagger \tilde{d}_k + \sum_{k > k_F} \hbar \omega_k, \quad (6.45)$$

onde o último termo representa a energia do mar de Fermi dual.

Definimos a função de Green para férmions não interagentes como

$$-i\tilde{G}_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \langle \tilde{\Phi}_0 | T[\tilde{\Psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t) \tilde{\Psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t')] | \tilde{\Phi}_0 \rangle, \quad (6.46)$$

sendo $|\tilde{\Phi}_0\rangle$ o estado fundamental não interagente normalizado pertencente ao espaço de Fock dual. Usando (6.42 - 6.43) e

$$\tilde{d}_k^\dagger(t) |\tilde{\Phi}_0\rangle = \tilde{b}_k^\dagger(t) |\tilde{\Phi}_0\rangle = 0, \quad (6.47)$$

a equação (6.46) torna-se

$$\begin{aligned} i\tilde{G}_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= \delta_{\alpha\beta} \sum_k \tilde{\xi}_k(\mathbf{x}) \tilde{\xi}_k^\dagger(\mathbf{x}') e^{i\omega_k(t-t')} \\ &\times [\theta(t' - t)\theta(\epsilon_F - \epsilon_k) - \theta(t - t')\theta(\epsilon_k - \epsilon_F)], \end{aligned} \quad (6.48)$$

ou, usando a representação integral para função degrau (6.36), reescrevemos (6.48) como

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= -\frac{1}{2\pi} \sum_k \tilde{\xi}_k(\mathbf{x}) \tilde{\xi}_k^\dagger(\mathbf{x}') \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \\ &\times \delta_{\alpha\beta} \left[\frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_k)}{\omega + \omega_k - i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega + \omega_k + i\eta} \right], \end{aligned} \quad (6.49)$$

nos levando a definir

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}^0(\mathbf{k}, \omega) = -\delta_{\alpha\beta} \left[\frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_k)}{\omega + \omega_k - i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega + \omega_k + i\eta} \right]. \quad (6.50)$$

Agora, podemos calcular o número total de partículas dual no estado fundamental não perturbado $|\tilde{\Phi}_0\rangle$

$$\begin{aligned}\tilde{N} &= \int d^3x \tilde{n}(\mathbf{x}) = \int d^3x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha=1}^{2s+1} \frac{\langle \tilde{\Phi}_0 | \tilde{\Psi}_\alpha^\dagger(x') \tilde{\Psi}_\alpha(x) | \tilde{\Phi}_0 \rangle}{\langle \tilde{\Phi}_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle} \\ &= \int d^3x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha=1}^{2s+1} i\tilde{G}_{\alpha\alpha}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \\ &= (2s+1) \sum_k \theta(\epsilon_F - \epsilon_k).\end{aligned}\quad (6.51)$$

sendo s o spin da partícula. Cada valor de $\epsilon_k < \epsilon_F$ contribui com $\theta(\epsilon_F - \epsilon_k) = 1$ para o somatório. Portanto, o fator de spin juntamente com o somatório nos diz quantas partículas estão no mar de Fermi que, por hipótese, é o número total de partículas no espaço dual.

A energia em termos da função de Green pode ser escrita como

$$\tilde{E}_0 = \int d^3x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha=1}^{2s+1} \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) i\tilde{G}_{\alpha\alpha}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t'). \quad (6.52)$$

Usando (6.44) e (6.48), a equação (6.52) fica

$$\tilde{E}_0 = (2s+1) \sum_k \epsilon_k \theta(\epsilon_F - \epsilon_k). \quad (6.53)$$

O termo $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ é a energia de uma partícula no espaço dual com momento k .

6.2.3 Férmions Livres em DCT

O valor esperado do número total de partículas em um estado térmico será

$$\begin{aligned}\langle \hat{N} \rangle_\beta &= \int d^3x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha=1}^{2s+1} \langle \Phi_0(\beta) | T [\underline{(\Psi^\dagger)}_{H\alpha}(x) \underline{(\Psi^\dagger)}_{H\alpha}^\dagger(x')] | \Phi_0(\beta) \rangle \\ &= - \int d^3x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha=1}^{2s+1} i\hat{G}_{\alpha\alpha}^0(x, x'; \beta) \\ &= - \sum_{\alpha=1}^{2s+1} \lim_{t' \rightarrow t^+} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} i\hat{G}_{\alpha\alpha}^0(\mathbf{k}\omega; \beta)\end{aligned}\quad (6.54)$$

com a função de Green térmica no espaço dos momentos dada por (5.47):

$$i\hat{G}^0(\mathbf{k}\omega; \beta) = \mathbb{B}_k^{-1}(\beta) i\hat{G}^0(\mathbf{k}\omega; 0) \mathbb{B}_k(\beta) \delta_{\alpha\alpha}. \quad (6.55)$$

e (5.45):

$$\hat{G}^0(\mathbf{k}\omega; 0) = \begin{pmatrix} G^0(\mathbf{k}\omega) & 0 \\ 0 & \tilde{G}^0(\mathbf{k}\omega) \end{pmatrix}. \quad (6.56)$$

onde $\mathbb{B}_k(\beta)$ e $\mathbb{B}_k^{-1}(\beta)$ são dados por (5.48), e as funções de Green $G(k)$ e $\tilde{G}(k)$ são dadas respectivamente por (6.38) e (6.50). Dessa forma temos:

$$\langle \hat{N} \rangle_{\beta}^{(11)} = (2s+1) \sum_k u_k^2(\beta) \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) + (2s+1) \sum_k v_k^2(\beta) \theta(\epsilon_k - \epsilon_F), \quad (6.57)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{N} \rangle_{\beta}^{(12)} &= \langle \hat{N} \rangle_{\beta}^{(21)} = -(2s+1) \sum_k u_k(\beta) v_k(\beta) \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \\ &+ (2s+1) \sum_k u_k(\beta) v_k(\beta) \theta(\epsilon_k - \epsilon_F), \end{aligned} \quad (6.58)$$

$$\langle \hat{N} \rangle_{\beta}^{(22)} = (2s+1) \sum_k v_k^2(\beta) \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) + (2s+1) \sum_k u_k^2(\beta) \theta(\epsilon_k - \epsilon_F), \quad (6.59)$$

sendo $u_k(\beta)$ e $v_k(\beta)$ expressos respectivamente por (5.49) e (5.50). O termo que tem significado físico é (6.57).

Como exemplo podemos tomar o nosso estado fundamental como sendo o vácuo térmico $|\Phi_0(\beta)\rangle = |0(\beta)\rangle$. Neste caso, temos que não existem estados com energia menores do que a de Fermi, ou seja, $\theta(\epsilon_F - \epsilon_k) = 0$ e $\theta(\epsilon_k - \epsilon_F) = 1$ qualquer que seja k . Assim, o valor esperado do operador número de partículas (6.57) no vácuo térmico fica

$$\begin{aligned} \langle \hat{N} \rangle_{\beta}^{(11)} &= (2s+1) \sum_k v_k^2(\beta) \\ &= (2s+1) \sum_k \frac{1}{1 + e^{\beta\omega_k}}, \end{aligned} \quad (6.60)$$

que é o valor do número de partículas encontrado na literatura [12].

A energia em DCT será

$$\begin{aligned} \langle \hat{E} \rangle_{\beta} &= \int d^3x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha=1}^{2s+1} \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \langle \Phi_0(\beta) | T [(\underline{\Psi}^\dagger)_{H\alpha}(x) (\underline{\Psi}^\dagger)_{H\alpha}^\dagger(y)] | \Phi_0(\beta) \rangle \\ &= - \int d^3x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha=1}^{2s+1} \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) i \hat{G}_{\alpha\alpha}^0(x, x'; \beta) \\ &= - \sum_{\alpha=1}^{2s+1} \lim_{t' \rightarrow t^+} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) i \hat{G}_{\alpha\alpha}^0(\mathbf{k}\omega; \beta), \end{aligned} \quad (6.61)$$

com a função de Green térmica dada por (6.55) e a função de Green duplicada dada por (6.56). Para partícula livre, encontramos que $G(k)$ e $\tilde{G}(k)$ são dadas respectivamente por (6.38) e (6.50). Assim, a energia à temperatura finita fica

$$\langle \hat{E} \rangle_{\beta}^{(11)} = (2s+1) \sum_k u_k^2(\beta) \epsilon_k \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) + (2s+1) \sum_k v_k^2(\beta) \epsilon_k \theta(\epsilon_k - \epsilon_F), \quad (6.62)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{E} \rangle_{\beta}^{(12)} &= \langle \hat{E} \rangle_{\beta}^{(21)} = -(2s+1) \sum_k u_k(\beta) v_k(\beta) \epsilon_k \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \\ &+ (2s+1) \sum_k u_k(\beta) v_k(\beta) \epsilon_k \theta(\epsilon_k - \epsilon_F), \end{aligned} \quad (6.63)$$

$$\langle \hat{E} \rangle_{\beta}^{(22)} = (2s+1) \sum_k v_k^2(\beta) \epsilon_k \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) + (2s+1) \sum_k u_k^2(\beta) \epsilon_k \theta(\epsilon_k - \epsilon_F), \quad (6.64)$$

sendo $u(\beta)$ e $v(\beta)$ dados respectivamente por (2.70) e (2.71). Segue, então, que sob temperatura a energia de um sistema fermiônico de partículas livres é dada por (6.62).

Novamente, se considerarmos o caso em que o estado fundamental é o vácuo térmico $|\Phi_0(\beta)\rangle = |0(\beta)\rangle$, segue que, o valor esperado da energia (6.62) será

$$\begin{aligned}\langle \hat{E} \rangle_{\beta}^{(11)} &= (2s+1) \sum_k v_k^2(\beta) \epsilon_k \\ &= (2s+1) \sum_k \epsilon_k \frac{1}{1 + e^{\beta \omega_k}},\end{aligned}\quad (6.65)$$

que é o valor da energia encontrado na literatura [12].

