2
Método da Equação de Dyson para Funções de Green de Muitos Corpos

2.1 Introdução

Partindo da equação de movimento das funções de Green (FG), apresentaremos a teoria RPA autoconsistente (SCRPA) e a aproximação RPA renormalizada de uma forma geral, (seções 2 , 3 e 5), dando ênfase aos aspectos de maior interesse aos propósitos do nosso trabalho. Mostraremos que esta teoria conduz a soluções auto-consistentes de um sistema fechado de equações não-lineares para funções de correlação a dois corpos e descrevemos de forma explícita os propagadores partícula-buraco (seção 3).

Na literatura este método é também conhecido como método da equação de movimento e é uma aproximação na equação de Dyson.

Para uma maior compreensão do método, uma aplicação ao modelo de Hubbard é feita para funções de correlação de carga e longitudinal de spin, na seção 4. Na seção 6 apresentamos uma regra de soma que deve ser obedecida pelas susceptibilidades de carga e de spin exatas. Esta regra é também obedecida pelas aproximções descritas nesta tese. No próximo capítulo, uma apresentação e discussão dos resultados é feita onde as vantagens e limitações da teoria serão apresentados.

2.2 Approach da equação de Dyson para funções de Green de muitos corpos[4]

Partimos da definição das funções de Green (FG) causal ou retardada de muitos corpos na temperatura zero, ($T = 0K$) e no equilíbrio,

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}^{c}_{AB}(t,t') &\equiv \langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^{c} \\
&= -i\,\langle 0|T_{\epsilon} A(t)\, B(t')|0\rangle \\
\mathcal{G}^{\mathrm{ret}}_{AB}(t,t') &\equiv \langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^{\mathrm{ret}} \\
&= -i\theta(t-t')\,\langle 0|[A(t), B(t')]_{-\epsilon}|0\rangle \qquad (2.1)
\end{aligned}$$

onde $|0\rangle$ é o estado fundamental exato e T_{ϵ}, o operador ordenamento temporal de Wick. $[A,B]_{-\epsilon} = AB - \epsilon BA$; para operadores A e B fermiônicos, usa-se a FG com o anti-comutador ($\epsilon = -1$), para operadores bosônicos usa-se o comutador ($\epsilon = +1$).

$A(t)$ e $B(t)$ são operadores arbitrários construídos de um número qualquer de operadores de criação e/ou aniquilação de bósons ou férmions ou ambos. $A(t)$ e $B(t)$ podem depender de um ou vários índices, e a notação $\langle\langle A; B\rangle\rangle$ é aqui considerada como uma abreviação para a função de Green matricial $\langle\langle A_\alpha; B_\beta\rangle\rangle$, onde α e β correspondem a um conjunto de números quânticos ou componentes. Os operadores A e B podem também representar operadores de spin. Para dedução da equação de Dyson, escolheremos $B = A^+$.

A dependência temporal é dada na representação de Heisenberg,

$$\chi(t) = e^{iHt}\chi e^{-iHt}$$

onde a hamiltoniana, H, é completamente geral e descreve sistemas fermiônicos, bosônicos ou de spin relativístico ou não relativístico ou outro qualquer, desde que o operador hamiltoniano exista. Nesta tese faremos $\hbar = 1$.

Para sistemas em equilíbrio as funções de Green dependem dos tempos t e t' através da diferença $t - t'$, i.é:

$$\langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^c = \langle\langle A(t-t'); B(0)\rangle\rangle^c;$$

$$\langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^{\text{ret}} = \langle\langle A(t-t'); B(0)\rangle\rangle^{\text{ret}}.$$

A equação de movimento para a função de Green retardada ou para a causal, é obtida derivando-se (2.1):

$$i\partial_t\langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle = \delta(t-t')\langle[A,B]_{-\epsilon}\rangle + \langle\langle [A,H](t); B(t')\rangle\rangle. \tag{2.2}$$

Note que em (2.2), no segundo termo do lado direito aparece o comutador; este termo vem da equação de movimento obedecida por $\frac{dA}{dt}$.

Tomando a transformada de Fourier no tempo temos

$$\omega\langle\langle A; B\rangle\rangle_\omega = \langle[A,B]_{-\epsilon}\rangle + \langle\langle [A,H]; B\rangle\rangle_\omega\ , \tag{2.3}$$

Seja

$$\mathcal{N} \equiv \langle[A,B]_{-\epsilon}\rangle$$

a matriz norma que basicamente corresponde a um fator de normalização. $\langle\langle [A,H]; B\rangle\rangle$ é uma função de Green de ordem superior pois envolve explicitamente o hamiltoniano mais uma vez.

Escrevendo a função de Green sob a forma

$$\langle\langle A; B\rangle\rangle_\omega = \{\omega - \mathcal{H}_{AB}(\omega)\}^{-1}\mathcal{N}\ , \tag{2.4}$$

podemos então definir uma hamiltoniana efetiva, $\mathcal{H}_{AB}(\omega)$. De (2.3)

$$\mathcal{H}_{AB}(\omega) = \langle\langle [A, H]; B\rangle\rangle_\omega \langle\langle A; B\rangle\rangle_\omega^{-1} \ , \tag{2.5}$$

e a equação de movimento Eq.(2.3) toma a forma de uma equação de Dyson,

$$\omega\langle\langle A; B\rangle\rangle_\omega = \mathcal{N} + \mathcal{H}_{AB}(\omega)\langle\langle A; B\rangle\rangle_\omega \tag{2.6}$$

onde o produto do lado direito das equações Eq.(2.5) e Eq.(2.6) eventualmente deve ser entendido como produto matricial.

