

"A TEORIA DE BRUECKNER-GOLDSTONE RENORMALIZADA
NO TRATAMENTO DE NÚCLEOS DE CAMADA FECHADA"

SBI-IFUSP



305M810T0439

CORACI P. MALTA



SÃO PAULO - 1979

RESUMO

Mostra-se a impossibilidade de se descrever o estado fundamental de núcleos de camada fechada fazendo-se uso somente dos termos de 1^a ordem da expansão de Brueckner-Goldstone mesmo quando renormalizada.

ABSTRACT

The two-body cluster approximation of the Brueckner-Goldstone expansion is shown not to provide a good description for the ground-state energy of closed shell nuclei even when a self-energy renormalization of that expansion is performed.

Agradecimentos

Meus sinceros agradecimentos ao professor J.V. de Passos pelas inúmeras e frutíferas discussões e valiosa colaboração. Agradeço também ao professor Peter U. Sauer pelas discussões proveitosa durante a minha estadia na Universidade de Hannover.

"... I derive from the celestial phenomena the forces of gravity with which bodies tend to the sun and the several planets. Then from these forces, by other propositions which are also mathematical, I deduce the motions of the planets, the comets, the moon, and the sea. I wish we could derive the rest of the phenomena of Nature by the same kind of reasoning from mechanical principles, for I am induced by many reasons to suspect that they may all depend upon certain forces by which the particles of bodies, by some causes hitherto unknown, are either mutually impelled towards one another, and cohere in regular figures, or are repelled and recede from one another. These forces being unknown, philosophers have hitherto attempted the search of Nature in vain; but I hope the principles here laid down will afford some light either to this or some truer method of philosophy."

Sir Isaac Newton, "Mathematical Principles of Natural Philosophy", preface to the first edition.

I N D I C E

Introdução	01.
Capítulo 1 - Expansão de Goldstone	15.
Teoria de Hartree-Fock	21.
Teoria de Brueckner-Goldstone	22.
Capítulo 2 - Propagadores de partícula independente	26.
Capítulo 3 - Processo de renormalização e funcional de BHFR	32.
Capítulo 4 - Funcional de BHFND	42.
Capítulo 5 - Discussão e Conclusões	58.
Apêndice A - Base bi ortonormal com $\langle p b \rangle = 0$	66.
Apêndice B - Variação do funcional E_{BHFND}	68.
Apêndice C - Expansão de Goldstone para H_0 não hermitiano	74.
Apêndice D - Cálculo dos polos do termo 	77.
Referências	79.

Introdução

O tratamento completo de sistemas nucleares constitui uma tarefa quase impossível pois requer a solução do problema de muitos corpos bem como a determinação da hamiltoniana que descreve o sistema de muitos corpos. Confrontados com tarefa tão formidável, seguindo o procedimento usual em física, foram desenvolvidos vários modelos para a descrição de sistemas nucleares.

Vamos, inicialmente, apresentar um breve resumo histórico do aparecimento dos modelos nucleares.

A concentração de cargas positivas (prótons) no centro do átomo, denominada núcleo atômico, foi comprovada em 1911 pela famosa experiência de Rutherford (Ru 11) de espalhamento de partículas alfa por ouro. Medidas realizadas por Thomson (Th 13) em 1913 mostraram que a massa do núcleo não é determinada por sua carga, o que indica não ser o núcleo constituído somente de prótons. Sendo a massa do núcleo aproximadamente igual ao dobro da massa de prótons, foi sugerido que o núcleo atômico fosse constituído de prótons e elétrons. Um marco decisivo no desenvolvimento da física nuclear foi a descoberta do nêutron, em 1932, por Curie-Joliot (Jo 32) e Chadwick (Ch 32). A existência de nêutrons no núcleo foi sugerida pela primeira vez em 1922, por Harkins (Ha 22), mas naquela ocasião não passou de mera especulação. Em 1927, medidas de massas efetuadas por Aston (As 27) mostraram que a energia de ligação do núcleo é proporcional ao número de partículas constituintes do mesmo; em 1931 Ehrenfest e Oppenheimer (Eh 31) demonstraram que os núcleos atômicos obedecem seja a estatística de Fermi-Dirac seja a de Bose-Einstein, isso dependendo do número de férmons no núcleo ser ímpar ou par, respectivamente (nessa demonstração o núcleo era considerado constituído de prótons e elétrons). E o princípio de exclusão de Pauli (Pa 33) foi proposto em 1933.

Entre 1932 e 1940, foram estabelecidas as características gerais (para energias baixas) da força nuclear de dois corpos, bem como vários modelos para a descrição do núcleo atômico. O caráter de saturação da força nuclear foi mostrado por Heisenberg (He 32)

no mesmo trabalho em que foi proposta a composição do núcleo por nêutrons e prótons. Em 1933, Wigner (Wi 33) mostrou que a força nuclear é forte em comparação com os outros tipos de força e é de curto alcance. Em 1935, Thomas (To 35) mostrou que a força nuclear não pode ter alcance nulo pois isso ocasionaria uma energia de ligação demasiadamente grande para o tritio. O caráter de troca da força nuclear foi estabelecido em 1933 (He 32, Ma 33). A dependência de spin da força nuclear foi sugerida por Wigner a Bethe e Bacher em comunicação particular (Be 36, pag. 117). A independência de carga foi proposta por Breit e Wigner (Br 36) em 1936. Nessa mesma época, Condon e Cassen (Ca 36) desenvolveram o formalismo de spin isotópico, o que permitiu tratar nêutron e próton como estados distintos de uma mesma partícula, fato fortemente sugerido pelo processo de decaimento beta. Na década de 40 a 50, tornou-se generalizado o uso da palavra nucleon para designar indiferentemente nêutron ou próton. É interessante notar que o spin isotópico já havia sido introduzido em 1932 por Heisenberg (He 32). A primeira teoria sobre a origem da força nuclear foi proposta em 1935 por Yukawa (Yu 35) que, em analogia com o modelo de Fermi para o decaimento beta, postulou a existência de mésons que seriam trocados entre os constituintes do núcleo interagindo entre si.

Entre 1939 e 1940, foram efetuadas medidas (Ke 39, Ke 40) do momento de quadrupolo do déuteron e os resultados, diferentes de zero, mostraram que a força nuclear deve ter uma componente tensorial.

Paralelamente a essa investigação das características gerais das forças nucleares de dois corpos, em baixas energias, foram também lançados os principais modelos para a descrição dos sistemas nucleares de muitas partículas. A hipótese de Bohr (Bo 36) sobre a formação de núcleo composto em reações nucleares foi apresentada em 1936. Já em 1936 e 1937, foram publicadas extensas revisões gerais sobre a estrutura de sistemas nucleares e reações nucleares por Bethe e Bacher (Be 36) e Bethe (Be 37), respectivamente.

A existência de números mágicos para os sistemas nucleares foi sugerido pela primeira vez em 1933 por Elsasser (El 33). Cálculos para os núcleos de camadas fechadas mais leves (^4He , ^{16}O e ^{40}Ca) foram feitos por Heisenberg (He 35) em 1935, na aproximação de Hartree (Hr 28). Estava, então, já em 1935, praticamente estabelecido o modelo de partícula independente para núcleos atômicos, o qual supõe que os componentes do núcleo se movem independentemente num poço de potencial. O melhor potencial de um corpo é, sem dúvida, aquele resultante de um cálculo auto-consistente e o primeiro cálculo desse tipo foi realizado para o ^4He , em 1938, por Matricon (Mt 38).

Tratamentos do núcleo em termos de subunidades (tais como partículas α) foram feitos a partir de 1933 (La 33) e, em particular, o modelo do grupo ressonante foi proposto em 1937 por Wheeler (Wh 37). A fórmula de massa de Weizsäcker (Wz 35) foi apresentada em 1935 e o modelo da gota líquida, em 1937, por Bohr e Kalckar (Bo 37). Nesse mesmo ano, foram realizados por Euler (Eu 37) os primeiros cálculos utilizando o modelo da matéria nuclear (sistema infinito, de densidade finita, com igual número de nêutrons e prótons, sem interação coulombiana).

A importância de forças de três corpos foi mostrada em 1939 por Janossy (Ja 39) e também por Primakoff e Holstein (Pr 39).

Por volta de 1940 temos, então, a física nuclear praticamente consolidada. É realmente espantoso o que se produziu num período de 15 anos após o estabelecimento da mecânica quântica.

Cálculos extensos usando o modelo de camadas foram realizados em 1948 e 1949 e ficou estabelecida a validade da aproximação de partícula independente, fato considerado surpreendente na época pois era difícil entender como isso poderia ser possível sendo a interação nuclear uma interação forte. A justificativa da validade dessa aproximação foi apresentada em 1958, para o modelo da matéria nuclear, no famoso trabalho de Gomes, Walecka e Weisskopf (Go 58). Eles mostraram que na matéria nuclear os nucleons se movem quase livremente pois somente para distâncias de separação me-

nores que 1,0 fm é que existem correlações de duas partículas. Como a distância média de separação de dois nucleons na matéria nuclear é de aproximadamente 1,66 fm e, portanto, bem maior que a distância máxima para a qual há correlações de dois corpos, conclui-se que correlações de três ou mais corpos devem ser pouco importantes.

Entre 1949 e 1951, foram efetuadas medidas, em energias mais altas, de defasagens para espalhamentos próton-próton por Cork (Co 50), Panofsky (Pa 50) e Chamberlain (Ch 50) e nêutron-próton por Brueckner (Bk 49), Hadler (Hd 49), Kelly e Segré (Ky 50) e Wallace (Wa 51). A análise desses dados experimentais mostraram que a força nuclear deve ter um caroço fortemente repulsivo de raio aproximadamente 0,6 fm (Jastrow, Jt 50, e Jt 51) ou então um termo dependente da velocidade (termo de acoplamento spin - órbita) (Case e Pais, Cs 50).

Medidas de momento de quadrupolo elétrico dos núcleos atômicos (Fe 49) mostraram que o modelo de partícula independente não é válido para sistemas com muitos nucleons fora da camada fechada. Para tais sistemas, os valores experimentais dos momentos de quadrupolo elétrico são ordens de grandeza maiores do que os valores obtidos no modelo de partícula independente, o que constitui forte indício da existência de estados altamente correlacionados para esses sistemas. Rainwater (Rw 50) sugeriu, em 1950, que os nucleons fora da camada fechada produziriam a deformação do sistema como um todo e o momento de quadrupolo resultaria então da deformação coletiva de várias órbitas. Na década dos 50, esse modelo foi desenvolvido e expandido por Bohr, Mottelson e Nilsson, culminando com o chamado modelo unificado que descreve de maneira unificada propriedades coletivas e de partícula independente (Bo 52, Bo 53). As partículas fora da camada fechada (que constitui o caroço nuclear) movem-se num potencial deformado, sendo a deformação do potencial determinada por elas mesmas. O cálculo de modelo de camadas para o caso de potencial elipsoidal foi desenvolvido em 1955 por Nilsson (Ni 55).

Nessa mesma época, apareceu o modelo da coordenada geradora, devido a Griffin, Hill e Wheeler (Hi 53, Gr 57), também para a

descrição de modos coletivos nucleares, porém com um ponto de vista diverso daquele do modelo unificado.

A primeira teoria geral para o tratamento do problema de muitos corpos, para potencial nuclear com caroço repulsivo, baseada na teoria de perturbação, foi desenvolvida, no caso da matéria nuclear (ou núcleos mágicos), de 1954 a 1955 por Brueckner e colaboradores (Bk 54, Bk 55) e generalizada por Goldstone (Gd 57) e Hugenholtz (Hu 57) independentemente em 1957.

Quanto à importância de forças de três ou mais corpos para sistemas nucleares de muitos corpos, após o trabalho de Primakoff e Holstein (Pr 39), foi proposto em 1957, por Fujita e Miyazawa (Fu 57), um potencial de três corpos resultante da troca de dois pions entre os três nucleons. Entre as forças de três corpos, essa é a que até hoje tem recebido maior atenção, o que é natural, uma vez que entre elas é a de maior alcance.

Por volta de 1960, temos estabelecidos não somente os modelos de estrutura nuclear mas também os modelos de reações nucleares que aqui foram muito brevemente mencionados.

Nessa mesma época, começaram a aparecer computadores mais rápidos e, em 1962, surgiu o primeiro potencial fenomenológico de dois corpos contendo os termos sugeridos pelos resultados experimentais de sistemas de dois nucleons. É o potencial estático de Hamada-Johnston (Hm 62), que contém uma barreira infinita de raio 0,4 fm sendo os seus parâmetros ajustados de modo a reproduzir os resultados do deuteron e as defasagens do espalhamento de dois nucleons até a energia de 315 MeV.

A partir de 1962, a principal atividade em física nuclear tem consistido na articulação do paradigma estabelecido (Ku 62, Ea 73), articulação essa que consiste em cálculos cada vez mais extensos e sofisticados utilizando os vários modelos existentes. Esses cálculos, por sua vez, certamente conduziram a refinamentos da teoria mas não se pode dizer que se tenha chegado a algum resultado revolucionário desde aquele época até o dia de hoje.

Os modelos nucleares podem ser classificados em microscópicos e fenomenológicos, sendo sempre não relativísticos o que constitui muito boa aproximação desde que as energias envolvidas sejam pequenas comparadas à energia de repouso do sistema.

Os modelos nucleares microscópicos são aqueles que pretendem descrever os sistemas nucleares a partir da interação entre os nucleons constituintes dos mesmos, sendo essa interação a interação entre os nucleons livres, isto é, a interação que existiria entre os nucleons interagentes se o resto dos nucleons não estivessem presentes. A partir dessa hipótese, todas as propriedades dos sistemas nucleares, pelo menos em princípio, poderiam ser descritas, fossem elas propriedades de caráter coletivo ou de partícula independente.

A característica principal dos modelos microscópicos é a utilização do menor número possível de informação experimental para descrever sistemas nucleares. Os modelos fenomenológicos, por outro lado, são aqueles que visam descrever apenas algumas propriedades dos sistemas nucleares e envolvem parâmetros que são determinados a partir de dados experimentais para o sistema em questão e não podem ser deduzidos a partir de princípios fundamentais. Portanto, os modelos fenomenológicos têm bastante limitações.

No tratamento microscópico de sistemas nucleares constituídos de muitos nucleons temos o acoplamento de dois problemas que, separadamente, são de difícil solução: (i) determinação da força entre nucleons livres, (ii) o problema de muitos corpos. Em primeira aproximação, esses problemas podem ser tratados separadamente e, dessa maneira, a partir de certas propriedades gerais das forças entre nucleons, foram desenvolvidos métodos (aproximados) para a solução do problema de muitos corpos. Os métodos são em geral perturbativos e baseiam-se na aproximação de partícula independente, ou seja, supõe-se a hamiltoniana do sistema nuclear constituída de um termo de partícula independente, H_0 (energia cinética + potencial de um corpo), e um termo de interação, H_1 , que é tratado perturbativamente. Os resultados desses métodos são

independentes de H_0 na medida em que se considere a expansão perturbativa completa. Entretanto, como estaremos interessados em considerar somente os termos de ordem mais baixa na perturbação H_1 , devemos escolher H_0 de modo a tornar H_1 o menor possível. Tal H_0 é aquele obtido a partir do princípio variacional e representa o potencial de um corpo médio resultante da interação entre os nucleons componentes do sistema. Esse particular H_0 é o potencial autoconsistente de Hartree-Fock (Fo 30). No caso atômico, o uso desse H_0 auto-consistente foi muito bem sucedido mas no caso nuclear não se espera sucesso equivalente pois, nesse caso, não existe um centro de forças definido como ocorre nos átomos. Devemos notar, que no caso da força nuclear ter singularidades, não é possível a utilização de um princípio variacional.

Como sabemos, há dois tipos de teoria de perturbação: degenerada e não degenerada. Sistemas nucleares constituidos de camadas fechadas de nucleons são descritos pela teoria de perturbação não degenerada. O sistema nuclear não degenerado mais simples é a matéria nuclear. Devido à invariança translacional de tal sistema, a base de partícula independente tem que ser ondas planas e portanto parte do problema já está resolvida de início.

O tratamento de sistemas degenerados é mais complicado e é feito considerando tal sistema como constituído do sistema não degenerado mais próximo (caroço) mais (ou menos) alguns nucleons (buracos) de valência. Para o caso de sistemas degenerados, com ± 2 nucleons fora da camada fechada, é possível calcular-se o espectro de energia considerando-se um espaço modelo e introduzindo-se operadores efetivos tais que os valores esperados desses operadores efetivos, no espaço modelo, sejam iguais aos valores esperados dos operadores correspondentes, no espaço todo. Os operadores efetivos são dados por séries infinitas em termos dos operadores correspondentes e, indubitavelmente, a particular escolha do espaço modelo é importante para que as expansões para os operadores efetivos converjam rapidamente de modo a se poder considerar somente os primeiros termos dessas expansões (Mf 67).

Não somente os modos de partícula independente, como também os modos coletivos, podem ser descritos microscopicamente .

Vibrações nucleares, por exemplo, podem ser descritas em termos de excitações partícula-buraco (orbital desocupado) como é o caso dos métodos RPA[†] (Bm 49 e Bm 53, An 58) Tamm-Dancoff (Tm 45 e Df 50). O modelo de Hartree-Fock dependente do tempo (Fr 57, Vi 77, Ba 78) é outro modelo adequado para a descrição de modos coletivos, também baseado no modelo de partícula independente, da mesma maneira que o modelo da coordenada geradora de Griffin-Hill-Wheeler (Hi 53, Gr 57, Wo 74). Nesse método da coordenada geradora, modos coletivos são superpostos às funções de onda de muitos corpos do modelo de camadas; o método é baseado em um princípio variacional, sendo a superposição mencionada obtida através da variação de certos parâmetros adequados utilizados para caracterizar as funções de onda de partícula independente. São esses parâmetros variacionais que recebem a denominação de coordenadas geradoras, uma vez que de certa maneira geram o movimento coletivo (desde que adequadamente escolhidos). Nesse método, não são introduzidas variáveis coletivas dinâmicas como no caso do modelo unificado de Bohr-Mottelson mas, embora não existam variáveis coletivas dinâmicas, existe uma subestrutura de operadores que descrevem movimentos coletivos médios induzidos por mudanças nas coordenadas geradoras.

Um tratamento recente, bastante promissor, de sistemas de muitos corpos, é aquele proposto por Amaral (Am 78) no qual o sistema é descrito em termos de uma routhiana ao invés de uma hamiltoniana. Parte das coordenadas são tratadas como parâmetros, sendo que para essa parte a routhiana funciona como lagrangiana e para o resto (variáveis) como hamiltoniana. O sistema é então descrito por equações de Schrödinger e Lagrange acopladas.

Esses constituem alguns dos métodos existentes para o problema de muitos corpos, métodos que requerem apenas o conhecimento da força nuclear para se descrever o sistema nuclear desejado.

Como, então determinar a força ou forças nucleares ? Tal problema é, na minha opinião, insolúvel; não será possível obter-

[†] "Random phase approximation"

-se mais do que modelos para as forças nucleares, modelos com validade restrita a certos intervalos de energia.

Há, essencialmente, dois tipos de forças nucleares de dois corpos: as chamadas forças "realísticas" que são construídas de modo a reproduzir os dados experimentais de sistemas de dois nucleons (até 300 MeV) e as forças efetivas.

Há três procedimentos distintos para a obtenção da força nuclear realística de dois corpos. O procedimento que se sugere imediatamente é o da solução do problema inverso do espalhamento (Wu 62) investigado exaustivamente, já em 1951, por Gel'fand e Levitan (Ge 51) sem, no entanto, muito sucesso. O procedimento mais utilizado é o de se parametrizar uma expressão contendo os termos adequados, sendo os parâmetros ajustados de maneira a reproduzir os resultados experimentais para sistemas de dois nucleons, no intervalo de energia considerado, de modo que os potenciais assim obtidos (Hm 62, Tb 64, Rd 68) são na realidade fenomenológicos; a expressão para o potencial não está determinada univocamente e o número de parâmetros envolvidos (30 a 50) é muito grande em comparação com o número de dados aos quais são ajustados e, além disso, não têm qualquer significado físico, o que constitui um fator muito importante contra esse tipo de potencial. Muito próximo a esse procedimento, porém com uma filosofia distinta, está aquele do grupo de Sussex (El 68 e Sa 74) que, ao invés de parametrizarem uma expressão, determinam diretamente, a partir dos resultados experimentais, os elementos de matriz do potencial nuclear na base do oscilador harmônico; o número de parâmetros é pequeno mas o número de elementos de matriz é limitado, o que poderia restringir a sua aplicabilidade. Finalmente, a maneira, considerada mais correta, é aquela que deduz o potencial nuclear a partir de teoria de campos e que constitui uma extensão da idéia de Yukawa (Yu 35) para a força nuclear: a interação nuclear é considerada resultante da troca de mesons entre os nucleons (Ez 74). Esses potenciais também tem parâmetros que são ajustados de maneira a reproduzir os dados experimentais de dois nucleons, o número de parâmetros todavia sendo muito menor que no caso dos potenciais fenomenológicos e, excetuando-se os parâmetros de corte

(que parametrizam a região mais interna da interação nuclear), esses parâmetros têm significado físico pois são as massas e constantes de acoplamento dos mesons considerados; além disso, a menos de fatores de forma (utilizados para levar em conta a estrutura dos nucleons) um tal potencial é determinado de maneira única para uma dada lagrangiana de interação meson-nucleon.