6.3 Aproximação de Primeira Ordem

A teoria de perturbação e diagramas de Feynman desenvolvidos nos capítulos anteriores nos permitem avaliar a função de Green para todas as ordens no potencial de interação. Tais procedimentos em geral são impraticáveis; portanto, devemos recorrer a aproximações, o que faremos nesta seção desenvolvendo a aproximação denominada de primeira ordem [12]. Assim, a função de Green é dada por (3.121). Assumindo que a interação depende apenas da diferença das coordenadas, i.e.

$$\mathcal{U}(x, x')_{\alpha\alpha', \beta\beta'} = V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')_{\alpha\alpha', \beta\beta'} \delta(t - t'), \quad (6.66)$$

podemos escrever a transformada de Fourier

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(x, x')_{\alpha\alpha', \beta\beta'} &= (2\pi)^{-4} \int d^4k e^{ik(x-x')} \mathcal{U}(k)_{\alpha\alpha', \beta\beta'} \\ &= (2\pi)^{-3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} V(\mathbf{k})_{\alpha\alpha', \beta\beta'} \delta(t - t')\end{aligned}\quad (6.67)$$

que, junto com (3.128) e (3.129), nos dá a equação (3.121) no espaço dos momentos:

$$\begin{aligned}G_{\alpha\beta}^{(1)}(k) &= i\hbar^{-1} G^0(k) \left\{ (2\pi)^{-4} \int d^4k_1 [-\mathcal{U}(0)_{\alpha\beta, \mu\mu} G^0(k_1) e^{i\omega_1 \eta} \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)_{\alpha\mu, \mu\beta} G^0(k_1) e^{i\omega_1 \eta} \right\} G^0(k)\end{aligned}\quad (6.68)$$

com η tendendo a 0. Supondo que a interação é independente do spin, com a contribuição do spin sendo da forma $\mathbf{1}(1)\mathbf{1}(2)$, ou seja, com matriz unidade em relação às duas partículas, tem-se

$$\mathcal{U}(q)_{\alpha\beta, \lambda\mu} = \mathcal{U}(q) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\lambda\mu} \quad (6.69)$$

e os dois termos do potencial ficam

$$\mathcal{U}_{\alpha\beta, \mu\mu} = (2s+1) \mathcal{U} \delta_{\alpha\beta}, \quad \mathcal{U}_{\alpha\mu, \mu\beta} = \mathcal{U} \delta_{\alpha\beta}, \quad (6.70)$$

onde $2s+1$ é a ordem da matriz identidade para valor s de spin. Introduzindo a autoenergia, (6.68) torna-se

$$G^{(1)}(k) = G^0(k) \Sigma^{(1)}(k) G^0(k), \quad (6.71)$$

o que resulta da forma geral

$$G(k) = G^0(k) + G^0(k)\Sigma(k)G^0(k), \quad (6.72)$$

onde, para aproximação de primeira ordem ($\Sigma(k) = \Sigma^{(1)}(k)$) e considerando spin 1/2, temos

$$\hbar\Sigma(k) = i(2\pi)^{-4} \int d^4k_1 [-2V(0) + V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)] G^0(k_1) e^{i\omega_1\nu}. \quad (6.73)$$

Agora, seja $|\Phi_0\rangle$ o estado fundamental e a transformada dos operadores de campo na descrição de interação definidos como

$$\Psi_I^\dagger(x) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{i\epsilon_k^0 t/\hbar} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} a^\dagger(\mathbf{k}), \quad (6.74)$$

$$\Psi_I(x) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\epsilon_k^0 t/\hbar} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} a(\mathbf{k}). \quad (6.75)$$

Então, de (3.109) vem

$$\begin{aligned} iG^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= (2\pi)^{-3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\epsilon_k^0(t-t')/\hbar} \\ &\times [\theta(t-t') \langle \Phi_0 | a(\mathbf{k}) a^\dagger(\mathbf{k}) | \Phi_0 \rangle - \theta(t'-t) \langle \Phi_0 | a^\dagger(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}) | \Phi_0 \rangle] \end{aligned} \quad (6.76)$$

$$\begin{aligned} &= (2\pi)^{-3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\epsilon_k^0(t-t')/\hbar} \\ &\times [\theta(t-t')\theta(|\mathbf{k}| - k_F) - \theta(t'-t)\theta(k_F - |\mathbf{k}|)], \end{aligned} \quad (6.77)$$

onde k_F é momento de Fermi. Usando (3.129) e

$$\theta(\nu) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega e^{-i\omega\nu}}{2\pi i(\omega + i\eta)} \quad (6.78)$$

encontramos

$$G^0(\mathbf{k}\omega) = \left[\frac{\theta(|\mathbf{k}| - k_F)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_k^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_k^0 - i\eta} \right], \quad (6.79)$$

que, substituído em (6.73) dá

$$\hbar\Sigma(k) = nV(0) - (2\pi)^{-3} \int d^3k_1 V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \theta(k_F - |\mathbf{k}_1|), \quad (6.80)$$

onde usamos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} e^{i\omega_1\nu} \left[\frac{\theta(|\mathbf{k}_1| - k_F)}{\omega_1 - \hbar^{-1}\epsilon_{k_1}^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}_1|)}{\omega_1 - \hbar^{-1}\epsilon_{k_1}^0 - i\eta} \right] = i\theta(k_F - |\mathbf{k}_1|). \quad (6.81)$$

Lembrando a equação de Dyson (3.132) e sabendo que

$$[G^0(k)]^{-1} = \omega - \omega_k = \omega - \hbar^{-1}\epsilon_k^0, \quad (6.82)$$

temos

$$G(k) = \frac{1}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_k^0 - \Sigma^*(k)}, \quad (6.83)$$

onde, na aproximação de primeira ordem, $\Sigma^*(k) = \Sigma(k)$. Em consequência, os polos na equação de Dyson são

$$\begin{aligned}\epsilon_k^{(1)} &= \epsilon_k^{(0)} + \hbar\Sigma^*(k) \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + nV(0) - (2\pi)^{-3} \int d^3k_1 V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)\theta(k_F - |\mathbf{k}_1|),\end{aligned}\quad (6.84)$$

que determina assim a energia de um estado com momento $\hbar k$. A energia de uma partícula é então, nessa aproximação, a energia não perturbada mais a energia potencial devido à interação média com todas as outras partículas do sistema.

6.4 Aproximação Hartree-Fock

Na seção anterior usamos uma aproximação em que consideramos apenas o termo de primeira ordem, $\Sigma^*(k) = \Sigma_{(1)}^*(k)$, descrito na Figura 6.

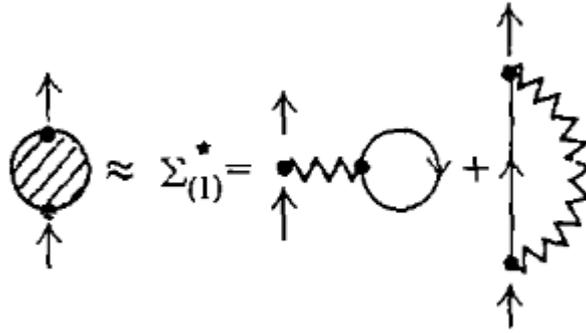


Figura 6 – Primeira ordem da autoenergia própria

Agora, vamos considerar todos os diagramas mostrados na Figura 7, onde o círculo riscado representa a autoenergia própria. Como a função de Green exata pode ser expressa como uma série contendo a autoenergia própria (vide Capítulo 3), esses diagramas podem ser escritos como a soma de dois termos indicados na Figura 8 e a função de Green é dada pela equação de Dyson como indicada na Figura 9.

Considerando então um sistema com um potencial externo $\mathcal{U}_0(\mathbf{x})$ independente do tempo e spin, o hamiltoniano total será composto por:

$$\mathbf{H}_0 = \int d^3x \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] \psi_\alpha(\mathbf{x}) \quad (6.85)$$

e

$$\mathbf{H}_1 = \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3x' \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_\beta(\mathbf{x}') \psi_\alpha(\mathbf{x}). \quad (6.86)$$

A função de Green é dada pela equação de Dyson (3.127), considerando a independência do spin, ou seja,

$$G(x, y) = G^0(x, y) + \int d^4x_1 d^4x'_1 G^0(x, x_1) \Sigma^*(x_1, x'_1) G(x'_1, y). \quad (6.87)$$

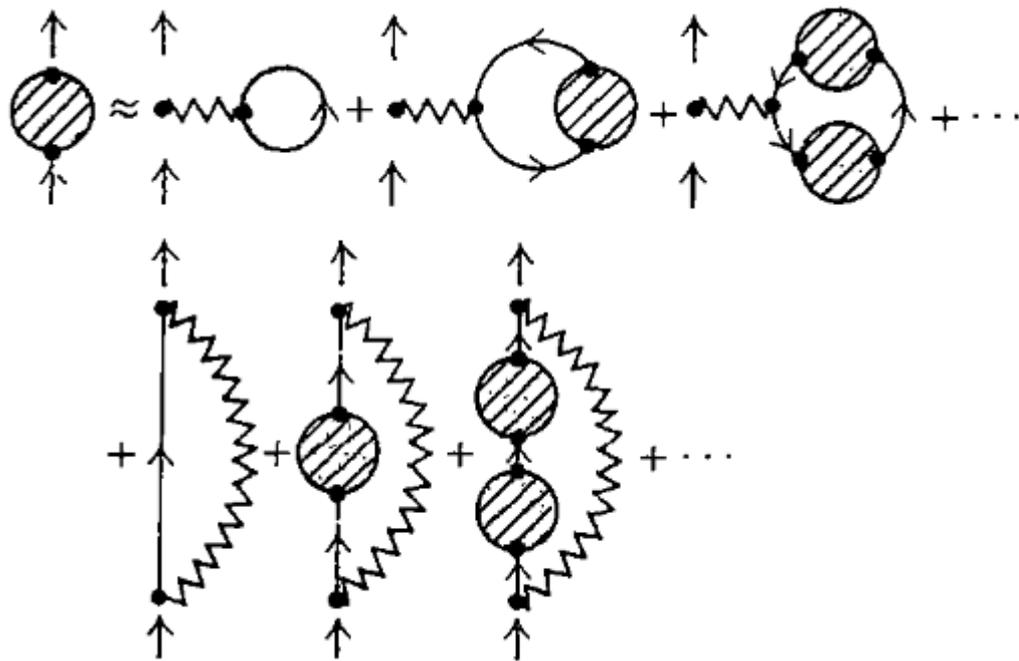


Figura 7 – Série para a autoenergia própria na aproximação Hartree-Fock

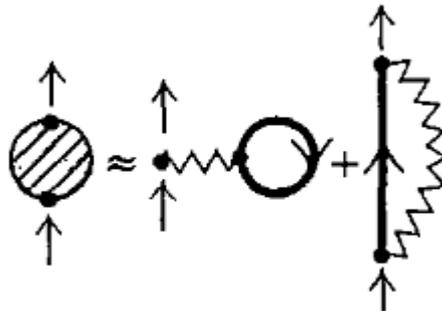


Figura 8 – Autoenergia própria autoconsistente na aproximação Hartree-Fock

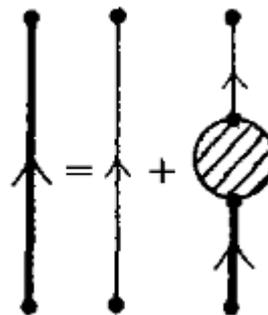


Figura 9 – Equação de Dyson para função de Green

Na presente aproximação, Figura 8, temos

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma^*(x_1, x'_1) &= -i\delta(t_1 - t'_1)[\delta(x_1 - x'_1)(2s + 1) \int d^3x_2 G(\mathbf{x}_2 t_2, \mathbf{x}_2 t_2^+) V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \\ &- V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) G(\mathbf{x}_1 t_1, \mathbf{x}'_1 t_1^+)]. \end{aligned} \quad (6.88)$$

