

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FISICA

34

N.T. 243

SBI-IFUSP



305M810T0243

APROXIMAÇÕES CONSERVATIVAS AUTO-CONSISTENTES PARA SISTEMAS DE MUITOS FERMIONS

por

JOAQUIM LOPES NETO

TESE DE MESTRADO, 1974

ORIENTADOR: PROF. A. F. R. de TOLEDO PIZA



SÃO PAULO

AGRADECIMENTOS

Queremos, aqui, agradecer ao Prof. Piza por sua orientação singular, incentivando e orientando o bolsista não só no aspecto profissional, mas em muitas outras situações que, normalmente, estariam fora de suas atribuições como orientador. Em particular, por seu interesse e leitura deste trabalho.

Tambem somos gratos ao Sr. Perclides, operador da xerox, ao Ednardo por ter-nos cedido sua 'lettera 36' e a J. por seu paciente trabalho datilográfico. Aos colegas Diogenes, Celso e Mauro com os quais discutimos algumas partes do que é apresentado.

Finalmente, agradecemos á FAPESP pelo apoio financeiro.



ABSTRACT

We present a review discussion of self-consistent approximations for many-body problems, in terms of Green's functions, based on papers by Baym and Kadanoff. Physically correct self-consistent approximations are constructed by requiring them to be derived from a 'closed' functional, $\bar{\Phi}$, of G , the dressed one-particle Green's function, and V , the two-particle interaction ($\bar{\Phi}$ -criterion). The self-energy is given by a functional derivative of $\bar{\Phi}$ with respect to G . The resulting approximations are called conserving approximations, since they include the conservation laws in their structure. As an example, we work out the Hartree-Fock approximation, which is the lowest order conserving approximation, and use the $\bar{\Phi}$ -criterion to derive it for density dependent effective interactions. A technique is presented for deriving approximations for the Green's functions. We also study the linear response function within the conserving approximations.

RESUMO

Apresentamos uma discussão geral de aproximações auto-consistentes para sistemas de muitos fermions, baseada em trabalhos de Baym e Kadanoff. Aproximações fisicamente corretas, são construídas exigindo-se que elas sejam deriváveis de um funcional 'fechado', $\bar{\Phi}$, de G , o propagador vestido, e V , a interação de duas-partículas, e do qual a auto-energia própria é dada por uma derivação funcional em relação a G . (critério- $\bar{\Phi}$). Estas aproximações são chamadas conservativas porque elas incluem em sua estrutura as leis de conservação. Também estudamos a resposta linear construída para essas aproximações. Como exemplo, analisamos a aproximação de Hartree-Fock, que é a aproximação conservativa de ordem mais baixa, e usamos o critério- $\bar{\Phi}$ para derivá-la quando interações dependentes da densidade são consideradas. Uma técnica para construção de aproximações de funções de Green é apresentada.

INTRODUÇÃO.

As funções de Green reduzidas que descrevem sistemas de muitos corpos, obedecem a uma hierarquia infinita de equações de movimento, nas quais a função de Green de n -partículas é acoplada às funções de Green de $n \pm 1$ e $n - 1$ -partículas. Um procedimento usual consiste em desacoplar estas equações aproximando a função de Green de n -partículas em termos das funções de Green de ordem mais baixa em n . As aproximações resultantes são auto-consistentes no sentido de que as funções de Green com as quais aproximamos o propagador, são também por ele determinadas.

Aqui estaremos interessados nas aproximações auto-consistentes para a função de Green de uma partícula, G . Uma técnica para derivar tais aproximações é apresentada na parte I. Formalmente, generalizamos as funções de Green, escrevendo-as como funcionais de uma função auxiliar U . Introduzindo derivadas funcionais⁹⁾, a equação do movimento é escrita como uma equação diferencial funcional que determina $G(U)$ completamente. Usamos esta equação para escrever uma equação integral para a auto-energia própria, $\Sigma(U)$. As aproximações auto-consistentes são obtidas tomando-se subconjuntos de termos da expansão completa de $\Sigma(U)$ em $G(U)$ e V . Dentro da mesma técnica, estudamos as aproximações no propagador de duas partículas, $G_2(U)$, que levam a aproximações auto-consistentes para $G(U)$. Desse modo, a aproximação da matriz- T é mais facilmente construída e também podemos perceber melhor o significado das restrições na descrição de um sistema nas aproximações consideradas. Como tópico final da parte I, definimos a função de resposta linear, L , e escrevemos uma equação integral para L , quando as aproximações são auto-consistentes. As aproximações para $G(U)$ se reduzem às aproximações para a função de Green comum quando fazemos $U = 0$.

A parte II trata das aproximações conservativas. Estas são aproximações

construídas de modo a incluir em sua estrutura as leis de conservação. Em 1961, Baym e Kadanoff¹⁾ estabeleceram condições para que uma aproximação auto-consistente fosse conservativa. Eles estavam interessados em descrições de fenômenos de transporte onde as leis de conservação são essenciais. As condições foram obtidas exigindo-se que os valores esperados das densidades dos operadores conservados, na presença de uma perturbação externa, obedecessem às leis de Newton. Assim a lei de conservação do momentum é a condição de que a derivada temporal do valor esperado da densidade de momentum total deve ser igual à força total aplicada pela perturbação externa. Em um trabalho posterior, Baym³⁾ mostrou que as tres condições assim obtidas poderiam ser condensadas num único critério: que a aproximação fosse derivável de um funcional fechado, Φ , em V e G , definidos na presença de um campo externo, e do qual a auto-energia seria obtida por uma derivação funcional em relação a G . Na mesma época, alguns autores fizeram uso da existência de Φ na teoria exata (Martin e Schwinger⁴⁾, Luttinger e Ward⁵⁾, Klein⁶⁾). Mostramos em A. II., como construí-lo. Com as tres condições de Baym e Kadanoff (ver parte II.), as aproximações de HF e da matriz-T são conservativas.

Neste trabalho seguimos o caminho inverso de Baym e Kadanoff: estabelecemos como condição para a aproximação que ela seja derivável de Φ . Uma justificativa a priori seria que Φ é um invariante da teoria em relação às simetrias da Hamiltoniana, (II). A posteriori, as aproximações deriváveis de Φ apresentam propriedades muito interessantes, que são manifestações de alta consistência interna:

a) As aproximações são conservativas. Além disso, as leis de conservação macroscópicas (das densidades totais) estão diretamente relacionadas com as leis de conservação nos vértices (microscópicas).

b) Uma melhor descrição da resposta linear está associada, ao mesmo tempo, com uma melhor aproximação para a função de Green não-perturbada e interação efetiva.

c) Existe um princípio variacional para a energia do estado fundamental. A minimização da energia do estado fundamental está relacionada com o inverso da resposta linear; em outras palavras, existe uma relação entre o comportamento coletivo descrito por L e as propriedades de extremo da energia do estado fundamental.

d) Como consequência do tratamento correto das leis de conservação, os estados espúrios, resultantes das quebras de simetrias da Hamiltoniana do sistema quando são feitas aproximações, não se acham misturados aos estados excitados do sistema, e ocorrem com energia zero em relação à energia do estado fundamental.

e) Muitos teoremas exatos, provados por teoria de perturbação, permanecem válidos ³⁾.

Estas propriedades são estudadas na parte II. Na parte III, nos analisamos a aproximação de HF, que é a aproximação derivável de Φ de ordem mais baixa, e mostramos a utilidade do critério- Φ para a construção de novas aproximações. Em particular, estudamos a aproximação de HF para interações dependentes da densidade.

Finalmente, queremos observar que este critério para a construção de aproximações auto-consistentes conservativas, é aplicável sempre que possamos generalizar as funções de Green, de modo que elas comportem uma formulação diagramática semelhante á do tratamento perturbativo de um sistema de fermions a temperatura zero. Este é o caso de funções de Green de temperatura para bosons ou fermions, para as quais a teoria foi originalmente formulada. Também para sistemas de fermions que apresentam correlações de emparelhamento; os procedimentos de Nambu ¹⁰⁾, ou de Valatin ¹¹⁾, podem ser usados para construir as funções de Gorkov.

I. APROXIMAÇÕES PARA AS FUNÇÕES DE GREEN

Desenvolvemos técnicas de construção de aproximações para funções de Green. O método, formal, é baseado no conceito de derivada funcional, ou derivada variacional ⁹⁾, que será usado ao longo deste trabalho. Estas técnicas condensam muitos esquemas de aproximação que são usualmente apresentados na formulação diagramática da teoria. Embora nesta última a visualização dos processos físicos a serem incluídos seja mais clara, aqui parece mais justificada a ideia de uma aproximação auto-consistente. Na primeira parte, derivamos aproximações para o propagador de uma-partícula, $G(U)$, escrito como um funcional de uma função escalar U . Mostramos como construir tres tipos de aproximações: teoria de perturbação comum, expansões da auto-energia em V e G_0 e as expansões da auto-energia em V e G , ou, aproximações auto-consistentes. Na segunda parte, usamos técnicas semelhantes para derivar aproximações para a função de Green de duas partículas, $G_2(U)$, mas não somos tão explícitos como na primeira parte, desde que estamos interessados especificamente na "ladder approximation" para a equação de Bethe-Salpeter. Como parte final, definimos a função resposta linear, L , e escrevemos uma equação integral para L quando esta função é calculada numa aproximação auto-consistente. A equação integral para L , na aproximação da matriz- T , é discutida. A notação usada é a mesma da ref. (1), onde $l \equiv x_1 t_1$, e uma barra sobre a variável, indica a variável de integração.

I.A. Introduzimos, formalmente, o funcional

$$(I.1) \quad G(l, l'; U) = \frac{1}{i} \frac{\langle T\{\psi(l)\psi^+(l')S\} \rangle}{\langle S \rangle}$$

com

$$S = T\{\exp i \int d2 d2' U(2, 2') \psi^+(2) \psi(2')\}$$

Consideramos um sistema de muitas partículas, governado pela Hamiltoniana

$$(I.2) \quad H(t_1) = (1/2m) \int dr_1 \nabla \Psi^+(1) \cdot \nabla \Psi(1) \\ + (1/2) \int dr_1 dr_2 dt_2 \Psi^+(1) \Psi^+(2) V(1-2) \Psi(2) \Psi(1),$$

onde $V(1-2) = v(r_1 - r_2) \delta(t_1 - t_2)$. Com esta Hamiltoniana, $G(U)$ obedece a equação do movimento

$$(I.3) \quad \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} \right) G(1, 1'; U) = \delta(1-1') + \int U(1, \bar{1}) G(\bar{1}, 1'; U) \\ - i \int V(1-\bar{2}) G_2(1\bar{2}, 1'\bar{2}; U)$$

e à equação adjunta

$$(I.3') \quad \left(i^* \frac{\partial}{\partial t_{1'}} + \frac{\nabla_{1'}^2}{2m} \right) G(1, 1'; U) = \delta(1-1') + \int G(1, \bar{1}; U) U(\bar{1}, 1') \\ - i \int G_2(1\bar{2}, 1'\bar{2}; U) V(\bar{2}-1')$$

A forma funcional $G(U)$ é então, equivalente à função de Green de uma partícula, escrita numa representação de interação, para o sistema na presença do potencial escalar U . Nesta representação, toda a dependência em U , está explícita no fator S , e os operadores de campo são os mesmos que na ausência do potencial. A função de Green de duas partículas é definida do mesmo modo que a (1):

$$(I.4) \quad G_2(12, 1'2'; U) = \left(\frac{1}{i} \right)^2 \frac{\langle T \{ \Psi(1) \Psi(2) \Psi^+(2') \Psi^+(1') S \} \rangle}{\langle S \rangle}$$

Consideramos, agora, a variação em $G(U)$ resultante de uma variação infinitesimal em U , $U(2, 2') \rightarrow U(2, 2') + \delta U(2, 2')$. Desde que $G(U)$ depende de U através de S , temos

$$(I.5) \quad \delta G(1, 1'; U) = \delta \left\{ \frac{1}{i} \frac{\langle T \{ \Psi(1) \Psi^+(1') S \} \rangle}{S} \right\} \\ = \frac{1}{i} \left[\frac{\langle T \{ \Psi(1) \Psi^+(1') \delta S \} \rangle}{\langle S \rangle} - \frac{\langle T \{ \Psi(1) \Psi^+(1') S \} \rangle}{\langle S \rangle} \delta \ln \langle S \rangle \right]$$