Levando (2.4) em (2.5) obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{AB}(\omega) &= \Big\langle\Big\langle [A, H]; B\Big\rangle\Big\rangle_\omega \mathcal{N}^{-1}\{\omega - \mathcal{H}_{AB}(\omega)\} \\ &\equiv \mathcal{H}^{I}_{AB}(\omega) - \mathcal{H}^{II}_{AB}(\omega) \end{aligned} \tag{2.7}$$

onde

$$\mathcal{H}^{I}_{AB}(\omega) \equiv \Big\langle\Big\langle [A, H]; B\Big\rangle\Big\rangle_\omega \mathcal{N}^{-1}\omega \tag{2.8a}$$

e

$$\mathcal{H}^{II}_{AB}(\omega) \equiv \Big\langle\Big\langle [A, H]; B\Big\rangle\Big\rangle_\omega \mathcal{N}^{-1}\mathcal{H}_{AB}(\omega) \ . \tag{2.8b}$$

$\mathcal{H}^{I}_{AB}(\omega)$, pode ser encontrada, em princípio, da equação de movimento para a função de Green de ordem superior, $\langle\langle [A, H]; B\rangle\rangle_\omega$:

$$\omega\Big\langle\Big\langle [A, H], B\Big\rangle\Big\rangle_\omega = \Big\langle [[A, H], B]_{-\epsilon}\Big\rangle + \Big\langle\Big\langle [A, H], [H, B]\Big\rangle\Big\rangle_\omega . \tag{2.9}$$

Considerando o operador B como A^{+}, pode-se mostrar que o único papel de $\mathcal{H}^{II}_{AB}(\omega)$ é cancelar todas as contribuições redutíveis de $\mathcal{H}^{I}_{AB}(\omega)$. Então das equações (2.8a) e (2.9), segue-se que

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{AB}(\omega) &= \left\{\Big\langle [[A, H], B]_{-\epsilon}\Big\rangle + \Big\langle\Big\langle [A, H], [H, B]\Big\rangle\Big\rangle_\omega^{\text{irr}}\right\}\mathcal{N}^{-1} \\ &\equiv \mathcal{H}^{sc}_{AB} + \mathcal{H}^{\text{res}}_{AB}(\omega) \ . \end{aligned} \tag{2.10}$$

Onde se observa que a hamiltoniana efetiva fica naturalmente dividida em duas partes, uma instantânea, $\mathcal{H}^{sc}_{AB}$, e outra, dependente de freqüência (parte dinâmica ou ressonante).

2.3 RPA auto-consistente

De forma similar à função de Green a um corpo, um propagador a campo médio generalizado a n-corpos pode ser definido ao substituir a hamiltoniana efetiva pela parte instantânea, $\mathcal{H}^{sc}_{AB}$, na solução formal das equações de Dyson, Eq.(2.4):

$$\begin{aligned} \Big\langle\Big\langle A; B\Big\rangle\Big\rangle_\omega^{sc} &= \{\omega - \mathcal{H}^{sc}_{AB}\}^{-1}\mathcal{N} \\ &= \Big\{\omega - \Big\langle [[A, H], B]_{-\epsilon}\Big\rangle \mathcal{N}^{-1}\Big\}^{-1}\mathcal{N} \ . \end{aligned} \tag{2.11}$$

Esta é a aproximação RPA autoconsistente (SCRPA). Como veremos mais adiante, esta aproximação é uma generalização da aproximação Hartree-Fock (HF).

2.4 Aplicação ao modelo de Hubbard

Como um exemplo e para melhor compreendermos o presente método, vamos derivar as expressões SCRPA para a FG partícula-buraco no modelo de Hubbard unidimensional:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \ , \tag{2.12}$$

onde $a^{+}_{i\sigma}$ e $a_{i\sigma}$ denotam os operadores de criação e destruição para um elétron com spin σ no sítio i, respectivamente e $n_{i\sigma} = a^{+}_{i\sigma} a_{i\sigma}$ é o operador número de ocupação de eletrons com spin σ no sítio i. O "hopping" t_{ij} está restrito aos vizinhos mais próximos,

$$t_{ij} = -t(\delta_{j,i+1} + \delta_{j,i-1}).$$

Consideraremos o caso $U > 0$, interação repulsiva, e trabalharemos a temperatura $T = 0$. Vamos aqui considerar $t = 1$; também a constante da rede será tomada como 1.

No espaço dos momentos, a hamiltoniana toma a forma

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k a^{+}_{k\sigma} a_{k\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{kpq} a^{+}_{k\uparrow} a_{k+q\uparrow} a^{+}_{p\downarrow} a_{p-q\downarrow} \tag{2.13}$$

com $a_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-ikr_i} a_{i\sigma}$ e analogamente para $a^{+}_{k\sigma}$, onde N é o número de sítios (ou íons) e todas as somas sobre os momentos são realizadas na primeira zona de Brillouin. A relação de dispersão na rede é dada por

$$\varepsilon_k = -2\cos k. \tag{2.14}$$

Seja o operador densidade

$$\rho_{q\sigma} = \sum_k a^{+}_{k\sigma} a_{k+q\sigma} \ . \tag{2.15}$$

que é a transformada de Fourier do operador número de ocupação $n_{i\sigma}$.

Mais adiante precisaremos da susceptibilidade de carga e a longitudinal de spin. A susceptibilidade de carga é definida por

$$\chi^{ch}(q,\omega) = \frac{1}{N} \Big\langle\Big\langle (\rho_{q\uparrow} + \rho_{q\downarrow}); (\rho^{+}_{q\uparrow} + \rho^{+}_{q\downarrow}) \Big\rangle\Big\rangle^{\text{ret}}_{\omega} \ . \tag{2.16}$$

No que segue omitiremos o super índice ret.