Vemos, portanto, que todos esses procedimentos envolvem ajuste aos resultados experimentais e, como os resultados experimentais não contêm todas as informações sobre a interação (por exemplo, o comportamento fora da camada de energia é desconhecido), é óbvio que permanece uma certa arbitrariedade nesses potenciais, razão pela qual considero tal problema insolúvel.

Um dado potencial nuclear só pode ser considerado aceitável se for capaz de reproduzir, em primeiro lugar, os resultados empíricos para a matéria nuclear e, em segundo lugar, os resultados experimentais para núcleos finitos.

Devemos ressaltar aqui, que o desenvolvimento da física, em geral, se processa através do teste da consistência entre os modelos correlacionados. Assim, em física nuclear, testa-se a consistência entre os modelos para a descrição de sistemas de muitos nucleons e os modelos para as forças nucleares. Esse teste é permeado pelos resultados experimentais que não são totalmente independentes de modelo, uma vez que, em geral, se mede aquilo que seja sugerido pelos próprios modelos.

Como já mencionado, a fim de se descrever o comportamento das defasagens do espalhamento nucleon-nucleon acima de 200 MeV, é necessário que o potencial nuclear contenha um termo dependente da velocidade ou um caroço fortemente repulsivo, sendo que nesse último caso torna-se impossível a utilização do método autoconsistente de Hartree-Fock para a determinação da hamiltoniana não perturbada H_0 . Esses potenciais com caroço repulsivo (Hm 62, Rd 68, Sa 74, Ue 68, Ho 75 e Ho 76) requerem a utilização da teoria de Brueckner-Goldstone (Bk 54, Bk 55, Gd 57, Ea 63, Da 67) ou outras equivalentes (Jw 55, Ct 58, Ct 60, Km 78) e o chamado método de

Brueckner-Hartree-Fock (Ba 67, Ta 68, Da 69), que aproxima a energia do estado fundamental de sistemas nucleares não degenerados pelo primeiro termo da expansão perturbativa, não provem do princípio variacional. A grande vantagem de potenciais dependentes da velocidade é que permitem a utilização do método variacional de Hartree-Fock; entretanto, o potencial de Tabakin (Tb 64), proposto em 1964, não reproduz as defasagens do espalhamento nucleon-nucleon tão bem quanto os potenciais singulares acima mencionados e, ademais, dá lugar a uma energia de ligação muito grande para a matéria nuclear, além de não ter o comportamento considerado correto na região mais externa. Um outro exemplo de potencial "realístico" não singular foi aquele inicialmente proposto pelo grupo de Sussex (El 68), potencial que, entretanto, não produzia saturação nos sistemas nucleares e, consequentemente, os cálculos de Hartree-Fock com tal potencial conduziam ao colapso (Ml 72) dos sistemas nucleares; em vista disso foi introduzido um termo com caroço repulsivo, o que conduziu à nova versão do potencial de Sussex (Sa 74).

As forças efetivas, ao contrário das forças realísticas, não são feitas para descrever sistemas de dois nucleons, e seus parâmetros são ajustados de maneira a reproduzir, em primeiro lugar, os resultados empíricos para a matéria nuclear e, em segundo lugar, um certo conjunto de núcleos finitos (em geral núcleos mágicos). A força de Skyrme (Sk 57, Va 72, Va 73) é o exemplo mais importante, sua motivação principal tendo sido levar em conta forças de mais de dois corpos. Essa força efetiva contém uma força de três corpos (forças de contato) que se reduz a uma força de contato de dois corpos, proporcional à densidade local, quando se faz a média sobre um dos nucleons. Novamente, a grande vantagem dessa força é à possibilidade de sua utilização em cálculo do tipo Hartree-Fock, tendo sido extensivamente utilizada por Brink e Vautherin há pouco tempo atrás (Va 72 e Va 73).

Um outro exemplo de interação efetiva, dependente da densidade, é aquela obtida por Negele (Ng 70) a partir da interação nucleon-nucleon (potencial de Reid, Rd 68), utilizando a aproximação de densidade local que supõe as correlações de dois corpos dentro do núcleo iguais às da matéria nuclear, com densidade igual à densidade no centro de massa dos dois nucleons interagentes.

Devemos mencionar que, a partir da expansão da matriz densidade, Negele e Vautherin (Ng 72) obtiveram expressão para a densidade de energia de núcleos mágicos a qual, para uma parametrização particular (a menos de termos de correção) se reduz à expressão para a força efetiva de Skyrme conferindo-lhe dessa maneira um caráter realístico.

Até agora mencionamos apenas forças de dois corpos e as indicações são de que elas sejam as mais importantes num sistema de muitos corpos, isso todavia não significando que as forças de três ou mais corpos sejam desprezíveis. Como já dissemos, os primeiros trabalhos apontando a importância das forças de três corpos no trítio apareceram em 1938 e 1939. A força de três corpos resultante da troca de dois pions entre três nucleons, foi proposta por Fujita e Miyazawa (Fu 57) em 1957 e, sem dúvida, é possível se obter outras forças de três corpos considerando-se trocas de outras partículas mais pesadas; entretanto, a força resultante da troca de dois pions é certamente a mais importante pois é a de maior alcance (essa afirmação pode não ser totalmente correta pois o alcance pode ser compensado pela constante de acoplamento). Quanto à contribuição dessa força para a matéria nuclear, existe no momento certa controvérsia a respeito. Para o trítio, também, não se sabe o valor exato dessa contribuição e, na realidade, todos esses cálculos têm uma grande margem de incerteza, uma vez que envolvem quantidades (como fatores de forma) que têm grande arbitrariedade de escolha.

Para sistemas de alta densidade, tais como o interior de estrelas de nêutrons, certamente forças de n corpos ($n > 3$) serão também importantes. Tentativa de avaliação da importância de forças de n ($n > 3$) corpos, em sistemas de alta densidade, foi feita por Rajaraman e McKellar (Mc 77) que concluem que, para altas densidades, ocorre a condensação de pions, não fazendo portanto mais sentido o conceito de força entre nucleons.

A consideração de forças de mais de dois corpos no tratamento dos sistemas nucleares é resultado das discrepâncias encontradas entre os resultados de cálculos teóricos, com forças de dois

corpos somente, e os resultados experimentais. Existe, certamente, a possibilidade de que essas discrepâncias sejam consequência das aproximações dos cálculos ou do nosso conhecimento incompleto da força de dois corpos, não existindo nenhum argumento fundamental para a inclusão de forças de três corpos, a não ser o fato de que, nos casos em que foi incluída, tal força melhorou o acordo com os resultados experimentais (Mc 77).

De modo geral, os resultados dos cálculos de Hartree-Fock realizados com as forças efetivas de dois corpos, dependentes da densidade (Ng 70, Va 72 e Va 73), estão em melhor acordo com os resultados experimentais do que os cálculos de Brueckner-Hartree-Fock (Ta 68, Da 69, Ml 74). Mesmo os resultados do cálculo de Brueckner-Hartree-Fock renormalizado (que leva em conta o fato de que os nucleons podem estar parte do tempo excitados) (Ca 70, Da 71) não são tão bons quanto os resultados para as interações efetivas dependentes da densidade. Os funcionais de energia nesses cálculos, como dissemos, constituem a aproximação de primeira ordem da expansão perturbativa sendo que, no caso das interações efetivas dependentes da densidade, tais funcionais derivam de um princípio variacional, o mesmo não ocorrendo no caso dos funcionais de Brueckner-Hartree-Fock ou Brueckner-Hartree-Fock renormalizado. Sem dúvida, exigindo-se que tais funcionais sejam estacionários com respeito à variação do potencial de um corpo, obter-se-á aquele potencial de um corpo para o qual o funcional de energia, até primeira ordem somente, constitui a melhor aproximação possível para a energia do estado fundamental do sistema. Isso, entretanto, certamente não garante que tal aproximação seja uma boa aproximação pois, embora a estacionariedade seja uma condição necessária para que isso ocorra, ela não é suficiente. Os estudos das propriedades de estacionariedade desses funcionais podem ainda fornecer uma relação com a teoria dependente da densidade de Negele (Ng 70). Tais estudos (Sr 75, Ml 75) mostraram que, para o caso de núcleos finitos, faz-se necessário efetuar-se uma renormalização mais completa do funcional de energia a fim de que se possa fazer uma escolha do potencial de um corpo que conduza à estacionariedade.

O objetivo do presente trabalho é obter tal funcional com renormalização mais completa, analisando os problemas que ocorrem nesse processo. O novo funcional, da mesma maneira que os funcionais de Brueckner-Hartree-Fock e Brueckner-Hartree-Fock renormalizado, já mencionados, não deriva de um princípio variacional. O estudo das propriedades de estacionaridade desse novo funcional, com relação à variação do potencial de um corpo, mostra que não é possível se escolher um potencial de um corpo para o qual o novo funcional seja estacionário, o que, na minha opinião, explica o fato de que para se obter bons resultados nos cálculos de Hartree-Fock dependente da densidade é necessário um ajuste da força efetiva (Ng 70) aos resultados da matéria nuclear.

O presente trabalho apresenta, no capítulo 1, uma breve dedução da expansão perturbativa de Goldstone para a energia do estado fundamental de sistemas não degenerados, uma vez que os funcionais mencionados são obtidos da renormalização dessa expansão. Nesse mesmo capítulo, apresentamos os funcionais de Hartree-Fock e Brueckner-Hartree-Fock. No capítulo 2, apresentamos o formalismo de função de Green (ou propagador de partícula independente) que é utilizado no processo geral de renormalização que é apresentado no capítulo 3. Nesse mesmo capítulo é obtido o funcional de Brueckner-Hartree-Fock renormalizado, sendo ainda feita uma análise breve das propriedades de estacionaridade desse funcional e do funcional de Brueckner-Hartree-Fock (Sr 75, Ml 75). No capítulo 4 é feita a dedução do funcional de Brueckner-Hartree-Fock com renormalização mais completa (para núcleos finitos), sendo ainda analisadas, nesse mesmo capítulo, as suas propriedades de estacionaridade. No capítulo 5, apresentamos uma discussão geral e conclusões.

Capítulo 1 - Expansão de Goldstone

Os funcionais de Brueckner-Hartree-Fock (BHF) são obtidos da expansão de Goldstone (Eq 63), que é a expansão perturbativa para o estado fundamental de sistemas nucleares não degenerados (núcleos mágicos ou matéria nuclear). Começaremos por uma breve exposição da expansão de Goldstone dos diagramas conexos.

Expansão de Goldstone

A hamiltoniana H para o sistema de A nucleons é a soma das energias cinéticas, T_i , e interações de dois corpos, V_{ij} :

$$H = \sum_{i=1}^A T_i + \sum_{i < j} V_{ij} . \quad (1)$$

Podemos somar e subtrair um termo de um corpo, U_i , a essa expressão e escrever H como soma de dois termos

$$H = H_0 + H_1 , \quad (2)$$

sendo H_0 o termo não perturbado:

$$H_0 = \sum_{i=1}^A (T_i + U_i) \quad (3)$$

e H_1 , o termo de perturbação, sendo

$$H_1 = \sum_{i < j} V_{ij} - \sum_i U_i . \quad (4)$$

A base de partícula independente resulta da solução da equação de autovalores para o operador de um corpo, $T+U$:

$$(T+U) |\phi_i\rangle = E_i |\phi_i\rangle . \quad (5)$$

Para um potencial U hermitiano, a base $\{\phi_i\}$ constitui um conjunto ortonormal completo.

O estado fundamental Φ_0 do sistema de A nucleons, não perturbado, solução da equação

$$H_0 \hat{\Phi}_0 = E_0 \hat{\Phi}_0 \quad , \quad (6)$$

é o determinante de Slater obtido colocando-se as A partículas nos estados ϕ_i de energia mais baixa. O nível de Fermi i_F corresponde ao maior ϵ_i e a energia não perturbada é

$$E_0 = \sum_{i \leq i_F}^A \epsilon_i$$

O estado fundamental exato (perturbado) satisfaz à equação completa

$$H \Psi = E \Psi \quad , \quad (7)$$

e a expansão de Goldstone é a expansão perturbativa para a diferença de energia $\Delta E = E - E_0$.

Utilizaremos a teoria de perturbação dependente do tempo para a qual é mais conveniente usar-se a representação de interação (Fe 71) ao invés da representação de Schrödinger. Operadores e estados na representação de interação são dados em termos dos operadores e estados na representação de Schrödinger pelas expressões ($n = 1$)

$$\hat{O}(t) = e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t}$$

$$\hat{\Psi}(t) = e^{iH_0 t} \Psi$$

Utilizando, então a teoria de perturbação dependente do tempo, temos[†]

$$\Delta E = \lim_{t \rightarrow -\infty (t-i\epsilon)} \frac{\langle \hat{\Phi}_0(t) | \hat{H}_1(t_0) \hat{T}(t_0, t) | \hat{\Phi}_0(t) \rangle}{\langle \hat{\Phi}_0(t) | \hat{T}(t_0, t) | \hat{\Phi}_0(t) \rangle} \quad , \quad (8)$$

[†] O parâmetro ϵ é introduzido para garantir que, ao ser ligada a interação, o sistema passe do estado fundamental Φ_0 para o estado fundamental perturbado Ψ_0 .

onde $\hat{T}(t_0, t)$ é o operador de evolução temporal, o qual permite obter o vetor de estado $\hat{\Psi}(t_0)$ a partir do vetor de estado $\hat{\Psi}(t)$

$$\hat{\Psi}(t_0) = \hat{T}(t_0, t) \hat{\Psi}(t).$$

O operador de evolução temporal é solução da equação

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{T}(t, t') = \hat{H}_1(t) \hat{T}(t, t') ,$$

com a condição de contorno $\hat{T}(t, t) = 1$. Essa equação pode ser resolvida iterativamente, resultando na expansão de Dyson

$$\begin{aligned} \hat{T}(t, t') &= 1 + (-i) \int_{t'}^t dt_1 \hat{H}_1(t_1) + (-i)^2 \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \hat{H}_1(t_2) \hat{H}_1(t_1) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t'}^t dt_1 \dots \int_{t'}^{t_n} dt_n P[\hat{H}_1(t_1) \dots \hat{H}_1(t_n)] , \end{aligned}$$

onde P é definido como

$$P[\hat{H}_1(t_1) \dots \hat{H}_1(t_n)] = \hat{H}_1(t_1) \hat{H}_1(t_2) \dots \hat{H}_1(t_n) ,$$

$$t_1 > t_2 > \dots > t_n .$$

A expansão para a diferença de energia ΔE é então obtida substituindo-se essa expressão para $\hat{T}(t_0, t)$ em (8). Os valores esperados que aparecem na expressão

(8) são calculados utilizando-se o formalismo de segunda quantização e fazendo-se uso do teorema de Wick (Fe 71).

Em segunda quantização, temos

$$H_i(t) = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij|V|kl\rangle a_i^\dagger(t) a_j^\dagger(t) a_k(t) a_l(t) - \sum_{ij} \langle ij|U|j\rangle a_i^\dagger(t) a_j(t) ,$$

onde

$$\langle ij|V|kl\rangle = \int \phi_i^*(1) \phi_j^*(2) V_{12} \phi_k(1) \phi_l(2) d(1) d(2)$$

e

$$\langle ij|U|j\rangle = \int \phi_i^*(1) U \phi_j(1) d(1)$$

são os elementos de matriz dos potenciais V e U .

Os operadores de criação e aniquilação estão na representação de interação e são dados por

$$a_i(t) = a_i e^{-i\epsilon_i t} ,$$

$$a_i^\dagger(t) = a_i^\dagger e^{i\epsilon_i t} ,$$

onde os operadores a_i e a_i^\dagger são os operadores na representação de Schrödinger, que satisfazem às relações de anticomutação

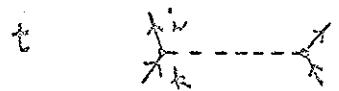
$$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = \{a_i, a_j\} = 0 ,$$

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij} .$$

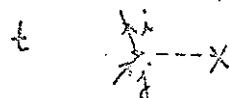
O operador a_i destroi um nucleon no estado ϕ_i , e a_i^\dagger cria um nucleon no estado ϕ_i . A destruição de uma partícula em Φ_0 equivale à criação de um buraco. De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, partículas só podem ser criadas em Φ_0 acima do nível de Fermi. O estado fundamental não perturbado Φ_0 corresponde ao vácuo de partículas e buracos uma vez que todos os níveis acima do

nível de Fermi estão desocupados, e todos os níveis abaixo ocupados.

Usando-se o teorema de Wick para calcular os valores esperados da expressão (8), obtém-se a expansão para ΔE em termos dos elementos de matriz de V e U , sendo que cada termo dessa expansão pode ser representado gráficamente por um diagrama obtido de acordo com um certo conjunto de regras, (Ea 63, Da 67), havendo uma correspondência biunívoca entre diagramas e termos da expansão. O operador de dois corpos V é representado por uma linha horizontal, no instante t , com dois vértices, e os seus elementos de matriz, $\langle ij|V|kl\rangle$, têm as linhas verticais i e j saindo de cada um desses vértices e as linhas k e l a eles chegando:



O operador de um corpo U é representado por uma linha horizontal com uma cruz e um único vértice, e os seus elementos de matriz $\langle i|U|j\rangle$ por uma linha i saindo do vértice e uma linha j a ele chegando:



As linhas que chegam e saem dos vértices representam os estados de partículas independente ϕ_i , e têm sentido de baixo para cima se o estado for de partícula (acima do nível de Fermi) e sentido de cima para baixo se o estado for de buraco.

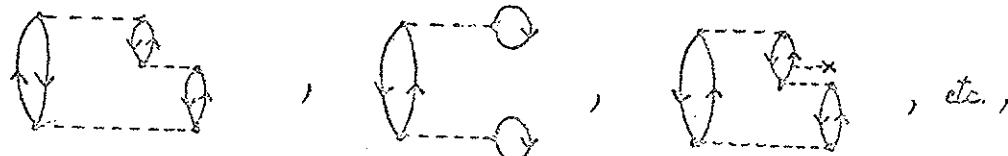
A expressão para ΔE em 1^a ordem é

$$\Delta E^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ \leq i_F}} \left[\langle ij|V|ij\rangle - \langle ij|V|ji\rangle \right] - \sum_{i \leq i_F} \langle ii|U|i\rangle ,$$

que graficamente é representada por

$$\Delta E^{(1)} = \text{Diagrama 1} + \text{Diagrama 2} - \text{Diagrama 3}$$

Os termos da expansão para ΔE podem ser classificados em dois tipos, um que corresponde a diagramas conexos, ou seja, todos os pontos ligados por linhas, como por exemplo,



e o outro a diagramas desconexos, como, por exemplo,



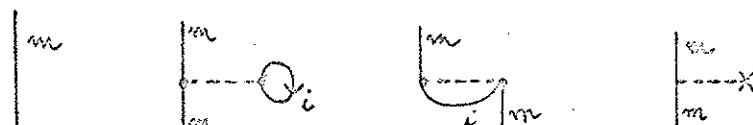
A ordem de um diagrama é dada pelo número de linhas de interação (U ou V), quer o diagrama seja conexo ou desconexo. Termos de ordem n que correspondem a diagramas desconexos vão como A^n e, portanto, tais termos são divergentes no caso da matéria nuclear. Brueckner (Bk 55a) mostrou que, até 6^a ordem, esses termos são cancelados por contratermos provenientes do denominador da expressão (8) e a grande realização de Goldstone (Gd 57) (e Hugenholtz (Hu 57)) consistiu em demonstrar isso para qualquer ordem de maneira que a separação de energia ΔE seja dada apenas pela soma dos diagramas conexos (topologicamente distintos)

$$\Delta E = \sum_n (-i)^n \frac{1}{n!} \int_{-\infty(1-i\epsilon)}^{t_0} dt_1 \dots \int_{-\infty(1-i\epsilon)}^{t_0} dt_n \langle \bar{\Phi}_0 | \mathcal{T} [\hat{H}_1(t_0) \hat{H}_1(t_1) \dots \hat{H}_1(t_n)] | \bar{\Phi}_0 \rangle_C , \quad (8')$$

onde P foi substituído pelo operador de ordenação temporal \mathcal{T} pois sendo par o número de operadores de criação e aniquilação em $H_1(t)$, esses operadores são equivalentes.