Agora,

$$(I.6) \quad \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta U(2,2')} = \frac{1}{i} \frac{\langle T \{ \Psi(2) \Psi^\dagger(2') S \} \rangle}{\langle S \rangle}$$

e podemos fazer o mesmo para o δS dentro do produto temporal ordenado, de modo que obtemos

$$\delta G(1,1';U) = \left[\left(\frac{1}{i} \right)^2 \frac{\langle T \{ \Psi(1) \Psi(2) \Psi^\dagger(2') \Psi^\dagger(1') S \} \rangle}{\langle S \rangle} - \frac{1}{i} \frac{\langle T \{ \Psi(1) \Psi^\dagger(1') S \} \rangle}{\langle S \rangle} \frac{\langle T \{ \Psi(2) \Psi^\dagger(2') S \} \rangle}{i \langle S \rangle} \right] \delta U(2;2)$$

Assim, a derivada funcional, ou derivada variacional de $G(U)$ em relação a U , dá

$$(I.7) \quad \frac{\delta G(1,1';U)}{\delta U(2,2')} = -[G_2(12,1'2';U) - G(1,1';U)G(2,2';U)]$$

Note a necessidade de um U não local para gerar a função de Green de duas-partículas completa. Para U local, $U(2,2') = U(2)\delta(2-2')$, teríamos obtido

$$(I.8) \quad \frac{\delta G(1,1';U)}{\delta U(2)} = -[G_2(12,1'2 ;U) - G(1,1';U)G(2,2 ;U)]$$

A função de Green G_2 , que aparece nesta equação, é a mesma da eq. (3) e portanto podemos escrever a seguinte equação diferencial para $G(U)$

$$(I.9) \quad \left\{ i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} - U(1) + i \int v(1-\bar{2}) \left[G(\bar{2},\bar{2} ;U) + \frac{\delta}{\delta U(\bar{2})} \right] \right\} G(1,1';U) = \delta(1-1')$$

Esta equação pode ser convertida, de imediato, numa 'equação integral'. A função de Green $G(U)$, na ausência de interação entre as partículas, é determinada pela equação

$$(I.10) \quad \left\{ i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} - U(1) \right\} G_0(1,1';U) = \delta(1-1')$$

mais condições de contorno. A matriz inversa $G_0^{-1}(U)$, é dada por (ver eq.(I.14))

$$(I.11) \quad G_0^{-1} = \left\{ i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} - U(1) \right\} \delta(1-1')$$

Com a definição de $G_0^{-1}(U)$, escrevemos

$$(I.12) \quad G(1,1';U) = G_0(1,1';U) - i \int G_0(1,\bar{1};U) v(\bar{1} - \bar{2}) \cdot \left[G(\bar{2},\bar{2};U) + \frac{\delta}{\delta U(\bar{2})} \right] G(\bar{1},1';U)$$

Agora, introduzimos a função de auto-energia própria, ou operador de massa, definido por

$$(I.13) \quad \Sigma(1,1';U) = i \int v(1 - \bar{3}) G_2(1\bar{3}, \bar{2}\bar{3};U) G^{-1}(\bar{2},1';U)$$

onde $G^{-1}(U)$ é a matriz inversa de $G(U)$.

$$(I.14) \quad \int G^{-1}(1,\bar{1};U) G(\bar{1},1';U) = \int G(1,\bar{1};U) G^{-1}(\bar{1},1';U) = \delta(1 - 1')$$

Reescrevendo a eq.(3) para U local, multiplicando-a por G^{-1} e usando a definição de Σ mais a eq.(11), encontramos

$$(I.15) \quad G^{-1}(1,1';U) = G_0^{-1}(1,1';U) - \Sigma(1,1';U)$$

Multiplicando esta equação à direita por G_0 e à esquerda por G , obtemos a equação integral

$$(I.16) \quad G(1,1';U) = G_0(1,1';U) + \int G_0(1,\bar{1};U) \Sigma(\bar{1},\bar{2};U) G(\bar{2},1';U)$$

que é a equação de Dyson para $G(U)$. Esta equação nos permite desenvolver uma formulação diagramática para $G(U)$ idêntica à da função de Green não perturbada $G(U=0)$, que satisfaz a eq. (3) com $U=0$.

A fim de obter uma equação integral para Σ , escrevemos a eq. (9)

na forma da (15)

$$(I.17) \quad G^{-1}(1,1';U) = G_0^{-1}(1,1';U) + i \int v(1 - \bar{2}) G(\bar{2},\bar{2};U) \delta(1 - 1') - i \int v(1 - \bar{2}) \frac{\delta G(1,\bar{1};U)}{\delta U(\bar{2})} G^{-1}(\bar{1},1';U)$$

de modo que, comparando-se as eqs. (17) e (15)

$$(I.18) \quad \Sigma(1,1';U) = -i \int V(1-\bar{2}) G(\bar{2},\bar{2};U) \delta(1-1') \\ + i \int V(1-\bar{2}) \frac{\delta G(1,\bar{1};U)}{\delta U(\bar{2})} G^{-1}(\bar{1},1';U)$$

Da relação $GG^{-1} = 1$, mais a eq. (15),

$$(I.19) \quad \int \frac{\delta G(1,\bar{1};U)}{\delta U(\bar{2})} G^{-1}(\bar{1},1';U) = - \int G(1,\bar{1};U) \frac{\delta G^{-1}(\bar{1},1';U)}{\delta U(\bar{2})} \\ = - \int G(1,\bar{1};U) \frac{\delta}{\delta U(\bar{2})} [G_0^{-1}(\bar{1},1';U) - \Sigma(\bar{1},1';U)] \\ = G(1,1';U) \delta(2-1') + \int G(1,\bar{1};U) \frac{\delta \Sigma(\bar{1},1';U)}{\delta U(\bar{2})}$$

Substituindo a (19) na (18), finalmente encontramos

$$(I.20) \quad \Sigma(1,1';U) = -i \int V(1-\bar{2}) G(\bar{2},\bar{2};U) \delta(1-1') \\ + iV(1-1')G(1,1';U) + i \int V(1-\bar{2}) G(1,\bar{1};U) \frac{\delta \Sigma(\bar{1},1';U)}{\delta U(\bar{2})}$$

Vejamos agora algumas aproximações que podem ser geradas usando-se as equações derivadas até aqui. Formalmente, elas são idênticas às obtidas para a função de Green não perturbada, $G(1-1') = \lim_{U \rightarrow 0} G(1,1';U)$, e se reduzem a elas neste limite. Na teoria de perturbação comum, expandimos $G(U)$ numa série de potências em V . Para isso precisamos apenas iterar sucessivamente a eq.(12). Os termos de primeira e segunda ordem são facilmente obtidos; apresentamos na Fig. (1) os correspondentes diagramas¹²⁾. Em geral este tipo de expansão converge muito lentamente. Dependendo do sistema físico que se quer tratar, esse problema pode ser evitado somando-se classes infinitas de termos na expansão, ou, o que é equivalente, expandindo-se a auto-energia, Σ , em V . Expandimos Σ em V e G , gerando deste modo sucessivas aproximações auto-consistentes.

A primeira aproximação é derivada desprezando $\delta\Sigma/\delta U$ na eq. (20) e é equivalente à aproximação de HF para $G(1, 1')$:

$$(I.21) \quad \Sigma^{HF}(1, 1'; U) = -i \int v(1, \bar{2}) G(\bar{2}, \bar{2}; U) \delta(1, 1') + i v(1, 1') G(1, 1'; U)$$

Os diagramas correspondentes são vistos na Fig. (2). O próximo termo na expansão, vem da substituição de $\delta\Sigma/\delta U$ por $\delta\Sigma^{HF}/\delta U$ na eq. (20). Então,

$$(I.22) \quad \Sigma(1, 1'; U) = \Sigma^{HF}(1, 1'; U) - i^2 \int v(1, \bar{2}) G(1, \bar{1}; U) \frac{\delta}{\delta U(2)} \left[\int v(\bar{1}, \bar{3}) G(\bar{3}, \bar{3}; U) \delta(\bar{1}, 1') - v(\bar{1}, 1') G(\bar{1}, 1'; U) \right]$$

e, desde que, em ordem mais baixa

$$\frac{\delta G(1, 1'; U)}{\delta U(2)} = G(1, 2; U) G(2, 1'; U)$$

achamos em segunda ordem em V

$$(I.23) \quad \Sigma_G(1, 1'; U) - \Sigma^{HF}(1, 1'; U) = -i^2 \int v(1, \bar{2}) v(\bar{3}, 1') \left[G(1, 1'; U) G(\bar{3}, \bar{2}; U) G(\bar{2}, \bar{3}; U) - G(1, \bar{3}; U) G(\bar{3}, 2; U) G(\bar{2}, 1'; U) \right]$$

Na aproximação de HF, as partículas movem-se independentemente no potencial auto-consistente $\Sigma(G(U))$. A mesma aproximação é obtida quando o propagador de duas partículas $G_2(U)$, é expresso como um produto anti-simetrizado de dois propagadores de uma partícula. Trataremos as aproximações da função de Green de duas partículas na próxima seção. Veremos que a (23) corresponde a aproximar G_2 como na Fig. (3), onde as linhas representam $G(U)$. Os termos de segunda ordem descrevem duas partículas, adicionadas ao sistema, espalhando-se através de uma única interação. Devido à semelhança entre esta descrição e

e a descrição do espalhamento convencional na primeira aproximação de Born, a (23) é conhecida como aproximação da colisão de Born. Do mesmo modo que na aproximação de Born, a expansão (23) não dá bons resultados para um potencial forte, mesmo diverge para um potencial de 'caroço duro'.

I.B. A função de Green de duas partículas, $G_2(U)$, obedece à seguinte equação do movimento:

$$(I.24) \quad \left\{ i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} - U(1) \right\} G_2(12, 1'2') - i \int V(1-\bar{3}) G_3(12\bar{3}, 1'2'\bar{3}) \\ = \delta(1-1') G(2, 2') - \delta(1-2') G(2, 1')$$

onde G_3 é a função de Green de três partículas. Esta equação também pode ser escrita numa forma fechada em termos da derivada funcional de G_2

$$\frac{\delta}{\delta U(\bar{3}, \bar{3}')} G_2(12, 1'2') = - [G_3(12\bar{3}, 1'2'\bar{3}') - G_2(12, 1'2') G(\bar{3}, \bar{3}')]]$$

que, substituída na (24), dá

$$(I.25) \quad \int G_0^{-1}(1, \bar{1}) G_2(\bar{1}2, 1'2') + i \int V(1-\bar{3}) [G(\bar{3}, \bar{3}) + \frac{\delta}{\delta U(\bar{3})}] G_2(12, 1'2') \\ = \delta(1-1') G(2, 2') - \delta(1-2') G(2, 1')$$

onde usamos a (11) para reescrever o primeiro termo. Multiplicando a (25) por G^{-1} e usando a (15) para G_0^{-1} ,

$$(I.26) \quad \int G^{-1}(1, \bar{1}) G^{-1}(2, \bar{2}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2') + \int G^{-1}(2, \bar{2}) \Sigma(1, \bar{1}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2') \\ + i \int G^{-1}(2, \bar{2}) V(1-\bar{3}) G(\bar{3}, \bar{3}) G_2(1\bar{2}, 1'2') \\ + i \int G^{-1}(2, \bar{2}) V(1-\bar{3}) \frac{\delta}{\delta U(\bar{3})} G_2(1\bar{2}, 1'2') \\ = \delta(1-1') \delta(2-2') - \delta(1-2) \delta(2-1') \\ \equiv \delta(12, 1'2')$$

Esta equação não está escrita de uma forma conveniente. Note que o terceiro termo cancela uma contribuição do segundo termo, (da eq.(20))

$$(I.27) \quad \int G^{-1}(2, \bar{2}) \Sigma(1, \bar{1}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2') = -i \int G^{-1}(2, \bar{2}) V(1-\bar{3}) G(\bar{3}, \bar{3}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2') \\ + i \int G^{-1}(2, \bar{2}) V(1-\bar{1}) G(1, \bar{1}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2') \\ + i \int G^{-1}(2, \bar{2}) V(1-\bar{3}) G(1, \bar{4}) \frac{\delta \Sigma(\bar{4}, \bar{1})}{\delta U(\bar{3})} G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2')$$

Antes de prosseguir, escrevemos a seguinte equação que define a interação efetiva de duas partículas, Γ ,

$$(I.28) \quad \int G^{-1}(1, \bar{1}) G^{-1}(2, \bar{2}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2') - \int \Gamma(12, \bar{1}\bar{2}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2') = \delta(12, 1'2')$$

Se desprezamos Γ na (28),

$$(I.29) \quad G_2^0(12, 1'2') = G(1, 1') G(2, 2') - G(1, 2') G(2, 1')$$

Esta aproximação de partícula independente para G_2 quando substituída na (3) dá o HF.

