

## 6. Funções de Green em mecânica quântica

Método das funções de Green (f.G.) é um dos mais potentes e universais em física teórica. O conceito de f.G. apareceu ainda no sec. XIX em física clássica, relacionado com problemas lineares diferenciais em derivadas parciais: em teoria de elasticidade, propagação de calor, electro- e magnetostática, propagação de ondas, etc.

Na formulação básica, se considera um problema uniforme:

$$\hat{L}u(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{P})$$

onde  $\hat{L}$  é um operador linear diferencial, normalmente com derivadas de 1ª e 2ª ordem (mas pode ter até termos de 3ª e 4ª ordem) e  $u(\mathbf{r}, t)$  a função procurada. Para este problema, a f.G.  $g(\mathbf{r}, t)$  está definida como a solução da equação associada:

$$\hat{L}g(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r})\delta(t).$$

Também estas funções se conhece como as soluções fundamentais do problema, Eq. (P). A importância das f.G. consiste em possibilidade de obter soluções para um problema não uniforme, relacionado com Eq. (P):

$$\hat{L}u(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t) \quad (\text{N})$$

onde  $f(\mathbf{r}, t)$  é uma função *arbitrária* (dentro das certas limitações razoáveis). Então a solução para Eq. (N) tem a forma:

$$u(\mathbf{r}, t) = u_0(\mathbf{r}, t) + \int g(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') f(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt'.$$

← uma solução da Eq. (P)

Esta construção indica também o caminho para tratamento do problema correspondente a perturbação da Eq. (P):

$$(\hat{L} + \hat{V})u(\mathbf{r}, t) = 0$$

levando-o à forma semelhante à Eq. (N):  $\hat{L}u = -\hat{V}u$ , e escrevendo a solução como:

$$u(\mathbf{r}, t) = u_0(\mathbf{r}, t) - \int g(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') (\hat{V}u)(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt'.$$

De facto, aqui temos uma equação integral para  $u(\mathbf{r}, t)$ , um caso particular desta foi considerado no Cap. 3. Considerando-lha como  $u = u_0 - \hat{G}\hat{V}u$ , onde  $\hat{G}$  é operador integral com o kernel  $g(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$ , obtemos a solução formal:

$$u = (1 + \hat{G}\hat{V})^{-1} u_0 \quad (\text{R})$$

operador de resolventa

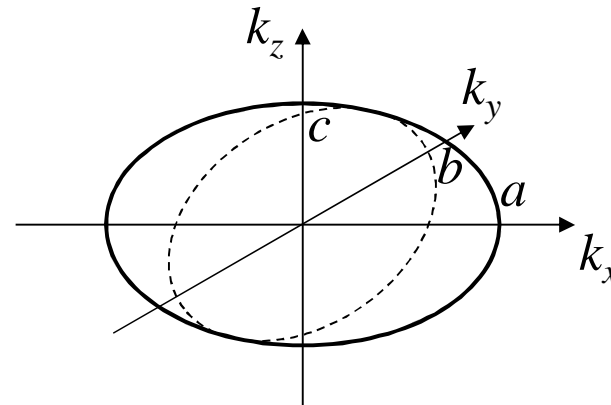
Logo podemos expandir Eq. (R) em serie segundo  $\hat{G}\hat{V}$  (se este for razoavelmente pequeno, como no caso de aproximação de Born) ou tratar uns métodos não perturbativos (até exactos, como foi no exemplo de potencial finito, Cap. 3).

## Funções de Green para problemas clássicos

Os problemas matemáticos mais estudados na física clássica são relacionados com equações de três tipos característicos.