A independência temporal do hamiltoniano nos permite escrever

$$G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega), \quad (6.89)$$

$$G^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} G^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega), \quad (6.90)$$

$$\Sigma^*(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta(t - t'). \quad (6.91)$$

Com isso, reescrevemos (6.87) como

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) = G^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) + \int d^3x_1 d^3x'_1 G^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \omega) \Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) G(\mathbf{x}'_1, \mathbf{y}, \omega) \quad (6.92)$$

e (6.88) se torna

$$\begin{aligned} \hbar \Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) &= -i\delta(x_1 - x'_1)(2s + 1) \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{i\omega\eta} G(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2, \omega) \\ &+ V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{i\omega\eta} G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega). \end{aligned} \quad (6.93)$$

Seja $\{\phi_j^0\}$ o conjunto completo das autofunções ortonormais de H_0 , ou seja,

$$H_0 \phi_j^0 = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] \phi_j^0 = \epsilon_j^0 \phi_j^0, \quad (6.94)$$

e os operadores de campo na descrição de interação definidos como

$$\Psi_I^\dagger(x) = \sum_j \phi_j^0(\mathbf{x})^* e^{i\epsilon_j^0 t/\hbar} a_j^\dagger \quad (6.95)$$

$$\Psi_I(x) = \sum_j \phi_j^0(\mathbf{x}) e^{-i\epsilon_j^0 t/\hbar} a_j. \quad (6.96)$$

A função de Green não interagente fica, então,

$$\begin{aligned} iG^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= \sum_j \phi_j^0(\mathbf{x}) \phi_j^0(\mathbf{x}')^* e^{-i\epsilon_j^0(t-t')/\hbar} \\ &\times [\theta(t-t')\theta(\epsilon_j^0 - \epsilon_F^0) - \theta(t'-t)\theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0)], \end{aligned} \quad (6.97)$$

ou, usando (6.78), obtemos

$$G^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = \sum_j \phi_j^0(\mathbf{x}) \phi_j^0(\mathbf{x}')^* \left[\frac{\theta(\epsilon_j^0 - \epsilon_F^0)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j^0 + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j^0 - i\eta} \right]. \quad (6.98)$$

Com esse resultado, podemos calcular a densidade número de partículas no estado fundamental não perturbado $|\Phi_0\rangle$ e obtemos

$$\begin{aligned} n^0(\mathbf{x}) &= \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha\beta} \frac{\langle \Phi_0 | \Psi_\beta^\dagger(x') \Psi_\alpha(x) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} \\ &= - \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \sum_{\alpha\beta} iG^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \delta_{\alpha\beta} \\ &= (2s + 1) \sum_j |\phi_j^0(\mathbf{x})|^2 \theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0) \end{aligned} \quad (6.99)$$

e o número total de partículas, i. e.

$$N^0 = \int d^3x n^0(\mathbf{x}) = (2s + 1) \sum_j \theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0). \quad (6.100)$$

Já para um estado fundamental perturbado $|\Phi\rangle$, a equação (6.92) e o fato de Σ^* não depender da frequência nos levam a tomar uma solução para G com a mesma forma de G^0 [12]

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = \sum_j \phi_j(\mathbf{x}) \phi_j(\mathbf{x}')^* \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j - i\eta} \right], \quad (6.101)$$

sendo $\{\phi_j(\mathbf{x})\}$ um conjunto completo de autoestados do hamiltoniano total, $H = H_0 + H_1$, com autovalor ϵ_j , isto é,

$$H\phi_j(\mathbf{x}) = \epsilon_j\phi_j(\mathbf{x}). \quad (6.102)$$

A densidade número de partícula nesse sistema com interação fica

$$n(\mathbf{x}) = (2s + 1) \sum_j |\phi_j(\mathbf{x})|^2 \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) \quad (6.103)$$

e o número total de partículas

$$N = N^0 = (2s + 1) \sum_j \theta(\epsilon_F - \epsilon_j), \quad (6.104)$$

porque a perturbação \mathbf{H}_1 conserva o número total de partículas. Com isso, a equação (6.93) fica

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) &= \delta(x_1 - x'_1)(2s + 1) \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \sum_j |\phi_j(\mathbf{x})|^2 \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) \\ &\quad - V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \sum_j \phi_j(\mathbf{x}) \phi_j(\mathbf{x}'_1)^* \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) \end{aligned} \quad (6.105)$$

$$\begin{aligned} &= \delta(x_1 - x'_1) \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) n(\mathbf{x}_2) \\ &\quad - V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \sum_j \phi_j(\mathbf{x}) \phi_j(\mathbf{x}'_1)^* \theta(\epsilon_F - \epsilon_j). \end{aligned} \quad (6.106)$$

Essa equação pode ser simplificada com o operador diferencial

$$L_1 = \hbar\omega + \frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \mathcal{U}_0(\mathbf{x}_1) = \hbar\omega - H_0. \quad (6.107)$$

Aplicando L_1 em $G^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega)$ obtemos

$$\begin{aligned} L_1 G^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) &= \sum_j (\hbar\omega - \epsilon_j^0) \phi_j^0(\mathbf{x}) \phi_j^0(\mathbf{x}')^* \left[\frac{\theta(\epsilon_j^0 - \epsilon_F^0)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j^0 + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j^0 - i\eta} \right] \\ &= \hbar \sum_j \phi_j^0(\mathbf{x}) \phi_j^0(\mathbf{x}'_1)^* \\ &= \hbar \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1). \end{aligned} \quad (6.108)$$

Então $\hbar^{-1}L_1$ é o operador inverso de G^0 . Portanto, aplicando L_1 em (6.92), temos

$$L_1 G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) = \hbar \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) + \int d^3 x_2 \hbar \Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) G(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_1, \omega). \quad (6.109)$$

Passando o último termo para o lado esquerdo e explicitando L_1 e G , segue que:

$$\begin{aligned} & \left[\hbar \omega + \frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \mathcal{U}_0(\mathbf{x}_1) \right] \sum_j \phi_j(\mathbf{x}_1) \phi_j(\mathbf{x}'_1)^* \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \hbar^{-1} \epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \hbar^{-1} \epsilon_j - i\eta} \right] \\ & - \int d^3 x_2 \hbar \Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \sum_j \phi_j(\mathbf{x}_2) \phi_j(\mathbf{x}'_1)^* \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \hbar^{-1} \epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \hbar^{-1} \epsilon_j - i\eta} \right] \\ & = \hbar \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1). \end{aligned} \quad (6.110)$$

Multiplicando essa expressão por $\phi_k(\mathbf{x}'_1)$ e integrando em x'_1 , obtemos

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}_1) \right] \phi_k(\mathbf{x}_1) + \int d^3 x_2 \hbar \Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \phi_k(\mathbf{x}_2) = \epsilon_k \phi_k(\mathbf{x}_1), \quad (6.111)$$

que é uma equação tipo Schrödinger com $\hbar \Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ agindo como um potencial não local. Na realidade sendo $\phi_k(\mathbf{x})$, por (6.102), autoestado de H e portanto desconhecido, a equação (6.111) pode ser vista como uma forma de obter essa solução, e como $\Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ depende de $\phi_k(\mathbf{x})$ é preciso, por exemplo, usar o método autoconsistente para resolvê-la.

Um resultado de interesse é a energia do estado fundamental; incluindo o potencial externo temos

$$E = -\frac{i}{2}(2s+1) \int d^3 x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{x' \rightarrow x} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] G(xt, x't'). \quad (6.112)$$