A partir da eq. (28), vamos procurar uma equação semelhante à (20) para ΓG_2 . A derivada no quarto termo da eq.(26) pode ser escrita em termos da derivada variacional de ΓG_2 . Para isso, usamos uma notação matricial em que as variáveis nos parêntesis indicam variáveis não integradas. Assim, a (28) fica

$$(I.30) \quad G^{-1}(1) G^{-1}(2) G_2(1'2') - \Gamma(12) G_2(1'2') = \delta(12, 1'2')$$

Temos então

$$G^{-1}(2) \frac{\delta}{\delta U} G_2(11'2') = \frac{\delta}{\delta U} [G^{-1}(2) G_2(11'2')] - \frac{\delta G^{-1}(2)}{\delta U} G_2(11'2')$$

Agora, da eq. (30)

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta U} [G^{-1}(1)G^{-1}(2)G_2(1'2')] &= \frac{\delta G^{-1}(1)}{\delta U} G^{-1}(2)G_2(1'2') \\ &+ G^{-1}(1) \frac{\delta}{\delta U} [G^{-1}(2)G_2(1'2')] \\ &= \frac{\delta}{\delta U} [\Gamma(12)G_2(1'2')] \end{aligned}$$

e assim,

$$\begin{aligned} \text{(I.31)} \quad G^{-1}(2) \frac{\delta}{\delta U} G_2(11'2') &= G(1) \frac{\delta}{\delta U} [\Gamma(2)G_2(1'2')] - G(1) \frac{\delta G^{-1}(2)}{\delta U} G_2(1'2') \\ &\quad - \frac{\delta G^{-1}(2)}{\delta U} G_2(11'2') \end{aligned}$$

Das eqs. (11) e (15),

$$\text{(I.32)} \quad \frac{\delta G^{-1}(2,2')}{\delta U(3)} = -\delta(2-3)\delta(2-2') - \frac{\delta \Sigma(2,2')}{\delta U(3)}$$

Substituindo a (32) na (31) e esta na (27), obtemos,

$$\begin{aligned} \text{(I.33)} \quad i \int G^{-1}(2, \bar{2}) v(1-\bar{3}) \frac{\delta}{\delta U(\bar{3})} G_2(1\bar{2}, 1'2') \\ = i \int v(1-\bar{3}) G(1, \bar{4}) \frac{\delta}{\delta U(\bar{3})} [\Gamma(\bar{4}2, \bar{1}\bar{2}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2')] \\ + i \int v(1-\bar{1}) G(1, \bar{1}) G^{-1}(2, \bar{2}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2') \\ + i \int v(1-\bar{3}) G(1, \bar{4}) \frac{\delta \Sigma(\bar{4}, \bar{1})}{\delta U(\bar{3})} G^{-1}(2, \bar{2}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2') \\ + i \int v(1-\bar{3}) \frac{\delta \Sigma(2, \bar{2})}{\delta U(\bar{3})} G_2(1\bar{2}, 1'2') \\ + i v(1-2) G_2(12, 1'2') \end{aligned}$$

Finalmente, o segundo e o terceiro termo da eq. (33) mais o terceiro da eq. (26), cancelam a contribuição explícita de Σ , e ficamos com a seguinte equação para ΓG_2 (compare eq. (28))

$$(I.34) \quad \int \Gamma(12, \bar{1}\bar{2}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2') = -iV(1-2)G_2(12, 1'2')$$

$$-i \int V(1-3) \frac{\delta \Sigma(2, \bar{2})}{\delta U(3)} G_2(1\bar{2}, 1'2')$$

$$-i \int V(1-3) G(1, \bar{4}) \frac{\delta}{\delta U(3)} [\Gamma(\bar{4}2, \bar{1}\bar{2}) G_2(\bar{1}\bar{2}, 1'2')]]$$

Na primeira aproximação para ΓG_2 , tomamos apenas o primeiro termo na eq. (34). Substituindo esta aproximação na eq. (28), obtemos a equação integral para G_2

$$(I.35) \quad G_2(12, 1'2') = G(1, 1')G(2, 2') - G(1, 2')G(2, 1')$$

$$-i \int G(1, \bar{1})G(2, \bar{2})V(\bar{1}\bar{2})G_2(12, 1'2')$$

Os diagramas correspondentes estão dispostos na Fig. (4). Esta é a 'ladder approximation' ou aproximação da matriz-T, sendo a matriz-T definida por meio da equação

$$(I.36) \quad V(1-2)G_2(12, 1'2') = \int \langle 12 | T | \bar{1}\bar{2} \rangle [G(\bar{1}, 1')G(\bar{2}, 2') - G(\bar{1}, 2')G(\bar{2}, 1')] \dots$$

É fácil de ver da (35) que ela satisfaz à equação integral

$$(I.37) \quad \langle 12 | T | 1'2' \rangle = V(1-2)\delta(1-1')\delta(2-2')$$

$$- i \int \langle 12 | T | \bar{1}\bar{2} \rangle G(\bar{1}, 1')G(\bar{2}, 2')V(1'-2')$$

Esta equação é conhecida como a equação de Bethe-Salpeter para a interação efetiva na aproximação de 'escada'. A matriz-T da eq. (37), representada nos diagramas da Fig. (4), é equivalente à matriz-T do espalhamento convencional, incluindo a mais os efeitos da restrição do espaço de fase para os possíveis estados finais numa colisão impostas pelo princípio de Pauli num sistema de muitos férmions, e uma dependencia explícita no momentum do centro de massa das partículas em colisão. Como no espalhamento convencional a matriz-T

é finita, mesmo que o potencial contenha um 'caroço duro'. Quando o potencial é forte, devemos considerar que as partículas sentem o efeito do potencial muitas e muitas vezes à proporção que elas se aproximam uma da outra. Este efeito é claramente levado em conta no tipo de expansão da Fig. (4). Do ponto de vista da eq.(34),

A auto-energia própria pode ser imediatamente expressa em termos da matriz-T. Usando-se as definições de T, eq. (36), e Σ , eq. (13), achamos

$$(I.38) \quad \Sigma(1,1') = -i \int [\langle 1\bar{3}|T|1'\bar{2} \rangle - \langle 1\bar{3}|T|\bar{2}1' \rangle] G(\bar{2},\bar{3})$$

Note que se substituimos apenas o primeiro termo de T, eq.(37), na eq. (36) e o resultado na (35) obtemos

$$(I.39) \quad G_2(12,1'2') = G(1,1')G(2,2') - G(1,2')G(2,1') \\ -i \int v(\bar{1}-\bar{2}) [G(1,\bar{1})G(\bar{1},1')G(2,\bar{2})G(\bar{2},2') \\ - G(1,\bar{1})G(\bar{1},2')G(2,\bar{2})G(\bar{2},1')]]$$

que é a G_2 que da a aproximação da colisão de Born (Fig. (3)).

I.C. Resposta Linear.

Consideremos um sistema na presença de um campo externo fraco, U , que tomamos numa forma geral, como não local no espaço e tempo. Em primeira ordem em U , temos

$$(I.40) \quad G(1,1';U) = G(1-1')_{U=0} + \int d2d2' \frac{\delta G(1,1';U)}{\delta U(2',2)} \Big|_{U=0} U(2,2')$$

A resposta linear é definida ⁴⁾ como o coeficiente da variação linear de G com U , e portanto,

$$(I.41) \quad L(12,1'2') = \frac{\delta G(1,1';U)}{\delta U(2',2)} \Big|_{U=0}$$

ou, da eq. (7),

$$(I.42) \quad L(12,1'2') = [G_2(12,1'2') - G(1-1')G(2-2')]_{U=0}$$

onde $G(1-1')$ é a função de Green não perturbada.

É fácil escrever uma equação integral para L quando a auto-energia Σ , é expressa como um funcional de G e V . Da eq.(19), temos

$$(I.43) \quad \frac{\delta G(1,1')}{\delta U(2',2)} = \int G(1,3) \left[\delta(3-2') \delta(4-2) + \frac{\delta \Sigma(3,4)}{\delta U(2',2)} \right] G(4,1')$$

Agora, a auto-energia depende de U através de sua dependencia em $G(U)$,

$$(I.44) \quad \frac{\delta \Sigma(3,4)}{\delta U(2',2)} \Big|_{U=0} = \left(\frac{\delta \Sigma(3,4)}{\delta G(5,6)} \right)_{U=0} \left(\frac{\delta G(5,6)}{\delta U(2',2)} \right)_{U=0}$$

onde $\delta \Sigma / \delta G$ deve ser compreendida como diferenciando a forma funcional de Σ .

Numa formulação diagramática, isto significa que devemos remover uma linha de G , de um dado diagrama de Σ , de todos os modos possíveis (ver parte II).

Portanto $\delta \Sigma / \delta G$ faz o papel de uma interação efetiva de duas partículas, que

denotaremos por \mathbb{H} ,

$$(I.45) \quad \mathbb{H}(35, 46) = \left. \frac{\delta \Sigma(3, 4)}{\delta G(5, 5)} \right|_{U=0}$$

Substituindo a (44) na eq. (43) e usando a definição acima, chegamos à seguinte equação integral para L,

$$(I.46) \quad L(12, 1'2') = -G(1-2')G(2-1') + \int G(1-3)G(4-1')\mathbb{H}(\overline{35}, \overline{46})L(\overline{52}, \overline{52}'),$$

Como um importante exemplo, consideramos agora a equação acima para a aproximação da matriz-T. Pode-se chegar facilmente à expressão da interação efetiva \mathbb{H} : substituímos Σ dada por (38) na definição (45) e usamos a eq. (37) para calcular a derivada de T em relação a G(!). O resultado é

$$(I.47) \quad \mathbb{H}(12, 1'2') = -i\langle 12 | T | 1'2' \rangle + \int \langle 1\overline{3} | T | 2'\overline{4} \rangle G(\overline{4}-\overline{5})G(\overline{5}-\overline{3}) \langle \overline{25} | T | 1'\overline{5} \rangle$$

onde os T's são calculados em $U = 0$. A equação para a resposta linear fica

$$(I.48) \quad L(12, 1'2') = -G(1-2')G(2-1') - i \int G(1-\overline{3})G(\overline{5}-1') \langle \overline{34} | T | \overline{56} \rangle L(\overline{52}, \overline{42}') \\ + \int G(1-\overline{3})G(\overline{3}'-1') \langle \overline{35} | T | \overline{4}'\overline{5}' \rangle G(\overline{5}'-\overline{5}) \\ \cdot G(\overline{5}'-\overline{5}) \langle \overline{45} | T | \overline{3}'\overline{5}' \rangle L(\overline{4}'2, \overline{42}').$$

A RPA é obtida desta equação se desprezamos o termo quadrático na amplitude de espalhamento, e para o termo linear substituímos o primeiro termo da equação integral de T, (37), devidamente antisimetrizado (veja (38)).

Então,

$$(I.49) \quad L(12, 1'2') = -G(1-2')G(2-1') - i \int G(1-\overline{3})G(\overline{3}-1')V(\overline{3}-\overline{4})L(\overline{42}, \overline{42}') \\ + i \int G(1-\overline{3})G(\overline{4}-1')V(\overline{3}-\overline{4})L(\overline{32}, \overline{42}')$$

A solução da equação da RPA é uma soma de diagramas de bolhas, onde cada bolha é composta, essencialmente, de uma matriz de espalhamento partícula-buraco construída com funções de HF. Ela despreza, portanto, as outras correlações produzidas por colisões entre partículas. Assim, a eq. (48) é uma generalização da RPA, incluindo efeitos de colisão, e apropriada para o estudo de movimentos coletivos, com forças realistas, na matéria nuclear. No entanto, esta equação é muito complicada. Note, por exemplo, que para qualquer aproximação superior ao HF, a auto-energia própria e a interação efetiva, Σ , tornam-se não-locais no tempo. Em linguagem de energia, elas são dependentes de frequência. A dependência da auto-energia na frequência é conhecida como 'propagação fora da camada de energia'.

II. APROXIMAÇÕES DERIVÁVEIS DE UM FUNCIONAL

II.A. Na parte I. ,mostramos uma técnica de construção de aproximações auto-consistentes.Estas aproximações apresentam uma propriedade geral de consequencias importantes: para as aproximações estudadas, podemos construir um funcional fechado, Φ , de V e G , tal que a auto-energia própria, Σ , seja dada como a derivada variacional de Φ em relação a G :

$$(II.1) \quad \Sigma(1,1') = \frac{\delta \Phi}{\delta G(1',1)}$$

Aqui, mostramos a existência de Φ para estes casos particulares, através da formulação diagramática. Deixamos para o apêndice A.II. uma discussão mais detalhada, onde mostramos também o Φ exato. Não será necessária a forma explícita de Φ para analisar as consequencias de sua existência. Mais adiante, estabeleceremos a existência de Φ como condição necessária e suficiente para que uma aproximação construída a partir dele, seja conservativa.