1. Equação de tipo elíptico:

$$\hat{L} = \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{b^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$



(a sua equação característica  $k_x^2/a^2 + k_y^2/b^2 + k_z^2/c^2 = 1$  corresponde a um elipsoide). O caso particular mais simples está dado por equação de Laplace:  $\nabla^2 u(\mathbf{r}) = 0$ , com a equação associada para f.G.:

$$\nabla^2 g(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (\text{E})$$

Construímos  $g(\mathbf{r})$  através da sua transformada de Fourier:

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{g}(\mathbf{k}).$$

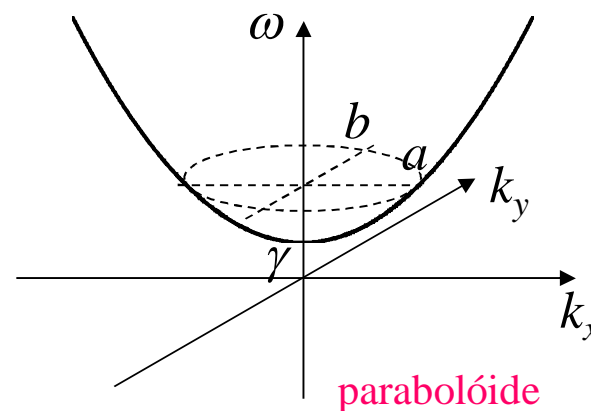
Representando aqui  $\delta(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3} \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k}$ , obtemos  $\tilde{g}(\mathbf{k}) = -1/k^2$ , e logo:

$$g(\mathbf{r}) = \frac{-1}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{k^2} = -\frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty \frac{\text{sen}kr}{k} dk = -\frac{1}{4\pi r} \quad (\text{G})$$

Esta f.G. serve para construção das diversas soluções dos problemas de electrostática.

2. Equação do tipo parabólico:

$$\hat{L} = \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{b^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$



com equação característica:  $\omega/\gamma = k_x^2/a^2 + k_y^2/b^2 + k_z^2/c^2 + 1$ .

A este tipo pertence a equação de difusão (ou de transporte de calor):

$$\frac{\partial}{\partial t} u(\mathbf{r}, t) = D \nabla^2 u(\mathbf{r}, t) \quad (\text{D})$$

coeficiente de difusão

Neste caso temos para f.G.:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - D \nabla^2 \right) g(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r}) \delta(t)$$

$$g(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\omega d\mathbf{k} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} + \omega t)} \tilde{g}(\mathbf{k}, \omega)$$

$$\tilde{g}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{i\omega + Dk^2}$$

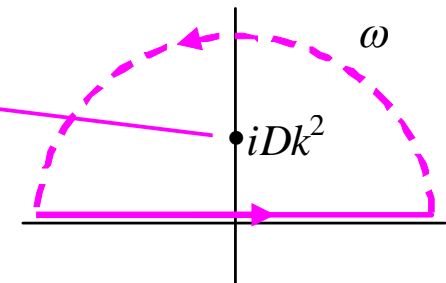
$$g(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\omega d\mathbf{k} \frac{e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} + \omega t)}}{i\omega + Dk^2} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} + iDk^2 t)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} k dk e^{i(kr + iDk^2 t)} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\partial}{\partial r} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikr - Dk^2 t} = -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\partial}{\partial r} \sqrt{\frac{\pi}{Dt}} e^{-r^2/4Dt} =$$

$$= \frac{e^{-r^2/4Dt}}{(4\pi Dt)^{3/2}}$$

descreve a difusão com tempo dum impulso  $\delta$  inicial



3. Equação de tipo hiperbólico:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u(\mathbf{r}, t) = c^2 \nabla^2 u(\mathbf{r}, t) \quad (\text{H})$$

equação telegráfica ou de D'Alembert

Para f.G. correspondente temos:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \right) g(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r}) \delta(t)$$