Teoria de Hartree-Fock

Dado qualquer termo da expansão de Goldstone é possível construir termos de ordem 1 unidade acima introduzindo, em qualquer linha do diagrama correspondente a tal termo, um vértice correspondente a V ou U :



No caso em que o potencial U seja o potencial autoconsistente de Hartree-Fock (H-F), U_{HF} , diagramas com inserções do tipo acima são eliminados da expansão pois esse potencial é tal que

$$\text{Diagram } 2 + \text{Diagram } 3 - \text{Diagram } 4 = 0$$

ou, explicitamente,

$$\sum_{i \in i_F} [\langle m_i | V | n_i \rangle - \langle m_i | V | n \rangle] - \langle m | U_{HF} | n \rangle = 0$$

Note que m e n podem ser estados de buraco ou partícula. Esses diagramas com as inserções de V são denominados diagramas de inserção de bolha e, em virtude da definição de U_{HF} , a expansão para a energia não contém nenhum diagrama de inserção de bolha ou de U_{HF} .

É interessante notarmos que se considerarmos a expansão de Goldstone para $H_1 = V$ (V não singular), o potencial de H-F resulta de uma renormalização dessa expansão, consistindo em se efetuar somas parciais infinitas de diagramas com um número infinito de inserções de bolhas obtidos de um mesmo diagrama básico.

O funcional de energia de H-F para a energia do estado fundamental é dado pela soma de E_0 , com o primeiro termo da expansão de Goldstone para $H_1 = V - U_{HF}$. Esse funcional também pode ser obtido a partir do princípio variacional (E_a 63) e é dado por

$$E_{HF} = \sum_{i \leq i_F} T_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle i j | V | i j \rangle_A \quad (9)$$

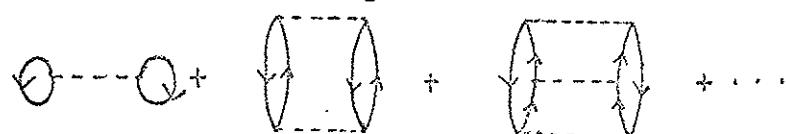
onde, para simplificar, adotaremos a notação

$$\langle i j | V | i j \rangle_A = \langle i j | V | i j \rangle - \langle i j | V | j i \rangle$$

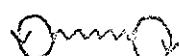
Passaremos agora ao caso onde o potencial nuclear é singular.

Teoria de Brueckner-Goldstone

A expansão de Goldstone, na forma apresentada, só é útil para o caso em que o potencial nuclear V é não singular. Como já dissemos, os potenciais nucleares considerados mais realísticos contêm um caroço repulsivo, em alguns casos infinitos, como é o caso do potencial de Hamada-Johnston (Hm 62), ou do potencial de Reid com caroço duro (Rd 68). Para tais potenciais, os elementos de matriz são muito grandes ou infinitos, o que requer algum tipo de modificação na expansão original. Essa aparente divergência da expansão de Goldstone é eliminada efetuando-se as somas infinitas de diagramas gerados pela introdução de vértices V consecutivos entre linhas de partícula:



Essa soma é representada simplesmente pelo termo



onde a nova linha horizontal corresponde à matriz de reação G e efetuar a soma acima é totalmente equivalente à substituição da interação V por G , a qual é dada pela equação integral

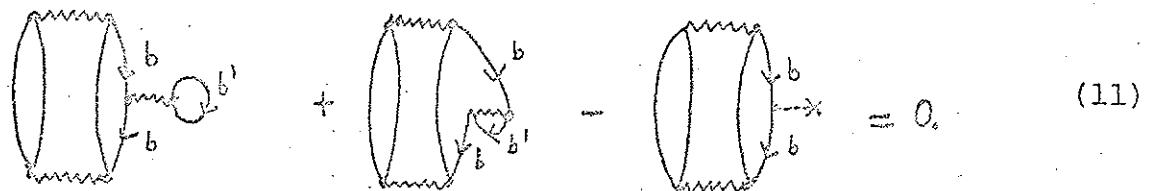
$$G_{42}(\omega) = V_{42} - V_{42} Q \frac{1}{\omega - [T(4) + T(2) + U(4) + U(2)]} G_{42}(\omega) \quad (10)$$

onde Q é o operador de Pauli dado por

$$Q |ij\rangle = \begin{cases} |ij\rangle & \text{se } i > i_F \quad j > j_F \\ 0 & \text{em qualquer outro caso.} \end{cases} \quad (10')$$

A expansão de Brueckner-Goldstone é então dada pelos diagramas em que V é substituído por G , eliminando-se todos aqueles diagramas em que V ocorra sucessivamente entre linhas de partícula. Logo, não há diagramas de 2ª ordem na expansão de Brueckner-Goldstone.

Devido à dependência de G na energia, ω , torna-se problemática a obtenção do potencial autoconsistente. É possível escolher U de tal maneira que sejam cancelados os diagramas com inserções em linhas de buraco



Isso foi demonstrado por Bethe, Brandow, Petcheck (Be 63), sendo por isso conhecido como o teorema BBP. Brandow demonstrou a existência desses cancelamentos de forma mais geral (Bd 69 e Bd 70) e nessa forma é conhecido como teorema da fatorização. Entretanto, tal cancelamento não ocorre no caso das inserções serem em linhas de partícula pois, nesse caso, a contribuição da bolha depende da energia do resto do diagrama. O resultado disso é que não é possível se escolher os elementos de matriz partícula-partícula de U de maneira análoga ao caso H-F.

O funcional de energia de BHF, E_{BHF} , é aquele obtido escolhendo-se U_{BHF} de maneira a serem cancelados os diagramas em (11), ou seja, escolhendo-se U_{BHF} tal que

$$\langle b | U_{BHF} | b \rangle = \sum_{b'} \langle bb' | G(\epsilon_b + \epsilon_{b'}) | bb' \rangle_A .$$

A expressão resultante para o funcional é

$$E_{BHF} = \sum_b \langle b | T | b \rangle + \frac{1}{2} \sum_{bb'} \langle bb' | G(\epsilon_b + \epsilon_{b'}) | bb' \rangle_A . \quad (12)$$

onde b e b' designam estados abaixo do nível de Fermi (para simplificar, usaremos daqui em diante a notação b para designar estados de buraco, e p os estados de partícula).

Os cálculos de BHF (Ta 68, Da 69, Ml 74) requerem o conhecimento dos elementos de matriz $\langle b | U_{BHF} | b' \rangle$, $b \neq b'$, $\langle p | U_{BHF} | b \rangle$ e $\langle p | U_{BHF} | p' \rangle$. Esses elementos de matriz partícula-partícula, em vista dos problemas mencionados acima, são usualmente colocados iguais a zero e, na realidade, os cálculos a que acima nos referimos, envolvem aproximações que tornam os resultados independentes da particular escolha feita para esses elementos de matriz. Os outros elementos de matriz são escolhidos da mesma maneira que (11), isto é,

$$\begin{array}{c} \downarrow b_2 \\ \text{---} \\ \downarrow b_1 \end{array} \otimes^b + \begin{array}{c} \downarrow b_2 \\ \text{---} \\ \downarrow b_1 \end{array} \otimes^{b_1} - \begin{array}{c} \downarrow b_2 \\ \text{---} \\ \downarrow b_1 \end{array} \otimes^x = 0$$

$$\begin{array}{c} \uparrow b \\ \text{---} \\ \uparrow b_1 \end{array} \otimes^b + \begin{array}{c} \uparrow b \\ \text{---} \\ \uparrow b_1 \end{array} \otimes^{b_1} - \begin{array}{c} \uparrow b \\ \text{---} \\ \uparrow b_1 \end{array} \otimes^x = 0 ,$$

que explicitamente são dados por:

$$\langle b_1 | U_{BHF} | b_2 \rangle = \sum_b \langle b_1 b | \frac{1}{2} [G(\epsilon_{b_1} + \epsilon_b) + G(\epsilon_{b_2} + \epsilon_b)] | b_2 b \rangle_A ,$$

$$\langle p | U_{BHF} | b \rangle = \sum_{b'} \langle pb' | G(\epsilon_b + \epsilon_{b'}) | bb' \rangle_A . \quad (13)$$

Mais uma vez queremos ressaltar que esse funcional de BHF não resulta do princípio variacional como é o caso do funcional de H-F.

De uma maneira geral, dada a expansão de Brueckner-Goldstone, podemos efetuar somas parciais e transformá-la numa nova expansão equivalente, contendo um menor número de diagramas. Esse processo é usualmente denominado renormalização. Os novos diagramas, chamados esqueletos, são equivalentes a uma soma (em geral infinita) de diagramas da expansão original. Um problema que muito frequentemente aparece é que a soma da expansão renormalizada contenha mais de uma vez um mesmo diagrama da expansão original. No caso da renormalização de energia própria, esse problema foi completamente resolvido pelo famoso teorema BLC (Bl 60, 65) devido a Bloch. O funcional de BHF renormalizado (BHFR) é aquele que resulta da expansão de Brueckner-Goldstone com renormalização de energia própria. Vamos, então, apresentar um resumo do processo de renormalização e, como a renormalização de energia própria utiliza funções de Green (ou propagadores), vamos primeiramente introduzir o formalismo das funções de Green de partícula independente.

Capítulo 2 - Propagadores de partícula independente

A função de Green completa de partícula independente é definida por (Ea 63, Fe 71)

$$g_i(t-t') = \langle \psi_0 | \mathcal{O} [a_i(t) a_i^\dagger(t')] | \psi_0 \rangle . \quad (14)$$

Para $t > t'$, temos a função de Green retardada e, para $t < t'$, temos a função de Green avançada. Fisicamente a função de Green retardada dá a amplitude de probabilidade de que, no instante t posterior a t' , se possa remover uma partícula, no estado ϕ_i , de um sistema de $(A+1)$ partículas interagentes, deixando as restantes A partículas interagentes no estado fundamental ψ_0 . O estado do sistema de $(A+1)$ partículas, no instante t , resulta da evolução natural do estado do sistema no instante t' obtido pela introdução de uma partícula, no mesmo estado ϕ_i , no sistema de A partículas interagentes no estado fundamental ψ_0 . A função de Green avançada dá a amplitude de probabilidade de que, no instante t' posterior a t se possa introduzir, num sistema de $(A-1)$ partículas interagentes, uma partícula no estado ϕ_i , ficando o sistema de A partículas no estado fundamental ψ_0 . O estado do sistema de $(A-1)$ partículas, no instante t' , resulta da evolução natural do sistema obtido, no instante t , pela remoção de uma partícula, no mesmo estado ϕ_i , do sistema de A partículas interagentes, no seu estado fundamental ψ_0 . Dizemos que a função de Green retardada descreve a propagação de uma partícula enquanto que a função de Green avançada descreve a propagação de um buraco, e a probabilidade de ocupação de um estado ϕ_k é dada por

$$P_k = \mp \lim_{t \rightarrow 0} g_k(t) , \quad (15)$$

o sinal negativo valendo para $k < i_F$ e o positivo para $k > i_F$.

A transformada de Fourier da função de Green dependente do tempo fornece-nos a função de Green na representação da energia:

$$g_k(w) = -i \int_{-\infty}^{\infty} g_k(t) e^{iwt} dt$$

Passando-se ao plano complexo da energia é fácil mostrar que a função de Green avançada tem polos no semiplano superior, e a função de Green retardada, no semiplano inferior. Os polos correspondem às energias de excitação dos sistemas de $(A-1)$ e $(A+1)$ partículas, respectivamente.

O propagador de partícula independente, não perturbado, é definido

$$g_k^0(t-t') = \langle \tilde{\Phi}_0 | \mathcal{J} [a_k(t) a_k^\dagger(t')] | \tilde{\Phi}_0 \rangle$$

Sendo $\tilde{\Phi}_0$ um autoestado de H_0 , é muito fácil calcular esse propagador explicitamente. O resultado é

$$g_k^0(t-t') = e^{-i\epsilon_k^0(t-t')} [\eta_k \Theta(t-t') - (1-\eta_k) \Theta(t'-t)] \quad (16)$$

onde

$$\eta_k = 1 \quad \text{para } k > i_F$$

$$\eta_k = 0 \quad \text{para } k \leq i_F$$

e

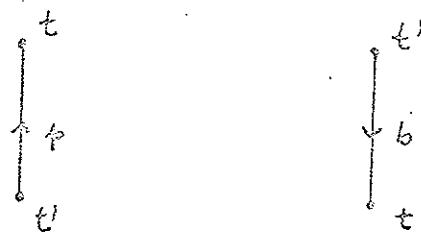
$$\Theta(t-t') = \begin{cases} 1 & t \geq t' \\ 0 & t < t' \end{cases}$$

Fazendo-se a transformada de Fourier, obtemos as funções em termos da energia ω :

$$g_k^0(\omega) = \frac{\eta_k}{\omega - \epsilon_k^0 + i0} - \frac{(1-\eta_k)}{\omega - \epsilon_k^0 - i0} \quad (16')$$

Na ausência de interação entre as partículas, se uma partícula ou um buraco, no estado ϕ_i , for introduzido no sistema num instante qualquer, permanecerá nesse estado indefinidamente. As probabilidades de ocupação são, portanto, ou 1 ou 0.

De acordo com a convenção dos diagramas, a representação diagramática dos propagadores não perturbados são linhas verticais : sentido de baixo para cima ($t > t'$) corresponde a partículas, e de cima para baixo ($t' > t$) a buracos:



A representação dos propagadores completos é feita da mesma maneira, fazendo-se uso de linhas duplas:

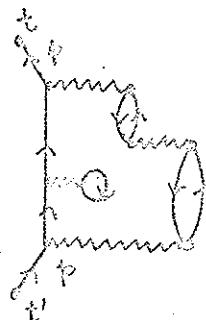


A expressão (14) para o propagador completo pode ser escrita de maneira análoga à expressão (8) para a energia ΔE . É fácil mostrar que $G_k(t-t')$ pode ser escrita como

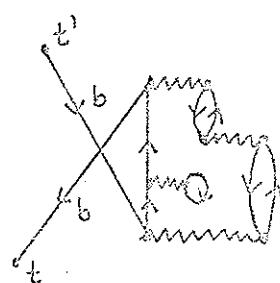
$$G_k(t-t') = \lim_{\substack{t_1 \rightarrow \infty (-ie) \\ t_2 \rightarrow -\infty (-ie)}} \frac{\langle \hat{\Phi}_0 | \mathcal{T}[\alpha_k(t) \hat{T}(t_1, t_2) \alpha_k^\dagger(t')] | \hat{\Phi}_0 \rangle}{\langle \hat{\Phi}_0 | \hat{T}(t_1, t_2) | \hat{\Phi}_0 \rangle}. \quad (17)$$

Substituindo-se $\hat{T}(t_1, t_2)$ pela sua expansão, e usando-se o teorema de Wick, obtém-se, a partir da expressão (17), a expansão perturbativa para o propagador completo. Os termos da expansão podem ser expressos diagramaticamente e esses diagramas são os mesmos que no caso da expansão

ΔE só que contém linhas externas. Para os propagadores de partícula, a expansão perturbativa para o numerador de (17) apresenta termos como



sendo o termo a ele correspondente, no caso de buraco, dado por



Esses diagramas são denominados diagramas de energia própria uma vez que podem ser inseridos em qualquer diagrama cortando-se uma linha apropriada.

A expansão do numerador apresenta termos disconexos divergentes que, de maneira análoga ao teorema de Goldstone, se demonstra serem cancelados pelos termos do denominador, e a expansão perturbativa para o propagador completo $\mathcal{G}_k(t-t')$ é dada apenas pelos termos do numerador correspondentes a diagramas conexos:

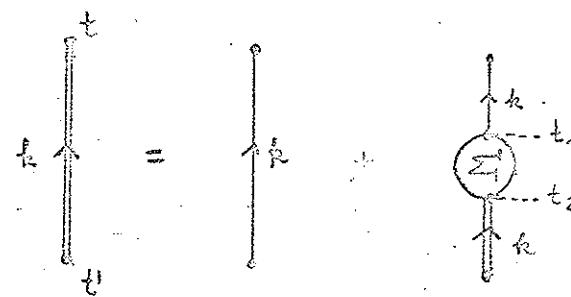
$$\mathcal{G}_k(t-t') = \lim_{\substack{t_1 \rightarrow \infty(i\epsilon), \\ t_2 \rightarrow -\infty(i\epsilon)}} \langle \bar{\phi} | \mathcal{T}[\alpha_k^-(t) \hat{T}(t_1, t_2) \alpha_k^+(t')] | \bar{\phi} \rangle_C .$$

As regras para o cálculo dos diagramas são as mesmas que no caso dos diagramas de Goldstone (ou Brueckner-Goldstone) e, da mesma maneira, incluem-se na expansão apenas os diagramas conexos topologicamente distintos.

Os diagramas da expansão de $\mathcal{G}_k(t-t')$ podem ser classificados em dois tipos: os que podem ser separados cortando-se uma única linha e diagramas para os quais isso não é possível. Os primeiros são os diagramas de energia própria redutíveis e, os outros, os irredutíveis. Qualquer diagrama redutível é obtido ligando-se diagramas irredutíveis. Considerando-se apenas os termos de energia própria irredutíveis é possível se expressar a função de Green completa através de uma equação integral. Denotando-se por $\Sigma_k(t_1-t_2)$ a soma de todos os diagramas de energia própria irredutíveis, temos

$$\mathcal{G}_k(t-t') = \mathcal{G}_k^0(t-t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \mathcal{G}_k^0(t-t_1) \Sigma_k(t_1-t_2) \mathcal{G}_k(t_2-t'), \quad (18)$$

que é a equação de Dyson para o propagador completo, graficamente, no caso de partículas ($k > i_F$), temos



Na representação da energia ω , a função $\mathcal{G}_k(\omega)$ satisfaz a equação

$$\mathcal{G}_k(\omega) = \mathcal{G}_k^0(\omega) + \mathcal{G}_k^0(\omega) \sum_k(\omega) \mathcal{G}_k(\omega), \quad (18')$$

onde

$$\sum_k(\omega) = i \int_{-\infty}^{\infty} d(t_1-t_2) \sum_k(t_1-t_2) e^{i\omega(t_1-t_2)}$$

Passemos agora a uma breve exposição do processo de renormalização (Bl 65).

Capítulo 3 - Processo de renormalização e funcional de BHFR

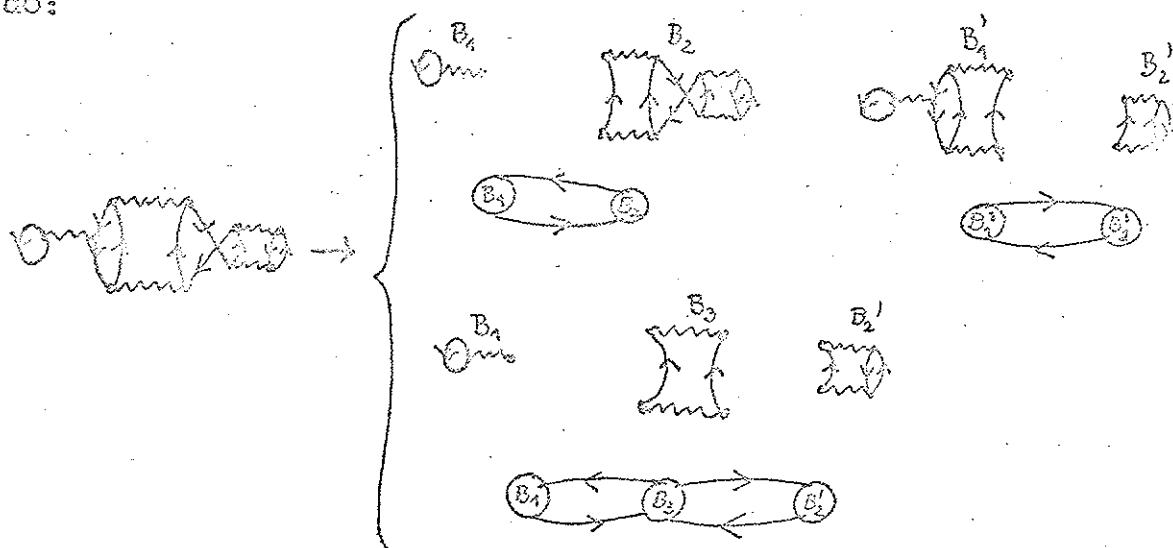
Por inserção de um diagrama entende-se um subdiagrama que se acha ligado ao resto do diagrama apenas em determinados pontos, os chamados pontos de junção. As inserções com dois pontos de junção correspondem aos diagramas de energia própria já introduzidos. O conjunto de inserções, com pontos de junção equivalentes, constituem uma classe, representada por uma caixa preta. O processo de renormalização consiste na substituição das classes de inserção pelas correspondentes caixas pretas e, portanto, os diagramas-esqueletos da expansão renormalizada resultam da conexão de caixas pretas entre si.

