

FI-193 – Lista 4

Soluções

Questão 1 — Partícula em potencial externo estático: equação de Dyson e matriz T

(Problema 3.11(a),(b), Fetter & Walecka, particularizado para $V_{\alpha\beta}(\vec{x}) = \delta_{\alpha\beta}V(\vec{x})$)

a) Equação de Dyson no espaço de momentos

O Hamiltoniano é o de partículas livres mais um potencial externo estático de um corpo,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}^{\text{ex}}, \quad \hat{H}^{\text{ex}} = \int d^d x \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\vec{x}) V_{\alpha\beta}(\vec{x}) \hat{\psi}_\beta(\vec{x}) = \int d^d x V(\vec{x}) \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}_\alpha(\vec{x}),$$

onde na última igualdade usamos $V_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}V$. Como a perturbação é de um corpo e diagonal no spin, a função de Green completa também é diagonal no spin, $G_{\alpha\beta}^{\text{ex}} = \delta_{\alpha\beta}G^{\text{ex}}$, e daqui em diante omitimos os índices de spin.

Na expansão perturbativa, cada inserção do potencial externo é um vértice de uma perna entrando e uma saindo (não há *loops* fechados conectados ao vértice além da série em cadeia, pois o potencial é de um corpo). A soma da série geométrica de inserções dá a **equação de Dyson exata** no espaço de posições,

$$G^{\text{ex}}(x, y) = G^{(0)}(x - y) + \int d^d z dt_z G^{(0)}(x - z) V(\vec{z}) G^{\text{ex}}(z, y),$$

com $x = (\vec{x}, t_x)$ etc. Note que $G^{(0)}$ depende só de $x - y$, mas G^{ex} depende de $\vec{x}$ e $\vec{y}$ separadamente (o potencial quebra a invariância translacional), embora só de $t_x - t_y$. Definindo a transformada dupla

$$G^{\text{ex}}(x, y) = \int \frac{d^d k d^d q d\omega}{(2\pi)^{2d+1}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{y}} e^{-i\omega(t_x - t_y)} G^{\text{ex}}(\vec{k}, \vec{q}, \omega),$$

e a transformada do potencial $V(\vec{q}) = \int d^d x e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} V(\vec{x})$, inserimos tudo na equação de Dyson. A integração em t_z produz $2\pi\delta(\omega - \omega')$ (o potencial é estático: a frequência é conservada), e a integração em $\vec{z}$ liga os momentos através de $V(\vec{k} - \vec{q})$. O resultado é

$$G^{\text{ex}}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = G^{(0)}(\vec{k}, \omega) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{k} - \vec{k}') + G^{(0)}(\vec{k}, \omega) \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} V(\vec{k} - \vec{q}) G^{\text{ex}}(\vec{q}, \vec{k}', \omega)$$

com

$$G^{(0)}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i\eta}, \quad \varepsilon_k = \frac{k^2}{2m} \quad (\hbar = 1),$$

onde tomamos o problema de *uma* partícula adicionada ao vácuo (banda vazia), de modo que todos os polos de $G^{(0)}$ ficam em $\omega = \varepsilon_k - i\eta$. Em volume finito, $(2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{k} - \vec{k}') \rightarrow \mathcal{V} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$, que é a forma $\delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$ do enunciado. $\square$

b) Matriz T e sua equação integral

Iterando a equação de Dyson,

$$G^{\text{ex}} = G^{(0)} + G^{(0)} V G^{(0)} + G^{(0)} V G^{(0)} V G^{(0)} + \dots = G^{(0)} + G^{(0)} [V + V G^{(0)} V + \dots] G^{(0)},$$

vemos que toda a série intermediária entre os dois propagadores externos define a **matriz** T :

$$G^{\text{ex}}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = G^{(0)}(\vec{k}, \omega) \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} + G^{(0)}(\vec{k}, \omega) T(\vec{k}, \vec{k}', \omega) G^{(0)}(\vec{k}', \omega)$$

com T satisfazendo a equação integral (equação de Lippmann–Schwinger)

$$T(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = V(\vec{k} - \vec{k}') + \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} V(\vec{k} - \vec{q}) G^{(0)}(\vec{q}, \omega) T(\vec{q}, \vec{k}', \omega)$$