Fazendo $\nu = t' - t$ na equação (6.89), $t' \rightarrow t^+$ implica em $\nu \rightarrow 0^+$ e a energia torna-se

$$\begin{aligned} E &= -\frac{i}{2}(2s+1) \int d^3 x \lim_{\nu \rightarrow 0^+} \lim_{x' \rightarrow x} (2\pi)^{-1} \int d\omega \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] e^{i\omega\nu} G(x, x', \omega) \\ &= -\frac{i}{2}(2s+1) \int d^3 x \lim_{\nu \rightarrow 0^+} \lim_{x' \rightarrow x} (2\pi)^{-1} \int d\omega \left[\hbar\omega - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] e^{i\omega\nu} \\ &\times \sum_j \phi_j(\mathbf{x}) \phi_j(\mathbf{x}')^* \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \hbar^{-1} \epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \hbar^{-1} \epsilon_j - i\eta} \right], \end{aligned} \quad (6.113)$$

onde foi usado (6.101). A expressão (6.113) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} E &= -i(2s+1) \int d^3 x \lim_{\nu \rightarrow 0^+} \lim_{x' \rightarrow x} \sum_j \phi_j(\mathbf{x}')^* (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{i\omega\nu} \left[\frac{\hbar}{2} \omega \phi_j(\mathbf{x}) \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2} \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] \phi_j(\mathbf{x}) \right] \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \hbar^{-1} \epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \hbar^{-1} \epsilon_j - i\eta} \right] \end{aligned} \quad (6.114)$$

$$\begin{aligned} &= -i(2s+1) \int d^3 x \lim_{\nu \rightarrow 0^+} \sum_j \phi_j(\mathbf{x})^* (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{i\omega\nu} \left[\frac{\hbar}{2} (\omega - \hbar^{-1} \epsilon_j) \phi_j(\mathbf{x}) \right. \\ &+ \left. \epsilon_j \phi_j(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \int d^3 x_1 \hbar \Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \phi_j(\mathbf{x}_1) \right] \\ &\times \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \hbar^{-1} \epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \hbar^{-1} \epsilon_j - i\eta} \right] \end{aligned} \quad (6.115)$$

onde foi usado (6.111). Nessa expressão, o primeiro termo é

$$\begin{aligned} \lim_{\nu \rightarrow 0^+} \int d\omega e^{i\omega\nu} \frac{\hbar}{2} (\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j) \phi_j(\mathbf{x}) \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j - i\eta} \right] \\ = \lim_{\nu \rightarrow 0^+} \int d\omega e^{i\omega\nu} \frac{\hbar}{2} \phi_j(\mathbf{x}) = 0 \end{aligned} \quad (6.116)$$

uma vez que

$$\lim_{\nu \rightarrow 0^+} \int d\omega e^{i\omega\nu} = 0, \quad (6.117)$$

e os outros dois termos dão

$$\begin{aligned} i \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega\nu} \frac{1}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j - i\eta} &= \int d\omega \frac{e^{i(\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j)\nu}}{(\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j) - i\eta} e^{i\hbar^{-1}\epsilon_j\nu} \\ &= e^{i\hbar^{-1}\epsilon_j\nu} \theta(-\nu) \end{aligned} \quad (6.118)$$

e

$$i \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega\nu} \frac{1}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j + i\eta} = -e^{-i\hbar^{-1}\epsilon_j\nu} \theta(\nu). \quad (6.119)$$

Então, no limite $\nu \rightarrow 0^+$, o primeiro termo é zero e o segundo é um. Assim,

$$E = (2s + 1) \sum_j \epsilon_j \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) - \frac{1}{2} (2s + 1) \int d^3x d^3x_1 \sum_j \phi_j(\mathbf{x}_1)^* \hbar \Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \phi_j(\mathbf{x}_1) \theta(\epsilon_F - \epsilon_j). \quad (6.120)$$

Substituindo (6.105) temos, então, para expressão da energia,

$$\begin{aligned} E &= (2s + 1) \sum_j \epsilon_j \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) - \frac{1}{2} (2s + 1) \sum_{jk} \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \int d^3x d^3x_2 V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2) \\ &\times [(2s + 1) |\phi_j(\mathbf{x})|^2 |\phi_k(\mathbf{x}_2)|^2 - \phi_j(\mathbf{x})^* \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k(\mathbf{x}_2)^* \phi_j(\mathbf{x}_2)], \end{aligned} \quad (6.121)$$

que é o resultado usual do Hartree-Fock. O penúltimo termo é a energia direta e o último é o termo de troca. Sabe-se que para potencial de curto alcance, como no caso de núcleos, esses termos são comparáveis em valor mas se o potencial é de longo alcance, como em sistemas atômicos e moleculares, a contribuição de troca é em geral menor que o direto.

6.5 Aproximação de Primeira Ordem no Espaço Dual

Com o objetivo de desenvolver a aproximação de primeira ordem em DCT, faremos nesta seção o desenvolvimento da aproximação de primeira ordem no espaço dual. Assumindo que a interação depende apenas da diferença das coordenadas, i.e.

$$\mathcal{U}(x, x')_{\alpha\alpha', \beta\beta'} = V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')_{\alpha\alpha', \beta\beta'} \delta(t - t'), \quad (6.122)$$

podemos escrever a transformada de Fourier

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(x, x')_{\alpha\alpha', \beta\beta'} &= (2\pi)^{-4} \int d^4k e^{ik(x-x')} \mathcal{U}(k)_{\alpha\alpha', \beta\beta'} \\ &= (2\pi)^{-3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} V(\mathbf{k})_{\alpha\alpha', \beta\beta'} \delta(t - t') \end{aligned} \quad (6.123)$$

que, junto com (4.109) e (4.110), nos dá a primeira ordem da função de Green no espaço dos momentos:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\alpha\beta}^{(1)}(k) &= -i\hbar^{-1}\tilde{G}^0(k)\{(2\pi)^{-4}\int d^4k_1[-\mathcal{U}(0)_{\alpha\beta,\mu\mu}\tilde{G}^0(k_1)e^{i\omega_1\eta} \\ &+ \mathcal{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)_{\alpha\mu,\mu\beta}\tilde{G}^0(k_1)e^{i\omega_1\eta}]\}\tilde{G}^0(k) \end{aligned} \quad (6.124)$$

com η tendendo a 0. Supondo que a interação é independente do spin, com a contribuição do spin sendo da forma $\mathbf{1}(1)\mathbf{1}(2)$, ou seja, com matriz unidade em relação às duas partículas, tem-se

$$\mathcal{U}(q)_{\alpha\beta,\lambda\mu} = \mathcal{U}(q)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\lambda\mu} \quad (6.125)$$

e os dois termos do potencial ficam

$$\mathcal{U}_{\alpha\beta,\mu\mu} = (2s+1)\mathcal{U}\delta_{\alpha\beta} \quad \mathcal{U}_{\alpha\mu,\mu\beta} = \mathcal{U}\delta_{\alpha\beta}, \quad (6.126)$$

onde $2s+1$ é a ordem da matriz identidade para valor s de spin. Introduzindo a autoenergia, (6.124) fica

$$\tilde{G}^{(1)}(k) = \tilde{G}^0(k)\tilde{\Sigma}^{(1)}(k)\tilde{G}^0(k), \quad (6.127)$$

o que resulta da forma geral

$$\tilde{G}(k) = \tilde{G}^0(k) + \tilde{G}^0(k)\tilde{\Sigma}(k)\tilde{G}^0(k), \quad (6.128)$$

onde, para aproximação de primeira ordem ($\tilde{\Sigma}(k) = \tilde{\Sigma}^{(1)}(k)$) e considerando spin 1/2, temos

$$\hbar\tilde{\Sigma}(k) = -i(2\pi)^{-4}\int d^4k_1[-2V(0) + V(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)]\tilde{G}^0(k_1)e^{-i\omega_1\eta}. \quad (6.129)$$

Agora, seja $|\tilde{\Phi}_0\rangle$ o estado fundamental e os operadores de campo na descrição de interação definidos como

$$\tilde{\Psi}_I^\dagger(x) = (2\pi)^{-3/2}\int d^3ke^{-i\epsilon_k^0 t/\hbar}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\tilde{a}^\dagger(\mathbf{k}), \quad (6.130)$$

$$\tilde{\Psi}_I(x) = (2\pi)^{-3/2}\int d^3ke^{i\epsilon_k^0 t/\hbar}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\tilde{a}(\mathbf{k}). \quad (6.131)$$

Então, de (4.98) vem

$$\begin{aligned} i\tilde{G}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= -(2\pi)^{-3}\int d^3ke^{i\epsilon_k^0(t-t')/\hbar}e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \\ &\times [\theta(t-t')\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{a}(\mathbf{k})\tilde{a}^\dagger(\mathbf{k})|\tilde{\Phi}_0\rangle - \theta(t'-t)\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{a}^\dagger(\mathbf{k})\tilde{a}(\mathbf{k})|\tilde{\Phi}_0\rangle] \end{aligned} \quad (6.132)$$

$$\begin{aligned} &= -(2\pi)^{-3}\int d^3ke^{i\epsilon_k^0(t-t')/\hbar}e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \\ &\times [\theta(t-t')\theta(|\mathbf{k}|-k_F) - \theta(t'-t)\theta(k_F-|\mathbf{k}|)], \end{aligned} \quad (6.133)$$

onde k_F é momento de Fermi. Usando (4.110) e (6.78) encontramos

$$\tilde{G}^0(k) = -\left[\frac{\theta(|\mathbf{k}|-k_F)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_k^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F-|\mathbf{k}|)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_k^0 - i\eta}\right], \quad (6.134)$$

que, substituído em (6.129), dá

$$\hbar\tilde{\Sigma}(k) = -nV(0) + (2\pi)^{-3} \int d^3k_1 V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)\theta(k_F - |\mathbf{k}_1|). \quad (6.135)$$

onde usamos

$$- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} e^{-i\omega_1\eta} \left[\frac{\theta(|\mathbf{k}_1| - k_F)}{\omega_1 + \hbar^{-1}\epsilon_k^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}_1|)}{\omega_1 + \hbar^{-1}\epsilon_k^0 - i\eta} \right] = i\theta(k_F - |\mathbf{k}_1|). \quad (6.136)$$

Lembrando a equação de Dyson (4.113) e sabendo que

$$[\tilde{G}^0(k)]^{-1} = \omega + \omega_{\mathbf{k}} = \omega + \hbar^{-1}\epsilon_{\mathbf{k}}^0, \quad (6.137)$$

temos

$$\tilde{G}(k) = \frac{1}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_{\mathbf{k}}^0 - \tilde{\Sigma}^*(k)}, \quad (6.138)$$

onde, na aproximação de primeira ordem, $\tilde{\Sigma}^*(k) = \tilde{\Sigma}(k)$. Em consequência os polos na equação de Dyson são

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_k^{(1)} &= -\epsilon_k^{(0)} - \hbar\tilde{\Sigma}^*(k) \\ &= -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + nV(0) - (2\pi)^{-3} \int d^3k_1 V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)\theta(k_F - |\mathbf{k}_1|), \end{aligned} \quad (6.139)$$

que determina assim a energia de um estado com momento $\hbar k$. A energia de uma partícula (dual) é então, nessa aproximação, a energia não perturbada mais a energia potencial devido à interação média com todas as outras partículas do sistema.

6.6 Aproximação Hartree-Fock no Espaço Dual

Com o objetivo de encontrar uma expressão para a aproximação Hartree-Fock termalizada precisamos desenvolver expressões tanto para o espaço direto quanto para o espaço til. Para o espaço til, vamos seguir passos semelhantes aos realizados na seção anterior.