A substituição da expansão de Brueckner-Goldstone pela expansão de diagramas-esqueleto baseia-se na possibilidade de fatorização dos diagramas, isto é, na possibilidade dos diagramas poderem ser escritos como um produto das contribuições parciais das várias inserções de modo que os diagramas-esqueletos sejam dados simplesmente pelo produto das funções caixa preta, essas representando a soma das inserções de uma mesma classe. Essa fatorabilidade introduz restrições na classe de inserções de energia própria, pois somente as inserções de energia própria para as quais haja cruzamento entre as linhas de conexão com o diagrama podem ser fatorizadas (Bd 69, Bd 70). A renormalização de energia própria, da qual resulta o funcional BHFR (Ca 70, Da 71), considera como função caixa preta (para as inserções de energia própria) o propagador não perturbado para partículas e o propagador completo para buracos:

$$b \downarrow \parallel = \downarrow b + \text{Diagrama com } \Sigma \text{ no topo} + \text{Diagrama com } \Sigma \text{ no topo e } \Sigma \text{ no lado} + \dots$$

com a restrição de que só entra a parte de Σ para a qual haja cruzamento entre as linhas conectoras; essa parte de Σ será indicada por M e corresponde à parte que está na camada de energia, motivo pelo qual o diagrama é fatorável.

A obtenção da expansão de diagramas-esqueletos pode ser feita de duas maneiras. Uma delas seria compondo os esqueletos a partir das caixas pretas; ocorre porém que as regras para tal construção não são simples e tampouco são de validade geral pois dependem dos tipos de caixa preta considerados. A outra maneira, que é muito mais simples, consiste em reduzir a esqueletos os diagramas originais, isto é, dado um diagrama qualquer, nele identificam-se as várias inserções e procede-se a substituição das mesmas pelas caixas pretas correspondentes. Para que esse processo de redução tenha sentido, é necessário que seja único, isto é, cada diagrama deve corresponder a um e somente um esqueleto. Uma condição suficiente para a unicidade é que, para cada par de inserções I e J dos diagramas, ou I e J não tenham nenhum elemento em comum ou a união deles seja também uma inserção. Se a unicidade não for satisfeita, a expansão renormalizada conterá um dado diagrama um número de vezes igual ao número de esqueletos ao qual o mesmo possa ser reduzido. No caso de diagramas sem linhas externas, como é o caso dos diagramas de Brueckner-Goldstone, a unicidade é violada. Todo diagrama de Goldstone pode ser reduzido a uma malha de blocos irredutíveis (representados por círculos) ligados por pares de linhas. Cada bloco pode ser considerado como um esqueleto e todo o resto como inserções; logo, o número de esqueletos correspondentes a um dado diagrama é igual ao número de blocos irredutíveis que o mesmo contenha. Exemplificando:



Logo, cada diagrama é reproduzido um número de vezes igual ao número de blocos irredutíveis que o componham. A solução des-

se problema de multiplicidade é possível graças à topologia dessas malhas de blocos irredutíveis; para uma árvore de blocos irredutíveis, tem-se que

$$N_B - N_L + N_C = 1 \quad , \quad (19)$$

onde N_B é o número de blocos, N_L o número de linhas e N_C o número de ciclos.

O teorema BLC, devido a Bloch (Bl 60 e Bl 65) mostra que é possível obter expressões para as somas dos diagramas contendo cada diagrama um número de vezes igual a N_B , N_L e N_C . Representando essas expressões por S_B , S_L e S_C , respectivamente, decorre imediatamente da propriedade (19) que a expansão para ΔE , contendo cada diagrama uma única vez, é dada por

$$\Delta E = S_B - S_L + S_C \quad ,$$

ficando, portanto, completamente eliminado o problema da multiplicidade.

A expressão para S_B é imediata pois é dada, pelo que foi visto, pela soma dos diagramas-esqueletos.

Para se obter S_L , notamos que qualquer diagrama de Goldstone pode ser obtido conectando-se um termo de energia própria irredutível a um termo qualquer de energia própria. Seja, por exemplo, um diagrama contendo n blocos irredutíveis de energia própria; qualquer um desses blocos pode ser escolhido para constituir o esqueleto, e o resto substituído pelo propagador completo de partícula independente, \mathcal{G} , de maneira que cada diagrama será repetido um número de vezes igual ao número de linhas de conexão. Diagramaticamente, temos

$$S_L = \text{Diagrama com } n \text{ blocos} = \text{Diagrama com } n \text{ blocos} + \text{Diagrama com } n-1 \text{ blocos} + \dots$$

cujo resultado é

$$S_L = \text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} dw \mathcal{G}(w) M(w) = \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} dw \mathcal{G}_k(w) M_k(w) \quad . \quad (20)$$

No caso particular que estamos considerando, o propagador completo é usado somente para buracos, como já mencionado. Usando-se (18') juntamente com (16'), temos

$$\begin{aligned} g_k(w) &= \frac{1}{w - E_k - i0} + \frac{1}{w - E_k - i0} M_k(w) \frac{1}{w - E_k - i0} + \dots = \\ &= \frac{1}{w - E_k - M_k(w) - i0} \end{aligned}$$

Na região onde $M_k(w)$ é não singular (semi-plano superior da energia), pode-se fazer uma expansão em série de Taylor em torno de um valor E_k e obter, desprezando-se termos não lineares em w , a expressão

$$g_k(w) \approx \frac{1}{w - E_k - M_k(E_k) - i0 - (w - E_k) M'_k(E_k)}$$

onde

$$M'_k(E_k) = \left. \frac{d M_k(w)}{d w} \right|_{w=E_k}$$

Portanto, para

$$E_k = E_k + M_k(E_k)$$

resulta

$$g_k(w) \approx \frac{1}{w - E_k - i0} \frac{1}{1 - M'_k(E_k)} = \frac{1}{w - E_k - i0} P_k \quad (21)$$

onde P_k é a probabilidade de ocupação (15).

Substituindo-se (21) na expressão (20) para S_L , resulta, pois $M(\omega)$ não tem polos no semi-plano superior da energia ω , que

$$S_L = \sum_k P_k M_k(E_k) . \quad (22)$$

Para se obter S_C , faz-se uso do fato de que, num ciclo com n linhas, cada diagrama é repetido n vezes e, portanto, dividindo-se sua contribuição por n , cada diagrama será incluído uma vez para cada ciclo. Dessa maneira, temos

$$\begin{aligned} S_C &= \text{(Diagrama com 1 linha)} + \frac{1}{2} \text{(Diagrama com 2 linhas)} + \frac{1}{3} \text{(Diagrama com 3 linhas)} + \dots = \\ &= \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega M_k(\omega) \left[G_k^0(\omega) + \frac{1}{2} G_k^0(\omega) M_k(\omega) G_k^0(\omega) + \frac{1}{3} G_k^0(\omega) M_k(\omega) \times \right. \\ &\quad \left. \times G_k^0(\omega) M_k(\omega) G_k^0(\omega) + \dots \right] . \end{aligned}$$

Usando-se a identidade

$$\int_0^1 \lambda^{n-1} d\lambda = \frac{1}{n} ,$$

a expressão acima pode ser escrita como

$$S_C = \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega M_k(\omega) \int_0^1 d\lambda G_k(\lambda, \omega) ,$$

onde

$$\begin{aligned} g_k(\lambda, \omega) &= g_k^0(\omega) + g_k^0[\lambda M_k(\omega)] g_k^0(\omega) + g_k^0(\omega)[\lambda M_k(\omega)] g_k^0(\omega)[\lambda M_k(\omega)] g_k^0(\omega) + \dots = \\ &= \frac{1}{\omega - E_k - \lambda M_k(\omega) - i0} \end{aligned}$$

Expandindo-se, novamente, $M_k(\omega)$ em série de Taylor e mantendo-se somente os termos lineares, vem

$$g_k(\lambda, \omega) \approx \frac{1}{\omega - E_k(\lambda) - i0} - \frac{1}{1 - \lambda M_k^1(E_k(\lambda))}$$

onde, analogamente,

$$E_k(\lambda) = E_k + \lambda M_k(E_k(\lambda))$$

Substituindo-se $g_k(\lambda, \omega)$ na expressão acima para S_C , e trocando-se a ordem das integrações, resulta que

$$S_C = \sum_k \int_0^1 d\lambda \frac{M_k(E_k(\lambda))}{1 - \lambda M_k^1(E_k(\lambda))}$$

Da equação acima para $E_k(\lambda)$, tem-se

$$\frac{dE_k(\lambda)}{d\lambda} = M_k(E_k(\lambda)) + \lambda M_k^1(E_k(\lambda)) \frac{dE_k(\lambda)}{d\lambda}$$

e, portanto,

$$\frac{M_k(E_k(\lambda))}{1 - \lambda M_k^1(E_k(\lambda))} = \frac{dE_k(\lambda)}{d\lambda}$$

e, assim, o resultado final para S_C é

$$S_C = \sum_k M_k(\varepsilon_k) \quad . \quad (23)$$

A expansão de ΔE em termos dos diagramas renormalizados, onde cada diagrama aparece uma única vez, é portanto dada por

$$\begin{aligned} \Delta E &= S_B - \sum_k M_k(\varepsilon_k) P_k + \sum_k M_k(\varepsilon_k) = \\ &= S_B + \sum_k (1 - P_k) M_k(\varepsilon_k) \quad . \end{aligned} \quad (24)$$

O fato das inserções de energia própria consideradas serem tais a permitirem a fatorização, implica que $M(\omega)$ possa ser escrito como (Bd 69, 70)

$$M(\omega) = f(\omega) - U$$

sendo a chamada escolha autoconsistente de U aquela para qual $M_k(\varepsilon_k) = 0$ e, portanto, sendo o operador U tal que

$$\langle k | U | k \rangle = f_k(\varepsilon_k) \quad .$$

Com essa escolha, são "eliminados" vários termos da expansão.

Para a escolha autoconsistente, a expansão renormalizada de ΔE é dada apenas por

$$\Delta E \approx S_B \quad . \quad (25)$$

Pode-se agora obter o funcional de BHFR, E_{BHFR} , a saber, aquele obtido considerando-se apenas o termo de primeira ordem da expansão renormalizada para ΔE , com a escolha autoconsistente para U e, portanto, de (25), tem-se que

$$\Delta E^{(1)} = S_B^{(1)} = \text{Diagrama 1} + \text{Diagrama 2} - \text{Diagrama 3} \quad .$$

Utilizando-se (21), calculam-se facilmente os dois termos acima:

$$\text{Diagram} + \text{Diagram} = \frac{1}{2} \sum_{bb'} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' g_b(\omega) \langle bb' | G(\omega + \omega') | bb' \rangle_A g_{b'}(\omega') =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{bb'} P_b \langle bb' | G(E_b + E_{b'}) | bb' \rangle_A P_{b'}$$

$$\text{Diagram} = - \sum_b \int_{-\infty}^{\infty} g_b(\omega) \langle b | U | b \rangle d\omega = - \sum_b \langle b | U | b \rangle P_b$$

Logo,

$$\Delta E^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_{bb'} P_b \langle bb' | G(E_b + E_{b'}) | bb' \rangle_A P_{b'} - \sum_b P_b \langle b | U | b \rangle$$

$$E_{BHFR} = E_0 + \Delta E^{(1)} = \sum_b E_b + \Delta E^{(1)} =$$

$$= \sum_b \langle b | T | b \rangle + \sum_b (1 - P_b) \langle b | U | b \rangle +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{bb'} P_b \langle bb' | G(E_b + E_{b'}) | bb' \rangle_A P_{b'} \quad (26)$$

com

$$\langle b | U | b \rangle = \sum_{b'} \text{Diagram} + \text{Diagram} = \sum_{b'} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \langle bb' | G(E_b + \omega) | bb' \rangle_A g_{b'}(\omega) =$$

$$= \sum_{b'} P_{b'} \langle bb' | G(E_b + E_{b'}) | bb' \rangle_A \quad (27)$$

Portanto, o funcional de BHFR tampouco resulta do princípio variacional.

Similarmente ao que ocorre nos cálculos de BHF, faz-se necessária, ao se calcular no caso de BHFR, uma escolha dos outros elementos de matriz de U . E, da mesma maneira que no esquema BHF, a escolha feita usualmente é (Da 71)

$$\langle b_1 | U | b_2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_b \langle b_1 b | [G(\varepsilon_{b_1} + \varepsilon_b) + G(\varepsilon_{b_2} + \varepsilon_b)] | b_2 b \rangle P_b ,$$

$$\langle p | U | p' \rangle = \sum_b \langle p b' | G(\varepsilon_b + \varepsilon_p) | b b' \rangle P_b .$$

(28)

Vamos agora brevemente analisar as propriedades de estacionaridade dos funcionais de BHF e BHFR (Sr 75, Ml 75).

Posto que ambos os funcionais E_{BHF} e E_{BHFR} não resultam do princípio variacional e são dados pelos termos de 1^a ordem da expansão perturbativa para ΔE , uma condição necessária (porem não suficiente), para que esses funcionais constituam uma boa aproximação para a energia do estado fundamental do sistema, é que sejam estacionários com respeito à variação do potencial de um corpo, U . A condição de estacionaridade, com respeito a variações de U , fornecerá a prescrição ótima para U . Para U hermitiano, estudos das propriedades de estacionaridade desses funcionais mostraram não ser possível se obter uma prescrição para os elementos de matriz $\langle p | U | p' \rangle$ e, para a escolha usualmente feita,

$$\langle p | U | p' \rangle = 0 ,$$

nenhum dos dois funcionais são estacionários se os elementos de matriz buraco-buraco e partícula-buraco, de U , forem dados por (13) e (28) para BHF e BHFR, respectivamente. Os defeitos de es-

tacionaridade são maiores para o caso BHF e contém termos correspondentes à renormalização de energia própria que é incluída em BHFR. Além disso, aparece, em ambos os casos, um termo nos elementos de matriz partícula-buraco que é incluído na teoria de HF dependente da densidade (Ng 70) o que explica o fato desses cálculos produzirem melhores resultados que os cálculos BHF e BHFR ; além disso, o aparecimento desse termo constitui uma indicação de que essa teoria de HF, dependente da densidade, esteja relacionada com a teoria de Brueckner-Goldstone. Entretanto, mesmo que esses termos sejam incluídos na definição dos elementos de matriz partícula-buraco de U , permanecem defeitos de estacionaridade relacionados com a renormalização de propagadores não diagonais, termos esses que embora não apareçam na matéria nuclear, estão presentes em núcleos finitos. Portanto, para se eliminar os defeitos de estacionaridade, é necessário (embora não suficiente) que se generalize a renormalização da expansão de Brueckner-Goldstone , de maneira a incluir os propagadores não diagonais; o estudo das propriedades de estacionaridade do novo funcional fornecerá uma nova escolha para U (isto é, para aqueles elementos de matriz de U não fixados pelo processo de renormalização) e, ao mesmo tempo, propiciará o relacionamento dessa teoria com a teoria de H-F, dependente da densidade, de Negele.

Vamos então deduzir esse funcional de Brueckner-Hartree-Fock renormalizado para propagadores não diagonais (BHFND). Para efectuar essa renormalização é mais conveniente utilizar um potencial de um corpo, U , não hermitiano. Mostramos no Apêndice C que a expansão de Goldstone é facilmente extendida para o caso de H_0 não hermitiano.

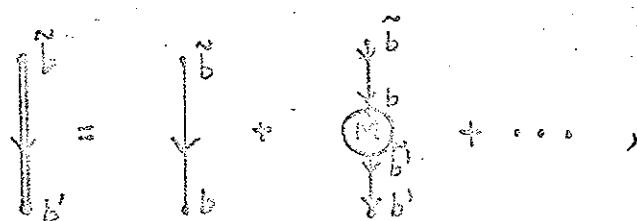
Capítulo 4 - Funcional de BHFRD

Para se efetuar essa renormalização mais geral da expansão de Brueckner-Goldstone, consideraremos o potencial de um corpo, U , não hermitiano. Os autovalores da hamiltoniana não perturbada, H_0 , serão reais e a base de partícula independente constituirá um conjunto bi-ortonormal completo,

$$\begin{aligned} H_0|\alpha\rangle &= E_\alpha |\alpha\rangle , \\ H_0^\dagger|\tilde{\alpha}\rangle &= \tilde{E}_\alpha |\tilde{\alpha}\rangle , \\ \langle\tilde{\alpha}|\beta\rangle &= \langle\alpha|\tilde{\beta}\rangle = \delta_{\alpha\beta} , \\ \sum_k |\alpha\rangle\langle\tilde{\alpha}| &= \sum_k |\tilde{\alpha}\rangle\langle\alpha| = 1 . \end{aligned} \quad (29)$$

Usaremos a normalização $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$, e a representação utilizada será aquela na qual os bras serão os estados marcados com um til e, portanto, graficamente, as linhas saindo dos vértices serão as que "carregam" o til. No Apêndice A, mostraremos que é possível se ter uma base bi-ortonormal com estados de partícula, e de buraco, ortogonais, isto é, $\langle p|b\rangle = 0$.

Da mesma maneira que no caso BHFR, os propadores de partícula serão os propagadores livres (não perturbados). Os propagadores diagonais a serem considerados, serão todos os propagadores avançados, isto é, aqueles definidos para $t < t'$:

(i) 

(ii) 

$$(iii) \quad \text{Diagram} = \text{Diagram} + \text{Diagram} + \dots \quad (30)$$

A equação de Dyson para esses propagadores é, tomando-se $t=0$,

$$G_{\alpha\beta}^{\circ}(t) = G_{\alpha\beta}^{\circ}(0) \delta_{\alpha\beta} - \frac{1}{2\pi i} \sum_{-\infty}^{\infty} dw e^{-i\omega t} G_{\alpha\beta}^{\circ}(w) \langle \bar{\psi} | M(w) | \psi \rangle G_{\alpha\beta}^{\circ}(w), \quad (31)$$

onde

$$G_{\alpha\beta}^{\circ} = G_{\alpha}^{\circ} \quad (16 \text{ e } 16').$$

As probabilidades de ocupação correspondentes são dadas por

$$\rho_{\alpha\beta} = - \lim_{t \rightarrow 0} G_{\alpha\beta}^{\circ}(t) \quad (32)$$

Os propagadores são obtidos pela iteração da equação de Dyson (31), considerando-se apenas os termos partícula-buraco ou buraco-buraco de $M(\omega)$, de maneira que as integrações possam ser efetuadas no plano complexo da energia, fechando-se o contorno no semi-plano superior:

(i) $\tilde{g}_{b\tilde{b}}(t)$

$$\tilde{g}_{b\tilde{b}}(\omega) = \tilde{g}_{b\tilde{b}}^0(t) \delta_{b\tilde{b}} - \frac{1}{2\pi i} \int_{\omega}^{\infty} dw e^{-iwt} \tilde{g}_{b\tilde{b}}(\omega) [\langle \tilde{b}|M(w)|b \rangle \tilde{g}_{b\tilde{b}}^0(w) +$$

$$+ \sum_a \langle \tilde{b}|M(w)|a \rangle \tilde{g}_{a\tilde{b}}^0(w) \langle \tilde{a}|M(w)|b \rangle \tilde{g}_{b\tilde{b}}^0(w) + \dots] =$$

$$= \tilde{g}_{b\tilde{b}}^0(t) \delta_{b\tilde{b}} - \frac{1}{2\pi i} \int_{\omega}^{\infty} dw e^{-iwt} \frac{1}{w - \epsilon_b - i0} [\langle \tilde{b}|M(w)|b \rangle \frac{1}{w - \epsilon_b - i0} +$$

$$+ \sum_a \langle \tilde{b}|M(w)|a \rangle \left[\frac{n_a}{w - \epsilon_a - i0} + \frac{(1-n_a)}{w - \epsilon_a - i0} \right] \langle \tilde{a}|M(w)|b \rangle \frac{1}{w - \epsilon_b - i0} + \dots].$$

As singularidades, no semi-plano superior, dos propagadores de buracos livres, são eliminados fazendo-se a escolha autoconsistente

$$\langle \tilde{b}|M(\epsilon_b)|b \rangle = 0 = \langle \tilde{b}|f(\epsilon_b)|b \rangle = \langle \tilde{b}|U|b \rangle , \quad (33)$$

$$\langle \tilde{b}|M(\epsilon_b)|b \rangle = 0 = \langle \tilde{b}|f(\epsilon_b)|b \rangle = \langle \tilde{b}|U|b \rangle .$$