De fato, substituindo a forma fechada de G^{ex} na equação de Dyson do item (a) e cancelando o fator comum $G^{(0)}(\vec{k}, \omega)$ e o propagador externo da direita, recupera-se exatamente a equação acima. $\square$

c) Potencial de contato $V(\vec{x}) = U\delta^{(d)}(\vec{x})$: solução da matriz T

Para o potencial de contato, $V(\vec{q}) = U$ para todo $\vec{q}$: o vértice não depende dos momentos. A equação integral então mostra que T tampouco depende de $\vec{k}, \vec{k}'$:

$$T(\omega) = U + U \left[\int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} G^{(0)}(\vec{q}, \omega) \right] T(\omega) \implies T(\omega) = \frac{U}{1 - U F(\omega)}, \quad F(\omega) \equiv \int_{q < \Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{\omega - \varepsilon_q + i\eta},$$

onde introduzimos o corte ultravioleta $q < \Lambda$ para regularizar a integral (necessário para $d \geq 2$).

d) Estado ligado para $U < 0$ em $d \leq 2$

Um **estado ligado** aparece como polo de $T(\omega)$ (e portanto de G^{ex}) em frequência real *negativa*, $\omega = -E_B$ com $E_B > 0$, abaixo do contínuo $\omega \in [0, \Lambda^2/2m]$. A condição de polo é

$$1 = U F(-E_B), \quad F(-E_B) = - \int_{q < \Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{E_B + q^2/2m} < 0.$$

Para $\omega < 0$ o denominador nunca se anula ($i\eta$ dispensável) e F é real e estritamente negativa; logo só pode haver solução para $U < 0$. Escrevendo $U = -|U|$, a condição vira

$$\frac{1}{|U|} = \Phi(E_B), \quad \Phi(E) \equiv |F(-E)| = \int_{q < \Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{E + q^2/2m}.$$

$\Phi(E)$ é monótona decrescente em E , com $\Phi(\infty) = 0$. Portanto existe solução (única) se, e somente se,

$$\frac{1}{|U|} < \Phi(0^+) = \int_{q < \Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{2m}{q^2}.$$

Tudo se decide, então, pela convergência infravermelha de $\Phi(0^+)$:

$d = 2$.

$$\Phi(E) = \int_0^\Lambda \frac{q dq}{2\pi} \frac{2m}{2mE + q^2} = \frac{m}{2\pi} \ln \left(1 + \frac{\Lambda^2}{2mE} \right) \xrightarrow{E \rightarrow 0^+} +\infty.$$

A divergência logarítmica garante que a equação $1/|U| = \Phi(E_B)$ *sempre* tem solução, por menor que seja $|U|$:

$$E_B = \frac{\Lambda^2}{2m} \frac{1}{e^{2\pi/(m|U|)} - 1} \simeq \frac{\Lambda^2}{2m} e^{-2\pi/(m|U|)} \quad (m|U| \ll 1),$$

uma energia de ligação exponencialmente pequena e não perturbativa em U (essencialmente o mesmo logaritmo que produz o par de Cooper).

$d = 1$.

$$\Phi(E) = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dq}{2\pi} \frac{2m}{2mE + q^2} = \frac{2m}{\pi} \frac{1}{\sqrt{2mE}} \arctan \frac{\Lambda}{\sqrt{2mE}} \xrightarrow{E \rightarrow 0^+} +\infty,$$

agora com divergência em lei de potência $\Phi \sim \sqrt{m/2E}$. De novo há sempre solução; para $|U|$ fraco ($\sqrt{2mE_B} \ll \Lambda$, o corte é irrelevante),

$$\frac{1}{|U|} \simeq \sqrt{\frac{m}{2E_B}} \implies E_B \simeq \frac{mU^2}{2},$$

que é exatamente a energia do estado ligado do poço delta unidimensional ($E_B = mU^2/2\hbar^2$), como deveria.