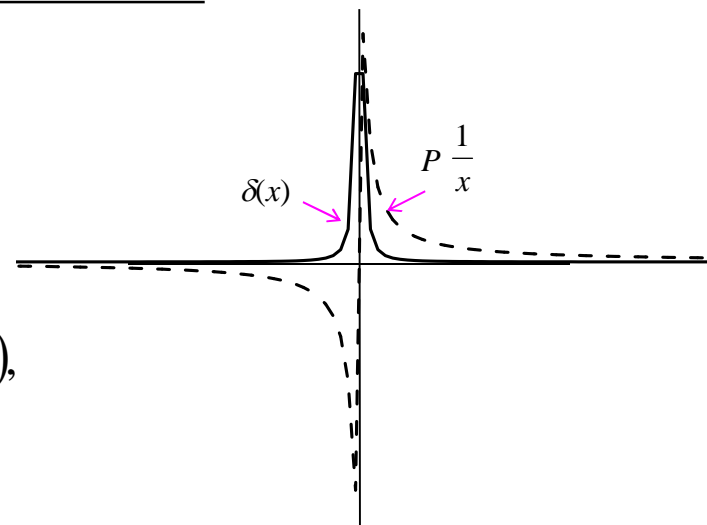
$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int \frac{d\omega d\mathbf{k} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} + \omega t)}}{-\omega^2 + c^2 k^2} = \\ &= -\frac{1}{2(2\pi)^4 c} \int_0^\infty k dk \int_{-\infty}^\infty d\omega e^{i\omega t} \left( \frac{1}{\omega - ck} - \frac{1}{\omega + ck} \right) \int d\Omega e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \\ &= -\frac{1}{8\pi^2 cr} \left[ \int_0^\infty e^{ik(r+ct)} dk - \int_0^\infty e^{-ik(r-ct)} dk \right] = \\ &= \frac{i}{8\pi^2 cr} \left( \frac{1}{r+ct+i0} + \frac{1}{r-ct-i0} \right) = \frac{i}{4\pi^2 c (r^2 - c^2 t^2)}. \end{aligned}$$

Aqui foram usadas as relações para funções generalizadas:

$$\int_0^{\infty} \text{sen}kx dk = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-\alpha k} \text{sen}kx dk = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{x}{x^2 + \alpha^2} \stackrel{\text{def}}{=} P \frac{1}{x},$$

$$\int_0^{\infty} \text{cos}kx dk = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-\alpha k} \text{cos}kx dk = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\alpha}{x^2 + \alpha^2} = \pi \delta(x),$$

$$\int_0^{\infty} e^{ikx} dk = i \left[ P \frac{1}{x} - i\pi \delta(x) \right] = \frac{i}{x + i0}.$$



Aparte das suas aplicações específicas, as consideradas f.G. clássicas indicam também o modo de generalização para os problemas de mecânica quântica.



## Funções de Green em mecânica quântica

As abordagens anteriores aplicam-se às equações de mecânica quântica comum de maneira directa. Começamos desde equação de Schroedinger estacionaria (livre):

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \varepsilon \right) \psi(\mathbf{r}) = 0$$

onde a f.G. construi-se em analogia com Eq. (E):

$$\begin{aligned} G_\varepsilon(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\hbar^2 k^2 / 2m - \varepsilon} = \\ &= \frac{m}{4\pi^2 \hbar^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left( \frac{1}{k - k_\varepsilon} + \frac{1}{k + k_\varepsilon} \right) \text{sen} kr = \\ &= \frac{m}{2\pi \hbar^2} \frac{e^{-ik_\varepsilon r}}{r}. \end{aligned}$$

com  $k_\varepsilon = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}$   
passando a Eq. (G)  
em limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

Outro exemplo está dado pela equação de Schroedinger dependente de tempo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

Aqui seguimos analogia com Eq. (D):

com  $D \rightarrow i\hbar/2m$

$$\begin{aligned}
 G(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int \frac{d\epsilon d\mathbf{k} e^{i(k\mathbf{r} - \epsilon t / \hbar)}}{\epsilon - \hbar^2 k^2 / 2m - i0} = & (S) \\
 &= \frac{i}{(2\pi)^3 r} \int_{-\infty}^{\infty} k d\mathbf{k} e^{i(kr - \hbar^2 k^2 t / 2m)} = \frac{1}{(2\pi)^2 ir} \frac{\partial}{\partial r} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k} e^{i(kr - \hbar^2 k^2 t / 2m)} = \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^2 ir} \sqrt{\frac{2m}{\hbar t}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ix^2} \right) \frac{\partial}{\partial r} e^{-ir^2 m / 2\hbar t} = \left( \frac{-im}{2\pi\hbar t} \right)^{3/2} e^{-ir^2 m / 2\hbar t}.
 \end{aligned}$$