Com essa escolha, a integração pode ser efetuada imediatamente pois é dada apenas pelo resíduo do integrando, no polo simples $w=\epsilon_b+i0$. O resultado é

$$\tilde{g}_{b\tilde{b}}(t) = \tilde{g}_{b\tilde{b}}^0(t) - e^{-\epsilon_b t} \left[\frac{\langle \tilde{b}|M(\epsilon_b)|b \rangle}{\epsilon_b - \epsilon_b} + \sum_b \frac{\langle \tilde{b}|M(\epsilon_b)|b \rangle}{\epsilon_b - \epsilon_b} \frac{\langle \tilde{b}|M(\epsilon_b)|b \rangle}{\epsilon_b - \epsilon_b} \right] +$$

$$= e^{-i\epsilon_b t} \left[\delta_{bb} + \frac{\langle \tilde{H}|M(\omega)|b\rangle}{\omega - \epsilon_b} + \sum_b \frac{\langle \tilde{H}|M(\omega)|b\rangle}{\omega - \epsilon_b} \frac{\langle \tilde{H}|M(\omega)|b\rangle}{\omega - \epsilon_b} + \dots \right]$$

e, usando-se (32), vem

$$g_{bb}(t) = -e^{-i\epsilon_b t} P_{bb}$$

Podemos definir uma probabilidade de ocupação $P_{bb}(\omega)$ dada por (Ps)

$$P_{bb}(\omega) = \delta_{bb} + \frac{\langle \tilde{H}|M(\omega)|b\rangle}{\omega - \epsilon_b} + \sum_b \frac{\langle \tilde{H}|M(\omega)|b\rangle}{\omega - \epsilon_b} \frac{\langle \tilde{H}|M(\omega)|b\rangle}{\omega - \epsilon_b} + \dots \quad (34)$$

$$= \delta_{bb} + \sum_b \frac{\langle \tilde{H}|M(\omega)|b\rangle}{\omega - \epsilon_b} P_{bb}(\omega)$$

onde

$$P_{bb} = P_{bb}(\omega) \Big|_{\omega = \epsilon_b}$$

(ii) $\tilde{g}_{b\tilde{p}}(t)$

$$\tilde{g}_{b\tilde{p}}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} dz e^{z\omega t} \tilde{g}_{bb}^*(\omega) \left[\tilde{G}(M(\omega)) \tilde{g}_{\tilde{p}\tilde{p}}^*(\omega) + \sum_{\tilde{b}'} \langle \tilde{b}' | M(\omega) | b' \rangle \tilde{g}_{b'\tilde{p}}^*(\omega) \right] \tilde{g}_{b\tilde{p}}^*(\omega) \times$$

$$\times \langle \tilde{b}' | M(\omega) | b' \rangle \tilde{g}_{\tilde{p}\tilde{p}}^*(\omega) + \sum_{\tilde{b}'} \langle \tilde{b}' | M(\omega) | b' \rangle \tilde{g}_{b'\tilde{p}}^*(\omega) \langle \tilde{p} | M(\omega) | b' \rangle \tilde{g}_{b\tilde{p}}^*(\omega) \times$$

$$\times \langle \tilde{b}' | M(\omega) | b' \rangle \tilde{g}_{b\tilde{p}}^*(\omega) + \dots] .$$

Para a escolha autoconsistente (33), temos

$$\tilde{g}_{b\tilde{p}}(t) = e^{-i\tilde{E}_p t} \left[\frac{\langle \tilde{b} | M(\omega) | b \rangle}{\tilde{E}_b - \tilde{E}_p} + \sum_{b'} \frac{\langle \tilde{b}' | M(\omega) | b \rangle}{\tilde{E}_b - \tilde{E}_{b'}} \frac{\langle \tilde{b}' | M(\omega) | b \rangle}{\tilde{E}_b - \tilde{E}_p} + \dots \right]$$

e, utilizando-se (32), segue que

$$\tilde{g}_{b\tilde{p}}(t) = e^{-i\tilde{E}_p t} P_{b\tilde{p}} .$$

Podemos, novamente, definir uma probabilidade de ocupação dependente da energia, a saber,

$$\begin{aligned} P_{b\tilde{p}}(\omega) &= \frac{\langle \tilde{b} | M(\omega) | b \rangle}{\omega - \tilde{E}_p} + \sum_{b'} \frac{\langle \tilde{b}' | M(\omega) | b' \rangle}{\omega - \tilde{E}_{b'}} \frac{\langle \tilde{b}' | M(\omega) | b \rangle}{\omega - \tilde{E}_p} + \dots = \\ &= \sum_{b'} P_{b'b}(\omega) \frac{\langle \tilde{b}' | M(\omega) | b \rangle}{\omega - \tilde{E}_p} , \end{aligned} \quad (35)$$

sendo

$$P_{b\tilde{p}} = P_{b\tilde{p}}(\omega) \Big|_{\omega=\tilde{E}_b} .$$

iii) $\mathcal{G}_{p\tilde{b}}(t)$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{p\tilde{b}}(t) = & -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{iwt} \mathcal{G}_{pp}^*(w) [P(M(w)) \mathcal{G}_{\tilde{b}\tilde{b}}^*(w) + \sum_p \langle \tilde{b}|M(w)|p\rangle \mathcal{G}_{pb}^*(w) \\ & \times \langle \tilde{b}|M(w)|b\rangle \mathcal{G}_{bb}^*(w) + \dots] . \end{aligned}$$

Para a escolha autoconsistente (33), o integrando da expressão acima não tem nenhum polo no semi-plano superior da energia e, assim, o resultado será zero:

$$\mathcal{G}_{p\tilde{b}}(t) = 0 \quad , \text{ para } t < 0$$

Portanto,

$$P_{pb} = 0$$

Essa assimetria existente entre os propagadores partícula-buraco e buraco-partícula é decorrência do tratamento assimétrico dado a partículas e buracos, uma vez que os propagadores de partículas são simplesmente os propagadores livres,

$$\mathcal{G}_{pp}(t) = \mathcal{G}_{\tilde{b}\tilde{b}}^*(t) \delta_{pp} = \mathcal{G}_p(t)$$

Observe-se que, para $t > 0$, temos $\mathcal{G}_{p\tilde{b}}(t) = 0$ e $\mathcal{G}_{p\tilde{b}}(t) \neq 0$ para escolha apropriada de U .

Queremos ressaltar que, no cálculo dos propagadores (30), não foi necessário se fazer nenhuma hipótese a respeito dos elementos de matriz buraco-partícula de $M(\omega)$. Se, então, acrescentarmos, às escolhas (33), a escolha que segue, para esses elementos de matriz,

$$\langle \tilde{b} | M(\epsilon_b) | f \rangle = 0 = \langle \tilde{b} | f(\epsilon_b) | f \rangle - \langle \tilde{b} | U | f \rangle, \quad (33')$$

estará eliminado o termo de primeira ordem na expressão para a probabilidade de ocupação partícula-buraco (35).

O próximo passo para se obter o funcional BHFND é o cálculo das somas S_C e S_L .

No presente caso, S_L é dado por

$$\begin{aligned}
 S_L &= \text{Diagrama com } \tilde{\alpha} \text{ e } M \text{ em um buraco} = \text{Diagrama com } \tilde{\alpha} \text{ e } M \text{ em um buraco} + \text{Diagrama com } M \text{ e } \tilde{\alpha} \text{ em um buraco} + \dots = \\
 &= \sum_{\alpha\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dw g_{\alpha\tilde{\beta}}(w) \langle \tilde{\beta} | M(w) | \alpha \rangle = \sum_{bb'} \int_{-\infty}^{\infty} dw g_{bb'}(w) \langle \tilde{b}' | M(w) | b \rangle + \\
 &\quad + \sum_{fb} \int_{-\infty}^{\infty} dw \left[g_{fb}(w) \langle \tilde{f} | M(w) | b \rangle + g_{fb}(w) \langle \tilde{b} | M(w) | f \rangle \right] = \\
 &= \sum_{bb'} P_{bb'} \langle \tilde{b}' | M(\epsilon_b) | b \rangle + \sum_{fb} P_{fb} \langle \tilde{f} | M(\epsilon_f) | b \rangle
 \end{aligned}$$

e, para a escolha autoconsistente (33),

$$S_L = 0.$$

A soma S_C é dada por

$$\begin{aligned}
 S_C &= \text{Diagram } + \frac{1}{2} \text{ Diagram } + \frac{1}{3} \text{ Diagram } + \dots = \\
 &= \sum_b \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{bb}^0(\omega) \langle \tilde{b} | M(\omega) | b \rangle + \frac{1}{2} \sum_b \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{bb}^0(\omega) \left[\sum_{b'} \langle \tilde{b} | M(\omega) | b' \rangle G_{b'b'}^0(\omega) \times \right. \\
 &\quad \times \left. \langle \tilde{b}' | M(\omega) | b \rangle + \sum_p \langle \tilde{b} | M(\omega) | p \rangle G_{pp}^0(\omega) \langle \tilde{p} | M(\omega) | b \rangle \right] + \dots = \\
 &= \sum_b \langle \tilde{b} | M(\epsilon_b) | b \rangle + \frac{1}{2} \sum_b \left[\sum_{b'} \langle \tilde{b} | M(\epsilon_b) | b' \rangle \frac{\langle \tilde{b}' | M(\epsilon_b) | b \rangle}{\epsilon_b - \epsilon_{b'}} + \right. \\
 &\quad \left. + \sum_p \langle \tilde{b} | M(\epsilon_b) | p \rangle \frac{\langle \tilde{p} | M(\epsilon_b) | b \rangle}{\epsilon_b - \epsilon_p} \right] + \dots ,
 \end{aligned}$$

que se anula pela escolha autoconsistente (33).

Assim, da mesma maneira que no caso do funcional $E_{\text{BHF}}^{\text{FR}}$, o funcional E_{BHFND} é obtido considerando-se somente os termos de primeira ordem de S_B :

$$\begin{aligned}
 E_{\text{BHFND}} &= E_0 + \text{Diagram } + \text{Diagram } - \text{Diagram } = \\
 &= \sum_b E_b + \frac{1}{2} \sum_{\substack{b_1 b_2 \\ b'_1 b'_2}} P_{b_1 b_2} \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(\epsilon_{b_2} + \epsilon_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle P_{b'_1 b'_2} - \sum_{b_1 b_2} P_{b_1 b_2} \langle \tilde{b}_1 | U | b_2 \rangle = \\
 &= \sum_b \langle \tilde{b} | T | b \rangle + \sum_{\substack{b_1 b_2 \\ b'_1 b'_2}} (S_{b_1 b_2} - P_{b_1 b_2}) \langle \tilde{b}_1 | U | b_2 \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\substack{b_1 b_2 \\ b'_1 b'_2}} P_{b_1 b_2} \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(\epsilon_{b_2} + \epsilon_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle P_{b'_1 b'_2} ,
 \end{aligned}$$

(36)

com a escolha auto-consistente (33) que, em ordem mais baixa, seria dada por

$$\langle \tilde{b}_1 | U | b_2 \rangle = \langle \tilde{b}_1 | f(\epsilon_{b_2}) | b_2 \rangle = \begin{array}{c} \text{Diagrama com } \tilde{b}_1 \text{ e } b_2 \text{ interagindo via } f \end{array} + \begin{array}{c} \text{Diagrama com } \tilde{b}_1 \text{ e } b_2 \text{ interagindo via } G \end{array} = \sum_{b'_1 b'_2} \langle \tilde{b}_1 b'_1 | G(\epsilon_{b_2} + \epsilon_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle P_{b'_1 b'_2}$$

(36')

$$\langle \tilde{p}_1 | U | b \rangle = \langle \tilde{p}_1 f(\epsilon_b) | b \rangle = \begin{array}{c} \text{Diagrama com } \tilde{p}_1 \text{ e } b \text{ interagindo via } f \end{array} + \begin{array}{c} \text{Diagrama com } \tilde{p}_1 \text{ e } b \text{ interagindo via } G \end{array} = \sum_{b'_1 b'_2} \langle \tilde{p}_1 b'_1 | G(\epsilon_b + \epsilon_{b'_2}) | b b'_2 \rangle P_{b'_1 b'_2}$$

Achamos oportuno fazer agora a comparação dessa nossa formulação com aquela devida a Brandow (Bd 70) para, depois, apresentarmos as propriedades de estacionaridade desse funcional de BHFND.

Na formulação de Brandow, é feita também, de certa maneira, a renormalização das linhas de partícula. Essa diferença, com respeito ao nosso tratamento, não é muito relevante porque, de maneira ou outra, não há contribuição das probabilidades de ocupação de partícula na aproximação de 1ª ordem considerada. O potencial U , da mencionada formulação, é igualmente não hermitiano e, também, autoconsistente, não sendo, todavia, idêntico ao nosso potencial. Além disso, as probabilidades de ocupação lá consideradas também não coincidem completamente com aquelas por nós consideradas. No mencionado trabalho, a não ortogonalidade da base é ignorada, afirmundo-se que

$$P_{bp} = \langle \Psi_0 | a_b^\dagger a_p | \Psi_0 \rangle \equiv 0$$

e, portanto, para $t < 0$, somente são incluídas (ver (34)) as probabilidades de ocupação buraco-buraco obtidas com a restrição de



que somente linhas de buraco entrem na equação para o propagador $\mathcal{G}_{b_1 b_2}(t)$. Com essa restrição, a expressão para $P_{b_1 b_2}$ fica

$$P_{b_1 b_2} = \delta_{b_1 b_2} + \frac{\langle b_1 | M(E_{b_1}) | b_2 \rangle}{E_{b_1} - E_{b_2}} + \sum_{b'} \frac{\langle b_1 | M(E_{b_1}) | b' \rangle}{E_{b_1} - E_{b'}} \frac{\langle b' | M(E_{b_2}) | b_2 \rangle}{E_{b_2} - E_{b_1}} + \dots$$

Usando-se a relação

$$M(\omega) = f(\omega) - U$$

e a prescrição de autoconsistência para U , a expressão acima fica

$$\begin{aligned} P_{b_1 b_2} = & \delta_{b_1 b_2} + \frac{\langle b_1 | f(E_{b_1}) - f(E_{b_2}) | b_2 \rangle}{E_{b_1} - E_{b_2}} + \\ & + \sum_{b'} \frac{\langle b_1 | f(E_{b_1}) - f(E_{b'}) | b' \rangle}{E_{b_1} - E_{b'}} \frac{\langle b' | f(E_{b_2}) - f(E_{b_1}) | b_2 \rangle}{E_{b_2} - E_{b_1}} + \dots \end{aligned} \quad (37)$$

Se olharmos para a expressão (5.3) do trabalho de Brandow (Bd 70), veremos que são incluídos, em $P_{b_1 b_2}$, termos partícula-buraco e, também, termos partícula-partícula. Esses termos de partícula-partícula são bastante questionáveis, pois o operador $M(\omega)$ (ou M^{on} , em sua notação) não é apropriado para esse caso, uma vez que apresenta singularidades no semi-plano inferior da energia. Além disso, como a imposição $P_{bp} = 0$ implica na ausência de elementos de matriz partícula-buraco em $P_{b_1 b_2}$, a expressão (5.3) de Brandow não é consistente com a imposição acima.

Devemos notar que os valores da energia são importantes na expressão para $P_{b_1 b_2}$ (37) e esses valores são omitidos em (Bd 70). Ressaltamos, ainda, que o operador $M(\omega)$ que entra na definição de $P_{p_1 p_2}$ não coincide com o operador $M(\omega)$ que ocorre em (5.3) e o uso da mesma notação é um tanto enganador.

Como já observado, quando da dedução das probabilidades de ocupação não diagonais, se se introduzir a renormalização para partículas ($t > 0$), o propagador $\tilde{J}_{pb}(t) \neq 0$ e, portanto, $P_{\tilde{p}b} \neq 0$ embora se tenha, para $t < 0$, $P_{\tilde{p}b} = 0$. No trabalho de Brandow é afirmado que $P_{pb} = 0$ e, pelos mesmos motivos expostos anteriormente, a presença de elementos de matriz partícula-buraco na definição de $P_{p_1 p_2}$ não é consistente com essa condição.

Encerrando essa comparação, queremos observar que não haveria maiores dificuldades em se introduzir a renormalização das linhas de partícula na presente formulação, sendo apenas necessário se escolher a parte de $\Sigma(\omega)$ apropriada.

Passamos a seguir, ao estudo das propriedades de estacionariedade do funcional E_{BHFND} .

Vamos considerar a variação do funcional E_{BHFND} com respeito a variação δU no potencial de um corpo. Em 1ª ordem de perturbação, temos que as variações nas energias de partícula-independente são dadas pelos elementos de matriz diagonais de δU e as variações nas funções de onda são dadas pelos elementos de matriz não diagonais. Para buracos,

$$\langle \tilde{b} | \delta U | b \rangle = \langle b | \delta U | \tilde{b} \rangle = \delta \epsilon_b ,$$

$$\langle \delta \tilde{b} | = - \sum_{b' \neq b} \frac{\langle \tilde{b} | \delta U | b' \rangle}{\epsilon_{b'} - \epsilon_b} \langle \tilde{b}' | - \sum_{\tilde{p}} \frac{\langle \tilde{b} | \delta U | \tilde{p} \rangle}{\epsilon_{\tilde{p}} - \epsilon_b} \langle \tilde{p} | , \quad (38)$$

$$|\delta b\rangle = - \sum_{b' \neq b} \frac{\langle \tilde{b}' | \delta U | b \rangle}{\epsilon_{b'} - \epsilon_b} |b'\rangle - \sum_{\tilde{p}} \frac{\langle \tilde{p} | \delta U | b \rangle}{\epsilon_{\tilde{p}} - \epsilon_b} |\tilde{p}\rangle .$$

A variação δE_{BHFND} (Apêndice B), com $\langle \tilde{p} | U | p' \rangle = 0$ e $\langle \tilde{b} | U | b' \rangle$ dado por (36'), é

$$\begin{aligned}
 \delta E_{\text{BHFND}} = & - \sum_{\substack{b_1 \\ b_2 \neq b_1}} \tilde{P}_{\tilde{b}_2 b_1} \langle \tilde{b}_1 | \delta U | b_2 \rangle - \sum_{\substack{b_2 \\ p}} \frac{\langle \tilde{p} | \delta U | b_2 \rangle}{\epsilon_p - \epsilon_{b_2}} \left[\sum_{b_1} \tilde{P}_{\tilde{b}_2 b_1} \left(\sum_{\substack{b'_1 b'_2 \\ b'_2 b'_1}} \tilde{P}_{\tilde{b}'_2 b'_1} \langle \tilde{b}'_1 b'_1 | G(\epsilon_{b'_2} + \epsilon_{b'_1}) | p' b'_2 \rangle \right. \right. \\
 & \left. \left. - \langle \tilde{b}'_1 | U | p' \rangle \right) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{b_1 b'_1 \\ b'_2 b'_1 p' \\ b'_2 p' p''}} \tilde{P}_{\tilde{b}'_2 b_1} \tilde{P}_{\tilde{b}'_1 b'_1} \langle \tilde{b}'_1 b'_1 | G(\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2}) | p' p'' \rangle \frac{1}{\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2} - \epsilon_p - \epsilon_{p''}} \times \right. \\
 & \times \langle \tilde{p}' b'_2 | G(\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2}) | b'_1 b'_2 \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\substack{b_1 b'_1 b'_2 \\ b'_2 p' p''}} \tilde{P}_{\tilde{b}'_2 b_1} \tilde{P}_{\tilde{b}'_1 b'_2} \frac{\langle \tilde{b}'_1 b'_1 | G(\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2}) | p' p'' \rangle}{\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2} - \epsilon_p - \epsilon_{p''}} \times \\
 & \times \left. \frac{\langle \tilde{p}' p'' | G(\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2}) | b'_1 b'_2 \rangle}{\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2} - \epsilon_{p'} - \epsilon_{p''}} \langle b_2 | U | p' \rangle \right] + \sum_{\substack{b_2 \\ p}} \frac{\langle \tilde{b}_2 | \delta U | p' \rangle}{\epsilon_p - \epsilon_{b_2}} \left[\sum_{b'_1} \tilde{P}_{\tilde{b}'_1 b_2} \times \right. \\
 & \times \left(\langle \tilde{p} | U | b_1 \rangle - \sum_{\substack{b'_1 b'_2 \\ b'_2 b'_1}} \tilde{P}_{\tilde{b}'_2 b'_1} \langle \tilde{p} b'_2 | G(\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2}) | b'_1 b'_1 \rangle \right) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{b_1 b'_1 b'_2 \\ b'_2 p' \\ b'_2 p' p''}} \tilde{P}_{\tilde{b}'_1 b_1} \tilde{P}_{\tilde{b}'_2 b'_2} \times \\
 & \times \langle \tilde{b}'_1 b'_1 | G(\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2}) | p' b'_2 \rangle \frac{1}{\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2} - \epsilon_{p'} - \epsilon_{p''}} \langle \tilde{p}' p'' | G(\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2}) | b'_1 b'_2 \rangle \\
 & + \left. \frac{1}{2} \sum_{\substack{b_1 b'_1 b'_2 \\ b'_2 b'_1 p' \\ b'_2 p' p''}} \tilde{P}_{\tilde{b}'_1 b_1} \tilde{P}_{\tilde{b}'_2 b'_2} \frac{\langle \tilde{b}'_1 b'_1 | G(\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2}) | p' p'' \rangle}{(\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2} - \epsilon_p - \epsilon_{p''})(\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2} - \epsilon_{p'} - \epsilon_{p''})} \langle \tilde{p}' p'' | G(\epsilon_{b'_1} + \epsilon_{b'_2}) | b'_1 b'_2 \rangle \langle \tilde{p}' | U | b_2 \rangle \right].
 \end{aligned}$$

(39)

Para a escolha (36'), feita para os elementos de matriz buraco-buraco, de U , vemos que o funcional não é estacionário. De (39), decorre que o defeito de estacionaridade correspondente à escolha (36'), é, no caso buraco-buraco,

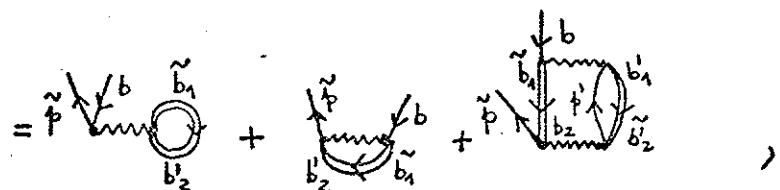
$$\chi_{\tilde{b}_1 \tilde{b}_2} = -P_{\tilde{b}_2 \tilde{b}_1}, \quad b_1 \neq b_2 .$$

Se fizéssemos a escolha (36') para o caso partícula-buraco, veríamos que a expressão para o defeito de estacionaridade seria mais complicada, por conter termos que não podem ser representados diagramaticamente, isto é, termos que não pertencem à expansão de Brueckner-Goldstone. A condição (33), para U , exige a representação diagramática. É possível somar-se e subtrair-se um termo conveniente de maneira a se obter um termo de 2ª ordem que possa ser representado diagramaticamente e que seja correspondente ao termo dependente da densidade, o qual é incluído no caso do funcional de H-F dependente da densidade (Ng 70). Todavia, ainda sobram termos que não podem ser representados diagramaticamente e, assim, a escolha autoconsistente (33) não é compatível com a estacionaridade.