Inicialmente, vamos considerar um sistema com um potencial externo $\mathcal{U}_0(\mathbf{x})$, o hamiltoniano total sendo, então,

$$\tilde{\mathbf{H}}_0 = \int d^3x \tilde{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \quad (6.140)$$

$$\tilde{\mathbf{H}}_1 = \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3x' \tilde{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \tilde{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \quad (6.141)$$

onde estamos considerando o potencial com as propriedades (6.66), (6.67), (6.69) e (6.70). A função de Green é dada pela equação de Dyson (4.108),

$$\tilde{G}(x, y) = \tilde{G}^0(x, y) + \int d^4x_1 d^4x'_1 \tilde{G}^0(x, x_1) \tilde{\Sigma}^*(x_1, x'_1) \tilde{G}(x'_1, y). \quad (6.142)$$

A aproximação na autoenergia própria é obtida ao aplicar as regras de conjugação til à equação (6.88),

$$\begin{aligned} \hbar\tilde{\Sigma}^*(x_1 - x'_1) &= i\delta(t_1 - t'_1)[\delta(x_1 - x'_1)(2s + 1) \int d^3x_2 \tilde{G}(\mathbf{x}_2 t_2, \mathbf{x}_2 t_2^+) V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \\ &\quad - V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \tilde{G}(\mathbf{x}_1 t_1, \mathbf{x}'_1 t_1^+)]. \end{aligned} \quad (6.143)$$

Consideremos as transformadas,

$$\tilde{G}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{i\omega(t-t')} \tilde{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega), \quad (6.144)$$

$$\tilde{G}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{i\omega(t-t')} \tilde{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega), \quad (6.145)$$

$$\tilde{\Sigma}^*(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \tilde{\Sigma}^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta(t - t'); \quad (6.146)$$

com isso, a equação de Dyson fica

$$\tilde{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) = \tilde{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) + \int d^3x_1 d^3x'_1 \tilde{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \omega) \tilde{\Sigma}^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \tilde{G}(\mathbf{x}'_1, \mathbf{y}, \omega) \quad (6.147)$$

e a autoenergia própria é

$$\begin{aligned} \hbar\tilde{\Sigma}^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) &= i\delta(x_1 - x'_1)(2s + 1) \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{-i\omega\nu} \tilde{G}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2, \omega) \\ &\quad + V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{-i\omega\nu} \tilde{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega). \end{aligned} \quad (6.148)$$

Seja $\{\tilde{\phi}_j^0\}$ o conjunto completo das autofunções ortonormais de \tilde{H}_0 , ou seja,

$$\tilde{H}_0 \tilde{\phi}_j^0 = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] \tilde{\phi}_j^0 = \epsilon_j^0 \tilde{\phi}_j^0, \quad (6.149)$$

e o operador de campo no espaço dual na descrição de interação fica

$$\tilde{\Psi}_I^\dagger(x) = \sum_j \tilde{\phi}_j^0(\mathbf{x})^* e^{-i\epsilon_j^0 t/\hbar} \tilde{a}_j^\dagger \quad (6.150)$$

$$\tilde{\Psi}_I(x) = \sum_j \tilde{\phi}_j^0(\mathbf{x}) e^{i\epsilon_j^0 t/\hbar} \tilde{a}_j. \quad (6.151)$$

A função de Green não interagente é, neste caso,

$$\begin{aligned} i\tilde{G}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= -\sum_j \tilde{\phi}_j^0(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_j^0(\mathbf{x}')^* e^{i\epsilon_j^0(t-t')/\hbar} \\ &\quad \times [\theta(t - t') \theta(\epsilon_j^0 - \epsilon_F^0) - \theta(t' - t) \theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0)], \end{aligned} \quad (6.152)$$

ou

$$\tilde{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = -\sum_j \tilde{\phi}_j^0(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_j^0(\mathbf{x}')^* \left[\frac{\theta(\epsilon_j^0 - \epsilon_F^0)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j^0 + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j^0 - i\eta} \right]. \quad (6.153)$$

Assim, a densidade número de partículas no estado fundamental não perturbado, $|\tilde{\Phi}_0\rangle$, é dada por

$$\begin{aligned} \tilde{n}^0(\mathbf{x}) &= i \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'} \sum_{\alpha\beta} \tilde{G}^0(x, x') \delta_{\alpha\beta} \\ &= (2s + 1) \sum_j |\tilde{\phi}_j^0(\mathbf{x})|^2 \theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0) \end{aligned} \quad (6.154)$$

e o número total de partículas por

$$\tilde{N}^0 = \int d^3x \tilde{n}^0(\mathbf{x}) = (2s + 1) \sum_j \theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0). \quad (6.155)$$

No estado fundamental perturbado $|\tilde{\Phi}\rangle$, a função de Green no espaço dual, \tilde{G} , é obtida ao aplicar a conjugação til em (6.101),

$$\tilde{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = - \sum_j \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}')^* \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j - i\eta} \right], \quad (6.156)$$

sendo $\{\tilde{\phi}_j(\mathbf{x})\}$ um conjunto completo de autoestados do hamiltoniano total, $\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{H}_1$, com autovalor ϵ_j , isto é,

$$\tilde{H} \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) = \epsilon_j \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}). \quad (6.157)$$

A densidade número de partícula resulta em

$$\tilde{n}(\mathbf{x}) = (2s + 1) \sum_j |\tilde{\phi}_j(\mathbf{x})|^2 \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) \quad (6.158)$$

e o número total de partículas em

$$\tilde{N} = \tilde{N}^0 = (2s + 1) \sum_j \theta(\epsilon_F - \epsilon_j), \quad (6.159)$$

porque a perturbação $\tilde{\mathbf{H}}_1$ conserva o número total de partícula. Com isso, a autoenergia própria no espaço dual fica

$$\begin{aligned} \hbar \tilde{\Sigma}^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) &= \delta(x_1 - x'_1) (2s + 1) \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \sum_j |\tilde{\phi}_j(\mathbf{x})|^2 \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) \\ &\quad - V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \sum_j \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}'_1)^* \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) \end{aligned} \quad (6.160)$$

$$\begin{aligned} &= \delta(x_1 - x'_1) \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \tilde{n}(\mathbf{x}_2) \\ &\quad - V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \sum_j \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}'_1)^* \theta(\epsilon_F - \epsilon_j). \end{aligned} \quad (6.161)$$

Como no caso direto, essa equação pode ser simplificada com o operador diferencial

$$-\tilde{L}_1 = \hbar\omega + \frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \mathcal{U}_0(\mathbf{x}_1) = \hbar\omega - \tilde{H}_0. \quad (6.162)$$

Aplicando \tilde{L}_1 em $\tilde{G}^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega)$ obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{L}_1 \tilde{G}^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) &= \sum_j (\hbar\omega - \epsilon_j^0) \tilde{\phi}_j^0(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_j^0(\mathbf{x}')^* \left[\frac{\theta(\epsilon_j^0 - \epsilon_F^0)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j^0 + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j^0 - i\eta} \right] \\ &= \hbar\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1), \end{aligned} \quad (6.163)$$

indicando que $\hbar^{-1}\tilde{L}_1$ é o operador inverso de \tilde{G}^0 . Aplicando \tilde{L}_1 em (6.147), temos

$$\tilde{L}_1 \tilde{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) = \hbar\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) + \int d^3x_2 \hbar \tilde{\Sigma}^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \tilde{G}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_1, \omega). \quad (6.164)$$

Explicitando

$$\begin{aligned}
& \left[\hbar\omega + \frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \mathcal{U}_0(\mathbf{x}_1) \right] \sum_j \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}_1) \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}'_1)^* \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j - i\eta} \right] \\
& - \int d^3x_2 \hbar \tilde{\Sigma}^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \sum_j \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}_2) \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}'_1)^* \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j - i\eta} \right] \\
& = \hbar \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1),
\end{aligned} \tag{6.165}$$

multiplicando por $\tilde{\phi}_k(\mathbf{x}'_1)$ e integrando em x'_1 , obtemos

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}_1) \right] \tilde{\phi}_k(\mathbf{x}_1) + \int d^3x_2 \hbar \tilde{\Sigma}^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \tilde{\phi}_k(\mathbf{x}_2) = \epsilon_k \tilde{\phi}_k(\mathbf{x}_1), \tag{6.166}$$

que é uma equação tipo Schrödinger com $\hbar \tilde{\Sigma}^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ agindo como um potencial não local. Neste caso também é válida a observação que na realidade $\tilde{\phi}_j(\mathbf{x})$, sendo autofunção do \tilde{H} completo, não é em princípio conhecida; daí a equação (6.166) pode ser uma forma de determinar $\tilde{\phi}_j(\mathbf{x})$ usando, por exemplo, o método autoconsistente.

Neste contexto a energia do estado fundamental, é obtida como

$$\begin{aligned}
\tilde{E} &= \frac{i}{2}(2s+1) \int d^3x \lim_{\nu \rightarrow 0^+} \lim_{x' \rightarrow x} (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{-i\omega\nu} \left[\hbar\omega - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] \tilde{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) \\
&= i(2s+1) \int d^3x \lim_{\nu \rightarrow 0^+} \sum_j \tilde{\phi}_j(\mathbf{x})^* (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{-i\omega\nu} \left[\frac{\hbar}{2} \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) + \left[\epsilon_j \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \int d^3x_1 \hbar \tilde{\Sigma}^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}_1) \right] \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega + \hbar^{-1}\epsilon_j - i\eta} \right] \right] \\
&= (2s+1) \sum_j \epsilon_j \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) - \frac{1}{2}(2s+1) \int d^3x d^3x_1 \sum_j \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}_1)^* \hbar \tilde{\Sigma}^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \\
&\quad \times \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}_1) \theta(\epsilon_F - \epsilon_j).
\end{aligned} \tag{6.167}$$

onde, usando (6.160), temos:

$$\begin{aligned}
\tilde{E} &= (2s+1) \sum_j \epsilon_j \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) - \frac{1}{2}(2s+1) \sum_{jk} \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \int d^3x d^3x_2 V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2) \\
&\quad \times [(2s+1) |\tilde{\phi}_j(\mathbf{x})|^2 |\tilde{\phi}_k(\mathbf{x}_2)|^2 - \tilde{\phi}_j(\mathbf{x})^* \tilde{\phi}_k(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_k(\mathbf{x}_2)^* \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}_2)],
\end{aligned} \tag{6.168}$$

que é o resultado do Hartree-Fock para o espaço dual.