Contraste: $d = 3$. Aqui $\Phi(0^+) = \int_{q < \Lambda} d^3q / (2\pi)^3 (2m/q^2) = m\Lambda/\pi^2$ é *finito*: só há estado ligado se $|U| > U_c = \pi^2/m\Lambda$. A formação incondicional do estado ligado para atração arbitrariamente fraca é, portanto, peculiar a $d \leq 2$, onde a integral de $2m/q^2$ diverge no infravermelho. $\square$

Questão 2 — Equação de movimento de G e a hierarquia G – G_2

(Problema 3.14, Fetter & Walecka)

Enunciado adotado¹: Considere o Hamiltoniano

$$\hat{H} = \int d^3x \, \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}(\vec{x}) + \frac{1}{2} \int d^3x \, d^3x' \, \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}') V(\vec{x} - \vec{x}') \hat{\psi}(\vec{x}') \hat{\psi}(\vec{x}).$$

Use a equação de movimento de Heisenberg para o operador de campo e mostre que a função de Green de partícula única $iG(1, 1') = \langle T[\hat{\psi}_H(1) \hat{\psi}_H^\dagger(1')] \rangle$ obedece a uma equação de movimento exata que acopla G à função de Green de duas partículas G_2 ; escreva essa equação.

Usamos a notação compacta $1 \equiv (\vec{x}_1, t_1)$, com $\hbar = 1$, índices de spin suprimidos (ou absorvidos nas coordenadas) e o sinal superior (inferior) para bósons (férmions) onde houver ambiguidade.

a) Equação de Heisenberg para $\hat{\psi}$

Na representação de Heisenberg, $i \partial_t \hat{\psi}_H(1) = [\hat{\psi}_H(1), \hat{H}]$. Com as relações canônicas de (anti)comutação a tempos iguais, $[\hat{\psi}(\vec{x}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}')]_{\mp} = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$, um cálculo direto dá, para a parte cinética,

$$[\hat{\psi}(\vec{x}_1), \hat{T}] = -\frac{\nabla_1^2}{2m} \hat{\psi}(\vec{x}_1),$$

e, para a parte de interação (o fator $\frac{1}{2}$ é cancelado pelas duas maneiras de contrair $\hat{\psi}$ com os dois $\hat{\psi}^\dagger$),

$$[\hat{\psi}(\vec{x}_1), \hat{V}] = \int d^3x_2 \, V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}_2) \hat{\psi}(\vec{x}_2) \hat{\psi}(\vec{x}_1).$$

Logo

$$i \partial_{t_1} \hat{\psi}_H(1) = -\frac{\nabla_1^2}{2m} \hat{\psi}_H(1) + \int d^3x_2 \, V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \hat{\psi}_H^\dagger(\vec{x}_2, t_1) \hat{\psi}_H(\vec{x}_2, t_1) \hat{\psi}_H(1).$$

b) Derivada temporal do produto ordenado no tempo

A função de Green é

$$iG(1, 1') = \langle T[\hat{\psi}_H(1) \hat{\psi}_H^\dagger(1')] \rangle = \theta(t_1 - t_{1'}) \langle \hat{\psi}_H(1) \hat{\psi}_H^\dagger(1') \rangle \pm \theta(t_{1'} - t_1) \langle \hat{\psi}_H^\dagger(1') \hat{\psi}_H(1) \rangle.$$

Ao derivar em t_1 , as funções degrau geram $\delta(t_1 - t_{1'})$ multiplicando o (anti)comutador a tempos iguais,

$$\delta(t_1 - t_{1'}) \langle [\hat{\psi}_H(1), \hat{\psi}_H^\dagger(1')]_{\mp} \rangle = \delta(t_1 - t_{1'}) \delta^{(3)}(\vec{x}_1 - \vec{x}_{1'}) \equiv \delta(1, 1'),$$

enquanto a derivada dos operadores dentro do T -produto é dada pela equação de Heisenberg do item (a). Portanto,

$$\left(i \partial_{t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} \right) G(1, 1') = \delta(1, 1') - i \int d^3x_2 \, V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \langle T[\hat{\psi}_H^\dagger(\vec{x}_2, t_1) \hat{\psi}_H(\vec{x}_2, t_1) \hat{\psi}_H(1) \hat{\psi}_H^\dagger(1')] \rangle.$$

¹Versão adotada do Problema 3.14 do F&W: para o Hamiltoniano com interação de dois corpos, usar a equação de Heisenberg dos operadores de campo para derivar a equação de movimento exata da função de Green de partícula única e mostrar que ela envolve a função de Green de duas partículas G_2 (início da hierarquia de Martin-Schwinger). Caso o enunciado do livro difira em detalhes de notação, o conteúdo físico é o mesmo.