A escolha

$$\langle \tilde{p} | U | b \rangle = \sum_{b_1 b'_1} P_{\tilde{b}_2 b'_1} \langle \tilde{p} \tilde{b}'_1 | G(E_b + E_{b'_1}) | b b'_1 \rangle_A +$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{\substack{b_1 b'_1 \\ b_2 b'_2}} P_{\tilde{b}_2 b'_1} P_{\tilde{b}_1 b'_2} \frac{\langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | \tilde{p} b \rangle_A \langle \tilde{p}' \tilde{p} | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle_A}{E_{b_2} + E_{b'_2} - E_p - E_{p'}} = \quad (40)$$



corresponde ao defeito de estacionaridade o menor possível e é dado por

$$\begin{aligned}
 X_{bp} = & \frac{1}{E_p - E_b} \frac{1}{2} \sum_{\substack{b_1 b'_1 \\ b_2 b'_2 \\ p}} P_{b_1 b'_1} P_{b_2 b'_2} \left[\langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | \tilde{p}' b \rangle_A + \right. \\
 & - \sum_{b''} P_{b'' b} \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | \tilde{p}' b' \rangle_A \frac{1}{E_{b_2} + E_{b'_2} - E_p - E_{p''}} \langle \tilde{p}'' \tilde{p} | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle_A + \\
 & \left. - \sum_{\tilde{p}''} \frac{\langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | \tilde{p}' \tilde{p}'' \rangle_A \langle \tilde{p}'' \tilde{p} | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle_A \langle \tilde{p}' | U | b \rangle}{(E_{b_2} + E_{b'_2} - E_p - E_{p''})(E_{b_2} + E_{b'_2} - E_p - E_{p''})} \right]. \quad (41)
 \end{aligned}$$

O único elemento de matriz de U , para o qual não foi necessário se impor condição alguma na dedução de E_{BHND} , é o elemento de matriz buraco-partícula.

A prescrição para esse elemento de matriz pode ser obtida impondo-se a estacionaridade, i.e.,

$$\frac{\delta E}{\langle \tilde{p} | \delta U | b_2 \rangle} = 0$$

Vemos, da expressão (39), que somente o termo de 1^a ordem pode ser representado diagramaticamente, o que é absolutamente necessário em um tratamento perturbativo, embora – como dissemos acima – pudéssemos, não havendo nenhuma condição no que diz respeito a esses elementos de matriz, escolhê-los a partir da condição de estacio-

naridade. Da mesma maneira que no caso partícula-buraco, podemos somar e subtrair um termo apropriado, o que torna possível fazer -se a escolha correspondente a (40) – intercambiando-se p e b – sendo o defeito de estacionaridade, $x_{\tilde{p}b}$, dado pela expressão (41), $p \leftrightarrow b$, com um termo adicional, de modo que $x_{\tilde{p}b} > x_{\tilde{b}p}$, o que resulta da assimetria entre partículas e buracos no presente formalismo.

Embora haja liberdade na escolha dos elementos de matriz buraco-partícula, sendo portanto possível fazer-se a escolha que nos pareça a mais adequada, o mesmo não ocorre com os elementos de matriz partícula-buraco (e, também, buraco-buraco) pois os propagadores não diagonais resultaram da condição de autoconsistência (33). Portanto, a escolha (40) para $\langle \tilde{p}|U|b \rangle$ só é possível se for incluído, no cálculo dos propagadores, o termo $M(\omega)$ dado por



Isso só será possível se tal termo não tiver polos no semi-plano superior da energia, condição necessária para que se obtenha a fatorização da probabilidade de ocupação nos propagadores. Infelizmente, os polos desse termo estão no semi-plano superior (Apêndice D), de maneira que a escolha (40) não permite tal fatorização. Como a escolha (33) não inclui nenhuma prescrição para os elementos de matriz buraco-partícula, a escolha para tais elementos de matriz correspondendo à expressão (40), é perfeitamente possível; se a escolha (33') fosse adicionada a (33), teríamos, então, também o problema de autoconsistência para os elementos de matriz buraco-partícula.

Vemos, portanto, que, se por um lado a renormalização de todos os propagadores não diagonais, para $t < 0$, inclui mais termos da expansão de Brueckner-Goldstone nos termos de 1^a ordem da expansão assim renormalizada, por outro lado, temos menor liberdade de escolha para o potencial de um corpo, U . Para que se tenha liberdade de escolha para os elementos de matriz partícula-buraco, de U , é necessário que se renormalize pura e simplesmente as li-

nhas de buraco de modo que somente estados de buraco entrem na equação de Dyson para os propagadores. Entretanto, mesmo para essa renormalização mais restrita, não se obterá um funcional de energia estacionário com relação a variações de U desde que se queira considerar, na definição dos elementos de matriz de U , não fixados, somente termos que possam ser representados diagramaticamente, correspondendo portanto a termos de uma expansão perturbativa.

Capítulo 5 - Discussão e Conclusões

Os objetivos do estudo aqui apresentado eram obter a prescrição ótima para o potencial de um corpo, U , para núcleos de camada fechada, de maneira a incluir o maior número possível de termos naqueles de primeira ordem da expansão para ΔE (8'), e relacionar essa teoria com a teoria dependente da densidade (Ng 70).

A tentativa de uma renormalização mais completa da expansão de Brueckner-Goldstone foi motivada primeiramente pelo fato dos cálculos com o (Da 71) funcional E_{BHFR} não produzirem resultados muito bons e, em segundo lugar, pelo fato dos defeitos de estacionariedade desse funcional (Sr 75, Ml 75) estarem relacionados a probabilidades de ocupação não diagonais. Devemos ressaltar que a renormalização completa da expansão de Brueckner-Goldstone não é possível, pois a fatorabilidade dos propagadores só ocorrerá se o operador de massa $\Sigma(\omega)$ (18), não tiver polos de espécie alguma, o que não é o caso. Logo, para os propagadores avançados, considera-se a parte $M(\omega)$ de $\Sigma(\omega)$ que não tem polos no semi-plano superior da energia, enquanto, para os propagadores retardados, teríamos que considerar a parte de $\Sigma(\omega)$ que não tem polos no semi-plano inferior. Com essas restrições, os propagadores podem ser fatorados de maneira que a renormalização seja obtida simplesmente multiplicando-se os propagadores livres pelas probabilidades de ocupação.

As probabilidades de ocupação constituem uma medida da competição pela ocupação dos estados correspondentes e, sendo o número de estados de partículas (acima do nível de Fermi) muito numerosos, certamente as probabilidades de ocupação para estados de partícula não devem ser muito grandes. Para a matéria nuclear, essas probabilidades são da ordem de 0,15 (Bd 66). No caso de estados de buraco, ao contrário, o número de estados disponíveis é pequeno em virtude do princípio de exclusão de Pauli e, por isso, a probabilidade de ocupação é grande, sendo da ordem de 0,90 para a matéria nuclear (Bd 66). Por esses motivos, decidimos fazer somente a renormalização dos propagadores avançados, mesmo porque 2 é a menor potência da probabilidade de ocupação, de partícula, que apareceria na expansão para ΔE .

Para se fazer a renormalização completa dos propagadores avançados, onde por renormalização completa queremos dizer que os propagadores considerados serão não diagonais (incluindo-se também propagadores partícula-buraco), é necessário sejam feitas escolhas particulares para os elementos de matriz buraco-buraco e partícula-buraco, de U (que não é hermitiano), dados pela expressão (33). Como não estamos renormalizando as linhas de partícula, nas expressões para os propagadores avançados nunca entram elementos de matriz partícula-partícula de $M(\omega)$ e, portanto, com a escolha (33), os propagadores não diagonais são fatorizáveis. Ressaltamos que nenhuma escolha se faz necessária para os elementos de matriz buraco-partícula, de U ; de qualquer maneira, essa renormalização dos propagadores avançados não diagonais (para núcleos finitos) envolve mais restrições do que a renormalização somente com propagadores diagonais pois, como vimos nesse caso, a escolha é feita somente para os elementos de matriz buraco-buraco diagonais, de U (27), enquanto que aqui precisamos escolher também os elementos de matriz buraco-buraco não diagonais e mais os elementos de matriz partícula-buraco (33). Se se adicionasse, à escolha (33), a escolha (33') para os elementos de matriz buraco-partícula de U , eliminar-se-ia o termo de 1^a ordem da expressão (35) para $P_{\tilde{b}p}$, e o potencial U ficaria totalmente determinado, os defeitos de estacionaridade correspondentes a essa escolha sendo dados pelos termos restantes em (39). Mais uma vez queremos fazer a ressalva de que essa renormalização de propagadores não diagonais não se aplica à matéria nuclear pois os termos nela incluídos violam a conservação do momento.

Com a escolha autoconsistente (33) para U , e com a escolha de $M(\omega)$ sem polos no semi-plano superior, obtém-se a fatorização dos propagadores não diagonais avançados ($t < 0$) de buraco-buraco, partícula-buraco e buraco-partícula, o último desses sendo igual a zero. As probabilidades de ocupação buraco-buraco e partícula-buraco são dadas respectivamente por (34) e (35), sendo nula a probabilidade de ocupação buraco-partícula. Se estivéssemos fazendo a renormalização dos propagadores retardados, essa probabilidade de ocupação seria diferente de zero. Observe-se ainda,

que o propagador partícula-buraco retardado ($t > 0$) anular-se-á desde que se utilize somente a parte de $\Sigma(\omega)$ apropriada, qual seja, sem polos no semi-plano inferior da energia, de modo a se poder efetuar a integral fechando-se o contorno por baixo.

Vimos que uma renormalização para incluir as probabilidades de ocupação não diagonais foi feita por Brandow (Bd 70), seu tratamento sendo, em princípio, completo pois inclui também as probabilidades de ocupação para partículas. Como já observamos, para se fazer essa renormalização total, deve-se considerar para cada caso a parte apropriada do operador de massa $\Sigma(\omega)$. No trabalho mencionado, entretanto, apesar do potencial U não ser hermitiano (da mesma forma que no presente trabalho), os estados de partícula independente são tratados como se fossem ortogonais e é afirmado que as probabilidades de ocupação partícula-buraco e buraco-partícula são identicamente nulas, o que por nós foi mostrado não ser verdade. No nosso caso, como vimos, as probabilidades de ocupação buraco-partícula são idênticamente nulas somente porque não fizemos a renormalização para $t > 0$. Como no trabalho mencionado (Bd 70), também os propagadores retardados são renormalizados, todas as probabilidades de ocupação serão diferentes de zero, sendo que para as escolhas autoconsistentes (33) e (33') (função f adequadas para cada caso) as probabilidades de ocupação partícula-buraco e buraco-partícula não teriam o termo de 1^a ordem e, portanto, seriam nulas no caso de se desprezar termos de ordem maior que a 1^a. Considerando-se as probabilidades de ocupação partícula-buraco e buraco-partícula iguais a zero, teremos que as probabilidades de ocupação buraco-buraco (não diagonais) só podem envolver elementos de matriz buraco-buraco de $M(\omega)$ como é dado em (37), e assim a expressão (5.3) do mencionado trabalho de Brandow só será correta desde que sejam incluídos somente elementos de matriz buraco-buraco. Analogamente, a expressão para as probabilidades de ocupação partícula-partícula, não diagonais, só poderá incluir elementos de matriz partícula-partícula da parte de $\Sigma(\omega)$ apropriada para os propagadores retardados.

O novo funcional de Brueckner-Hartree-Fock renormalizado, E_{BHFN} , foi obtido, da mesma maneira que o funcional E_{BHFR} , utilizando - se o teorema de BLC (B1 65). Para a escolha autoconsistente (33), o

funcional E_{BHFND} é dado pela expressão (36). O estudo das propriedades de estacionaridade desse funcional, com respeito a variações δU do potencial de um corpo, U , não hermitiano, mostraram que não é possível fazer-se uma escolha, de U , compatível com (33), para a qual δE_{BHFND} se anule. Mais ainda, não é possível fazer-se a escolha para os elementos de matriz partícula-buraco de U (40) que tornaria o defeito de estacionaridade o menor possível, pois o termo em (40), de 2^a ordem na interação, corresponde a um termo de $\Sigma(\omega)$ que possui polos no semi-plano superior da energia. Portanto, tal termo jamais poderia ser incluído no cálculo dos propagadores e, se tal termo fosse incluído na definição dos elementos de matriz partícula-buraco, seria violada a condição de autoconsistência (33). Para o caso dos elementos de matriz buraco-partícula, esse termo de 2^a ordem poderia ser incluído uma vez que não há nenhuma imposição de autoconsistência para esses elementos de matriz (desde que não se tenha incluído a escolha (33')). Esse termo de 2^a ordem na interação $G(\omega)$ é o termo que é incluído na teoria de H-F dependente da densidade de Negele (Ng 70) e, como é demonstrado no Apêndice B, esse termo provém da variação do operador de Pauli Q (10') na eq. (10) para a interação $G(\omega)$. Ressaltamos que a estacionaridade, tanto desse funcional E_{BHFND} quanto dos funcionais E_{BHFR} e E_{BHF} , não requer (Ml 75) a introdução do termo correspondente na definição dos elementos de matriz buraco-buraco, contrariamente ao que é afirmado por Tripathi e outros (Tr 73 e Tr 74). Consequentemente, a inclusão desse termo na definição dos elementos de matriz buraco-buraco, de U , poderia aumentar a não estacionaridade do funcional de energia.

A escolha dos elementos de matriz partícula-buraco e buraco-partícula, de U , poderia ser feita, a partir da condição de estacionaridade do funcional de energia, se se fizesse a renormalização incluindo somente misturas de estados de buraco de maneira que os propagadores partícula-buraco e buraco-partícula seriam identicamente nulos, e o propagador buraco-buraco envolveria apenas elementos de matriz buraco-buraco de $M(\omega)$. Com essa restrição, obtém-se a probabilidade de ocupação $P_{\tilde{b}^1 b^2}$ dada por (37), a qual envolve apenas a condição de autoconsistência para os elementos de matriz

buraco-buraco de U . Todavia, desde que se deseje considerar, na definição de U , somente termos que possam ser representados diagramaticamente, mesmo fazendo essa renormalização envolvendo misturas apenas de buracos, o funcional correspondente jamais seria estacionário uma vez que, além dos termos correspondentes a (40), também neste caso apareceriam termos não representáveis por diagramas, $x_{\tilde{p}b}$ e $x_{\tilde{b}p}$ sendo, portanto, não nulos. Entretanto, mesmo que se incluissem todos os termos na definição dos elementos de matriz partícula-buraco e buraco-partícula, de U , o defeito de estacionariedade $x_{\tilde{b}b}$ permaneceria, visto que a escolha (36') para o elemento de matriz buraco-buraco tem que ser usada ao se efetuar a variação pois, caso contrário, a expressão para δE_{BHFD} se tornaria absolutamente intratável porque conteria um termo com $\delta P_{\tilde{b}'b}$. Logo os funcionais de energia resultantes da renormalização de propagadores não podem ser tornados estacionários através de uma escolha apropriada do potencial de um corpo, U , sendo violada, portanto, a condição necessária para que esses funcionais de energia constituam uma boa aproximação para a energia do estado fundamental de núcleos de camada fechada.

Vejamos, então, qual a consequência desse resultado no que diz respeito à possibilidade de relacionamento desses funcionais renormalizados com a teoria de Hartree-Fock dependente da densidade de Negele. O potencial de um corpo, U_{HF} , resulta, nesse caso, da aplicação do princípio variacional ao funcional de energia que será, portanto, estacionário com respeito a variações de U_{HF} . Como já mencionamos anteriormente, os elementos de matriz partícula-buraco e buraco-partícula de U_{HF} são dados pelos mesmos diagramas de (40) (com linhas simples) e, como esse mesmo tipo de escolha não torna estacionários os funcionais renormalizados, esses funcionais devem ser distintos desse funcional de Hartree-Fock dependente da densidade. Todavia, antes de se concluir isso definitivamente, seria necessário realizar cálculos com esses funcionais renormalizados, pelo menos com o funcional E_{BHFR} . Os cálculos existentes para E_{BHFR} (Da 71) não incluem o termo de 2^a ordem (dependente da densidade) na definição dos elementos de matriz partícula-buraco e buraco-partícula, o que nesse caso pode ser feito uma vez que essa renormalização de propagadores diag-

nais não envolve restrições de autoconsistência para esses elementos de matriz.

Devemos ter em conta que o trabalho de Negele tem dois conjuntos de resultados: um que utiliza a força efetiva dependente da densidade sem ajustes; e outro que utiliza a força efetiva dependente da densidade previamente ajustada de maneira a reproduzir os dados empíricos para a matéria nuclear. Os cálculos de BHFR, (Da 71) incluindo somente os termos de 1^a ordem na definição dos elementos de matriz de U , produzem resultados que não são tão bons mesmo quando comparados aos resultados de Negele sem ajuste da força efetiva. Entretanto, seria bastante ilustrativo se os resultados dos cálculos de BHFR, incluindo os termos de 2^a ordem, fossem comparáveis aos resultados de Negele sem ajuste pois isso significaria que, efetivamente, os funcionais seriam equivalentes embora o funcional de Hartree-Fock seja estacionário e o outro não; afinal, a estacionariedade é uma condição necessária, porém não suficiente, para que os funcionais de energia, que correspondem à aproximação de 1^a ordem, constituam uma boa aproximação para a energia do estado fundamental. Além disso, se esses resultados fossem comparáveis, significaria que o ajuste da força efetiva de alguma maneira leva em conta os defeitos de estacionariedade do funcional E_{BHFR} . Devemos mencionar que a comparação dos resultados desses diferentes tipos de cálculo, feita por Davies et al. (Da 74), sugere a equivalência mencionada.

Como observamos, a impossibilidade de ser obter funcionais renormalizados estacionários é uma indicação de que termos de ordem maior que a 1^a sejam necessários para se descrever a energia do estado fundamental do sistema nuclear (de camadas fechadas), o que, aliás, é corroborado pela necessidade de ajuste da força efetiva dependente da densidade para que os resultados dos cálculos reproduzam melhor os dados experimentais.

Além de termos de ordem mais alta da expansão perturbativa, talvez seja também necessária a introdução de forças de três ou mais corpos. Sem dúvida, não é possível afirmar-se, definitivamente, ser imprescindível a introdução de termos de ordem mais alta (correlações de três ou mais corpos) ou de forças de três ou mais corpos, pois nenhuma das forças de dois corpos existentes reproduz as de-

fasagens do espalhamento nucleon-nucleon perfeitamente e, além disso, a parte fora da camada de energia da força nuclear não é conhecida experimentalmente, da mesma maneira que a intensidade do seu termo tensorial (Ho 78, Fr 78). Mesmo os potenciais mais recentes de troca de bosons, propostos pelo grupo de Bonn (Ho 75, Ho 76 e Ho 78), apesar de reproduzirem as defasagens melhor que qualquer dos outros potenciais realísticos, ainda deixam a desejar.

O fato, então, de nenhum potencial de dois corpos, do tipo realístico, reproduzir os resultados empíricos para a matéria nuclear (Ho 75), pode ser tanto interpretado como indicando a importância de forças de três ou mais corpos, como também da inadequação da particular força de dois corpos escolhida, ou da importância das correlações de três ou mais corpos, no caso do modelo nuclear utilizado. A decisão disso fica obviamente a cargo do pesquisador.

Uma teoria muito boa para o tratamento das correlações é a chamada teoria exp S , proposta por Coester e Kummel (Ct 58 e Ct 60) e desenvolvida por Kummel e colaboradores (Km 78). Essa teoria fornece, para um sistema de A corpos, um sistema de A equações acopladas que permitem a inclusão sistemática de correlações até a ordem desejada. Cálculos realizados por Zabolitzky (Za 74), incluindo correlações até de três corpos, produziram resultados melhores do que os resultados que utilizaram a teoria de Brueckner - Goldstone (Da 71). Entretanto, na prática, não é possível se incluir correlações de mais que quatro corpos e, nesse caso, somente com certas aproximações, devido à grande complexidade das equações (Km 78).