A transformada de Fourier da componente z do spin pode ser expressa como

$$S^z_q = \frac{1}{2}(\rho_{q\uparrow} - \rho_{q\downarrow}) \tag{2.17}$$

e a susceptibilidade longitudinal de spin é definida por

$$\chi^{sp}(q,\omega) = \frac{1}{N}\Big\langle\Big\langle S_q^z; S_q^{z+}\Big\rangle\Big\rangle_\omega$$
$$= \frac{1}{N}\Big\langle\Big\langle \frac{1}{2}(\rho_{q\uparrow} - \rho_{q\downarrow}); \frac{1}{2}(\rho_{q\uparrow}^{+} - \rho_{q\downarrow}^{+})\Big\rangle\Big\rangle_\omega \ . \tag{2.18}$$

Para derivar a aproximação SCRPA para este problema, vamos definir a seguinte FG partícula-buraco,

$$\mathcal{G}_{k\sigma p\sigma'}(q,\omega) \equiv \Big\langle\Big\langle a_{k\sigma}^{+} a_{k+q\sigma}; a_{p+q\sigma'}^{+} a_{p\sigma'}\Big\rangle\Big\rangle_\omega \ , \tag{2.19}$$

na qual usaremos $\epsilon = +1$ (comutador). Aqui então $A \equiv A_{k\sigma}(q,\omega) = a_{k\sigma}^{+} a_{k+q\sigma}$ e $B \equiv B_{p\sigma'}(q,\omega) = a_{p+q\sigma'}^{+} a_{p\sigma'}$.

A matriz norma é dada por:

$$\mathcal{N}_{k\sigma,p\sigma'}(q) = \langle [a_{k\sigma}^{+} a_{k+q\sigma}, a_{p+q\sigma'}^{+} a_{p\sigma'}]\rangle$$
$$\mathcal{N}_{k\sigma,p\sigma'}(q) = \delta_{kp}\delta_{\sigma\sigma'}(n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma}) \ , \tag{2.20}$$

onde

$$n_{k\sigma} = \langle a_{k\sigma}^{+} a_{k\sigma}\rangle \ , \tag{2.21}$$

é o número de ocupação do modo k.

Para derivar a hamiltoniana efetiva, vamos considerar a hamiltoniana de Hubbard como $H = H_0 + H_{\text{int}}$, onde H_0 é o termo cinético e H_{int} o termo de interação. No desenvolvimento que segue, usaremos a seguinte relação

$$[O_1, O_2 O_3] = O_2[O_1, O_3] + [O_1, O_2]O_3 \ . \tag{2.22}$$

Da equação (2.10), a hamiltoniana efetiva na aproximação SCRPA é definida como

$$\mathcal{H}_{k\sigma,p\sigma'}^{SC}(q) = \langle [[a_{k\sigma}^{+} a_{k+q\sigma}, (H_0 + H_{\text{int}})],\ a_{p+q\sigma'}^{+} a_{p\sigma'}]\rangle \mathcal{N}_{p\sigma',p\sigma'}^{-1}(q) \ , \tag{2.23}$$

o termo sem interação, $\mathcal{H}_{k\sigma,p\sigma'}^{SC(0)}(q)$, corresponde a considerar apenas H_0 em (2.23). Após algumas operações, obtemos

$$\mathcal{H}_{k\sigma p\sigma'}^{SC(0)}(q) = \delta_{kp}\delta_{\sigma\sigma'}(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \ . \tag{2.24}$$

Para o termo de interação, $\mathcal{H}_{k\sigma p\sigma'}^{SC(\text{int})}(q)$, a hamiltoniana efetiva toma a forma

$$\mathcal{H}_{k\sigma,p\sigma'}^{SC(\text{int})}(q) = \frac{U}{N}\sum_{k'p'q'} \langle [[a_{k\sigma}^{+} a_{k+q\sigma}, a_{k'\uparrow}^{+} a_{k'+q'\uparrow} a_{p'\downarrow}^{+} a_{p'-q'\downarrow}], a_{p+q\sigma'}^{+} a_{p\sigma'}]\rangle \mathcal{N}_{p\sigma,p\sigma'}^{-1}(q). \tag{2.25}$$

Para os cálculos que seguem, usaremos a relação (2.22). Considerando a primeira relação de comutação em (2.25), obtemos:

$$\begin{aligned}
&\left[a^{+}_{k\sigma}a_{k+q\sigma}, \sum_{k'p'q'} a^{+}_{k'\uparrow}a_{k'+q'\uparrow}a^{+}_{p'\downarrow}a_{p'-q'\downarrow}\right] \\
&= \left\{\delta_{\sigma\downarrow}\sum_{k'q'} a^{+}_{k'\uparrow}a_{k'+q'\uparrow}a^{+}_{k\downarrow}a_{k+q-q'\downarrow} - \delta_{\sigma\downarrow}\sum_{k'q'} a^{+}_{k'\uparrow}a_{k'+q'\uparrow}a^{+}_{k+q'\downarrow}a_{k+q\downarrow}\right. \\
&\left. + \delta_{\sigma\uparrow}\sum_{p'q'} a^{+}_{k\uparrow}a_{k+q+q'\uparrow}a^{+}_{p'\downarrow}a_{p'-q'\downarrow} - \delta_{\sigma\uparrow}\sum_{p'q'} a^{+}_{k-q'\uparrow}a_{k+q\uparrow}a^{+}_{p'\downarrow}a_{p'-q'\downarrow}\right\} . \qquad (2.26)
\end{aligned}$$