A derivada funcional de Φ em relação a G , significa que devemos derivar a forma funcional de Φ , ou, numa formulação diagramática, significa remover uma linha de G , de um dado diagrama de Φ , de todos os modos possíveis. A forma dos diagramas que contribuem em Φ , para uma dada aproximação, é sugerida pela eq. (1). Φ deve ser um funcional associado a uma classe de diagramas análogos àqueles que ocorrem numa expansão perturbativa da energia do estado fundamental. Mas com uma diferença: os propagadores livres, G_0 , substituídos por propagadores 'vestidos', G , e portanto as inserções de auto-energia estão implícitas. Nas Figs. (7), (8) e (9) apresentamos os Φ 's associados às tres aproximações estudadas em I. Desde que estamos tratando com diagramas de Feynman, devemos incluir somente os diagramas topologicamente distintos. Um diagrama de n -ésima ordem contém $2n$ linhas equivalentes e deve, portanto, ser multiplicado por $1/2n$. (ver A.II.)

II.B. Vejamos agora como obter a energia do estado fundamental, EEF, para uma aproximação derivável de Φ . A expansão obtida corresponde à 'linked cluster expansion' (LCE), e mostramos que existe um princípio variacional para a EEF, a segunda variação estando diretamente relacionada com a resposta linear.

Consideramos o potencial V como λV , onde λ é uma constante numérica de acoplamento, tomando valores $0 \leq \lambda \leq 1$. Então, Φ depende de λ de dois modos: através da dependência explícita em V , e através de sua dependência em G . Portanto,

$$(II.2) \quad \frac{d\Phi_\lambda}{d\lambda} = \left. \frac{\partial \Phi_\lambda}{\partial \lambda} \right|_G + \text{tr} \Sigma_\lambda \frac{dG_\lambda}{d\lambda}$$

onde o índice G , significa que estamos derivando a dependência explícita em V ; o segundo termo é diretamente obtido da eq. (1). Para encontrar a derivada de Φ com G constante, usa-se o seguinte truque: multiplica-se cada V explícito em Φ por α e cada G por $\alpha^{-1/2}$. Agora, cada G em Φ liga dois vértices e cada V está ligado a quatro G 's. Logo, Φ é invariante por esta transformação α . Assim,

$$(II.3) \quad 0 = \frac{d\Phi_\lambda}{d\alpha} = \frac{\lambda}{\alpha} \left. \frac{\partial \Phi_\lambda}{\partial \lambda} \right|_G + \text{tr} \frac{\delta \Phi_\lambda}{\delta G_\lambda} \frac{d}{d\alpha} (\alpha^{-1/2} G_\lambda) \\ = \frac{\lambda}{\alpha} \left. \frac{\partial \Phi_\lambda}{\partial \lambda} \right|_G - \frac{1}{2} \alpha^{-3/2} \text{tr} \Sigma_\lambda G_\lambda$$

Para $\alpha=1$,

$$(II.4) \quad \left. \frac{\partial \Phi_\lambda}{\partial \lambda} \right|_G = \frac{1}{2\lambda} \text{tr} \Sigma_\lambda G_\lambda$$

Agora, integramos a eq. (2) em relação a λ de 0 a 1, e obtemos

$$(II.5) \quad \Phi = \int_0^1 \frac{d\lambda}{2\lambda} \text{tr} \Sigma_\lambda G_\lambda + \int_0^1 d\lambda \text{tr} \Sigma_\lambda \frac{dG_\lambda}{d\lambda}$$

onde $\Phi_{\lambda=0} = 0$. Prosseguimos avaliando a segunda integral na eq. (5). Usando-se que

$$\begin{aligned} \delta \text{tr} \Sigma G &= \text{tr} [\delta \Sigma] G + \text{tr} \Sigma \delta G \\ &= \text{tr} [-\delta G^{-1}] G + \text{tr} \Sigma \delta G \end{aligned}$$

e definindo-se formalmente, $\text{tr} [-\delta G^{-1}] G = \delta \text{tr} \ln(-G)$, então

$$\begin{aligned} \int_0^1 d\lambda \text{tr} \Sigma_\lambda \frac{dG_\lambda}{d\lambda} &= \left[\text{tr} \Sigma_\lambda G_\lambda - \text{tr} \ln(-G_\lambda) \right]_0^1 \\ &= \text{tr} \Sigma G - \text{tr} \ln(-G) + \text{tr} \ln(-G_0) \end{aligned}$$

que substituída na (5), dá

$$(II.6) \quad \Delta E = E - E_0 = - \int_0^1 \frac{d\lambda}{2\lambda} \text{tr} \Sigma_\lambda G_\lambda = -\Phi + \text{tr} \Sigma G + \text{tr} \ln G_0 G^{-1}$$

A integral nesta equação, quando Σ_λ e G_λ são expandidos em série em λ , obtém-se a LCE⁹⁾.

A existência de um princípio variacional para a EEF, segue-se de imediato. Consideramos a quantidade equivalente

$$(II.7) \quad I = \Phi - \text{tr} \Sigma G + \text{tr} \ln(-G)$$

de onde temos

$$\begin{aligned} (II.8) \quad \delta I &= \text{tr} \left[\frac{\delta \Phi}{\delta G} - \Sigma \right] G \\ &= 0, \text{ para } \Sigma = \frac{\delta \Phi}{\delta G} \end{aligned}$$

Portanto a energia do estado fundamental é estacionária por variações de G , quando $\Sigma = G_0^{-1} - G^{-1} = \delta \Phi / \delta G$.

Uma vez estabelecido o princípio variacional, é interessante verificar se temos realmente um extremo. Para isso, é necessário estudar a segunda variação de I . Da eq. (8),

$$\delta^2 I = \text{tr} \left[\frac{\delta^2 \Phi}{\delta G^2} - \frac{\delta \Sigma}{\delta G} \right] \delta G \delta G + \text{tr} \left[\frac{\delta \Sigma}{\delta G} - \Sigma \right] \delta^2 G$$

Fazendo-se $\delta \Phi / \delta G$ igual a Σ e tendo-se que $\delta \Sigma = G^{-1}(\delta G)G^{-1}$, obtemos

$$(II.9) \quad \frac{\delta^2 I}{\delta G(1',1)\delta G(2',2)} = \left[\frac{\delta^2 \Phi}{\delta G(1',1)\delta G(2',2)} - G^{-1}(1,2')G^{-1}(2,1') \right]$$

que das eqs. (1) e (I.46) resulta

$$(II.10) \quad \delta^2 I = - \left(\delta G(1',1) L^{-1}(12,1'2') \delta G(2',2) \right)$$

Esta equação é interessante, desde que ela relaciona a minimização da energia do estado fundamental com os movimentos coletivos descritos por L . Na aproximação conservativa de ordem mais baixa, o HF, o determinante de Slater que dá o valor esperado mais baixo possível da Hamiltoniana, estabiliza os modos coletivos no RPA (garante que as frequências são reais (ver III.)).

II. Leis de conservação para G .

Se uma aproximação é derivável de Φ , mostramos agora, que ela satisfaz às leis de conservação para os valores esperados das quantidades conservadas, tais como, densidade de partículas, momentum total e energia. Em geral, quando fazemos aproximações, quebramos simetrias da Hamiltoniana do sistema. Por outro lado, quando fazemos uma expansão diagramática de Σ em G e V , as leis de conservação nos vértices são obedecidas. Assim, em cada vértice de $\Sigma(1,1')$, exceto nos vértices exteriores 1 e $1'$, existe uma linha de interação, duas partículas entrando e duas partículas saindo, e portanto, há conservação de partículas nos vértices. Os tempos intermediários são integrados sobre todos os valores consistentes com as condições de contorno que, em geral, podem ser escolhidas periódicas, ou sobre todo o eixo- t , $(-\infty, +\infty)$ e portanto, invariantes por um deslocamento do tempo, o que na ausência de perturbações, leva à forma apropriada da conservação de energia nos vértices.



Da mesma forma, todos os pontos intermediários são integrados sobre todo o espaço, o que na ausência de perturbação externa dá a conservação do momentum. Mesmo assim, uma aproximação tipo diagramática mantém as leis de conservação nos vértices e pode, no entanto, não conservar número de partículas, momentum total, e energia. Este não é o caso nas aproximações deriváveis de Φ . Agora faremos uso das leis de conservação nos vértices para deduzir as leis de conservação macroscópicas. Assim, as aproximações conservativas comportam-se, neste sentido, como a teoria exata em relação às leis de conservação.

a) lei de conservação do número de partículas

A conservação do número de partículas está relacionada com invariância por transformação de 'gauge'. Portanto, vamos considerar a seguinte transformação em G:

$$(II.11) \quad G \longrightarrow G(1,1';\Lambda) = e^{-i\Lambda(1)} G(1,1') e^{i\Lambda(1')}$$

Mostramos em A.I. que esta transformação é equivalente a considerar G na presença de um campo externo que corresponde a uma transformação de 'gauge'. Agora, da eq. (1), para uma mudança δG em G, então Φ , como um funcional de G, mudará da quantidade

$$(II.12) \quad \delta\Phi = \int d1d1' \Sigma(1,1') \delta G(1',1)$$

Da (11),

$$\delta G(1,1') = i [\Sigma(1,1') \Lambda(1') - \Lambda(1) G(1,1')]$$

e portanto

$$(II.13) \quad i\delta\Phi = \int d1d1' [\Sigma(1,1') G(1',1) - G(1,1') \Sigma(1',1)] \Lambda(1)$$

Da conservação de partículas nos vértices e desde que Φ é um funcional fechado de G (para cada linha de G que entra, outra sai), Φ é um invariante

frente a transformação (11). Assim, $\delta\bar{\phi} = 0$ e o coeficiente de $\Lambda(1)$ na eq. (13) deve anular-se. Logo,

$$(II.14) \quad \int [\Sigma(1,1')G(1',1) - G(1,1')\Sigma(1',1)] d1' = 0$$

Em termos da auto-energia própria as equações do movimento, (I.3) e (I.3') ficam

$$(II.15) \quad \int [G_0^{-1}(1,\bar{1}) - U(1,\bar{1}) - \Sigma(1,\bar{1})]G(\bar{1},1') = \delta(1-1')$$

$$(II.15') \quad \int G(1,\bar{1})[G_0^{-1}(\bar{1},1') - U(\bar{1},1') - \Sigma(\bar{1},1')] = \delta(1-1')$$

Subtraindo a segunda destas equações da primeira, tomando-se U local, fazendo o limite $1' = 1^+$ e usando a eq. (14), temos finalmente,

$$(II.16) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \langle j \rangle = 0$$

onde $\rho = \lim_{1',=1} iG(1,1')$, é a densidade de partículas, e j , a densidade de corrente de partículas, dada por $(1/2im) [(\nabla_1 - \nabla_{1'})\psi^+(1')\psi(1)]_{1'=1^+}$.

b) conservação do momentum

A conservação do momentum está relacionada com deslocamento no espaço e portanto, consideramos a transformação

$$(II.17) \quad G \longrightarrow G(rt, r't'; R) = G(r + R(t), t; r' + R(t'), t')$$

ϕ é invariante por esta transformação, desde que em cada vértice a interação é local no tempo e depende somente da diferença das coordenadas espaciais e a integração nestas coordenadas é feita sobre todo o espaço. De modo semelhante ao que fizemos em a), obtemos³⁾

$$(II.18) \quad \frac{d}{dt_1} \langle P(t_1) \rangle_0 = - \int dr_1 [\nabla U(1)] \rho_0(1)$$

que nos diz que a derivada temporal do momentum total é igual à força total aplicada. Esta é simplesmente a lei de Newton.

c) conservação da energia

Para a conservação da energia, nenhuma outra suposição essencial, além da invariância de Φ por deslocamento nas variáveis temporais, é necessária. No entanto, uma quantidade muito maior de cálculo é envolvida³). O resultado é, na sua forma mais simples, que, na ausência de perturbação externa, o valor esperado da Hamiltoniana independe do tempo:

$$(II.19) \quad \frac{d H(t)}{dt} = 0$$

II. D. A condição de que uma aproximação seja derivável de um funcional Φ , de G e V , garante que os valores esperados dos operadores que comutam com a Hamiltoniana do sistema, satisfazem as leis de conservação, e, do mesmo modo, a resposta linear, calculada a partir do G aproximado (ver III.C.). Veremos agora que o critério- Φ pode ser quebrado em tres condições de simetria que nos permitem verificar se uma dada aproximação é ou não conservativa, examinando apenas sua estrutura.