Como vemos, o tratamento de sistemas nucleares não degenerados já é bastante complicado e, portanto, o tratamento de sistemas degenerados resultará mais complicado ainda pois é feito a partir do sistema não degenerado contido no sistema degenerado (Bd 67, Mf 69, Jo 71). Dessa maneira, tal tratamento carregará os problemas do tratamento dos sistemas não degenerados, além dos problemas a ele inerentes.

A natureza é extremamente complicada e certamente não é possível descrevê-la exatamente. Podemos tão somente descrever modelos que imaginamos para os fenômenos que se deseja descrever. Fenômenos físicos admitem normalmente mais de um modelo, sendo que a beleza e a simplicidade desempenham um papel muito importante na seleção do modelo a ser adotado (Ea 72). Embora não seja possível uma descrição exata da Natureza, poderia ser possível a sua descrição através de um modelo unificado cuja obtenção constitui o grande sonho da comunidade científica. Em 1931, Goedel (Na 56) demonstrou que uma teoria matemática consistente é incompleta. Concluindo, deixo a pergunta: será possível se construir um modelo global da Natureza, unificado e consistente? Ou, então, será pelo menos possível a obtenção de um modelo nuclear unificado que descreva todo e qualquer aspecto dos núcleos atômicos?

"I do not know what I may appear to the world, but to myself I seem to have been only like a boy playing on the sea-shore, and diverting myself in now and then finding a smoother pebble or a prettier shell than ordinary, whilst the great ocean of truth lay all undiscovered before me."

Sir Isaac Newton; from Brewster's "Memoirs of Newton".

Apêndice A

Base bi-ortonormal com $\langle p | b \rangle = 0$

Os cálculos são efetuados, na prática, com um número finito de orbitais. Vamos considerar n_1 estados $\langle b |$ e n_2 estados $\langle p |$, linearmente independentes. Os estados complementares $\langle \tilde{b} |$ e $\langle \tilde{p} |$, no caso geral, são dados por

$$\langle \tilde{p} | = \sum_b \langle \tilde{p} | \tilde{b} \rangle \langle b | + \sum_{p_1} \langle \tilde{p} | \tilde{p}_1 \rangle \langle p_1 | ,$$

e

$$\langle \tilde{b} | = \sum_{b_1} \langle \tilde{b} | \tilde{b}_1 \rangle \langle b_1 | + \sum_p \langle \tilde{b} | \tilde{p} \rangle \langle p | ,$$

sendo

$$\langle \tilde{\alpha} | \beta \rangle = \langle \tilde{\beta} | \alpha \rangle = \delta_{\alpha \beta} .$$

No caso particular em que $\langle p | b \rangle = 0$, para quaisquer p e b , os coeficientes $\langle \tilde{b} | \tilde{b}' \rangle$ da expansão acima são obtidos resolvendo o sistema linear de n_1 equações, resultantes do produto escalar $\langle \tilde{b} | b' \rangle$:

$$\sum_{b_1} \langle \tilde{b} | \tilde{b}_1 \rangle \langle b_1 | b' \rangle = \delta_{bb'} .$$

Os coeficientes $\langle \tilde{b} | \tilde{p} \rangle$, por outro lado, são obtidos do sistema linear de n_2 equações resultantes do produto escalar $\langle \tilde{b} | p' \rangle$:

$$\sum_p \langle \tilde{b} | \tilde{p} \rangle \langle p | p' \rangle = 0 ,$$

cuja solução, em virtude da independência linear dos estados sem o til, é

$$\langle \tilde{b} | \tilde{p} \rangle = 0 \quad (\text{para quaisquer } b \text{ e } p) .$$

Logo, $\langle p | b \rangle = 0$ implica em $\langle \tilde{p} | \tilde{b} \rangle = 0$ e, consequentemente, os estados de buraco complementares $\langle \tilde{b} |$ contêm apenas mistura de estados de buraco $\langle b |$:

$$\langle \tilde{b} | = \sum_{b_1} \langle \tilde{b} | \tilde{b}_1 \rangle \langle b_1 | .$$

Da mesma maneira, mostra-se que

$$\langle \tilde{p} | = \sum_{\tilde{p}_n} \langle \tilde{p} | \tilde{p}_n \rangle \langle p_n | .$$

Vejamos agora quais condições devem ser satisfeitas por U , a fim de que $\langle p | b \rangle = 0$. Temos que

$$\langle p | (T+U) | b \rangle = \varepsilon_b \langle p | b \rangle$$

e

$$\langle b | (T+U) | p \rangle = \langle p | (T+U^\dagger) | b \rangle^* = \varepsilon_p \langle p | b \rangle^* .$$

Subtraindo a 2^a equação da 1^a, tem-se

$$\langle p | U | b \rangle - \langle p | U^\dagger | b \rangle = (\varepsilon_b - \varepsilon_p) \langle p | b \rangle .$$

Portanto,

$$\langle p | b \rangle = 0 \longrightarrow \langle p | U | b \rangle = \langle p | U^\dagger | b \rangle .$$

Como $\langle p | b \rangle = 0 \rightarrow \langle \tilde{p} | \tilde{b} \rangle = 0$, temos que também deverá ser satisfeita a condição

$$\langle \tilde{p} | U | \tilde{b} \rangle = \langle \tilde{p} | U^\dagger | \tilde{b} \rangle .$$

Ambas as condições sobre elementos de matriz de U podem ser satisfeitas.

Apêndice B

Variação do funcional E_{BHFND}

Temos:

$$E_{\text{BHFND}} = \sum_{b_1} \langle \tilde{b}_1 | (T+U) | b_1 \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\substack{b_1 b_2 \\ b'_1 b'_2}} P_{\tilde{b}_1 b_1} \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle A_{\tilde{b}'_1 b'_1} +$$

$$- \sum_{b_1 b_2} P_{\tilde{b}_1 b_1} \langle \tilde{b}_1 | U | b_2 \rangle$$

com a condição (33) sendo $P_{\tilde{b}_2 b_1}$ definidas por (34).

A variação mais geral de E_{BHFND} é aquela obtida da variação δU do potencial U , sendo dada por

$$\begin{aligned} \delta E_{\text{BHFND}} = & \sum_{b_1} (\langle \delta \tilde{b}_1 | T | b_1 \rangle + \langle \tilde{b}_1 | T | \delta b_1 \rangle) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{b_1 b_2 \\ b'_1 b'_2}} \left\{ \left[\langle \delta \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle A_{\tilde{b}'_1 b'_1} + \right. \right. \\ & + \langle \tilde{b}_1 \delta \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle A_{\tilde{b}'_1 b'_1} + \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | \delta b_2 b'_2 \rangle A_{\tilde{b}'_1 b'_1} + \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 \delta b'_2 \rangle A_{\tilde{b}'_1 b'_1} + \\ & \left. \left. + \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | \delta G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle A_{\tilde{b}'_1 b'_1} \right] P_{\tilde{b}_2 b_1} P_{\tilde{b}'_2 b'_1} + \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle A_{\tilde{b}'_1 b'_1} \times \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[\delta P_{\tilde{b}_2 b_1} P_{\tilde{b}'_2 b'_1} + P_{\tilde{b}_2 b_1} \delta P_{\tilde{b}'_2 b'_1} \right] \} + \sum_{b_1} (1 - P_{\tilde{b}_2 b_1}) \left[\langle \delta \tilde{b}_1 | U | b_1 \rangle + \right. \\
 & \left. + \langle \tilde{b}_1 | U | \delta b_1 \rangle + \langle \tilde{b}_1 | \delta U | b_1 \rangle \right] - \sum_{b_1 \neq b_2} P_{\tilde{b}_2 b_1} \left[\langle \delta \tilde{b}_1 | U | b_2 \rangle + \right. \\
 & \left. + \langle \tilde{b}_1 | U | \delta b_2 \rangle + \langle \tilde{b}_1 | \delta U | b_2 \rangle \right] - \sum_{b_1 b_2} \langle \tilde{b}_1 | U | b_2 \rangle \delta P_{\tilde{b}_2 b_1} .
 \end{aligned}$$

Em 1^a ordem, temos

$$\langle \tilde{b} | \delta U | b \rangle = \langle b | \delta U | \tilde{b} \rangle = \delta E_b ,$$

$$\langle \delta \tilde{b} | = - \sum_{b' \neq b} \frac{\langle \tilde{b} | \delta U | b' \rangle}{E_b - E_{b'}} \langle \tilde{b}' | - \sum_p \frac{\langle \tilde{b} | \delta U | p \rangle}{E_p - E_b} \langle \tilde{p} | ,$$

$$|\delta b\rangle = - \sum_{b' \neq b} \frac{\langle \tilde{b}' | \delta U | b \rangle}{E_b - E_{b'}} |b'\rangle - \sum_p \frac{\langle \tilde{p} | \delta U | b \rangle}{E_p - E_b} |p\rangle .$$

Substituindo em δE_{BHFND} , vem

$$\begin{aligned}
 \delta E_{\text{BHFND}} = & - \sum_{b_1} \left[\sum_{b_1 \neq b_2} \left(\frac{\langle \tilde{b}_1 | \delta U | b_2 \rangle}{E_{b_2} - E_{b_1}} \langle \tilde{b}_2 | T | b_1 \rangle + \frac{\langle \tilde{b}_2 | \delta U | b_1 \rangle}{E_{b_2} - E_{b_1}} \langle \tilde{b}_1 | T | b_2 \rangle \right) + \right. \\
 & + \sum_p \left(\frac{\langle \tilde{b}_1 | \delta U | p \rangle}{E_p - E_{b_1}} \langle \tilde{p} | T | b_1 \rangle + \frac{\langle \tilde{p} | \delta U | b_1 \rangle}{E_p - E_{b_1}} \langle \tilde{b}_1 | T | p \rangle \right) \Big] + \\
 & - \sum_{\substack{b_1 b_2 \\ b'_1 b'_2}} P_{\tilde{b}_2 b_1} P_{\tilde{b}'_2 b'_1} \left[\sum_{b_3 \neq b_1} \frac{\langle \tilde{b}_1 | \delta U | b_3 \rangle}{E_{b_3} - E_{b_1}} \langle \tilde{b}_3 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle_A + \right. \\
 & + \sum_{b_3 \neq b_2} \frac{\langle \tilde{b}_3 | \delta U | b_2 \rangle}{E_{b_3} - E_{b_2}} \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_3 b'_2 \rangle_A + \sum_p \left(\frac{\langle \tilde{b}_1 | \delta U | p \rangle}{E_p - E_{b_1}} \langle \tilde{p} \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle_A + \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\langle \tilde{p} | \delta U | b_2 \rangle}{E_p - E_{b_2}} \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | p b'_2 \rangle_A \right) \right] - \sum_{b_1 b_2} \delta P_{\tilde{b}_2 b_1} \left(\langle \tilde{b}_1 | U | b_2 \rangle + \right. \\
 & - \sum_{b_1 b'_2} \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle_A P_{\tilde{b}'_2 b'_1} \Big) + \sum_{b_1 b_2} (\delta_{b_1 b_2} - P_{\tilde{b}_2 b_1}) \langle \tilde{b}_1 | \delta U | b_2 \rangle + \\
 & - \sum_{b_1 b_2} (\delta_{b_1 b_2} - P_{\tilde{b}_2 b_1}) \left[\sum_{b_3 \neq b_1} \frac{\langle \tilde{b}_1 | \delta U | b_3 \rangle}{E_{b_3} - E_{b_1}} \langle \tilde{b}_3 | U | b_2 \rangle + \sum_{b_3 \neq b_2} \frac{\langle \tilde{b}_3 | \delta U | b_2 \rangle}{E_{b_3} - E_{b_2}} \langle \tilde{b}_1 | U | b_3 \rangle + \right. \\
 & + \sum_p \left(\frac{\langle \tilde{b}_1 | \delta U | p \rangle}{E_p - E_{b_1}} \langle \tilde{p} | U | b_2 \rangle + \frac{\langle \tilde{p} | \delta U | b_2 \rangle}{E_p - E_{b_2}} \langle \tilde{b}_1 | U | p \rangle \right) \Big] + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\substack{b_1 b'_1 \\ b_2 b'_2}} P_{\tilde{b}_2 b_1} P_{\tilde{b}'_2 b'_1} \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}'_1 | \delta G(E_{b_2} + E_{b'_2}) | b_2 b'_2 \rangle_A . \quad (B1)
 \end{aligned}$$

Para a escolha

$$\langle \tilde{b}_1 | U | b_2 \rangle = \sum_{\tilde{b}_1' b_2'} \langle \tilde{b}_1' | G(\epsilon_{b_2} + \epsilon_{b_2'}) | b_2 b_2' \rangle P_{\tilde{b}_1' b_2'} \quad , \quad (B2)$$

elimina-se o termo em $\delta P_{\tilde{b}_2' b_1}$.

A variação δG é obtida da equação (10) para $G(\omega)$:

$$\begin{aligned} \delta G = & G(\omega) \delta Q \frac{1}{e(\omega)} Q G(\omega) + G(\omega) Q \frac{1}{e(\omega)} \delta Q G(\omega) + \\ & - G(\omega) Q \frac{1}{e(\omega)} \delta e(\omega) \frac{1}{e(\omega)} Q G(\omega) \end{aligned}$$

onde, para simplificar, colocamos

$$e(\omega) = \omega - T(1) - U(1) - T(2) - U(2) \quad .$$

A variação δQ calcula-se facilmente, a partir da expressão para Q (10'):

$$Q = \sum_{p_1 p_2} |p_1 p_2 \times \tilde{p}_1 \tilde{p}_2| = \left(1 - \sum_{b_1} |b_1\rangle \langle \tilde{b}_1|\right) \left(1 - \sum_{b_2} |b_2\rangle \langle \tilde{b}_2|\right) \quad ,$$

e o resultado é

$$\begin{aligned} \delta Q = & \sum_{b_1} \left[\frac{\langle \tilde{p}_2 | \delta U | b_1 \rangle}{E_{p_2} - \epsilon_{b_1}} |p_1 p_2\rangle \langle \tilde{p}_1 \tilde{b}_1| + \frac{\langle \tilde{b}_1 | \delta U | p_2 \rangle}{E_{p_2} - \epsilon_{b_1}} |p_1 b_1\rangle \langle \tilde{p}_1 \tilde{p}_2| + \right. \\ & \left. + \frac{\langle \tilde{p}_2 | \delta U | b_1 \rangle}{E_{p_2} - \epsilon_{b_1}} |p_2 p_1\rangle \langle \tilde{b}_1 \tilde{p}_1| + \frac{\langle \tilde{b}_1 | \delta U | p_2 \rangle}{E_{p_2} - \epsilon_{b_1}} |b_1 p_1\rangle \langle \tilde{p}_2 \tilde{p}_1| \right] \quad . \end{aligned}$$

Substituição dessa expressão na expressão para δG dá lugar

a

$$\langle \tilde{b}_1 \tilde{b}_1' | \delta G(E_{b_2} + E_{b_2'}) | b_2 b_2' \rangle_A = \sum_{\substack{b_3 \\ p_1 p_2}} \left[\frac{\langle \tilde{b}_3 | \delta U | p_2 \rangle}{E_{p_2} - E_{b_3}} \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}_1' | G(E_{b_2} + E_{b_2'}) | p_1 b_3 \rangle_B \times \right.$$

$$\left. \times \frac{1}{E_{b_2} + E_{b_2'} - E_{p_1} - E_{p_2}} \langle \tilde{p}_1 \tilde{p}_2 | G(E_{b_2} + E_{b_2'}) | b_2 b_2' \rangle_A + \right]$$

$$+ \frac{\langle \tilde{p}_2 | \delta U | b_3 \rangle}{E_{p_2} - E_{b_3}} \langle \tilde{b}_1 \tilde{b}_1' | G(E_{b_2} + E_{b_2'}) | p_1 p_2 \rangle_B \frac{1}{E_{b_2} + E_{b_2'} - E_{p_1} - E_{p_2}} \times$$

$$\times \langle \tilde{p}_1 \tilde{b}_3 | G(E_{b_2} + E_{b_2'}) | b_2 b_2' \rangle_A - \sum_{p_1 p_2} (\delta E_{b_2} + \delta E_{b_2'}) \times$$

$$\times \frac{\langle \tilde{b}_1 \tilde{b}_1' | G(E_{b_2} + E_{b_2'}) | p_1 p_2 \rangle \langle \tilde{p}_1 \tilde{p}_2 | G(E_{b_2} + E_{b_2'}) | b_2 b_2' \rangle_B}{(E_{b_2} + E_{b_2'} - E_{p_1} - E_{p_2})^2} +$$

$$+ \sum_{\substack{p_1 p_2 \\ p_3}} \langle \tilde{p}_2 | \delta U | p_1 \rangle \frac{\langle \tilde{b}_1 \tilde{b}_1' | G(E_{b_2} + E_{b_2'}) | p_2 p_3 \rangle_A}{E_{b_2} + E_{b_2'} - E_{p_2} - E_{p_3}} \times$$

$$\times \frac{\langle \tilde{p}_1 \tilde{p}_3 | G(E_{b_2} + E_{b_2'}) | b_2 b_2' \rangle_A}{E_{b_2} + E_{b_2'} - E_{p_1} - E_{p_3}} \quad (B3)$$

A condição $\langle \tilde{p}_2 | U | p_1 \rangle = 0$ permite escrever $\langle \tilde{p}_2 | \delta U | p_1 \rangle$ da seguinte maneira:

$$\langle \tilde{p}_2 | \delta U | p_1 \rangle = \sum_{b_3} \left[\frac{\langle \tilde{p}_2 | \delta U | b_3 \rangle}{E_{b_3} - E_{p_2}} \langle \tilde{b}_3 | U | p_1 \rangle + \frac{\langle \tilde{b}_3 | \delta U | p_1 \rangle}{E_{b_3} - E_{p_1}} \langle \tilde{p}_2 | U | b_3 \rangle \right],$$

eliminando, portanto, os elementos de matriz partícula-partícula de δU .

Para obtermos a expressão final para δE_{BHFND} (39) temos que calcular $P_{\tilde{b}_1 b_1}$. De (34), usando a definição $M(\omega) = f(\omega) - U$, mais a condição de autoconsistência (33), temos

$$\tilde{P}_{b_1 b_1} = 1 + \sum_{\alpha} \tilde{P}_{b_1 \alpha} \left\langle \tilde{\alpha} \left| \frac{\partial f}{\partial \omega} \right| b_1 \right\rangle_{\omega=\epsilon_{b_1}}$$

Para a particular escolha feita para $\langle \tilde{b}_1 | U | b_1 \rangle$ (B2), temos

$$f(\omega) = \sum_{b'_1 b'_2} \langle \tilde{b}'_1 | G(\omega) | b'_2 \rangle \tilde{P}_{b'_2 b'_1}$$

e, portanto,

$$1 - \tilde{P}_{b_1 b_1} = \sum_{\substack{b'_1 b'_2 \\ p_1 p_2}} \tilde{P}_{b'_1 b'_2} \tilde{P}_{p'_1 p'_2} \frac{\langle \tilde{b}'_1 | G(\epsilon_{b_2} + \epsilon_{b'_2}) | p_1 p_2 \rangle \langle \tilde{p}'_1 | G(\epsilon_{b_2} + \epsilon_{b'_2}) | b'_2 b'_1 \rangle}{(\epsilon_{b_2} + \epsilon_{b'_2} - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{p_2})^2}. \quad (\text{B4})$$

A substituição de (B3) e (B4) em (B1), fornece a expressão (39) para δE_{BHFND} . A particular escolha (B2) permite não somente a eliminação do termo em $\delta P_{\tilde{b}_2 b_1}$ como também o cancelamento do termo $(1 - \tilde{P}_{b_1 b_1}) \delta \epsilon_{b_1}$ com o termo em $\delta \epsilon$ proveniente de (B3).

Apêndice C

Expansão de Goldstone para H_0 não hermitiano

Ao se considerar a hamiltoniana H_0 não hermitiana estamos abandonando a exigência de que a base não perturbada seja ortonormal. Com isso torna-se possível a obtenção de dois conjuntos de determinantes de Slater, $\{\Phi\}$ e $\{\tilde{\Phi}\}$, que se relacionam de modo bastante simples com as autofunções, $\{\Psi\}$, de H . A projeção de Ψ no espaço das funções não perturbadas é Φ enquanto que $\tilde{\Phi}$ é a função cuja projeção no espaço das funções perturbadas é Ψ . Para sistemas não degenerados Φ e $\tilde{\Phi}$ diferem apenas por um fator numérico.