A seguir, vamos nomear, para o segundo comutador em (2.25) cada um dos termos provenientes da equação (2.26) por H_1, H_2, H_3 e H_4, respectivamente. Para o primeiro termo, H_1, temos:

$$\begin{aligned}
H_1 &= \frac{U}{N}\delta_{\sigma\downarrow}\sum_{k'q'}\left[a^{+}_{k'\uparrow}a_{k'+q'\uparrow}a^{+}_{k\downarrow}a_{k+q-q'\downarrow}, a^{+}_{p+q\sigma'}a_{p\sigma'}\right] \\
H_1 &= -\frac{U}{N}\delta_{\sigma\downarrow}\left[\delta_{\sigma'\uparrow}\sum_{q'} a^{+}_{p+q\uparrow}a_{p+q'\uparrow}a^{+}_{k\downarrow}a_{k+q-q'\downarrow} - \right. \\
&-\delta_{\sigma'\uparrow}\sum_{q'} a^{+}_{p+q-q'\uparrow}a_{p\uparrow}a^{+}_{k\downarrow}a_{k+q-q'\downarrow} + \delta_{\sigma'\downarrow}\delta_{kp}\sum_{k'q'} a^{+}_{k'\uparrow}a_{k'+q'\uparrow} \\
&\left.\times a^{+}_{p+q\downarrow}a_{k+q-q'\downarrow} - \delta_{\sigma'\downarrow}\sum_{k'} a^{+}_{k'\uparrow}a_{k'+k-p\uparrow}a^{+}_{k\downarrow}a_{p\downarrow}\right] ; \qquad (2.27)
\end{aligned}$$

os demais, H_2, H_3 e H_4 são dados por:

$$\begin{aligned}
H_2 &= -\frac{U}{N}\delta_{\sigma\downarrow}\sum_{k'q'}\left[a^{+}_{k'\uparrow}a_{k'+q'\uparrow}a^{+}_{k+q'\downarrow}a_{k+q\downarrow}, a^{+}_{p+q\sigma'}a_{p\sigma'}\right] \\
H_2 &= \frac{U}{N}\delta_{\sigma\downarrow}\left[\delta_{\sigma'\uparrow}\sum_{q'} a^{+}_{p+q\uparrow}a_{p+q'\uparrow}a^{+}_{k+q'\downarrow}a_{k+q\downarrow} - \right. \\
&-\delta_{\sigma'\uparrow}\sum_{q'} a^{+}_{p+q-q\uparrow}a_{p\uparrow}a^{+}_{k+q'\downarrow}a_{k+q\downarrow} + \delta_{\sigma'\downarrow}\sum_{k'} a^{+}_{k'\uparrow}a_{k'+p-k\uparrow} \\
&\left.\times a^{+}_{p+q\downarrow}a_{k+q\downarrow} - \delta_{\sigma'\downarrow}\delta_{pk}\sum_{k'q'} a^{+}_{k'\uparrow}a_{k'+q'\uparrow}a^{+}_{k+q'\downarrow}a_{p\downarrow}\right] ; \qquad (2.28)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_3 &= \frac{U}{N}\delta_{\sigma\uparrow}\sum_{p'q'}\left[a^{+}_{k\uparrow}a_{k+q+q'\uparrow}a^{+}_{p'\downarrow}a_{p'-q'\downarrow}, a^{+}_{p+q\sigma'}a_{p\sigma'}\right] \\
H_3 &= -\frac{U}{N}\delta_{\sigma\uparrow}\left[\delta_{\sigma'\uparrow}\delta_{kp}\sum_{p'q'} a^{+}_{p+q\uparrow}a_{k+q+q'\uparrow}a^{+}_{p'\downarrow}a_{p'-q'\downarrow} - \right. \\
&-\delta_{\sigma'\uparrow}\sum_{p'} a^{+}_{k\uparrow}a_{p\uparrow}a^{+}_{p'\downarrow}a_{p'-p+k\downarrow} + \delta_{\sigma'\downarrow}\sum_{q'} a^{+}_{k\uparrow}a_{k+q+q'\uparrow}a^{+}_{p+q\downarrow}a_{p-q'\downarrow} - \\
&\left. - \delta_{\sigma'\downarrow}\sum_{q'} a^{+}_{k\uparrow}a_{k+q+q'\uparrow}a^{+}_{p+q+q'\downarrow}a_{p\downarrow}\right] ; \qquad (2.29)
\end{aligned}$$

$$H_4 = -\frac{U}{N}\delta_{\sigma\uparrow}\sum_{p'q'}\left[a^+_{k-q'\uparrow}a_{k+q\uparrow}a^+_{p'\downarrow}a_{p'-q'\downarrow}, a^+_{p+q\sigma'}a_{p\sigma'}\right]$$

$$H_4 = \frac{U}{N}\delta_{\sigma\uparrow}\left[\delta_{\sigma'\uparrow}\sum_{p'}a^+_{p+q\uparrow}a_{k+q\uparrow}a^+_{p'\downarrow}a_{p'-k+p\downarrow} - \right.$$
$$-\delta_{\sigma'\uparrow}\delta_{pk}\sum_{p'q'}a^+_{k-q'\uparrow}a_{p\uparrow}a^+_{p'\downarrow}a_{p'-q'\downarrow} + \delta_{\sigma'\downarrow}\sum_{q'}a^+_{k-q'\uparrow}a_{k+q\uparrow}a^+_{p+q\downarrow}a_{p-q'\downarrow} -$$
$$\left. - \delta_{\sigma'\downarrow}\sum_{q'}a^+_{k-q'\uparrow}a_{k+q\uparrow}a^+_{p+q+q'\downarrow}a_{p\downarrow}\right] \quad . \tag{2.30}$$

Agrupando todos os termos das equações (2.27), (2.28), (2.29) e (2.30) que envolvem $\delta_{\sigma\uparrow}\delta_{\sigma'\uparrow}\delta_{kp}$ e $\delta_{\sigma\downarrow}\delta_{\sigma'\downarrow}\delta_{kp}$ chegamos a

$$-\frac{U}{N}\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{kp}\sum_{q'}(a^+_{p+q-q',\sigma}a_{p,\sigma} + a^+_{p+q\sigma}a_{p+q'\sigma})\rho_{q-q',-\sigma} \tag{2.31}$$