c) Aparecimento de G_2 : a equação exata

O valor esperado com quatro operadores é, por definição, a função de Green de **duas** partículas,

$$(i)^2 G_2(1, 2; 1', 2') \equiv \left\langle T[\hat{\psi}_H(1)\hat{\psi}_H(2)\hat{\psi}_H^\dagger(2')\hat{\psi}_H^\dagger(1')] \right\rangle.$$

Identificando $2 = (\vec{x}_2, t_1)$ e $2' = (\vec{x}_2, t_1^+)$ (o t_1^+ garante que o par $\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}$ criado pela interação fique na ordem correta dentro do T -produto), obtemos a **equação de movimento exata**

$$\left(i \partial_{t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} \right) G(1, 1') = \delta(1, 1') \pm i \int d^3x_2 V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) G_2(1, \vec{x}_2 t_1; 1', \vec{x}_2 t_1^+)$$

(sinal superior para bósons, inferior para férmions, conforme a convenção de sinais do reordenamento dos campos dentro de G_2).

Discussão. A equação é exata, mas não fechada: $\partial_t G$ envolve G_2 ; da mesma forma, a equação de movimento de G_2 envolveria G_3 , e assim por diante — é a *hierarquia de Martin–Schwinger*, análoga quântica da hierarquia BBGKY. Toda teoria de muitos corpos aproximada corresponde a uma prescrição de truncamento dessa hierarquia; por exemplo, a fatoração

$$G_2(1, 2; 1', 2') \approx G(1, 1') G(2, 2') \pm G(1, 2') G(2, 1')$$

fecha a equação em G e reproduz exatamente a aproximação de Hartree–Fock autoconsistente. Equivalentemente, definindo a autoenergia Σ por $\mp i \int V G_2 \equiv \int \Sigma(1, \bar{1}) G(\bar{1}, 1') d\bar{1}$, a equação acima é a própria equação de Dyson na forma diferencial. $\square$

Questão 3 — Polarização do gás de elétrons livre: função de Lindhard

(Problema 7.5, Fetter & Walecka)

Enunciado adotado²: Para o gás de Fermi livre em $T = 0$, considere a polarização de ordem mais baixa

$$\Pi^0(q) = -2i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) G^{(0)}(k+q), \quad q \equiv (\vec{q}, \omega),$$

com o fator 2 vindo da soma de spin. Obtenha a forma explícita de $\Pi^0(\vec{q}, \omega)$, sua parte imaginária, e discuta os limites estático e de longos comprimentos de onda.

a) Integração em frequência e forma espectral (Lehmann)

Com

$$G^{(0)}(\vec{k}, \omega) = \frac{\theta(k - k_F)}{\omega - \varepsilon_k + i\eta} + \frac{\theta(k_F - k)}{\omega - \varepsilon_k - i\eta}, \quad \varepsilon_k = \frac{k^2}{2m},$$

a integral em frequência interna de Π^0 só é não nula quando um propagador é de partícula e o outro de buraco (polos em semiplanos opostos). Fechando o contorno e usando $n_{\vec{k}} = \theta(k_F - k)$, obtém-se

$$\Pi^0(\vec{q}, \omega) = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n_{\vec{k}} (1 - n_{\vec{k}+\vec{q}}) \left[\frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}\vec{q}} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{\vec{k}\vec{q}} - i\eta} \right]$$

com $\omega_{\vec{k}\vec{q}} \equiv \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}} = (q^2 + 2\vec{k} \cdot \vec{q})/2m > 0$ na região permitida. Esta é exatamente a representação de Lehmann: soma sobre estados intermediários de um par partícula–buraco de momento $\vec{q}$ e energia de excitação $\omega_{\vec{k}\vec{q}}$, com os dois termos (frequência positiva e negativa) garantindo $\Pi^0(\vec{q}, -\omega) = \Pi^0(\vec{q}, \omega)$ e a analiticidade típica de função tempo-ordenada.

b) Parte imaginária

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

$$\text{Im } \Pi^0(\vec{q}, \omega) = -2\pi \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n_{\vec{k}} (1 - n_{\vec{k}+\vec{q}}) [\delta(\omega - \omega_{\vec{k}\vec{q}}) + \delta(\omega + \omega_{\vec{k}\vec{q}})] \leq 0,$$

não nula apenas dentro do *contínuo partícula–buraco*,

$$\left| \frac{q^2}{2m} - \frac{qk_F}{m} \right| \leq |\omega| \leq \frac{q^2}{2m} + \frac{qk_F}{m}.$$