Por fim, tornamos à equação de Klein-Gordon, Eq. (A):

$$\left( -\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \hbar^2 \nabla^2 - m^2 c^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

que tem estrutura hiperbólica parecida à Eq. (H). Neste caso, temos:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int \frac{d\varepsilon d\mathbf{k} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \varepsilon t / \hbar)}}{\varepsilon^2 / c^2 - \hbar^2 k^2 - m^2 c^2} = \\ &= \frac{ic}{2(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}}{\sqrt{k^2 + k_m^2}} \exp\left[ i\left( \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + ct\sqrt{k^2 + k_m^2} \right) \right] = && k_m = mc/\hbar \sim 10^{10} \div 10^{12} \\ & && \text{cm}^{-1}, \text{ muito grande} \\ &= -\frac{ic}{8\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k dk}{\sqrt{k^2 + k_m^2}} \exp\left[ i\left( kr + ct\sqrt{k^2 + k_m^2} \right) \right] = && \text{integramos por partes} \\ &= \frac{1}{8\pi^2 r} \exp\left[ i\left( kr + ct\sqrt{k^2 + k_m^2} \right) \right] \Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{i}{8\pi^2 t} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[ i\left( kr + ct\sqrt{k^2 + k_m^2} \right) \right] dk. \\ & && \text{para } t + i0 \text{ torna-se nulo} \end{aligned}$$

Para o cálculo de último integral usamos o método de ponto de sela ao redor dum extremo da expoente  $if(k)$ :

$$f(k) = kr + ct\sqrt{k^2 + k_m^2},$$

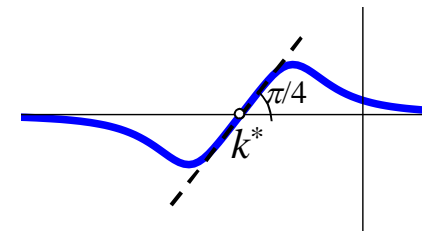
$$f'(k) = r + \frac{kct}{\sqrt{k^2 + k_m^2}} \Big|_{k=k^*} \Rightarrow 0,$$

$$k^* = -\frac{k_m r}{\sqrt{c^2 t^2 - r^2}}, \quad f(k^*) = k_m \sqrt{c^2 t^2 - r^2}.$$

Distinguem-se dois casos característicos, que vamos tratar separadamente.

a)  $s^2 = r^2 - c^2 t^2 < 0$ , intervalo pseudotemporal.

Neste caso, o ponto de sela  $k^*$  está no eixo real do plano  $k$  complexo. Na sua vizinhança  $k \approx k^* + qe^{i\varphi}$ , a trajectória de integração deve seguir a direcção  $\varphi$  onde a 2ª derivada  $id^2f(k)/dq^2$  fosse mais negativa possível.



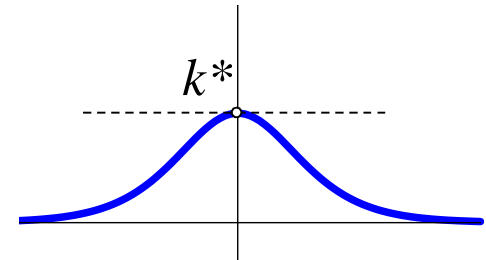
Isso corresponde a expansão:

$$if(k) \approx if(k^*) + e^{i(2\varphi + \pi/2)} \frac{k_m^2}{2(k^{*2} + k_m^2)^{3/2}} q^2,$$