Termos semelhantes mas sem δ_{kp} fornecem

$$\frac{U}{N}\delta_{\sigma,\sigma'}(a^+_{k\sigma}a_{p\sigma}\rho_{-p+k,-\sigma} + a^+_{p+q\sigma}a_{k+q\sigma}\rho_{-k+p,-\sigma}) \tag{2.32}$$

Os demais termos dão

$$\frac{U}{N}\delta_{\sigma,\sigma'}\sum_{q'}(a^+_{k,\sigma}a_{k+q-q',\sigma} - a^+_{k+q',\sigma}a_{k+q,\sigma})(a^+_{p+q-q',-\sigma}a_{p,-\sigma} - a^+_{p+q,-\sigma}a_{p+q',-\sigma}) \tag{2.33}$$

Os termos (2.31), (2.32) e (2.33) permitem que (2.25) seja escrita como

$$\mathcal{H}^{SC(int)}_{k\sigma p\sigma'}(q) = -\left[\delta_{pk}\delta_{\sigma\sigma'}\frac{U}{N}\sum_{q'}\langle(a^+_{k+q-q'\sigma}a_{k\sigma} + a^+_{k+q\sigma}a_{k+q'\sigma})\rho_{q-q',-\sigma}\rangle\right.$$
$$+ \delta_{\sigma\sigma'}\frac{U}{N}\langle a^+_{k\sigma}a_{p\sigma}\rho_{k-p,-\sigma} + a^+_{p+q\sigma}a_{k+q\sigma}\rho_{p-k,-\sigma}\rangle$$
$$+ \delta_{\sigma,-\sigma}\frac{U}{N}\sum_{q'}\langle(a^+_{k\sigma}a_{k+q-q'\sigma} - a^+_{k+q'\sigma}a_{k+q\sigma})$$
$$\left.(a^+_{p+q-q',-\sigma}a_{p,-\sigma} - a^+_{p+q,-\sigma}a_{p+q',-\sigma})\rangle\right](n_{p,\sigma'} - n_{p+q,\sigma'})^{-1} \ , \tag{2.34}$$

As médias envolvendo quatro operadores podem ser transformadas em médias correlacionadas ou cumulantes[8], a partir da relação

$$\langle a^+_k a_p a^+_{k'} a_{p'}\rangle^c \equiv \langle a^+_k a_p a^+_{k'} a_{p'}\rangle - \langle a^+_k a_p\rangle\langle a^+_{k'} a_{p'}\rangle \ . \tag{2.35}$$

São estes cumulantes que ocorrem no teorema espectral (ver apêndice A) e que serão usados no processo de auto-consistência (ver mais adiante).

Com esta transformação finalmente encontramos

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}^{SC}_{k\sigma,p\sigma'}(q) &= \delta_{kp}\delta_{\sigma\sigma'}[\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k] + \delta_{\sigma-\sigma'}(n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma})\frac{U}{N} \\
&+ \Bigg[-\delta_{kp}\delta_{\sigma\sigma'}\frac{U}{N}\sum_{q'} \langle (a^+_{k+q-q'\sigma}a_{k\sigma} + a^+_{k+q\sigma}a_{k+q'\sigma})\rho_{q-q',-\sigma}\rangle^c \\
&+ \delta_{\sigma\sigma'}\frac{U}{N}\langle a^+_{k\sigma}a_{p\sigma}\rho_{k-p,-\sigma} + a^+_{p+q\sigma}a_{k+q\sigma}\rho_{p-k,-\sigma}\rangle^c \\
&+ \delta_{\sigma,-\sigma'}\frac{U}{N}\sum_{q'}\Big\langle (a^+_{k\sigma}a_{k+q-q'\sigma} \\
&- a^+_{k+q'\sigma}a_{k+q\sigma})\cdot(a^+_{p+q-q',-\sigma}a_{p,-\sigma} - a^+_{p+q,-\sigma}a_{p+q',-\sigma})\Big\rangle^c \Bigg] \cdot \\
&\cdot\ (n_{p\sigma'} - n_{p+q\sigma'})^{-1}\ . \qquad (2.36)
\end{aligned}
$$

O segundo termo do lado direito de (2.36) aparece devido à conversão dos valores médios em cumulantes.

2.5 RPA renormalizada

Vamos agora aproveitar os cálculos explicitos realizados para o modelo de Hubbard para concluir a apresentação do nosso método. Veremos também a diferença entre o método RPA auto-consistente (SCRPA) e o método RPA renormalizada, o qual será utilizado no presente trabalho.

Seja

$$\mathcal{H}^{SC}_{k\sigma,p\sigma'} = \mathcal{H}^{0}_{k\sigma,p\sigma'} + \mathcal{N}_{k\sigma k\sigma}\mathcal{K}^{SC}_{k\sigma p\sigma'}\ ,$$

Para o modelo de Hubbard, (2.36) fornece para o Kernel

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{K}^{SC}_{k\sigma p\sigma'}(q) = \delta_{\sigma-\sigma'}\frac{U}{N} \\
&+ (n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma})^{-1}\Bigg[-\delta_{kp}\delta_{\sigma\sigma'}\frac{U}{N}\sum_{q'} \langle (a^+_{k+q-q'\sigma}a_{k\sigma} + a^+_{k+q\sigma}a_{k+q'\sigma})\rho_{q-q',-\sigma'}\rangle^c \\
&+ \delta_{\sigma\sigma'}\frac{U}{N}\langle a^+_{k\sigma}a_{p\sigma}\rho_{k-p,-\sigma} + a^+_{p+q\sigma}a_{k+q\sigma}\rho_{p-k,-\sigma}\rangle^c \\
&+ \delta_{\sigma,-\sigma'}\frac{U}{N}\sum_{q'}\Big\langle (a^+_{k\sigma}a_{k+q-q'\sigma} \\
&- a^+_{k+q'\sigma}a_{k+q\sigma})\cdot(a^+_{p+q-q',-\sigma}a_{p,-\sigma} - a^+_{p+q,-\sigma}a_{p+q',-\sigma})\Big\rangle^c \Bigg] \cdot \\
&\cdot\ (n_{p\sigma'} - n_{p+q\sigma'})^{-1}\ . \qquad (2.37)
\end{aligned}
$$