Fazendo a integral angular (para $\omega > 0$; adimensionalizando $x = q/2k_F$, $\nu = \omega/(qv_F)$, $v_F = k_F/m$, e $N(0) = mk_F/\pi^2$ a densidade de estados no nível de Fermi, com spin):

$$\text{Im } \Pi^0(\vec{q}, \omega) = -\frac{\pi}{2} N(0) \begin{cases} \nu, & \text{região } 0 < \nu \leq 1 - x, \\ \frac{1 - (\nu - x)^2}{4x}, & \text{região } |1 - x| \leq \nu \leq 1 + x, \\ 0, & \nu \geq 1 + x, \end{cases}$$

que é o amortecimento de Landau: absorção por criação de pares partícula–buraco reais.

²Versão adotada do Problema 7.5 do F&W: a partir da definição da polarização própria de ordem zero $\Pi^0(q, \omega)$ do gás de elétrons livre (o “bolhão” partícula–buraco), obter sua representação espectral (Lehmann), calcular sua parte imaginária e verificar os dois limites característicos: o limite estático $\Pi^0(q \rightarrow 0, \omega = 0)$, que dá a blindagem de Thomas–Fermi, e o limite dinâmico de longos comprimentos de onda $\Pi^0(q \rightarrow 0, \omega \text{ fixo})$, que dá a frequência de plasma. Caso o enunciado do livro difira em detalhes, o conteúdo adotado é este.

c) Forma explícita (função de Lindhard) e limite estático

A parte real segue da integral principal; o resultado fechado é a **função de Lindhard**:

$$\text{Re } \Pi^0(\vec{q}, \omega) = -\frac{N(0)}{2} \left[1 + \frac{1 - (\nu - x)^2}{4x} \ln \left| \frac{\nu - x - 1}{\nu - x + 1} \right| + \frac{1 - (\nu + x)^2}{4x} \ln \left| \frac{\nu + x + 1}{\nu + x - 1} \right| \right].$$

Limite estático, $\omega = 0$:

$$\Pi^0(\vec{q}, 0) = -\frac{N(0)}{2} \left[1 + \frac{1 - x^2}{2x} \ln \left| \frac{1 + x}{1 - x} \right| \right] \xrightarrow{q \rightarrow 0} -N(0) = -\frac{mk_F}{\pi^2}.$$

Na constante dielétrica RPA, $\epsilon(\vec{q}, 0) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \Pi^0(\vec{q}, 0) \rightarrow 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2}$, com

$$q_{TF}^2 = 4\pi e^2 N(0) = \frac{4me^2 k_F}{\pi} :$$

a interação coulombiana é blindada, $V_{\text{ef}}(\vec{q}) = 4\pi e^2 / (q^2 + q_{TF}^2)$, i.e., um Yukawa de alcance q_{TF}^{-1} (blindagem de **Thomas–Fermi**). Note também a singularidade fraca da derivada em $x = 1$ ($q = 2k_F$), origem das oscilações de Friedel e da anomalia de Kohn.

d) Limite dinâmico de longos comprimentos de onda

Agora $q \rightarrow 0$ com ω fixo ($\nu \gg 1$): expandindo os logaritmos em potências de $1/\nu$ (ou, diretamente, expandindo a forma espectral do item (a) em potências de $\omega_{\vec{k}\vec{q}}/\omega$),

$$\Pi^0(\vec{q}, \omega) \simeq \frac{2}{\omega^2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n_{\vec{k}} (1 - n_{\vec{k}+\vec{q}}) 2\omega_{\vec{k}\vec{q}} \xrightarrow{q \rightarrow 0} \frac{nq^2}{m\omega^2} \left[1 + \frac{3}{5} \frac{q^2 v_F^2}{\omega^2} + \dots \right],$$

onde $n = k_F^3/3\pi^2$ é a densidade eletrônica (o coeficiente $nq^2/m\omega^2$ é fixado pela regra de soma- f). A condição de modo coletivo $\epsilon(\vec{q}, \omega) = 0$ dá então

$$1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{nq^2}{m\omega^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\omega^2 = \omega_p^2 + \frac{3}{5} q^2 v_F^2 + \dots, \quad \omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}}$$

o **plasmon**, sem amortecimento enquanto sua dispersão ficar acima do contínuo partícula–buraco do item (b), onde $\text{Im } \Pi^0 = 0$. □