6.7 Aproximação de Primeira Ordem em DCT

A forma matricial de (5.45) é

$$\hat{G}(k; 0) = \begin{pmatrix} G(k) & 0 \\ 0 & \tilde{G}(-k) \end{pmatrix}. \tag{6.169}$$

Na aproximação de primeira ordem temos que $G(k)$ é dado por (6.83) e $\tilde{G}(k)$ dado por (6.138). Inserindo o efeito da temperatura por meio de (5.47) encontramos

$$\hat{G}(k; \beta) = \mathbb{B}_k^{-1}(\beta) \hat{G}(k; 0) \mathbb{B}_k(\beta), \tag{6.170}$$

que tem o primeiro termo sendo

$$\hat{G}^{(11)}(k; \beta) = u_k^2(\beta)G(k) + v_k^2(\beta)\tilde{G}(-k), \quad (6.171)$$

ou seja,

$$\hat{G}^{(11)}(k; \beta) = \frac{u_k^2(\beta)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_k^0 - \Sigma^*(k)} + \frac{v_k^2(\beta)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_k^0 - \tilde{\Sigma}^*(k)}, \quad (6.172)$$

com $u_k(\beta)$ e $v_k(\beta)$ dados por (5.49) e (5.50), respectivamente.

6.8 Aproximação Hartree-Fock em DCT

A energia em DCT será

$$\begin{aligned} \hat{E}_\beta &= -\frac{i}{2}(2s+1) \int d^3x \lim_{\nu \rightarrow 0^+} \lim_{x' \rightarrow x} (2\pi)^{-1} \int d\omega e^{i\omega\nu} \left[\hbar\omega - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] \\ &\times \langle \Psi(\beta) | T[(\Psi^\dagger)_{H\alpha}(x)(\Psi^\dagger)_{H\alpha}(y)] | \Psi(\beta) \rangle \\ &= -\frac{i}{2}(2s+1) \int d^3x \lim_{\nu \rightarrow 0^+} \lim_{x' \rightarrow x} (2\pi)^{-1} \\ &\times \int d\omega e^{i\omega\nu} \left[\hbar\omega - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] \hat{G}_{\alpha\alpha}(x, x'; \beta), \end{aligned} \quad (6.173)$$

com a função de Green térmica dada por (6.55) e a função de Green duplicada dada por (6.56). Para partícula livre, encontramos que $iG_{\alpha\alpha}(x, x')$ e $i\tilde{G}_{\alpha\alpha}(x, x')$ são dadas, respectivamente, por (6.101) e (6.156). Assim, a energia à temperatura finita fica

$$\hat{E}_\beta = \mathbb{B}^{-1}(\beta) \hat{E}_0 \mathbb{B}(\beta), \quad (6.174)$$

com

$$\hat{E}_0 = -(2s+1) \frac{1}{2} \int d^3x \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \left[\hbar\omega - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mathcal{U}_0(\mathbf{x}) \right] i\hat{G}_{\alpha\alpha}(x, x'; 0). \quad (6.175)$$

Segue, então, que sob temperatura a energia de um sistema fermiônico (átomo, molécula, sólidos, por exemplo) na aproximação dos diagramas de Feynman conhecida como aproximação Hartree-Fock é dada por

$$\begin{aligned} \hat{E}_\beta^{(11)} &= u^2(\beta)(2s+1) \sum_j \epsilon_j \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) - \frac{1}{2}(2s+1)u^2(\beta) \sum_{jk} \theta(\epsilon_F - \epsilon_j) \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \\ &\times \int d^3x d^3x_2 V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2) [(2s+1)|\phi_j(\mathbf{x})|^2 |\phi_k(\mathbf{x}_2)|^2 - \phi_j(\mathbf{x})^* \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k(\mathbf{x}_2)^* \phi_j(\mathbf{x}_2)] \\ &+ v^2(\beta)(2s+1) \sum_j \epsilon_j \theta(\epsilon_j - \epsilon_F) - \frac{1}{2}(2s+1)v^2(\beta) \sum_{jk} \theta(\epsilon_j - \epsilon_F) \theta(\epsilon_F - \tilde{\epsilon}_k) \\ &\times \int d^3x d^3x_2 V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2) [(2s+1)|\tilde{\phi}_j(\mathbf{x})|^2 |\tilde{\phi}_k(\mathbf{x}_2)|^2 - \tilde{\phi}_j(\mathbf{x})^* \tilde{\phi}_k(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_k(\mathbf{x}_2)^* \tilde{\phi}_j(\mathbf{x}_2)] \end{aligned} \quad (6.176)$$

sendo $u(\beta)$ e $v(\beta)$ dados respectivamente por (2.70) e (2.71).

Tendo as expressões teóricas obtidas neste capítulo, dado um sistema específico caracterizado por um potencial $V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ e um potencial externo $\mathcal{U}_0(\mathbf{x})$, podemos determinar sua energia bem como a função de Green térmica e usá-la na obtenção de propagadores de interesse.

7 Conclusões e perspectivas

Neste trabalho, com o objetivo de investigar a influência da temperatura na determinação de propriedades de interesse para sistemas de muitas partículas consideramos o espaço de Fock e desenvolvemos de forma sistemática a Dinâmica de Campos Térmicos -DCT, também denominada de Thermofield Dynamics -TFD, visando aplicações a sistemas atômicos, moleculares e de estado sólido.

O procedimento que adotamos partiu da equação de Schrödinger como descrevendo um campo de matéria não relativístico, construindo em seguida no espaço de Fock a descrição denominada direta e a descrição denominada dual para, usando a formulação de dubletos, determinar as expressões das grandezas de interesse na descrição DCT. Esta abordagem nos possibilitou determinar, em termos da temperatura, as funções de Green a uma partícula, a equação de Dyson e permitiu realizar aplicações como a obtenção das equações do método Hartree-Fock, de interesse para átomos e moléculas, o estudo de um sistema de férmions não interagentes incluindo temperatura e considerar, dentro da formulação diagramática, as aproximações denominadas de primeira ordem e de Hartree-Fock à temperatura finita.

Embora alguns textos sobre aplicação da Thermofield Dynamics a estado sólido citem o espaço de Fock como a estrutura matemática presente na formulação, ao apresentarem essa teoria a construção de forma matematicamente completa não é desenvolvida, enquanto sequer é abordada para o estudo de átomos e moléculas. Desta forma, consideramos que nosso trabalho preenche uma lacuna no desenvolvimento da DCT não relativística.

Como perspectivas pretendemos: (i) usar as expressões obtidas em aplicações a sistemas específicos; (ii) analisar processos e modelos de interesse usando a teoria não-relativística de espalhamento à temperatura finita que já estamos concluindo seguindo a mesma linha desse trabalho e (iii) analisar como a teoria desenvolvida é aplicável a sistemas bosônicos.

APÊNDICE A – Teorema de Gell-Mann e Low

A.1 Espaço Direto

Teorema de Gell-Mann e Low diz [11, 12, 32]: Se o limite

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle} = \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} \quad (\text{A.1})$$

existir para todas as ordens da teoria de perturbação, então este é o auto-estado de \mathbf{H} , ou seja,

$$\frac{\mathbf{H}|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} = \frac{E|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}, \quad (\text{A.2})$$

permitindo escrever um estado do Hamiltoniano perturbado a partir do estado não perturbado.

Antes de provar esse teorema observe que, se multiplicarmos pela esquerda a equação (A.2) por $\langle\Phi_0|$, obtemos

$$\frac{\langle\Phi_0|\mathbf{H}_0|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} + \frac{\langle\Phi_0|\mathbf{H}_1|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} = \frac{\langle\Phi_0|E|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} \quad (\text{A.3})$$

ou

$$E \frac{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} - E_0 \frac{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} = \frac{\langle\Phi_0|\mathbf{H}_1|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} \quad (\text{A.4})$$

e daí

$$E - E_0 = \frac{\langle\Phi_0|\mathbf{H}_1|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}. \quad (\text{A.5})$$

Agora, considere o operador $\mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)$ dado por (3.90) e a expressão:

$$\begin{aligned} (\mathbf{H}_0 - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle &= (\mathbf{H}_0 - E_0)\mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle \\ &= [\mathbf{H}_0, \mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)]|\Phi_0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

O n -ésimo termo do comutador é

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_1(t_i)\mathbf{H}_1(t_j)\dots\mathbf{H}_1(t_k)] &= [\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_1(t_i)]\mathbf{H}_1(t_j)\dots\mathbf{H}_1(t_k) \\ &+ \mathbf{H}_1(t_i)[\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_1(t_j)]\dots\mathbf{H}_1(t_k) \\ &+ \mathbf{H}_1(t_i)\mathbf{H}_1(t_j)\dots[\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_1(t_k)], \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

e usando (3.69) temos

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \mathbf{H}_1(t)}{\partial t} = [\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_1(t)]. \quad (\text{A.8})$$