Inicialmente, observamos que na dedução das leis de conservação, fizemos a suposição implícita de que a função de Green, G , obedece às eq. (15) e (15'). Em termos da aproximação original para G_2 , eqs. (I.3) e (I.3'), quando uma dada aproximação para G_2 é substituída nas duas equações, os dois procedimentos devem levar a uma mesma determinação de G . Este é um critério de consistência entre as duas equações. Em geral, as equações (15) e (I.3) podem diferir, mas para as aproximações conservativas elas são equivalentes, porque a forma funcional de Σ é determinada unicamente por Φ , que também determina G_2 (ver (21)). Se agora das eqs. (I.3) e (I.3') construímos o produto matricial $G(G_0^{-1} - U)G$, a consistência entre as duas

fica expressa por

$$(II.20) \quad \int G(1, \bar{1}) V(\bar{1}-\bar{3}) G_2(\bar{1}\bar{3}, 1' \bar{3}) = \int G_2(1\bar{3}, \bar{1}\bar{3}) V(\bar{3}-\bar{1}) G(\bar{1}, 1')$$

Esta é a condição A da ref. (1). A condição B é obtida observando-se que

$$(II.21) \quad \frac{\delta \Phi}{\delta V(1, 2)} = -(i/2) G_2(12, 1^* 2^*)$$

Da identidade das partículas, $V(1, 2) = V(2, 1)$, e então, $\delta \Phi / \delta V(1, 2) = \delta \Phi / \delta V(2, 1)$.

Portanto,

$$(II.22) \quad G_2(12, 1^* 2^*) = G_2(21, 2^* 1^*)$$

Finalmente, a condição C vem da própria existência de Φ . Uma condição suficiente para que exista o funcional Φ , tal que $\delta \Phi / \delta G = \Sigma$, é ³⁾

$$\frac{\delta \Sigma(1, 1')}{\delta G(2', 2)} = \frac{\delta \Sigma(2, 2')}{\delta G(1', 1)}$$

Portanto, para uma aproximação conservativa a interação efetiva \boxplus deve ter a simetria

$$(II.23) \quad \boxplus(12, 1' 2') = \boxplus(21, 2' 1')$$

Note da eq. (I.46), que a função resposta linear, L, deve obedecer a mesma simetria. Os resultados apresentados na última seção podem ser igualmente deduzidos das eqs. (I.3) e (I.3'), mais as condições de simetria A) e B). De fato, originalmente, as condições A), B) e C) foram obtidas impondo que as aproximações, auto-consistentes, fossem conservativas.

III. A APROXIMAÇÃO DE HARTREE-FOCK.

Analisamos um exemplo concreto, embora trivial, do uso do critério de aproximações conservativas: a aproximação de Hartree-Fock. Construímos a função resposta linear e dela derivamos as equações da RPA. Do ponto de vista da eq. (II.10), estudamos a relação entre a estabilidade da RPA e a minimização da energia do estado fundamental. Em seguida, mostramos a utilidade do critério- $\bar{\Phi}$ na construção de novas aproximações, generalizando o HF para interações dependentes da densidade.

III.A. Da fig. (7), o funcional correspondente à aproximação de HF é dado por

$$(III.1) \quad \bar{\Phi} = -\frac{i}{2} \int d1d2 [G(1,1^{\dagger})V(1-2)G(2,2^{\dagger}) - G(1,2^{\dagger})V(1-2)G(2,1^{\dagger})]$$

Neste caso simples, $\bar{\Phi}$ pode ser escrito em termos da matriz densidade de uma-partícula, ρ , definida por

$$(III.2) \quad \rho_{\alpha\beta}(t) = -iG_{\alpha\beta}(t, t^{\dagger}) ; \quad G_{\alpha\beta}(t, t^{\dagger}) = \int dx dx' \varphi_{\alpha}^*(x) G(xt, x't^{\dagger}) \varphi_{\beta}(x')$$

onde $\{\varphi_{\mu}\}$ é uma representação de funções de onda de partícula-única, soluções do HF estático. Então $\bar{\Phi}$ toma a forma

$$(III.3) \quad \bar{\Phi} = (1/2) \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\gamma\delta} ; \quad V_{\alpha\beta\gamma\delta} \equiv V_{\alpha\beta\gamma\delta} - V_{\alpha\beta\delta\gamma}$$

ou, em notação matricial,

$$(III.4) \quad \bar{\Phi} = (1/2) \text{tr}_1 \text{tr}_2 \rho_1 v(1,2) \rho_2$$

De imediato, a auto-energia própria, ou potencial de HF, é dada por

$$(III.5) \quad \Sigma_1(t) = \text{tr}_2 v(1,2) \rho_2$$

Agora das eqs. (II.15) e (II.15') e com a auto-energia dada pela eq. acima,

obtemos facilmente a equação para a matriz densidade na aproximação de HF

$$(III.6) \quad i(d/dt) \rho(t) = [h(t), \rho(t)]$$

onde $h(t) = T + \Sigma(t)$ é a Hamiltoniana de um corpo de HF.

Passamos à resposta linear, que definimos como

$$(III.7) \quad L(\alpha t, \delta\tau; \beta t, \gamma\tau) = - \left. \frac{\delta \rho_{\alpha\beta}(t)}{\delta U_{\gamma\delta}(\tau)} \right|_{U=0}$$

Esta forma particular da (I.42) é também conhecida como função de correlação partícula-buraco e está diretamente relacionada com flutuações de densidade¹²⁾.

A fim de obter uma equação integral para L, colocamos o sistema num campo externo $U(t)$, com uma pequena dependência temporal

$$U(t) = U_0 + \delta U(t)$$

e escrevemos a matriz densidade como

$$\rho(t, U) = \rho^0 + \delta\rho^1(t, U)$$

onde ρ^0 é a matriz densidade não perturbada, correspondente à solução do HF estático; $\delta\rho^1$ é a variação em primeira ordem devido à dependência em t de U , δU . Do mesmo modo,

$$\Sigma(t, U) = \Sigma^0 + \Sigma^1(t, U)$$

onde Σ^0 corresponde à auto-energia do HF estático e

$$\Sigma^1(t) = \text{tr}_1 \left. \frac{\delta \Sigma}{\delta \rho^1} \right|_{\rho=\rho^0} \delta\rho^1(t, U)$$

Da eq. (6), a equação do movimento obedecida por $\delta\rho^1(t)$ é

$$(III.8) \quad \frac{d}{dt} \delta\rho_{\alpha\beta}^1(t) = -i(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta) \delta\rho_{\alpha\beta}^1(t) + i(\rho_{\alpha\alpha}^0 - \rho_{\beta\beta}^0) \left[\delta U_{\alpha\beta} + \left. \frac{\delta \Sigma_{\alpha\beta}}{\delta \rho_{\gamma\delta}^1} \right|_{\rho=\rho^0} \delta\rho_{\gamma\delta}^1(t) \right]$$

onde escolhemos a representação $\{\varphi_\alpha\}$ que diagonaliza h^0 : $h_{\alpha\beta}^0 = \epsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta}$.

Nesta representação ρ^0 também é diagonal, tomando valores*

$$\rho_{ij}^0 = \delta_{ij} \quad , \quad \rho_{mn}^0 = \rho_{im}^0 = \rho_{mi}^0 = 0$$

As soluções da eq. (6) satisfazem as condições $\rho^2 = \rho$, $\text{tr } \rho = N$ (número de partículas). Destas condições vemos que $\delta\rho^1$ contém apenas elementos de matriz partícula-buraco e buraco-partícula. Escrevemos a eq. (8) na seguinte forma matricial

$$(III.9) \quad \frac{d}{dt} \delta\rho^1(t) = -iV[\delta U(t) + M \delta\rho^1(t)]$$

onde $\delta\rho^1$ é um vetor coluna cujos elementos são os elementos de matriz partícula-buraco $\delta\rho_{mi}^1$, $\delta\rho_{in}^1$; V é a matriz

$$(III.10) \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

e M é a matriz usual

$$(III.11) \quad M_{mi,nj} = \delta_{ij} \delta_{mn} (\epsilon_m - \epsilon_n) + \left. \frac{\delta \Sigma_{mi}}{\delta \rho_{nj}} \right|_{\rho=\rho^0} = M_{im,jn}^*$$

$$(III.11') \quad M_{mi,jn} = \left. \frac{\delta \Sigma_{mi}}{\delta \rho_{jn}} \right|_{\rho=\rho^0} = M_{im,nj}^*$$

Adotando-se a condição de contorno de que a variação $\delta U(t)$ é tal que $\delta\rho^1 = 0$, para $t = -\infty$ e integrando-se a eq. (9) com esta condição, obtemos

$$(III.12) \quad \delta\rho^1(t) = -iV \int_{-\infty}^t [\delta U(t') + M \delta\rho^1(t')] dt'$$

Derivando-se variacionalmente esta equação em relação a U , usando a def. (7), achamos a equação integral para a resposta linear

$$(III.13) \quad L(t-\tau) = iV\theta(t-\tau) - iVM \int_{-\infty}^t dt' L(t'-\tau).$$

Poderíamos ter escrito esta equação diretamente da eq. (I.46). No entanto, achamos que o procedimento seguido é mais instrutivo. Agora tomamos a transformada de Fourier desta equação. Definindo

$$L(w) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iw(t-\tau)} L(t-\tau) d(t-\tau)$$

achamos

$$(III.14) \quad [M - wv]L(w) = 1$$

As energias dos estados excitados (estados coletivos) são dadas pelos polos de $L(w)$, ou seja, pelas soluções de autovalor zero de $L^{-1}(w)$,

$$(III.15) \quad L^{-1}(w) = M - wv$$

Chamando-se V^N aos autovalores de $L^{-1}(w)$,

$$[M - wv]V^N = \lambda^N(w)V^N$$

os polos de $L(w)$ são dados pela seguinte equação de autovalor

$$(III.16) \quad MV_n^N = w_n v V_n^N$$

que é a conhecida equação da RPA⁸).

Observamos das eqs. (11) que a matriz M é Hermitiana. Contudo, a (16) não é um problema de autovalor para uma matriz Hermitiana, devido a presença da matriz v no segundo membro. Portanto, não temos nenhuma garantia de que os autovalores w_n sejam reais, como devem ser, desde que essa é uma aproximação sem colisão. Para estudar este problema, vamos à eq. (II.10) que aqui é escrita na forma

$$(III.17) \quad \delta^2 E = \delta\rho^{1\dagger} [M - vw] \delta\rho^1$$

Mostramos agora que, se a solução do HF não perturbada é um mínimo local, então todas as frequências de excitação são reais. A condição de mínimo é que a segunda variação da energia, eq. (17), seja positiva

$$(III.18) \quad \delta\rho^{1\dagger} M \delta\rho^1 > 0$$

(o outro termo é zero qualquer que seja w). É fácil mostrar que a desigualdade (18) é sempre satisfeita se a matriz Hermitiana M , é positiva definida, e vice-versa¹³). Agora, se M é positiva definida, multiplicando a (16), à esquerda, por $V^{N\dagger}$, temos

$$V^{N\dagger} M V^N, \text{ real e } > 0$$

e portanto,

$$(III.19) \quad w_n V^{N\dagger} V^N, \text{ real e } > 0.$$

Escrevendo explicitamente, $V = \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}$,

$$V^{N\dagger} V = (X^*, Y^*) \begin{pmatrix} X \\ -Y \end{pmatrix} = (X^* X - Y^* Y), \text{ real.}$$

Logo, da (19), os autovalores w_n são reais.

III.8. DHF. Para estudar a aproximação de HF com interações efetivas dependentes da densidade, consideramos a forma geral

$$(III.20) \quad v(x_1, x_2; R) = v_1(x_1 - x_2) + v_2(x_1 - x_2) f[\rho(R)]$$

onde ,
$$\rho_R \equiv \rho(R) = \sum_{\alpha\beta} \varphi_\alpha^*(R) \varphi_\beta(R) \rho_{\beta\alpha}$$

e $R = (1/2)(x_1 + x_2)$ é a coordenada de centro de massa dos dois nucleons.

Uma excelente análise da dinâmica das interações dependentes da densidade encontra-se em Ripka^B). Como estamos interessados na aproximação de HF, escrevemos um funcional na forma (3), com v dado por (20),

$$(III.21) \quad \Phi = (1/2) \text{tr}_1 \text{tr}_2 \rho_1 v(1,2; \rho_R) \rho_2$$

Temos então, o seguinte resultado para a auto-energia própria

$$(III.22) \quad \Sigma_1 = \frac{\delta \Phi}{\delta \rho_1} = \text{tr}_3 v(1,3) \rho_3 + (1/2) \text{tr}_2 \text{tr}_3 \rho_2 \left[\frac{d}{d \rho_1} v(2,3; \rho_R) \right] \rho_3$$

Todas as equações da seção III.B. são válidas neste caso se substituirmos a auto-energia dada pela eq. (22). A aproximação resultante é certamente conservativa. Note que um potencial dependente da densidade, não é invariante por translação, num sistema finito. Contudo, $\bar{\Phi}$ ainda é um invariante, desde que todas as suas coordenadas espaciais estão integradas.