Por sua vez, façamos a separação

$$\mathcal{K}^{SC}_{k\sigma,p\sigma'} = \mathcal{K}^{RPA}_{k\sigma,p\sigma'} + \mathcal{K}^{C}_{k\sigma,p\sigma'} \qquad (2.38)$$

onde

$$\mathcal{K}^{RPA}_{k\sigma,p\sigma'} = \delta_{\sigma,-\sigma'}\frac{U}{N} \qquad (2.39)$$

e

$$\mathcal{K}^{C}_{k\sigma,p\sigma'} = (n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma})^{-1} \times$$
$$\times \left[-\delta_{kp}\delta_{\sigma\sigma'}\frac{U}{N}\sum_{q'}\langle (a^{+}_{k+q-q'\sigma}a_{k\sigma} + a^{+}_{k+q\sigma}a_{k+q'\sigma})\rho_{q-q',-\sigma'}\rangle^{c} \right.$$
$$+ \delta_{\sigma\sigma'}\frac{U}{N}\langle a^{+}_{k\sigma}a_{p\sigma}\rho_{k-p,-\sigma} + a^{+}_{p+q\sigma}a_{k+q\sigma}\rho_{p-k,-\sigma}\rangle^{c}$$
$$\left. + \delta_{\sigma,-\sigma'}\frac{U}{N}\sum_{q'}\left\langle (a^{+}_{k\sigma}a_{k+q-q'\sigma} - a^{+}_{k+q'\sigma}a_{k+q\sigma})\cdot(a^{+}_{p+q-q',-\sigma}a_{p,-\sigma} - a^{+}_{p+q,-\sigma}a_{p+q',-\sigma})\right\rangle^{c}\right]$$
$$\cdot\ (n_{p\sigma'} - n_{p+q\sigma'})^{-1}\ . \tag{2.40}$$

A equação de Dyson (2.6) se escreve, em forma matricial

$$\omega\mathcal{G}^{SC}(\omega) = \mathcal{N} + \mathcal{H}^{SC}\mathcal{G}^{SC}(\omega) \tag{2.41}$$

ou

$$\omega\mathcal{G}^{SC} = \mathcal{N} + (\mathcal{H}^{0} + \mathcal{N}\mathcal{K}^{SC})\,\mathcal{G}^{SC}(\omega)$$

donde

$$(\omega - \mathcal{H}^{0})\mathcal{G}^{SC}(\omega) = \mathcal{N} + \mathcal{N}\mathcal{K}^{SC}\mathcal{G}^{SC}(\omega)$$

ou

$$\mathcal{G}^{SC}(\omega) = (\omega - \mathcal{H}^{0})^{-1}\mathcal{N} + (\omega - \mathcal{H}^{0})^{-1}\mathcal{N}\,\mathcal{K}^{SC}\mathcal{G}^{SC}(\omega) \tag{2.42}$$

Seja (ver 2.4)

$$\mathcal{G}^{0}(\omega) = (\omega - \mathcal{H}_{0})^{-1}\mathcal{N} \tag{2.43}$$

Então (2.42) se escreve

$$\mathcal{G}^{SC}(\omega) = \mathcal{G}^{0}(\omega) + \mathcal{G}^{0}(\omega)\mathcal{K}^{SC}\mathcal{G}^{SC}(\omega) \tag{2.44}$$

Se em (2.44) fizermos $\mathcal{K}^{SC} \to \mathcal{K}^{RPA}$, definimos então uma $\mathcal{G}^{RPA}(\omega)$:

$$\mathcal{G}^{RPA}(\omega) = \mathcal{G}^{0}(\omega) + \mathcal{G}^{0}(\omega)\mathcal{K}^{RPA}\mathcal{G}^{RPA}\ . \tag{2.45}$$

Nesta aproximação porém, da equação (2.41), temos que

$$\omega\mathcal{G}^{RPA} = \mathcal{N} + (\mathcal{H}^{0} + \mathcal{N}\mathcal{K}^{RPA})\mathcal{G}^{RPA}$$

$$\omega - \mathcal{N}(\mathcal{G}^{RPA})^{-1} = \mathcal{H}^{0} + \mathcal{N}\mathcal{K}^{RPA} \tag{2.46}$$

mas

$$\omega\mathcal{G}^{SC}(\omega) = \mathcal{N} + (\mathcal{H}^{0} + \mathcal{N}\mathcal{K}^{RPA} + \mathcal{N}\mathcal{K}^{C})\mathcal{G}^{SC}$$

Usando a (2.46) obtemos

$$\omega\mathcal{G}^{SC}(\omega) = \mathcal{N} + (\omega - \mathcal{N}(\mathcal{G}^{RPA})^{-1} + \mathcal{N}\mathcal{K}^{C})\mathcal{G}^{SC}$$

$$\mathcal{N}(\mathcal{G}^{RPA})^{-1}\mathcal{G}^{SC} = \mathcal{N} + \mathcal{N}\mathcal{K}^{C}\mathcal{G}^{SC}$$

donde se obtém

$$\mathcal{G}^{SC} = \mathcal{G}^{RPA} + \mathcal{G}^{RPA}\mathcal{K}^{C}\mathcal{G}^{SC} \qquad (2.47)$$

A equação (2.45) tem exatamente a forma de uma equação de Dyson onde o Kernel $\mathcal{K}^{RPA}$ faz o papel de interação. Por outro lado a equação de Dyson (2.47) mostra que conhecendo-se $\mathcal{G}^{RPA}$ podemos em princípio encontrar $\mathcal{G}^{SC}$ mas para isso temos que utilizar $\mathcal{K}^{C}$.