Daqui obtemos:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, t) &\approx \frac{\exp\left[ik_m \sqrt{c^2 t^2 - r^2} \operatorname{sign}(t) + \pi/4\right]}{8\pi^2 t} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{(c^2 t^2 - r^2)^{3/2}}{2c^2 t^2 k_m} q^2\right] dq \\ &= \frac{c}{4} \sqrt{\frac{\pi k_m}{2}} \frac{\exp\left[ik_m \sqrt{c^2 t^2 - r^2} \operatorname{sign}(t) + \pi/4\right]}{(c^2 t^2 - r^2)^{3/4}}. \end{aligned}$$

b)  $s^2 > 0$ , intervalo pseudoespacial. O ponto de sela  $k^*$  está no eixo imaginário:  $k^* = ik_m r/|s|$ , e deve ser passado segundo a direcção  $\varphi = 0$ . O resultado para  $G(\mathbf{r}, t)$  coincide com o que se obteve da formula anterior para  $r^2 > c^2 t^2$ :



$$G(\mathbf{r}, t) \approx \frac{c}{4} \sqrt{\frac{\pi k_m}{2}} \frac{\exp\left[-k_m \sqrt{r^2 - c^2 t^2}\right]}{(r^2 - c^2 t^2)^{3/4}}.$$

## Funções de Green dentro de formalismo de 2ª quantificação.

Como tenhamos visto, 2ª quantificação (teoria dos campos quânticos) constitui a base para estudo de imensa área de física de matéria condensada, dos núcleos, das partículas elementares, etc. Portanto é uma questão de grande importância poder estender o método das f.G. para este formalismo.

No caso dos campos quantificados já não podemos aplicar o simples método de Fourier para equações diferenciais como em casos de física clássica ou mecânica quântica comum. Em diferença das funções numéricas  $u(\mathbf{r},t)$  ou  $\psi(\mathbf{r},t)$ , aqui os elementos básicos são operadores  $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$  e equação básica de Heisenberg

$$-i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\psi}] \quad (\text{M})$$

*não é do tipo Eq. (L).*

Mas a construção das f.G. em 2ª quantificação torna-se possível, baseada na analogia mais profunda com os casos clássicos.

Representamos a anterior f.G. para equação de Schroedinger temporal em forma mais geral:

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = i \sum_l \varphi_l(\mathbf{r}) \varphi_l^*(\mathbf{r}') e^{i\varepsilon_l(t-t')/\hbar}$$

onde  $\varphi_l(\mathbf{r})$  é a função de onda do estado estacionário  $|l\rangle$  com energia  $\varepsilon_l$ , assim que Eq. (S) torna-se o seu caso particular para estados livres:  $|l\rangle = |\mathbf{k}\rangle$ . Verificamos que o mesmo aspecto tem a grandeza:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = -i \langle T \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}', t') \rangle \quad (\text{T})$$

onde  $\psi(\mathbf{r}, t)$  é o operador de campo de tipo considerado em Cap. 1, mas definido em representação de Heisenberg para estatística quântica, com o Hamiltoniano  $\hat{H}$  em Eq. (M) substituído por  $\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}$  ( $\mu$  é o potencial químico).

O símbolo do produto cronológico significa:

$$T \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t') = \begin{cases} \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t'), & t > t', \\ \begin{matrix} \text{B} \\ \text{F} \end{matrix} \pm \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t') \hat{\psi}(\mathbf{r}, t), & t < t', \end{cases}$$

com os sinais em 2ª linha respectivos aos casos das partículas de Bose ou de Fermi. Por fim, o médio  $\langle \dots \rangle$  efectua-se sobre *estado de base* (para temperatura  $T = 0$ ) ou segundo *estatística de Gibbs* (para  $T \neq 0$ ). Assim se definem as chamadas f.G. temporais. Estas têm a conta das específicas de 2ª quantificação:

- O “Hamiltoniano” corresponde ao número variável das partículas.
- Estado de base, definido pelo autovalor mais baixo de  $\hat{H}'$ , não é necessariamente o vazio (para  $\mu \neq 0$ ).
- Estados excitados incluem tanto variação de energia (autovalor de  $\hat{H}$ ) para número de partículas  $N$  fixo como variação de  $N$ .
- As regras canónicas de comutação só aplicam-se aos operadores simultâneos ( $t = t'$ ), mas para  $t \neq t'$  devemos ter em conta explicitamente:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = e^{i\hat{H}t} \hat{\psi}(\mathbf{r}, 0) e^{-i\hat{H}t}$$



- Variáveis  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{r}'$  podem ser também acrescentadas por índices de spin, neste caso temos uma matriz das f.G.:

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = -i \langle T \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}', t') \rangle \quad (\text{TS})$$

mas para sistema *não ferromagnético* e em ausência de campo magnético externo esta matriz torna-se diagonal:  $G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = \delta_{\sigma\sigma'} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')$ .