A interação efetiva, $\bar{\Xi}$, eq. (I.45), é dada por

$$\begin{aligned}
 \text{(III.23)} \quad \bar{\Xi}(1,4) &= \frac{\delta \Sigma 1}{\delta \rho_4} \Big|_{\rho=\rho^0} \\
 &= v(1,4) + \text{tr}_3 \left[\frac{d}{d\rho_4} v(1,3; \rho_R) \right] \rho_3 + \text{tr}_3 \left[\frac{d}{d\rho_1} v(4,3; \rho_R) \right] \rho_3 \\
 &\quad + (1/2) \text{tr}_2 \text{tr}_3 \rho_2 \left[\frac{d^2}{d\rho_1 d\rho_4} v(2,3; \rho_R) \right] \rho_3 \Big|_{\rho=\rho^0}
 \end{aligned}$$

É interessante notar que a interação efetiva (23), que aparece em M, na RPA, não é a mesma usada no cálculo de HF, quando usamos interações dependentes da densidade. Na representação considerada, as equações (22) e (23) ficam

$$\text{(III.22')} \quad \Sigma_{\alpha\beta} = \sum_{\beta\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\delta\beta} + \langle \psi | \frac{dv}{d\rho} | \psi \rangle$$

$$\text{(III.23')} \quad \bar{\Xi}(\alpha\beta, \gamma\delta) = v_{\alpha\beta\gamma\delta} + \sum_i \left\{ \langle \beta i | \frac{dv}{d\rho_{\gamma\alpha}} | \delta i \rangle + \langle \alpha i | \frac{dv}{d\rho_{\beta\delta}} | \gamma i \rangle \right\} + \langle \bar{\Phi} | \frac{d^2 v}{d\rho_{\beta\delta} d\rho_{\gamma\alpha}} | \bar{\Phi} \rangle$$

onde $|\bar{\Phi}\rangle$ corresponde a ρ_0 . Usando a expressão para ρ_R , podemos ainda escrever as derivadas de v na forma

$$\text{(III.24)} \quad \frac{dv}{d\rho_{\gamma\alpha}} = \frac{dv}{d\rho} \frac{d\rho}{d\rho_{\gamma\alpha}} = (\psi_\alpha^*(R) \psi_\gamma(R)) \frac{dv}{d\rho}$$

A interpretação das contribuições de cada um dos termos das eqs. (22) e (23), também podem ser encontradas na ref. (8).

III.C. Leis de conservação e resposta linear. Estados espúrios.

Na discussão da RPA, excluimos as possíveis soluções da eq. (16) para $w_n = 0$. Veremos, logo adiante, que estas soluções existem e são consequências das violações das leis de conservação, quando fazemos aproximações na função de Green. Antes de entrar neste problema, estudamos um assunto relacionado, resposta linear e leis de conservação.

Seja $Q(t) = \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger}(t) a_{\beta}(t)$, um operador de um corpo que comuta com a Hamiltoniana do sistema, $[H, Q] = 0$. Então da parte II., podemos escrever a seguinte lei de conservação para Q :

$$(III.25) \quad \frac{d\langle Q(t) \rangle_U}{dt} = -i \sum_{\rho\alpha} Q_{\rho\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t'} \right) G_{\alpha\rho}(t, t'; U) \Big|_{t'=t^{\pm}}$$

$$= \sum_{\beta\alpha} Q_{\beta\alpha} [G_{\alpha\beta}(t, t^{\pm}; U) U_{\beta\alpha}(t) - U_{\alpha\beta}(t) G_{\beta\alpha}(t, t^{\pm}; U)]$$

Derivando esta equação em relação U , tomando o limite $U=0$ e usando a def. (7), encontramos

$$(III.26) \quad \frac{\delta}{\delta U_{\rho\sigma}(t')} \frac{d}{dt} \langle Q(t) \rangle_U \Big|_{U=0} = -i \sum_{\beta\alpha} Q_{\beta\alpha} \frac{d}{dt} L(\alpha t, \sigma t'; \beta t^{\pm}, \rho t')$$

$$= \delta(t-t') \sum_{\beta R} [Q_{\beta R} G_{R\beta}(t-t^{\pm}) - Q_{\beta\beta} G_{\beta\beta}(t-t^{\pm})]$$

Da (26), segue-se que

$$(III.27) \quad \sum_{\rho\sigma} Q_{\rho\sigma} \frac{\delta}{\delta U_{\rho\sigma}(t')} \frac{d}{dt} \langle Q(t) \rangle_U \Big|_{U=0} = 0$$

As eqs. (26) e (27), são as formas das leis de conservação para a resposta linear. Observe que a (26) contém um termo de descontinuidade proporcional à função de Green, G , para tempos iguais. Assim, para as aproximações conservativas, a função de correlação partícula-buraco, $L(t, t')$, define unicamente a matriz densidade, ρ . Generalizando para U não local, obtemos a mesma conexão entre a resposta linear e função de Green completas¹⁾.

Esta conexão tem uma razão física clara: desde que a resposta linear é calculada considerando-se pequenas variações em G, as correlações necessárias para uma boa descrição da função de Green não perturbada devem ter um papel dominante também na determinação do comportamento de L. É importante notar, dessas considerações, que não podemos construir uma melhor aproximação, para a resposta linear, calculando correções de ordem superior para a interação efetiva e para o propagador de partícula-única independentemente, e ainda manter a aproximação conservativa.

Quando fazemos aproximações quebramos certas simetrias da Hamiltoniana do sistema. As violações de simetrias dão origem ao aparecimento de estados espúrios. Assim, uma descrição de partícula independente, por exemplo, é incompatível com a conservação do momentum total, num sistema ligado finito. Em um sistema ligado finito as partículas estão localizadas relativa uma às outras e isto pode ser feito ou localizando-as no espaço, ou correlacionando seus movimentos. Claramente, a primeira alternativa viola a invariância translacional e a segunda é incompatível com um modelo de partícula independente. Devido à violação da invariância translacional numa descrição de partícula independente, mesmo uma translação infinitesimal do estado fundamental, dá um estado diferente deste, sendo a diferença proporcional a $P|\psi_0\rangle$, o momentum total operando no estado fundamental. Este é um estado espúrio. Por outro lado, fisicamente, o ato de transladar o sistema de uma certa quantidade não deve mudar sua energia intrínseca e portanto, o estado espúrio deve ter energia zero em relação ao estado fundamental.

É fácil mostrar que a resposta linear, calculada numa aproximação conservativa, elimina automaticamente os estados espúrios nas soluções de energia zero, e eles não se misturam às outras excitações do sistema. Das eqs. (26) e (27), podemos escrever

$$(III.28) \quad \Theta(t-t') \frac{d}{dt} \langle \psi_0 | Q(t')Q(t) - Q(t)Q(t') | \psi_0 \rangle = 0$$

Introduzindo um conjunto completo de estados e tomando a transformada de Fourier, temos para a parte imaginária da (28), se Q é Hermitiano,

$$(III.29) \quad \sum_n w_n |\langle \psi_n | Q | \psi_0 \rangle|^2 [\delta(w + w_n) + \delta(w - w_n)] = 0$$

onde w_n é a energia de excitação do sistema no estado n . Vemos então que os estados $|\psi_n\rangle$, correspondentes a $w_n \neq 0$, não conterão mistura do estado espúrio $Q|\psi_0\rangle$, enquanto que se $\langle \psi_n | Q | \psi_0 \rangle \neq 0$, $|\psi_n\rangle$ tem energia zero.

Para estudar outras características interessantes da resposta linear, calculada numa aproximação conservativa, voltamos á RPA e consideramos Q como P , o operador momentum linear total. Neste caso temos para a eq. (16)

$$(III.30) \quad M P^N = 0,$$

onde $P^N = \begin{pmatrix} P \\ -P^* \end{pmatrix}$, e P tem elementos de matriz $P_{mi} = \langle m | p | i \rangle$. (Seguimos o procedimento da ref. (14).) Note, contudo, que as soluções da eq. (16) ocorrem aos pares: se w_n é um auto-valor real de V^N , então $-w_n$ também é um auto-valor, de V^{N+} . Basta tomar o adjunto Hermitiano da eq. (16). Estas soluções conjugadas são necessárias para que os auto-vetores formem um conjunto completo. Na eq.

(30) não temos esta solução conjugada. Para encontrá-la colocamos, no centro de massa do sistema, um potencial de oscilador harmonico, suficientemente fraco para não afetar seus estados de partícula-única, escrevemos as equações da RPA e só no final fazemos o limite do campo externo indo a zero.

As eqs. da RPA ficam

$$(III.31) \quad M V^+ = v w_{ext} V^+ \quad , \quad M V^- = -v w_{ext} V^-$$

com $V^\pm = \begin{pmatrix} X^\pm \\ Y^\pm \end{pmatrix}$ e os elementos de matriz de X e Y são dados pela equação

$$(III.32) \quad X_{mi}^\pm = \langle m | 1/i\sqrt{2Mw_{ext}} p \pm i\sqrt{Mw_{ext}/2} x/N | i \rangle = -Y_{mi}^\pm$$

onde $X = (1/N) \sum (m | x | i) a_m^\dagger a_i$ é o operador posição do centro de massa.

podemos agora, construir as duas seguintes soluções:

$$(III.33) \quad M(V^+ + V^-) = v w_{\text{ext}}(V^+ - V^-), \quad M(V^+ - V^-) = v w_{\text{ext}}(V^+ + V^-)$$

que da eq. (32) identificamos como sendo

$$(III.34) \quad M P^N = w_{\text{ext}}^2 \bar{\Phi}^N$$

$$(III.35) \quad M \begin{pmatrix} \bar{\Phi} \\ \bar{\Phi}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P \\ P^* \end{pmatrix}$$

onde $\bar{\Phi}^N = \begin{pmatrix} \bar{\Phi} \\ -\bar{\Phi}^* \end{pmatrix}$, com $\bar{\Phi}_{w_i} = i(M/N)X_{w_i}$. Nesta aproximação também temos

$$(III.36) \quad \langle X^2 \rangle = 1/2Mw_{\text{ext}}$$

$$(III.37) \quad \langle PX \rangle = -i/2$$

$$(III.38) \quad \langle P^2 \rangle = Mw_{\text{ext}}/2$$

onde os valores esperados são tomados no estado fundamental, que na sua parte de movimento do centro de massa é o estado fundamental do oscilador.

Agora, fazemos o limite de $w_{\text{ext}} \rightarrow 0$. Então a eq. (34) reproduz a (30) e a eq. (35) da a solução que estávamos procurando. Por outro lado, as eqs. (36) - (38) mostram o que acontece com o estado fundamental. Da eq. (38) vemos que o estado $\lim_{w_{\text{ext}} \rightarrow 0} P|\psi\rangle$ tende a zero. Porém o estado $P|\psi\rangle / (Mw_{\text{ext}}/2)^{1/2}$, cuja a parte de centro de massa é o primeiro estado excitado do oscilador, não se anula. Este é o estado espúrio, associado à solução da (30). Da eq. (36) um outro estado não se anula, $(2Mw_{\text{ext}})X|\psi\rangle$ e corresponde à solução da (35). É interessante notar que embora o estado $\langle \psi | P$ tenda a zero, o estado $X|\psi\rangle$ torna-se infinito em norma. Portanto, a combinação $\langle PX \rangle - \langle XP \rangle = -i$ reproduz a relação de comutação $[P, X] = -i$, nesta aproximação. Esta é

uma característica geral da resposta linear calculada nas aproximações conservativas; ela também preserva a informação do comutador da quantidade conservada e sua conjugada ¹⁾.

Assim, embora a invariância translacional seja violada na descrição de partícula independente, ela é restaurada, no sentido acima, na aproximação conservativa para L .

Nota: * os índices i, j, \dots referem-se a orbitas ocupadas e m, n, \dots a orbitas vazias.

APÊNDICE A.I.

Consideremos a transformação (II.11) na função de Green livre G_0 ,

$$(A.1) \quad G_0(1,1';\Lambda) = e^{-i\Lambda(1)} G_0(1,1') e^{i\Lambda(1')}$$

Derivando $G_0(\Lambda)$ em relação a t_1 , e usando a equação do movimento para G_0 , chegamos à seguinte equação do movimento para $G_0(\Lambda)$

$$(A.2) \quad \left\{ i \frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\partial \Lambda(1)}{\partial t_1} + \frac{1}{2m} [\nabla_1 + i \nabla \Lambda(1)]^2 \right\} G_0(1,1';\Lambda) = \delta(1-1')$$

Agora mostramos que a equação para $G(\Lambda)$ é da forma

$$(A.3) \quad \left\{ i \frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\partial \Lambda(1)}{\partial t_1} + \frac{1}{2m} [\nabla_1 + i \nabla \Lambda(1)]^2 \right\} G(1,1';\Lambda) - \int \Sigma(1,\bar{1};\Lambda) G(\bar{1},1';\Lambda) = \delta(1-1')$$

Para isso, basta mostrar que Σ transforma-se do mesmo modo que G_0 e G .