A aproximação SCRPA exige um esforço numérico considerável e por esta razão usaremos a aproximação mais simples, RPA renormalizada, a qual parte de (2.45) e é descrita mais adiante. Esta aproximação mais simples, entretanto, captura os aspectos essenciais relacionados à auto-consisteência.

No apêndice A (ver também referência [9]) mostramos que a FG partícula buraco ($\mathcal{G}^{SC}$ ou $\mathcal{G}^{RPA}$) permite o cálculo do número de ocupação $n_{k\sigma}$:

$$n_{k\sigma} = \langle n_\sigma \rangle - \frac{1}{\pi N}\sum_q \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega Im\, \mathcal{G}_{k\sigma k\sigma}(q,\omega) \ . \qquad (2.48)$$

Observe que de (2.43) podemos escrever, usando (2.20) e (2.24)

$$\mathcal{G}^{0}_{k\sigma,p\sigma'}(q,\omega) = \mathcal{G}^{0}_{k\sigma}(q,\omega)\,\delta_{kp}\delta_{\sigma\sigma'} \qquad (2.49)$$

com

$$\mathcal{G}^{0}_{k\sigma}(q,\omega) = \frac{(n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma})}{\omega - [\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k] + io^+}. \qquad (2.50)$$

onde introduzimos um fator de convergência no denominador, o qual deverá ir a zero no final dos cálculos.

A equação (2.45) pode ser escrita como uma equação integral em que as funções $\mathcal{G}^{RPA}_{k\sigma p\sigma}(q,\omega)$ e $\mathcal{G}^{RPA}_{k-\sigma p\sigma}(q,\omega)$ aparecem acopladas:

$$\mathcal{G}^{RPA}_{k\sigma,p\sigma'}(q,\omega) = \delta_{kp}\delta_{\sigma\sigma'}\mathcal{G}^{0}_{k\sigma}(q,\omega) + \mathcal{G}^{0}_{k\sigma}(q,\omega)\frac{U}{N}\sum_{k'}\mathcal{G}^{RPA}_{k'-\sigma,p\sigma'}(q,\omega) \ . \qquad (2.51)$$

Para desacoplar $\mathcal{G}^{RPA}_{k\sigma p\sigma}(q,\omega)$ e $\mathcal{G}^{RPA}_{k-\sigma p\sigma}(q,\omega)$, iteramos a eq.(2.51) fazendo $\sigma = \sigma'$ o que vai gerar no lado direito $\mathcal{G}^{RPA}_{k-\sigma,p\sigma}$, o qual é obtido de (2.51) com $\sigma' = -\sigma$.

$$\mathcal{G}^{RPA}_{k\sigma p\sigma} = \delta_{kp}\mathcal{G}^{0}_{k\sigma} + \mathcal{G}^{0}_{k\sigma}\frac{U}{N}\sum_{k'}\mathcal{G}^{0}_{k',-\sigma}\frac{U}{N}\sum_{k"}\mathcal{G}^{RPA}_{k"-\sigma p\sigma}$$

ou

$$\mathcal{G}^{RPA}_{k\sigma p\sigma} = \delta_{kp}\mathcal{G}^0_{k\sigma} + \mathcal{G}^0_{k\sigma} U \chi^0_{-\sigma}(q,\omega)\frac{U}{N}\sum_{k'}\mathcal{G}^{RPA}_{k'-\sigma,p\sigma} \tag{2.52}$$

onde

$$\chi^0_\sigma(q,\omega) = \frac{1}{N}\sum_k \mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega) \tag{2.53}$$

é a susceptibilidade não interagente. Somando a eq.(2.52) sobre os momentos k e rotulando de $A_{p\sigma} = \sum_k \mathcal{G}^{RPA}_{k\sigma p\sigma}$, temos

$$A_{p\sigma}(q,\omega) = \mathcal{G}^0_{p\sigma} + \chi^0_\sigma(q,\omega)U\chi^0_{-\sigma}(q,\omega)UA_{p\sigma}$$

$$A_{p\sigma}(q,\omega) = \frac{\mathcal{G}^0_{p\sigma}(q,\omega)}{1 - U\chi^0_\sigma(q,\omega)U\chi^0_{-\sigma}(q,\omega)}$$

e a eq.(2.52) toma a forma final

$$\mathcal{G}^{RPA}_{k\sigma p\sigma}(q,\omega) = \delta_{kp}\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega) + \frac{U}{N}\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)\frac{U\chi^0_{-\sigma}(q,\omega)\mathcal{G}^0_{p\sigma}(q,\omega)}{1 - U\chi^0_\sigma(q,\omega)U\chi^0_{-\sigma}(q,\omega)} \ . \tag{2.54}$$

Novamente, iterando a eq.(2.51) para $\mathcal{G}^{RPA}_{k\sigma p-\sigma}$, tem-se

$$\mathcal{G}^{RPA}_{k\sigma p-\sigma} = \mathcal{G}^0_{k\sigma}\frac{U}{N}\sum_{k'}\left(\delta_{k'p}\mathcal{G}^0_{k'-\sigma} + \mathcal{G}^0_{k'-\sigma}\frac{U}{N}\sum_{k''}\mathcal{G}^{RPA}_{k''\sigma,p-\sigma}\right)$$

ou

$$\mathcal{G}^{RPA}_{k\sigma p-\sigma} = \mathcal{G}^0_{k\sigma}\frac{U}{N}\mathcal{G}^0_{p-\sigma} + \mathcal{G}^0_{k\sigma}U\chi^0_{-\sigma}\frac{U}{N}\sum_{k'}\mathcal{G}^{RPA}_{k'\sigma,p-\sigma} \ .$$