As funções de onda de partícula independente, $|\alpha\rangle$ e $|\tilde{\alpha}\rangle$ (29), formam um conjunto biortonormal sendo os determinantes de Slater Φ e $\tilde{\Phi}$ produtos de $|\alpha\rangle$ e $|\tilde{\alpha}\rangle$ respectivamente. Os estados Φ_0 e $\tilde{\Phi}_0$ correspondem ao estado fundamental e resultam da colocação das A partículas nos níveis de energia mais baixa. Entre as várias expressões possíveis para a energia ΔE escolhemos a expressão na qual o bra é o estado com o tilde:

$$\Delta E = \frac{\langle \tilde{\Phi}_0 | H_1 | \Psi_0 \rangle}{\langle \tilde{\Phi}_0 | \Psi_0 \rangle}.$$

Na representação de interação temos

$$|\hat{\Psi}(t)\rangle = e^{iH_0 t},$$

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = e^{iH_0^+ t}$$

e

$$\hat{O}(t) = e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t}.$$

Observe-se que $\hat{O}^\dagger \neq \hat{O}^+$ mesmo que O seja hermitiano.

A expressão correspondente a (8) é

$$\Delta E = \lim_{t \rightarrow -\infty(1-i\varepsilon)} \frac{\langle \tilde{\Phi}_0(t) | \hat{H}_1(t_0) \hat{T}(t_0, t) | \hat{\Phi}_0(t) \rangle}{\langle \tilde{\Phi}_0(t) | \hat{T}(t_0, t) | \hat{\Phi}_0(t) \rangle}, \quad (C1)$$

onde $\hat{T}(t_0, t)$ é o operador de evolução temporal, do vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$, solução da equação

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{T}(t, t') = \hat{H}_1(t) \hat{T}(t, t') ,$$

com a condição $\hat{T}(t, t) = 1$. O operador de evolução temporal do vetor de estado $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ é $\hat{\tilde{T}}(t_0, t)$, solução da equação

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\tilde{T}}(t, t') = \hat{H}_1^\dagger(t) \hat{\tilde{T}}(t, t') ,$$

com $\hat{\tilde{T}}(t, t) = 1$. Esses operadores de evolução temporal obedecem à relação de "unitariedade"

$$\hat{\tilde{T}}^\dagger(t, t') \hat{T}(t, t') = \hat{T}(t, t') \hat{\tilde{T}}^\dagger(t, t') = 1 .$$

A expansão perturbativa para $\hat{T}(t, t')$ é dada pela mesma expressão que no caso de H_0 hermitiano. Substituindo $\hat{H}_1(t)$ por $\hat{H}_1^\dagger(t)$ obtém-se a expansão para $\hat{\tilde{T}}(t, t')$.

Devido à particular escolha feita para ΔE , dentre as várias expressões em segunda quantização para $\hat{H}_1(t)$, a mais adequada é

$$\hat{H}_1(t) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \tilde{\alpha}\tilde{\beta}|V|\tilde{\gamma}\tilde{\delta}\rangle a_\alpha^\dagger(t) a_\beta^\dagger(t) \tilde{a}_\delta(t) \tilde{a}_\gamma^\dagger(t) - \sum_{\alpha\beta} \langle \tilde{\alpha}|U|\beta\rangle a_\alpha^\dagger(t) \tilde{a}_\beta^\dagger(t) ,$$

onde

$$\langle \tilde{\alpha}\tilde{\beta}|V|\tilde{\gamma}\tilde{\delta}\rangle = \int \tilde{\alpha}^*(1) \tilde{\beta}^*(2) V_{12} \tilde{\gamma}(1) \tilde{\delta}(2) d(1) d(2)$$

e

$$\langle \tilde{\alpha}|U|\beta\rangle = \int \tilde{\alpha}^*(1) U \beta(1) d(1) .$$

Os operadores de criação e aniquilação estão na representação de interação e são dados por

$$a_\alpha(t) = a_\alpha e^{-iE_\alpha t} , \quad a_\alpha^\dagger(t) = a_\alpha^\dagger e^{iE_\alpha t} .$$

e

$$\tilde{a}_\alpha(t) = \tilde{a}_\alpha e^{-i\varepsilon_\alpha t}, \quad \tilde{a}_\alpha^\dagger(t) = \tilde{a}_\alpha^\dagger e^{i\varepsilon_\alpha t},$$

com os operadores de criação e aniquilação, na representação de Schrödinger, satisfazendo às relações de comutação

$$\{\tilde{a}_\alpha, a_\beta^\dagger\} = \{a_\alpha, \tilde{a}_\beta^\dagger\} = \delta_{\alpha\beta},$$

$$\{\tilde{a}_\alpha, \tilde{a}_\beta^\dagger\} = \int \tilde{\alpha}^*(1) \tilde{\beta}(1) d(1),$$

$$\{a_\alpha, a_\beta^\dagger\} = \int \tilde{\alpha}(1) \beta(1) d(1),$$

com as restantes iguais a zero.

O operador $a_\alpha^\dagger(a_\alpha)$ cria (destroi) uma partícula no estado $|\alpha\rangle$ ao passo que $\tilde{a}_\alpha^\dagger(\tilde{a}_\alpha)$ cria (destroi) uma partícula no estado $|\tilde{\alpha}\rangle$.

A expressão perturbativa para ΔE é obtida, analogamente ao caso em que H_0 é hermitiano, substituindo em (Cl). a expressão de Dyson para $\hat{T}(t_0, t)$; o teorema de Wick, que facilmente se extende para o presente caso, permite a obtenção da expansão para ΔE em termos dos elementos de matriz de V e U cuja representação gráfica difere, do caso em que H_0 seja hermitiano, apenas pelo fato de que as linhas saindo dos vértices carregam um til:

$$\langle \tilde{\alpha} \tilde{\beta} | V | \tilde{\gamma} \tilde{\delta} \rangle \rightarrow \begin{array}{c} \nearrow \tilde{\alpha} \\ \searrow \tilde{\beta} \end{array} \cdots \begin{array}{c} \nearrow \tilde{\gamma} \\ \searrow \tilde{\delta} \end{array} \quad t$$

$$\langle \tilde{\alpha} | U | \beta \rangle \rightarrow \begin{array}{c} \nearrow \tilde{\alpha} \\ \searrow \tilde{\beta} \end{array} \cdots \begin{array}{c} \nearrow \beta \\ \searrow \tilde{\beta} \end{array} \quad t$$

Da mesma maneira, aparecerão diagramas conexos e diagramas disconexos e a demonstração do teorema de Goldstone é feita da mesma maneira, bastando apenas colocar til sobre os bras.

Apêndice D

Cálculo dos polos do termo

O termo de primeira ordem é dado pela expansão

$$\text{Diagrama com loop} = \text{Diagrama com loop} + \text{Diagrama com loop e polos} + \dots$$

Vamos calcular apenas o primeiro termo

$$\text{Diagrama com loop} = \frac{i}{2\pi} \int d\omega_{b_1} d\omega_{b_2} d\omega_p \langle b_1 b_2 | V | p \beta \rangle \langle \alpha b_1 | V | b_1 b_2 \rangle \times$$

$$\times \delta(\omega_p + \omega_\beta - \omega_{b_1} - \omega_{b_2}) \delta(\omega_{b_1} + \omega_{b_2} - \omega_p - \omega_\alpha) \times$$

$$\times \frac{1}{\omega_{b_1} - \epsilon_{b_1} - i0} \frac{1}{\omega_{b_2} - \epsilon_{b_2} - i0} \frac{1}{\omega_p - \epsilon_p + i0} =$$

$$= \frac{i}{2\pi} \delta(\omega_\alpha - \omega_\beta) \langle b_1 b_2 | V | p \beta \rangle \langle \alpha b_1 | V | b_1 b_2 \rangle \times$$

$$\times \int d\omega_{b_1} d\omega_{b_2} \frac{1}{(\omega_{b_1} - \epsilon_{b_1} - i0)(\omega_{b_2} - \epsilon_{b_2} - i0)} \frac{1}{\omega_{b_1} + \omega_{b_2} - \omega_\alpha - \epsilon_p + i0} =$$

$$= 2\pi i \delta(\omega_\alpha - \omega_\beta) \frac{\langle b_1 b_2 | V | p \beta \rangle \langle \alpha p_1 | V | b_1 b_2 \rangle}{\omega_\alpha - \epsilon_{b_1} - \epsilon_{b_2} - \epsilon_p - i0}$$

Portanto, tal termo apresenta singularidade no semi-plano superior da energia o que o torna inapropriado para a renormalização de propagadores avançados ($t < 0$). (Observe que não há cruzamento das linhas α e β se estas forem linhas de buraco).

Referências

- Am 78 - C.M. do Amaral, "Quantização de Sistemas Langrangianos e Hamiltonianos", a ser submetido à Rev. Bras. de Física.
- An 58 - J.W. Anderson, Phys. Rev. 112 (1958) 1900.
- As 27 - F. W. Aston, Proc. Roy. Soc (London) A115(1927) 489.
- Ba 67 - M. Baranger, International School of Physics "Enrico Fermi", Varenna 1967 (Acad.Press.N.Y.69), editado por M.Jean.
- Ba 78 - M. Baranger e M. Vénéroni, Ann. of Phys. 114 (1978) 123.
- Bd 66 - B.H. Brandow, Phys. Rev. 152 (1966) 863.
- Bd 67 - B.H. Brandow, Revs. Mod. Phys. 39 (1967) 771.
- Bd 69 - B.H. Brandow, "Lectures in Theoretical Physics", Boulder 1968 (Gordon e Breach 1969).
- Bd 70 - B.H. Brandow, Ann. of Phys. (N.Y.) 57 (1970) 214.
- Be 36 - H.A. Bethe e R.F. Bacher, Revs. Mod. Phys. 8(1936)193.
- Be 37 - H.A. Bethe, Revs. Mod. Phys. 9 (1937) 71.
- Be 63 - H.A. Bethe, B.H. Brandow e A.G. Petchek, Phys. Rev. 129 (1963) 225.
- Bk 49 - K. Brueckner, W. Hartsough, E. Hayward e W.M. Powell, Phys. 75 (1949) 555.
- Bk 54 - K.A. Brueckner, C.A. Levinson e H.M. Mahmoud, Phys. Rev. 95 (1954) 217; K.A. Brueckner, Phys. Rev. 96 (1954) 508.
- Bk 55 - K.A. Brueckner e C.A. Levinson, Phys. Rev. 97 (1955) 1344. K.A. Brueckner, Phys. Rev. 97 (1955) 1353.
- Bk 55a- K.A. Brueckner, Phys. Rev. 100 (1955) 36.
- Bl 60 - C. Bloch, Physica 26 (1960) 562.
- Bl 65 - C. Bloch, "Studies in Statistical Mechanics", editado por J. de Boer e G.E. Uhlenbeck, Vol.III, 1965 (North Holland Publ.Co.).
- Bm 49 - D. Bohm e E.P. Gross, Phys. Rev. 75 (1949) 1864 .
- Bm 53 - D. Bohm e D. Pines, Phys. Rev. 92 (1953) 609.
- Bo 36 - N. Bohr, Nature 137 (1936) 344.
- Bo 37 - N. Bohr e F. Kalckar, Mat-fys.Medd. 14 (1937) nº 10 .
- Bo 52 - A. Bohr, Mat-fys.-Medd. 26 (1952) nº 14.
- Bo 53 - A. Bohr e B.R. Mottelson, Mat.-fys.Medd.27 (1953) nº 16.
- Br 36 - G. Breit e E.P. Wigner, Phys Rev. 49 (1936) 519.
- Ca 36 - B. Cassen e E.U. Condon, Phys. Rev. 50 (1936) 846.

- Ch 32 - J. Chadwick, Proc. Roy. Soc. (London) A136 (1932) 692.
- Ch 50 - D. Chamberlain e C. Wiegand, Phys. Rev. 79 (1950) 81.
- Co 50 - B. Cork, L. Johnston e C. Richman, Phys. Rev. 79 (1950) 71.
- Cs 50 - K.M. Case e A. Pais, Phys. Rev. 80 (1950) 203.
- Ct 58 - F. Coester, N.P. 7 (1958) 421.
- Ct 60 - F. Coester e H. Kümmel, N.P. 17 (1960) 477.
- Da 67 - B.D. Day, Revs. Mod. Phys. 39 (1967) 719.
- Da 69 - K.T.R. Davies, M. Baranger, R.M. Tarbutton e T.T. S. Kuo
Phys. Rev. 177 (1969) 1519.
- Da 71 - K.T.R. Davies e R.J. McCarthy, Phys. Rev. 4C (1971) 81.
- Da 74 - K.T.R. Davies, R.J. McCarthy, J.W. Negele e P.U. Sauer,
Phys. Rev. 10C (1974) 2607.
- Df 50 - S.M. Dancoff, Phys. Rev. 78 (1950) 382.
- Ea 63 - B.R. Easlea, "Lectures on the many-body problem and its
relation to Nuclear Physics" - apostila (Pittsburgh Ju-
nho 1963).
- Ea 73 - B.R. Easlea, "Liberation and the Aims of Science", Sussex
1973.
- Eh 31 - P. Ehrenfest e J.R. Oppenheimer, Phys. Rev. 37 (1931) 333.
- El 33 - W.M. Elsasser, J. Phys. et le radium 4 (1933) 549
5 (1934) 389.
- El 68 - J.P. Elliott, A.D. Jackson, H.A. Mavromatis, E.A. Sanderson
e B. Singh, N.P. A121 (1968) 241.
- Eu 37 - H. Euler, Zeit.f. Phys. 105 (1937) 553.
- Ez 74 - K. Erkelenz, Phys. Rep. 13C (1974) 191.
- Fe 49 - B.T. Feld, "Nuclear Electric Quadrupole Moments and Qua-
drupole Couplings in Molecules", Nat. Res. Council, Nucl.
Science Series, Preliminary Report n° 2, Maio 1949.
- Fe 71 - A.L. Fetter e J.D. Walecka, "Quantum Theory of Many-Parti-
cle Systems", 1971 (McGraw-Hill).
- Fo 30 - V. Fock, Zeit.f. Phys. 61 (1930) 126.
- Fr 57 - R.A. Ferrell, Phys. Rev. 107 (1957) 1631.
- Fr 78 - J.L. Friar, "Is the Deuteron Percentage D-state Measurea-
ble?", submetido ao Phys. Rev. C.
- Fu 57 - I. Fujita e H. Miyazawa, Prog. Theor. Phys. 17 (1957) 360.
- Gd 57 - J. Goldstone, Proc. Roy. Soc. (London) A239 (1957) 267.
- Ge 51 - I. Gel'fand e B. Levitan. Isv. Akad. Nauk. SSSR 15 (1951) 309.

- Go 58 - L.C.Gomes, J.D. Walecka e V.F. Weisskopf, Ann. of Phys. (N.Y.) 3 (1958) 241.
- Gr 57 - J.J. Griffin e J.A. Wheeler, Phys. Rev. 108 (1957) 311.
- Ha 22 - W.D. Harkins e S.L. Madorsky, Phys. Rev. 19 (1922) 135.
- Hd 49 - J. Hadley, E.L. Kelly, C.Leith, E. Segré, C. Wiegand e H. York, Phys. Rev. 75 (1949) 351.
- He 32 - W. Heisenberg, Zeit.f. Phys. 77 (1932) 1.
- He 35 - W. Heisenberg, Zeit. f. Phys. 96 (1935) 473.
- Hi 53 - D.L. Hill e J.A. Wheeler, Phys. Rev. 89 (1953) 1102.
- Hm 62 - T. Hamada e I. Johnston, N.P. 34 (1962) 382.
- Ho 75 - K. Holinde e R. Machleidt, N.P. A247 (1975) 495.
- Ho 76 - K. Holinde e R. Machleidt, N.P. A256 (1976) 479.
- Ho 78 - " π NN form factor and two nuclear data" - preprint.
- Ht 28 - D.R. Hartree, Proc.Camb.Phil.Soc. 24 (1928) 89 e 111.
- Hu 57 - N.M. Hugenholtz, Physica 23 (1957) 481.
- Ja 39 - L. Janossy, Proc.Camb.Phil.Soc. 35 (1939) 616.
- Jo 32 - I. Curie-Joliot e F. Joliot, Compt.Prend. 194 (1932) 273.
- Jo 71 - M.B. Johnson e M. Baranger, Ann. of Phys. (N.Y.) 62 (1971) 172.
- Jt 50 - R. Jastrow, Phys. Rev. 79 (1950) 389.
- Jt 51 - R. Jastrow, Phys. Rev. 81 (1951) 165.
- Ke 39 - J.M.B. Kelley, I.I. Rabi, N.F. Ramsey Jr. e J.K. Zacharias, Phys. Rev. 56 (1939) 728.
- Ke 40 - J.M.B. Kelley, I.I. Rabi, N.F. Ramsey Jr. e J.K.Zacharias, Phys. Rev. 57 (1940) 677.
- Km 78 - H. Kummel, K.H. Lührmann e J.G. Zabolitzky, Phys. Rev. 36C (1978) 1.
- Ku 62 - T.S. Kuhn, "The Structure of Scientific Revolutions", 1962 (Chicago).
- Ky 50 - E.L. Kelly, C. Leith, E.Segré e C. Wiegand, Phys. Rev. 79 (1950) 96.
- La 33 - A. Landé, Phys. Rev. 43 (1933) 620 e 624.
- Ma 33 - E. Majorana, Zeit.f.Phys. 82 (1933) 137.
- Mc 77 - B.H.J. McKeller e R. Rajaraman, "Mesons in Nuclei", editado por D. Wilkinson e M. Rho (North Holland Publ. Co.)
- Mf 67 - M.H. Macfarlane, International School of Physics "Enrico Fermi", Varenna 1967 (Acad.Press.N.Y. 1969), editor M.Jean.

- Ml 72 - C.P. Malta, Tese de doutoramento (Sussex 1972).
- Ml 74 - C.P. Malta e E.A. Sanderson, N.P. A225 (1974) 189.
- Ml 75 - C.P. Malta, E.J.V. de Passos e P.U. Sauer, Proc. Int. Conf. Effect. Interact. and Operation in Nucl., vol.1 (Tucson 1975).
- Mt 38 - M. Matricon, Compt. Rend. 206 (1938) 651 e 1809.
- Na 56 - E. Nagel e J.R. Newman, "The World of Mathematics", vol.3 (1956), 1668.
- Ni 55 - S.G. Nilsson, Mat.-fys-Medd. 29 (1955) nº 16.
- Ng 70 - J.W. Negele, Phys. Rev. C1 (1970) 1260.
- Ng 72 - J.W. Negele e D. Vautherin, Phys. Rev. C5 (1972) 1472.
- Pa 33 - W. Pauli Jr., Handbuch der Physik vol. 24, 1, cap.2.
- Pa 50 - W.H.K. Panofsky e F.L. Fillmore, Phys. Rev. 79 (1950) 57.
- Ps - Sugestão de E.J.V. de Passos.
- Pr 39 - H. Primakoff e T. Holstein, Phys. Rev. 55 (1939) 1218.
- Rd 68 - R. Reid, Ann. of Phys. 50 (1968) 411.
- Ru 11 - E. Rutherford, Phil. Mag. 21 (1911) 669.
- Rw 50 - J. Rainwater, Phys. Rev. 79 (1950) 432.
- Sa 74 - E.A. Sanderson, J.P. Elliott, H.A. Mavromatis e B. Singh, N.P. A219 (1974) 190.
- Sk 59 - T.H.R. Skyrme, N.P. 9 (1959) 615.
- Sr 75 - P.U. Sauer, Proc. Int. Conf. on Nucl. Self-Consistent Fields, 1975 (North Holland Publ. Co.).
- Ta 68 - R.M. Tarbutton e K.T.R. Davies, N.P. A120 (1968) 1.
- Tb 64 - F. Tabakin, Ann. of Phys. 30 (1964) 51.
- Th 13 - J.J. Thomson, Rays of Positive Electricity, Longmans Green, 1913.
- Tm 45 - I. Tamm, J. Phys. (USSR) 9 (1945) 449.
- To 35 - L.H. Thomas, Phys. Rev. 47 (1935) 903.
- Tr 73 - R.K. Tripathi, A. Faessler e A.D. MacKeller, Phys. Rev. 86 (1973) 125.
- Tr 74 - R.K. Tripathi, A. Faessler e H. Müther, Phys. Rev. C10 (1974) 2080.
- Ue 68 - T. Ueda e A.E.S. Green, Phys. Rev. 174 (1968) 1304.
- Va 72 - D. Vautherin e D.M. Brink, Phys. Rev. C5 (1972) 626.
- Va 73 - D. Vautherin, Phys. Rev. C7 (1973) 6.
- Vi 77 - F. Villars, N.P. A285 (1977) 269.

- Wa 51 - R. Wallace, Phys. Rev. 81 (1951) 493.
Wh 37 - J.A. Wheeler, Phys. Rev. 52 (1937) 1083 e 1107.
Wi 33 - E.P. Wigner, Phys. Rev. 43 (1933) 252.
Zeit.f.Phyz. 83 (1933) 253.
Wo 74 - C.W. Wong, Phys. Rep. 15C (1974) 284.
Wu 62 - T. Wu e T. Omura - "Quantum Theory of Scattering", N.Y.,
1962.
Wz 35 - C.F. von Weizsäcker, Zeit.f. Phys. 96 (1935) 431.
Yu 35 - H. Yukawa, Proc. Phys-Math.Soc.Japan 17 (1935) 48.
Za 74 - J. Zabolitzky, N.P. A228 (1974) 272 e 285.