Consideremos a transformação

$$(A.4) \quad G(2,2';\Lambda) \longrightarrow e^{-i\Lambda(2)} \bar{G}(2,2';\Lambda) e^{i\Lambda(2')}$$

Sob esta transformação,

$$(A.5) \quad \Sigma(1,1';G(\Lambda)) = e^{-i\Lambda(1)} (1,\bar{1};\bar{G}) e^{i\Lambda(\bar{1})}$$

que segue da conservação de partículas nos vértices de Σ : os fatores exponenciais cancelam-se nos vértices interiores e sobram apenas os fatores correspondentes aos vértices exteriores 1 e $\bar{1}$. Assim, \bar{G} obedece a equação do movimento (A.3) com $\Lambda = 0$. Logo, $\bar{G}(\Lambda) = G(\Lambda = 0)$ e portanto $G(\Lambda)$ satisfaz a eq. (A.3). Esta equação é equivalente à equação de G na presença de um

campo externo, U , local no tempo, correspondente a uma transformação de 'gauge', e dado por

$$(A.6) \quad \int d1 d1' \psi^\dagger(1) U(1,1') \psi(1') = \int d1 \left[\nabla \Lambda(1) \cdot \left(j(1) + \frac{1}{2m} \nabla \Lambda(1) \rho(1) \right) + \frac{\partial \Lambda(1)}{\partial t_1} \rho(1) \right]$$

que pode ser verificado substituindo U na eq. (I.3). Na equação acima, $j(1)$ é a densidade de corrente de partículas e Λ é uma função escalar.

Do mesmo modo, pode-se mostrar que o $G(R)$ que aparece na dedução da lei de conservação do momentum, corresponde ao sistema sendo descrito por um observador cuja origem de coordenadas está num ponto que varia com o tempo, $R(t)$. Desse modo, o observador vai descrever o sistema com um termo extra na Hamiltoniana, dado por

$$(A.7) \quad - \frac{dR(t)}{dt} \cdot \int dr m j(r,t) = - \frac{dR(t)}{dt} \cdot P(t)$$

onde P é o operador momentum total.

APENDICE A.II.

O raciocínio para construir o Φ exato é semelhante ao que usamos na parte II. Observamos que os diagramas da auto-energia, Σ , apresentam uma estrutura de diagramas conexos fechados (diagramas de Φ), com uma linha simplesmente removida. Chamamos irreduzível a um diagrama que não contém nenhuma inserção de auto-energia. Assim, todos os diagramas de Σ (diagramas Σ) podem ser obtidos escrevendo-se todos os diagramas irreduzíveis e inserindo todas as possíveis partes de auto-energia, o que é equivalente a tomar todos os diagramas irreduzíveis possíveis e substituir G_0 por G . Suponha agora, que façamos o mesmo com todos os diagramas irreduzíveis conexos fechados para obter os diagramas de Φ . É fácil de ver que teríamos um problema de contagem: um mesmo diagrama Φ apareceria várias vezes. Em outras palavras, a redução dos diagramas Φ a diagramas irreduzíveis não é única, ao contrário dos diagramas da auto-energia, nos quais algumas interações são escolhidas, por definição, a permanecerem nos diagramas irreduzíveis. Portanto, desde que cada diagrama, na expansão da auto-energia, ocorre apenas uma vez, ao construir Φ devemos eliminar esta contagem excessiva.

A auto-energia é um funcional do G exato e representamos a expansão de Σ pela expressão formal

$$(A'.1) \quad \Sigma \equiv \Sigma[G] = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \Sigma^{(n)}[G]$$

onde λ^n é um fator que exhibe a dependência explícita do termo de 'n-ésima' ordem no potencial. Chamamos Φ' à quantidade $\text{tr} \Sigma G$ que é uma soma de todos os diagramas obtidos fechando-se cada diagrama de Σ . Agora, removendo-se qualquer linha de um diagrama Φ' , obtemos um diagrama de Σ . Dizemos que duas linhas são equivalentes se a remoção de uma ou outra dá o mesmo (topologicamente equivalente) diagrama Σ . Então o número de diagramas Σ diferentes que podem ser obtidos de um dado diagrama Φ' , é igual a $w(n(d))$,

o número de linhas não equivalentes no diagrama d na ordem n . Por outro lado, w é também o número de vezes que o dado diagrama ocorre na expansão de $\bar{\Phi}$. Agora, todos os diagramas $\bar{\Phi}'$ de ordem n , possuem o mesmo número de linhas $l(n(d))$. Assim, temos $2n = l(n(d))w(n(d))$ linhas equivalentes entre os $w(n(d))$ diagramas $\bar{\Phi}'$ idênticos. Então $\bar{\Phi}$ é dado por

$$(A'.2) \quad \bar{\Phi} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{2^n} \text{tr} \Sigma^{(n)} G$$

Com esta expressão explícita para $\bar{\Phi}$ podemos demonstrar facilmente as equações obtidas em II. A existência de $\bar{\Phi}$ é introduzida analiticamente em Martin e Schwinger, ref. (4).

- 41 -

REFERENCIAS

- 1) G. BAYM e L.P. KADANOFF, - Phys. Rev. 124 (1961)297
- 2) G. BAYM - Phys. Lett. 1 (1962)241
- 3) G. BAYM - Phys. Rev. 127 (1962)1391
- 4) P.C. MARTIN e J. SCHWINGER - Phys. Rev. 115 (1959)1342
- 5) J.M. LUTTINGER e J.C. WARD - Phys. Rev. 118 (1960)1417
- 6) A. KLEIN - Phys. Rev. 121 (1961)950
- 7) J. LETOURNEUX e R. PADJEN - Nucl. Phys. A193 (1972)257
- 8) G. RIPKA - Duilovo Lectures, Saclay report DPh- T69-54 (1969)
- 9) BONCH-BRUEVICH e TYABLIKOV - The Green Function Method in Statistical Mechanics, North-Holland, 1962, pag. 50, e appendix V.
- 10) Y. NAMBU - Phys. Rev. 117 (1960) 648
- 11) J. G. VALATIN - Phys. Rev. 122 (1961)1012
- 12) FETTER e WALECKA - Quantum Theory of Many-Part. Systems, Mc-Graw-Hill.
- 13) M. BARANGER - Cargèse Lectures, 1962
- 14) G. BROWN - Unified Theory of Nuc. Models and Forces, North-Holland, 1971

LEGENDAS

- Figura 1 - Todos os diagramas que contribuem em primeira e segunda ordem em teoria de perturbação simples.
- Figura 2a - Equação de Dyson para $G(U)$ na aproximação de Hartree-Fock. A linha dupla representa o propagador 'vestido'.
- Figura 2b - Auto-energia própria mostrando as infinitas classes de termos somados na expansão de G para o HF. Note que todos os diagramas de a) a l), na figura 1, podem ser obtidos iterando-se a equação de HF. Os dois últimos, m) e n), representam a contribuição de ordem mais baixa do segundo membro da eq. (23) da aproximação de colisão de Born.
- Figura 3 - Aproximação da função de Green de duas partículas, G_2 , na aproximação de colisão de Born. As linhas cheias representam $G(U)$.
- Figura 4 - G_2 na aproximação da matriz-T.
- Figura 5 - A resposta linear, L , na aproximação de HF, eq. (I.49).
- Figura 6 - Forma diagramática da eq. (I.48)
- Figura 7 - À direita os diagramas do funcional $\bar{\Phi}$ para a aproximação de HF; à esquerda, as correspondentes contribuições para a auto-energia.
- Figura 8 - Diagramas de $\bar{\Phi}$ e Σ que somados aos da fig. 7, dão as contribuições da aproximação de colisão de Born.
- Figura 9 - a) Diagramas de $\bar{\Phi}$ (à direita) na aproximação da matriz-T; b) um dos diagramas de a), numa forma sugestiva.