Somando sobre os momentos k e procedendo de forma análoga ao caso anterior, tem-se

$$\mathcal{G}^{RPA}_{k\sigma,p-\sigma}(q,\omega) = \frac{\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)\frac{U}{N}\mathcal{G}^0_{p,-\sigma}(q,\omega)}{1 - U\chi^0_\sigma U\chi^0_{-\sigma}} \ . \tag{2.55}$$

Estamos agora em condições de explicar o método RPA renormalizado: partindo de uma distribuição inicial para os $n_{k\sigma}$ – por exemplo a função degrau de Fermi-Dirac – calculamos $\mathcal{G}_0$ por (2.50). Dai temos χ^0_σ em (2.53) e $\mathcal{G}^{RPA}$ por (2.54) e (2.55). A autoconsistência consiste em encontrar novos $n_{k\sigma}$ usando $\mathcal{G}^{RPA}$ em (2.48) e assim reiniciarmos o ciclo até que se atinja, dentro de certa precisão, a convergência. Observe que, por este procedimento, mesmo $\mathcal{G}^0$ e χ^0_σ dependem da interação através dos novos $n_{k\sigma}$.

Esta autoconsistência melhora consideravelmente a RPA convencional, pois esta considera apenas os n_k iniciais, isto é, os dados pela distribuição de Fermi-Dirac.

De (2.16)

$$\begin{aligned}
\chi^{ch}(q,\omega) &= \frac{1}{N}\sum_{\substack{k\sigma\\p\sigma'}} \langle\langle a^+_{k\sigma}a_{k+q\sigma}\ ;\ a^+_{p+q\sigma'}a_{p\sigma'}\rangle\rangle_\omega \\
&= \frac{1}{N}\sum_{\substack{k\sigma\\p\sigma'}} \mathcal{G}_{k\sigma,p\sigma'}(q,\omega) = \\
&= \frac{1}{N}\sum_{\substack{kp\\\sigma}} (\mathcal{G}_{k\sigma,p\sigma}(q,\omega)+\mathcal{G}_{k\sigma,p-\sigma}(q,\omega))
\end{aligned} \tag{2.56}$$

Na aproximação RPA e na fase paramagnética ($n_{k\uparrow}=n_{k\downarrow} \therefore \chi^0_\uparrow=\chi^0_\downarrow\equiv\chi^0$), substituindo (2.54) e (2.55) em (2.56) encontramos

$$\chi^{ch}(q,\omega) = \frac{2\chi^0}{1-U\chi^0}\ . \tag{2.57}$$

Usando um procedimento análogo para a susceptibilidade longitudinal de spin obtemos

$$\chi^{sp}(q,\omega) = \frac{\frac{1}{2}\chi^0(q,\omega)}{1+U\chi^0(q,\omega)}\ . \tag{2.58}$$

Note que mantivemos a forma utilizada por Schuck *et al.*[4] cuja definição de $\mathcal{G}^0$ é o negativo da expressão que se usa convencionalmente na literatura. Daí os sinais trocados nos denominadores de (2.57) e (2.58).

2.6 Regra de soma

Como o operador densidade $\rho_{q\sigma}$ comuta com o termo da interação da hamiltoniana de Hubbard, podemos estabelecer uma forma mais simples para a regra de soma para as susceptibilidades de carga $\chi^{ch}(q,\omega)$ e spin $\chi^{sp}(q,\omega)$. Assim, o duplo comutador $\langle[[\rho_{q\sigma},H],\rho^+_{q\sigma'}]\rangle$ fornece

$$\begin{aligned}
\langle[[\rho_{q\sigma},H],\rho^+_{q\sigma'}]\rangle &= \delta_{\sigma\sigma'}\sum_k[\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k](n_{k\sigma}-n_{k+q\sigma}) \\
&= \quad \delta_{\sigma\sigma'}2(\cos q-1)\sum_k \varepsilon_k n_{k\sigma}\ .
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Somente o termo livre da hamiltoniana de Hubbard, eq.(2.13), contribui para o duplo comutador. Mas, do teorema espectral (ver Apêndice A) para a FG de ordem mais alta $\langle\langle[\rho_{k\sigma},H\rangle\rangle;\rho^+_{q\sigma}\rangle\rangle$, se obtém a forma geral da regra de soma:

$$\langle[[\rho_{q\sigma},H],\rho^+_{q\sigma'}]\rangle = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\omega Im\langle\langle\rho_{q\sigma};\rho^+_{q\sigma}\rangle\rangle_\omega, \tag{2.60}$$

a qual assume uma forma mais simples quando usamos (2.59): somando (2.60) sobre σ e σ' e usando a definição (2.16) chegamos a

$$2(\cos q-1)\langle\varepsilon_c\rangle = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\omega Im\chi^{ch}(\mathbf{q},\omega), \tag{2.61a}$$

Analogamente

$$\frac{1}{2}(\cos q - 1)\langle\varepsilon_c\rangle = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\omega Im\chi^{sp}(\mathbf{q},\omega), \tag{2.61b}$$

onde

$$\langle\varepsilon_c\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\sigma}\varepsilon_{\mathbf{k}}n_{\mathbf{k}\sigma} \tag{2.62}$$

é a energia cinética média por sítio. Como $\langle\varepsilon_c\rangle$ depende do número de ocupação, implicitamente, esta energia passa a depender da função de Green.

Tanto a versão RPA renormalizada quanto a SCRPA satisfazem esta regra de soma mas a RPA convencional não, como veremos no próximo capítulo.

No capítulo subseqüente, apresentaremos os resultados da RPA renormalizada referentes ao modelo de Hubbard, dando ênfase aqueles de maior interesse aos nossos propósitos.