Logo

$$[\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_1(t_i)\mathbf{H}_1(t_j)\dots\mathbf{H}_1(t_k)] = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial t_i} + \frac{\partial}{\partial t_j}\dots\frac{\partial}{\partial t_k}\right)\mathbf{H}_1(t_i)\mathbf{H}_1(t_j)\dots\mathbf{H}_1(t_k), \quad (\text{A.9})$$

o que resulta em

$$\begin{aligned} (\mathbf{H}_0 - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle &= -\sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n-1}\frac{1}{n!}\int_{-\infty}^0 dt_1\dots\int_{-\infty}^0 dt_n e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_n|)} \\ &X \left(\sum_{i=1}^n n\frac{\partial}{\partial t_i}\right)T[\mathbf{H}_1(t_1)\dots\mathbf{H}_1(t_n)]\Phi_0, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

onde o termo $n = 0$ não aparece pois $[\mathbf{H}_0, 1] = 0$. Integrando a derivada por partes e usando $e^{-\epsilon|t_i|} = e^{\epsilon t_i}$ já que $t_i < 0$ vem

$$\int_{-\infty}^0 dt_i e^{\epsilon t_i} \frac{\partial \mathbf{H}_1(t_i)}{\partial t_i} = \mathbf{H}_1 - \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_i e^{\epsilon t_i} \mathbf{H}_1(t_i), \quad (\text{A.11})$$

e como todas as derivadas dão a mesma contribuição,

$$\begin{aligned} (\mathbf{H}_0 - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle &= -\mathbf{H}_1 \sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n-1}\frac{1}{(n-1)!}\int_{-\infty}^0 dt_1\dots\int_{-\infty}^0 dt_{n-1} e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_{n-1}|)} \\ &X T[\mathbf{H}_1(t_1)\dots\mathbf{H}_1(t_{n-1})]|\Phi_0\rangle + i\hbar\epsilon \sum_{n=1}^{\infty} n\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_{-\infty}^0 dt_1\dots\int_{-\infty}^0 dt_n \\ &X e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_n|)}T[\mathbf{H}_1(t_1)\dots\mathbf{H}_1(t_n)]|\Phi_0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Fazendo $\mathbf{H}_1(t_i) = g\mathbf{V}(t_i)$, onde g é uma constante de acoplamento, $nT[\mathbf{H}_1(t_1)\dots\mathbf{H}_1(t_n)] = g\frac{\partial}{\partial g}g^n T[\mathbf{V}_1(t_1)\dots\mathbf{V}_1(t_n)]$ e temos

$$\begin{aligned} (\mathbf{H}_0 - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle &= -\mathbf{H}_1\mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)\Phi_0\rangle + i\hbar\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}\mathbf{U}_\epsilon(0, -\infty)\Phi_0\rangle \\ &= -\mathbf{H}_1|\Psi_0(\epsilon)\rangle + i\hbar\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}|\Psi_0(\epsilon)\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

ou

$$(\mathbf{H} - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle = i\hbar\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}|\Psi_0(\epsilon)\rangle. \quad (\text{A.14})$$

Então, multiplicando pela esquerda por $[\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle]^{-1}\langle\Phi_0|$, obtemos

$$\frac{\langle\Phi_0|(\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1 - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} = \frac{i\hbar\epsilon g}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle}\frac{\partial}{\partial g}\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle$$

ou

$$\frac{\langle\Phi_0|\mathbf{H}_1|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} = i\hbar\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}\ln(\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle) = E - E_0, \quad (\text{A.15})$$

onde a última igualdade vem de (A.5). Por outro lado, considerando

$$\frac{\partial}{\partial g}\left(\frac{|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle}\right) = \frac{1}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle^2}\left[\left(\frac{\partial}{\partial g}|\Psi_0(\epsilon)\rangle\right)\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle - |\Psi_0(\epsilon)\rangle\frac{\partial}{\partial g}\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle\right] \quad (\text{A.16})$$

vem

$$\begin{aligned}
 \frac{(\mathbf{H} - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} &= \frac{i\hbar\epsilon g}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} \frac{\partial}{\partial g} |\Psi_0(\epsilon)\rangle \\
 &= i\hbar\epsilon g \left\{ \frac{\partial}{\partial g} \left(\frac{|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} \right) + \frac{|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} \frac{\partial}{\partial g} \ln \langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle \right\} \\
 &= i\hbar\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} \left(\frac{|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} \right) + (E - E_0) \frac{|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle}, \quad (\text{A.17})
 \end{aligned}$$

onde foi usado (A.15) na última igualdade. Passando então o último termo dessa expressão para o lado esquerdo segue que

$$\frac{(\mathbf{H} - E)|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} = i\hbar\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} \left(\frac{|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} \right) \quad (\text{A.18})$$

que tende a zero no limite de $\epsilon \rightarrow 0$, demonstrando assim o teorema.

A.2 Espaço Dual

Teorema de Gell-Mann e Low no espaço dual segue passo a passo o caso do espaço direto, ou seja, diz: Se o limite

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(0, -\infty)|\tilde{\Phi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(0, -\infty)|\tilde{\Phi}_0\rangle} = \frac{|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle} \quad (\text{A.19})$$

existir para todas as ordens da teoria de perturbação, então este é o auto-estado de $\tilde{\mathbf{H}}$, ou seja,

$$\frac{\tilde{\mathbf{H}}|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle} = \frac{E|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle}, \quad (\text{A.20})$$

permitindo escrever um estado do Hamiltoniano perturbado a partir do estado não perturbado.

Como no caso anterior observe que, se multiplicarmos pela esquerda a equação (A.20) por $\langle\tilde{\Phi}_0|$, obtemos

$$\frac{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\mathbf{H}}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle} + \frac{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\mathbf{H}}_1|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle} = \frac{\langle\tilde{\Phi}_0|E|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle} \quad (\text{A.21})$$

e daí

$$E - E_0 = \frac{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\mathbf{H}}_1|\tilde{\Psi}_0\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle}. \quad (\text{A.22})$$

Agora, considere a expressão

$$\begin{aligned}
 (\tilde{\mathbf{H}}_0 - E_0)|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle &= (\tilde{\mathbf{H}}_0 - E_0)\tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(0, -\infty)|\tilde{\Phi}_0\rangle \\
 &= [\tilde{\mathbf{H}}_0, \tilde{\mathbf{U}}_\epsilon(0, -\infty)]|\tilde{\Phi}_0\rangle. \quad (\text{A.23})
 \end{aligned}$$

O n -ésimo termo do comutador é

$$\begin{aligned} [\tilde{\mathbf{H}}_0, \tilde{\mathbf{H}}_1(t_i)\tilde{\mathbf{H}}_1(t_j)\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_k)] &= [\tilde{\mathbf{H}}_0, \tilde{\mathbf{H}}_1(t_i)]\tilde{\mathbf{H}}_1(t_j)\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_k) \\ &+ \tilde{\mathbf{H}}_1(t_i)[\tilde{\mathbf{H}}_0, \tilde{\mathbf{H}}_1(t_j)]\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_k) \\ &+ \tilde{\mathbf{H}}_1(t_i)\tilde{\mathbf{H}}_1(t_j)\dots[\tilde{\mathbf{H}}_0, \tilde{\mathbf{H}}_1(t_k)], \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

e usando (4.62) temos

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{\mathbf{H}}_1(t)}{\partial t} = [\tilde{\mathbf{H}}_0, \tilde{\mathbf{H}}_1(t)]. \quad (\text{A.25})$$

Logo,

$$[\tilde{\mathbf{H}}_0, \tilde{\mathbf{H}}_1(t_i)\tilde{\mathbf{H}}_1(t_j)\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_k)] = -\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial t_i} + \frac{\partial}{\partial t_j} \dots \frac{\partial}{\partial t_k} \right) \tilde{\mathbf{H}}_1(t_i)\tilde{\mathbf{H}}_1(t_j)\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_k), \quad (\text{A.26})$$

o que resulta em

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbf{H}}_0 - E_0)|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle &= -\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{n-1} \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_n e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_n|)} \\ &X \left(\sum_{i=1}^n n \frac{\partial}{\partial t_i} \right) T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1)\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_n)]\tilde{\Phi}_0. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Como a integração por partes das derivadas dá a mesma contribuição

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbf{H}}_0 - E_0)|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle &= -\tilde{\mathbf{H}}_1 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{n-1} \frac{1}{(n-1)!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_{n-1} e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_{n-1}|)} \\ &X T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1)\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_{n-1})]|\tilde{\Phi}_0\rangle - i\hbar\epsilon \sum_{n=1}^{\infty} n \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_n \\ &X e^{-\epsilon(|t_1|+\dots+|t_n|)} T[\tilde{\mathbf{H}}_1(t_1)\dots\tilde{\mathbf{H}}_1(t_n)]|\tilde{\Phi}_0\rangle \\ &= -\tilde{\mathbf{H}}_1|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle - i\hbar\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} |\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

ou

$$(\tilde{\mathbf{H}} - E_0)|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle = -i\hbar\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} |\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle. \quad (\text{A.29})$$

onde $\tilde{\mathbf{H}}_1(t_i) = g\tilde{\mathbf{V}}(t_i)$ e g é uma constante de acoplamento. Multiplicando pela esquerda por $[\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle]^{-1}\langle\tilde{\Phi}_0|$, obtemos

$$\frac{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\mathbf{H}}_1|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle} = -i\hbar\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} \ln(\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle) = E - E_0, \quad (\text{A.30})$$

onde a última igualdade vem de (A.22). Por outro lado, considerando

$$\frac{\partial}{\partial g} \left(\frac{|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle} \right) = \frac{1}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle^2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial g} |\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle \right) \langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle - |\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle \frac{\partial}{\partial g} \langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle \right] \quad (\text{A.31})$$

vem

$$\begin{aligned} \frac{(\tilde{\mathbf{H}} - E_0)|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle} &= -\frac{i\hbar\epsilon g}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle} \frac{\partial}{\partial g} |\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle \\ &= -i\hbar\epsilon g \left\{ \frac{\partial}{\partial g} \left(\frac{|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle} \right) + \frac{|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle} \frac{\partial}{\partial g} \ln\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle \right\} \\ &= -i\hbar\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} \left(\frac{|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle} \right) + (E - E_0) \frac{|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle}, \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

onde foi usada (A.30) na última igualdade. Passando então o último termo dessa expressão para o lado esquerdo, segue que

$$\frac{(\tilde{\mathbf{H}} - E)|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle} = -i\hbar\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} \left(\frac{|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle}{\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Psi}_0(\epsilon)\rangle} \right) \quad (\text{A.33})$$

que tende a zero no limite de $\epsilon \rightarrow 0$, demonstrando assim o teorema.