## Relação entre funções de Green e características físicas de sistema.

As f. G., Eqs. (T, TS), estão relacionadas com a matriz de densidade:

$$\rho_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{N} \langle \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t) \rangle = -\frac{i}{N} G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t+0)$$

o que permite calcular valor médio de qualquer operador de 1 p., para um sistema uniforme com  $G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$ :

$$\hat{F}_{\sigma\sigma'}(t) = \int \hat{\psi}_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{f}_{\sigma'\sigma''} \hat{\psi}_{\sigma''}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r},$$

$$\langle \hat{F} \rangle = N \int [\hat{f}_{\sigma'\sigma''} \rho_{\sigma'\sigma''}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} d\mathbf{r} = -i \int [\hat{f}_{\sigma'\sigma''} G_{\sigma'\sigma''}(\mathbf{r}, t = -0)]_{\mathbf{r}=0} d\mathbf{r}.$$

indica ordem dos operadores

Os exemplos mais simples.

Densidade de partículas (neste caso  $\hat{f} = 1$ ):

limite termodinâmico

$$N/V = 2N\rho(0) = -2iG(\mathbf{r} = 0, t = -0).$$

Distribuição das partículas segundo impulsos:

$$N(\mathbf{p}) = -i \int G(\mathbf{r}, t = -0) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} d\mathbf{r}.$$

Para analisar em mais detalhe estrutura das f.G. temporais (limitando-se a temperatura  $T = 0$ ), calculamos explicitamente os elementos de matriz dos operadores de campo:

$$\langle n | \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) | m \rangle = e^{i\omega_{nm}t} \langle n | \hat{\psi}(\mathbf{r}, 0) | m \rangle,$$

onde

$$\omega_{nm} = \frac{1}{\hbar} [E_n - E_m - \mu(N_n - N_m)].$$

variação de energia      variação de número,  
aqui só  $\pm 1$

Logo, para sistema uniforme, a translação de operador de campo está gerada por operador do impulso total  $\hat{\mathbf{P}}$ , portanto temos:

$$\langle n | \hat{\psi}(\mathbf{r}, 0) | m \rangle = e^{i\mathbf{k}_{nm}\cdot\mathbf{r}} \langle n | \hat{\psi}(0, 0) | m \rangle,$$

onde

$$\mathbf{k}_{nm} = \frac{\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m}{\hbar}.$$

impulso total de  $N_n$   
partículas

Usando estes resultados, chegamos a representação para f.G.:

$$G(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int \tilde{G}(\mathbf{p}, \omega) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} / \hbar - \omega t)} d\mathbf{p} d\omega,$$

onde  $\tilde{G}(\mathbf{p}, \omega)$  é a transformada de Fourier de  $G(\mathbf{r}, t)$  ou:

$$\tilde{G}(\mathbf{p}, \omega) = \frac{(2\pi)^3}{2} \sum_m \left\{ \frac{A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\hbar\omega + \mu + E_0(N) - E_m(N+1) + i0} + \frac{B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)}{\hbar\omega + \mu + E_m(N-1) - E_0(N) - i0} \right\},$$

a chamada representação de Källén-Lehmann (1954) com:

$$A_m = \left| \langle 0 | \hat{\psi}(0,0) | m \rangle \right|^2,$$

$$B_m = \left| \langle m | \hat{\psi}(0,0) | 0 \rangle \right|^2.$$

As formulas acima definem o espectro das excitações a partir dos polos de  $\tilde{G}(\mathbf{p}, \omega)$ .