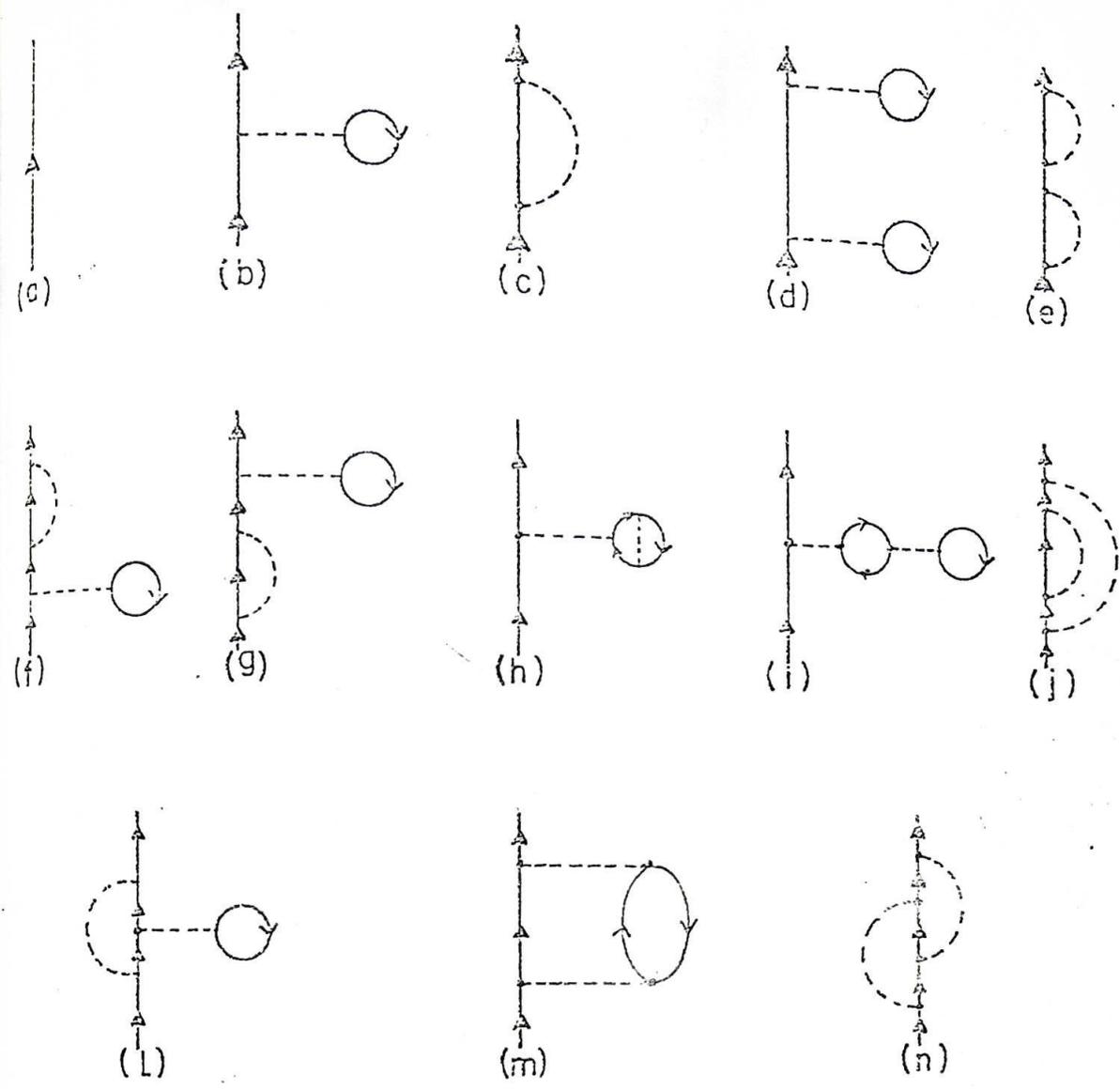


FIGURA 2

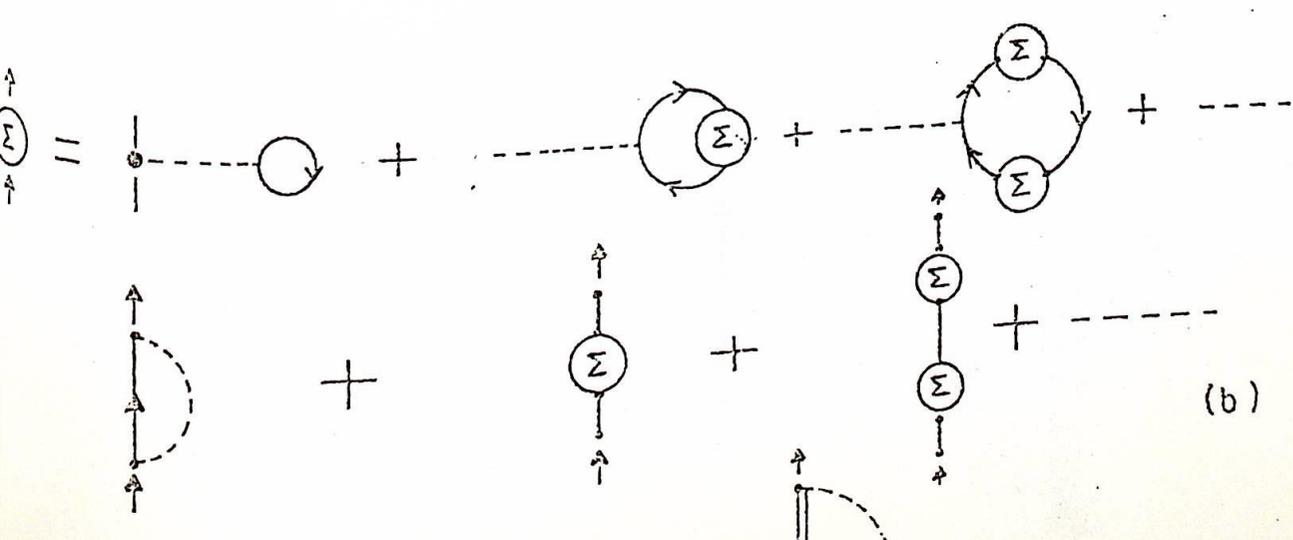
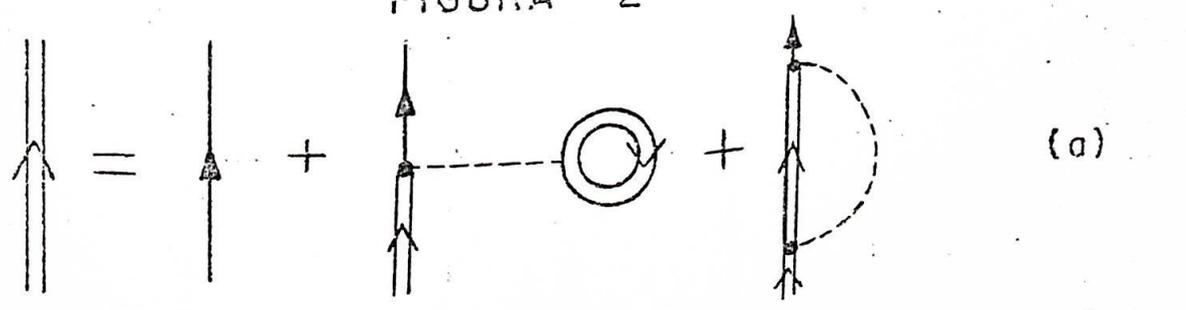


FIGURA 3

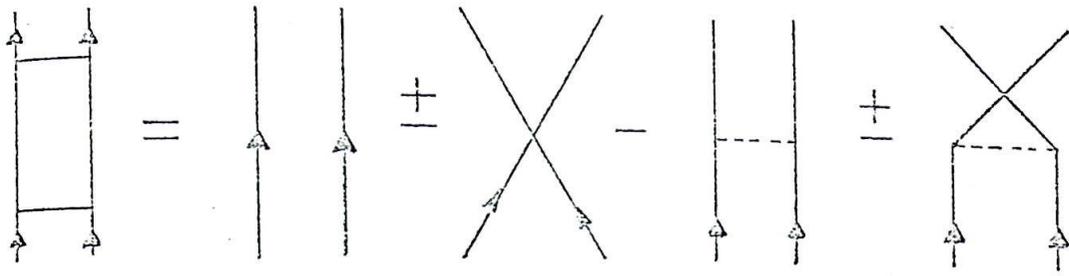
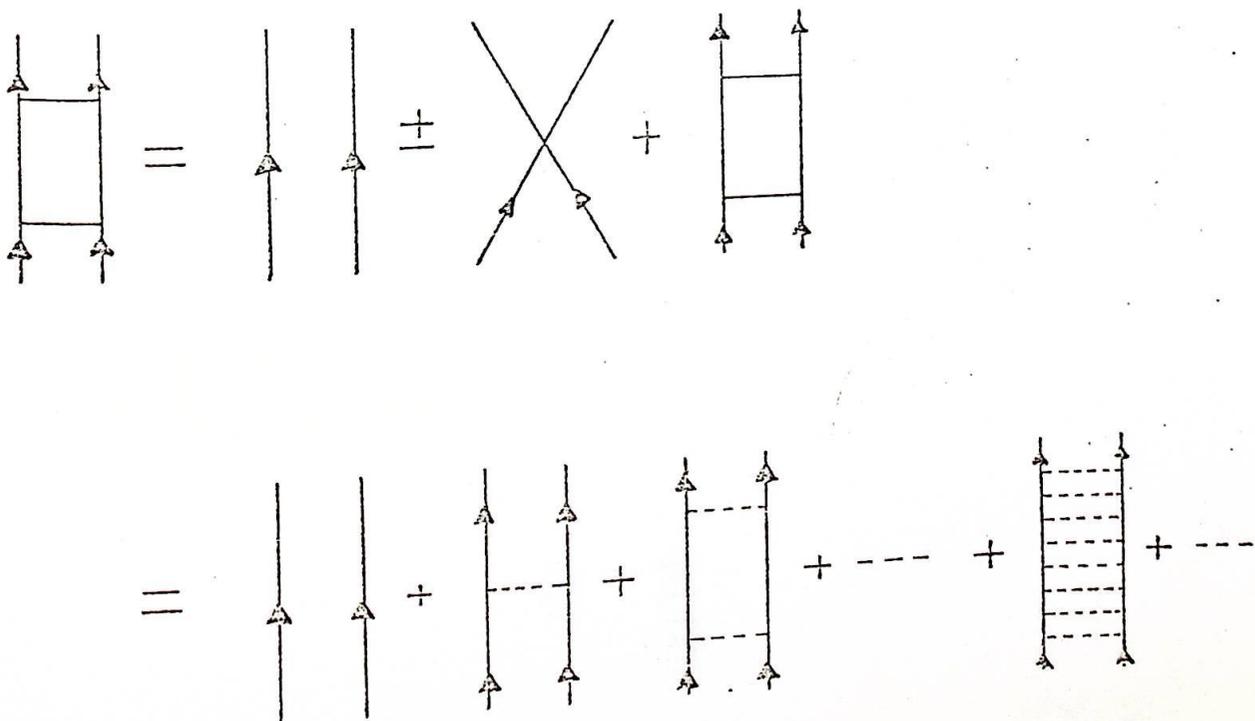


FIGURA 4



† (Termos 1 ↔ 2)

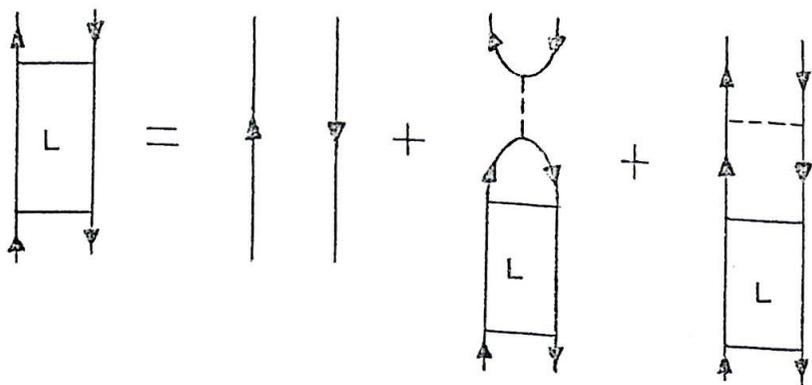


FIGURA 5

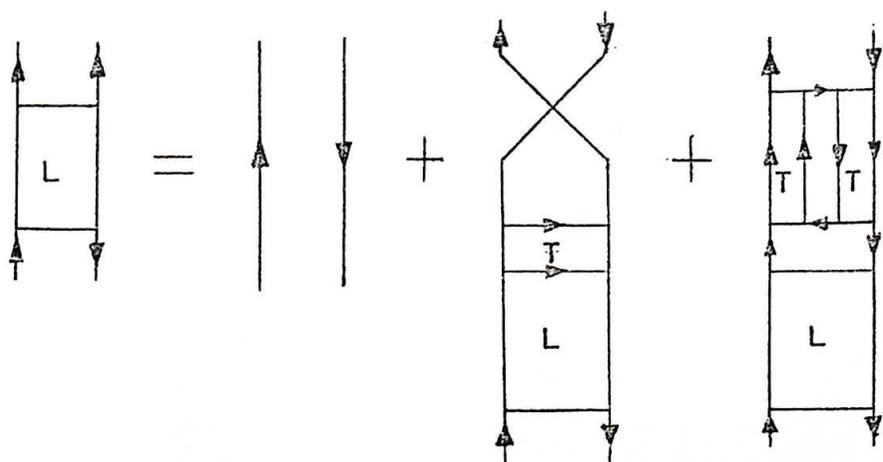


FIGURA 6

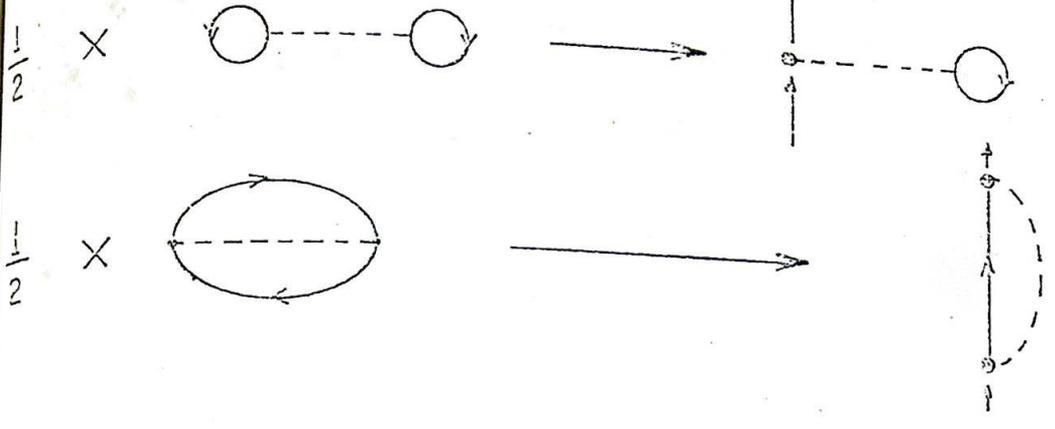


FIGURA 8

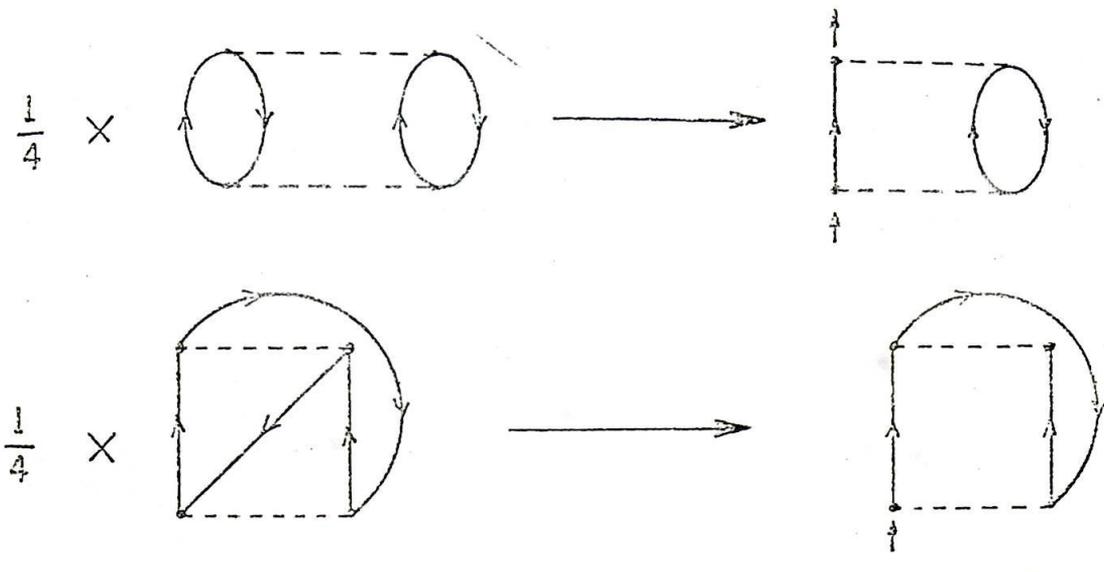


FIGURA 9