APÊNDICE B – Teorema de Wick

B.1 Espaço Direto

Seguiremos, para demonstrar o teorema de Wick, as referências [?, 11, 12, 33]

Inicialmente, precisamos de 3 definições [12]: (i) Ordenador Temporal T: operadores com o tempo maior ficam a esquerda,

$$T[\mathbf{ABCD}\dots] = (-1)^P T[\mathbf{CADB}\dots], \quad (\text{B.1})$$

onde P é o número de permutações dos operadores fermiônicos; (ii) Ordenador Normal N: operadores de aniquilação ficam à direita,

$$N[\mathbf{ABCD}\dots] = (-1)^P N[\mathbf{CADB}\dots] \quad (\text{B.2})$$

O operador normal é conveniente pois seu valor esperado no estado fundamental não perturbado, $|\Phi_0\rangle$, é zero (exceto no caso onde só temos operadores de criação). (iii) Contração: diferença entre T e N ,

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}\cdot = T[\mathbf{AB}] - N[\mathbf{AB}]. \quad (\text{B.3})$$

Agora, podemos escrever o Ordenador Temporal em termos do Ordenador Normal usando o teorema de Wick, ou seja,

$$\begin{aligned} T[\mathbf{UVW}\dots\mathbf{XYZ}] &= N[\mathbf{UVW}\dots\mathbf{XYZ}] + N[\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}\cdot\mathbf{W}\dots\mathbf{XYZ}] \\ &+ N[\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}\mathbf{W}\cdot\dots\mathbf{XYZ}] + \dots + N[\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}\cdot\mathbf{W}\cdot\dots\mathbf{X}\cdot\mathbf{Y}\cdot\mathbf{Z}\cdot] \\ &= N[\mathbf{UVW}\dots\mathbf{XYZ}] \\ &+ N(\text{soma sobre todos os possíveis pares de contração}). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

O teorema de Wick baseia-se no lema: Se $N(\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY})$ é um produto normal e \mathbf{Z} é o termo com o menor tempo, então

$$\begin{aligned} N(\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY})\mathbf{Z} &= N(\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY}\mathbf{Z}\cdot) + N(\mathbf{UV}\dots\mathbf{X}\cdot\mathbf{Y}\mathbf{Z}\cdot) + \dots \\ &+ N(\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}\dots\mathbf{XYZ}\cdot) + N(\mathbf{UV}\dots\mathbf{XYZ}). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Antes de provar o lema observemos que:

1. Se \mathbf{Z} é um operador de destruição, então $T[\mathbf{AZ}] = N[\mathbf{AZ}]$ e todas as contrações são nulas; portanto, o lema está provado.
2. O produto de operadores $\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY}$ pode ser assumido como normal-ordenado uma vez que, se não o for, os operadores podem ser re-ordenados em ambos os lados da equação de

modo que fique normal-ordenado.

3. Podemos assumir que \mathbf{Z} seja um operador de criação e $\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY}$ sejam todos de destruição. Se o lema for provado para esse caso, então também será para o caso do produto obtido por multiplicação de um operador de criação pela esquerda.

Portanto, para provar o lema basta considerar o caso em que \mathbf{Z} é operador de criação e $\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY}$ são todos de destruição. A prova segue por indução. O lema é verdadeiro para dois operadores pela definição (B.3), ou seja,

$$\mathbf{AZ} = T[\mathbf{AZ}] = \mathbf{A}\cdot\mathbf{Z}\cdot + N[\mathbf{AZ}]. \quad (\text{B.6})$$

Agora, supondo o lema verdadeiro para n operadores, vamos mostrar que também o é para $n + 1$. Multiplicando a equação (B.5) por \mathbf{D} (operador de destruição com tempo maior que o de \mathbf{Z})

$$\begin{aligned} \mathbf{DN}(\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY})\mathbf{Z} &= N(\mathbf{DUV}\dots\mathbf{XY})\mathbf{Z} \\ &= \mathbf{DN}(\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY}\cdot\mathbf{Z}\cdot) + \dots + \mathbf{DN}(\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}\dots\mathbf{XY}\mathbf{Z}\cdot) + \dots \\ &+ \mathbf{DN}(\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY}\mathbf{Z}) \\ &= N(\mathbf{DUV}\dots\mathbf{XY}\cdot\mathbf{Z}\cdot) + \dots + N(\mathbf{DU}\cdot\mathbf{V}\dots\mathbf{XY}\mathbf{Z}\cdot) + \dots \\ &+ \mathbf{DN}(\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY}\mathbf{Z}). \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Apenas o último termo não foi possível colocar o operador \mathbf{D} dentro do ordenador normal, pois \mathbf{Z} ainda é operador. Mas este termo pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathbf{DN}(\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY}\mathbf{Z}) &= (-1)^p \mathbf{DZUV}\dots\mathbf{XY} \\ &= (-1)^p T(\mathbf{DZ})\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY} \\ &= (-1)^p \mathbf{D}\cdot\mathbf{Z}\cdot\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY} + (-1)^p N(\mathbf{DZ})\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY} \\ &= [(-1)^p]^2 \mathbf{D}\cdot\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY}\mathbf{Z}\cdot + [(-1)^p]^2 N(\mathbf{DUV}\dots\mathbf{XY}\mathbf{Z}) \\ &= N[\mathbf{D}\cdot\mathbf{UV}\dots\mathbf{XY}\mathbf{Z}\cdot] + N(\mathbf{DUV}\dots\mathbf{XY}\mathbf{Z}), \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

provando o lema.

O resultado pode ser generalizado para ordenador normal já contendo contrações de operadores de campo, ou seja,

$$\begin{aligned} N(\mathbf{UV}\dots\mathbf{X}\cdot\mathbf{Y})\mathbf{Z} &= N(\mathbf{UV}\dots\mathbf{X}\cdot\mathbf{Y}\cdot\mathbf{Z}\cdot) + \dots + N(\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}\dots\mathbf{X}\cdot\mathbf{Y}\mathbf{Z}\cdot) \\ &+ N(\mathbf{UV}\dots\mathbf{X}\cdot\mathbf{Y}\mathbf{Z}). \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Tendo o resultado do lema, podemos provar o teorema de Wick usando novamente a indução. Para dois operadores a equação (B.6) é válida. Assumindo válido para n operadores e multiplicando pelo lado direito por $\mathbf{\Omega}$, com tempo menor que qualquer outro fator, segue

que

$$\begin{aligned}
 T(\mathbf{UVW}\dots\mathbf{XYZ})\Omega &= T(\mathbf{UVW}\dots\mathbf{XYZ}\Omega) \\
 &= N(\mathbf{UVW}\dots\mathbf{XYZ})\Omega + N(\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}\cdot\mathbf{W}\dots\mathbf{XYZ})\Omega + \dots \\
 &= N(\mathbf{UVW}\dots\mathbf{XYZ}\Omega) + N(\text{soma sobre todos} \\
 &\quad \text{os possíveis pares de contração}), \tag{B.10}
 \end{aligned}$$

onde foi usado o lema para introduzir o operador $\hat{\Omega}$ no ordenador normal.

Referências

- [1] Vianna, J. D. M., Fazzio, A., Canuto, S., *Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional*. Livraria da Física, São Paulo (2004).
- [2] Szabo, A., Ostlund, N. S., *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Dover Publications, Nova York (1996).
- [3] McWeeny, R., *Methods of Molecular Quantum Mechanics*. Academic Press, U.K. (1992).
- [4] Dardenne, L. E., Makiuchi, N., Malbouisson, L. A. C., Vianna, J. D. M., *Int. J. Quantum Chemistry*, **76** 600 (2000).
- [5] Makiuchi, N., Martins, M. G. R., Malbouisson, L. A. C., *Int. J. Quantum Chemistry*, **106** 2772 (2006).
- [6] Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M., *Phys. Rev. Lett.*, **77** 3865 (1996).
- [7] Logrado, P. G., Vianna, J. D. M., *J. Math. Chem.*, **22** 107 (1997).
- [8] Alexandre, S. S., Chacham, H., Nunes, R. W., *Phys. Rev.*, **B 63** 045402 (2001).
- [9] Rocha, O. L. V., *Estados quânticos do tipo Bell na representação duplo-triplo e efeitos da temperatura: uma análise usando a Dinâmica de Campos Térmicos*. Dissertação de Mestrado, Instituto de Física, UFBA (2011).
- [10] Trindade, M. A. S., Silva Filho, L. M., Santos, L. C., Martins, M. G. R., Vianna, J. D. M., *Int. J. Mod. Phys.*, **B 27** 1350133 (2013).
- [11] Nolting, W., *Fundamentals of Many-Body Physics: Principles and Methods*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2009).
- [12] Fetter, A. L., Walecka, J. D., *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill, New York (1971).
- [13] Le Bellac, M., *Thermal Field Theory*. Cambridge University Press, U.K. (1996).
- [14] Matsubara, T., *Prog. Theor. Phys.*, **14** 351 (1955).
- [15] Fradkin, E.S., *Proc. Lebedev Inst.*, **29** 6 (1965).
- [16] Schwinger, J. S., *J. Math. Phys.*, **2** 407 (1961).
- [17] Takahashi, Y., Umezawa, H., *Int. J. Mod. Phys.*, **B 10** (1996).

-
- [18] Umezawa, H., Matsumoto, H., Tachiki, M., *Thermo Field Dynamics and Condensed States*. North-Holland, Netherlands (1982).
- [19] Khanna, F. C., Malbouisson, A. P. C., Malbouisson, J. M. C., Santana, A. E., *Thermal Quantum Field Theory: Algebraic Aspects and Applications*. World Scientific, Singapore (2009).
- [20] Das, A., *Finite Temperature Field Theory*. World Scientific, Singapore (1997).
- [21] Rivers, R. J., *Path Integral Methods in Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, U.K. (1987).
- [22] Trindade, M. A., *Estruturas Álgebricas em Informação Quântica e Dinâmica de Campos Térmicos*. Tese de Doutorado, Instituto de Física, UFBA (2010).
- [23] Queiroz, H., *O Operador Espalhamento para Férmions num Campo Externo em Thermofield Dynamics*. Tese de Doutorado, Instituto de Física Teórica, UNESP (2002).
- [24] Salinas, S. R. A., *Introdução à Física Estatística*. edusp, São Paulo (1999).
- [25] Kim, Y. S., Noz, M. E., *Phase Space Picture of Quantum Mechanics: Group Theoretical Approach*. World Scientific, Singapore (1991).
- [26] Mukunda, N., Sudarshan, E. C. G., *Classical Dynamics: A Modern Perspective*. John Wiley & Sons, Canada (1974).
- [27] Scharf, G., *Finite Quantum Electrodynamics*. Springer-Verlag, Berlin (1989).
- [28] Klein, A., Prange, R., *Phys. Rev.*, **112** 994 (1958).
- [29] Feynman, R. P., *Phys. Rev.*, **76** 749 (1949).
- [30] J. Goldstone, *Proc. Roy. Soc.*, **A239** 267 (1957).
- [31] Dyson, F. J., *Phys. Rev.*, **75** 1736 (1949).
- [32] Gell-Mann, M., Low, F., *Phys. Rev.*, **84** 350 (1951).
- [33] Wick, G. C. *Phys. Rev.*, **80** 268 (1950).