Para o exemplo de gas ideal de Fermi temos:

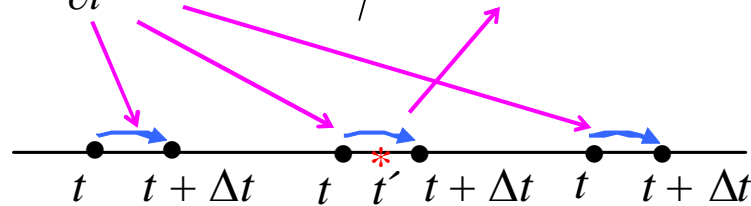
$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p \exp\{i[\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - (p^2 / 2m - \mu)t] / \hbar\} \hat{u}_\sigma a_{p, \sigma}$$

assim que

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t) + \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t) = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

A derivada temporal da f.G.:

$$\frac{\partial}{\partial t} G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \left\langle T \frac{\partial \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t') \right\rangle - i \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$$



produz

$$\hat{\psi} \hat{\psi}^\dagger + \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}$$

Daqui obtemos:

$$\tilde{G}(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \underbrace{p^2/2m + \mu}_{\approx v_F(p - p_F)} + i0 \cdot \text{sign}(p - p_F)}$$

$\omega \rightarrow \omega + i0 \cdot \text{sign}\omega$

e logo

$$N(\mathbf{p}) = -\frac{i}{2\pi} \int \frac{d\omega}{\hbar\omega - p^2/2m + \mu + i0 \cdot \text{sign}(p - p_F)} = \begin{cases} 1, & p < p_F, \\ 0, & p > p_F, \end{cases}$$

o que é exactamente a distribuição de Fermi.

## Representação de interação para funções de Green

Em analogia com RI introduzida antes para teoria de perturbações dependentes de tempo (Cap. 4), podemos dividir o Hamiltoniano em duas partes:

$$\hat{H}' = \hat{H}'^{(0)} + \hat{V} = \hat{H}^{(0)} - \mu\hat{N} + \hat{V}$$

produzindo operadores em RI:

$$\hat{\psi}_0(\mathbf{r}, t) = e^{i\hat{H}'^{(0)}t} \hat{\psi}(\mathbf{r}, 0) e^{-i\hat{H}'^{(0)}t}$$

e obtendo variação temporal dos estados em RI:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n\rangle = \hat{V}_0(t) |n\rangle, \quad (\text{I})$$

$$\hat{V}_0(t) = e^{i\hat{H}'^{(0)}t} \hat{V} e^{-i\hat{H}'^{(0)}t}.$$

operador de interação em RI

A solução formal de Eq. (I) é:

$$|n(t)\rangle = \hat{S}(t,0)|n(0)\rangle,$$

$$\hat{S}(t,0) = \text{Texp}\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{V}_0(t') dt'\right\}.$$

Assim obtemos f.G. em RI:

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \langle \hat{S}^{-1} \text{T}[\hat{\psi}_{0,\sigma}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_{0,\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t') \hat{S}] \rangle,$$

$$\hat{S} \equiv \hat{S}(\infty, -\infty) = \text{Texp}\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{V}_0(t') dt'\right\}$$

interacção ligada adiabaticamente

Ligação adiabática de  $V_0(t)$  não pode mudar o estado de base porque o último não é degenerado, portanto acção de operador sobre este estado só o multiplica por um factor de fase:  $\hat{S}|0\rangle = \langle \hat{S} | 0 \rangle$ , e nos chegamos a:

$$iG_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{\langle \hat{S} \rangle} \langle \text{T}[\hat{\psi}_{0,\sigma}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_{0,\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t') \hat{S}] \rangle \quad (\text{E})$$



Logo os médios dos produtos dos operadores em Eq. (E) estão calculados com uso de teorema de Wick, segundo qual o tal médio apresenta a soma das todas divisões possíveis do produto dado em médios dos pares:  $\langle \hat{\psi} \hat{\psi}^\dagger \rangle$ . Isso dá origem à técnica de diagramas para cálculo das f.G. em sistemas com interacção.