FI 193 – Teoria Quântica de Sistemas de Muitos Corpos

2º Semestre de 2023
24/10/2023
Aula 20

Teoria de resposta linear

VÁRIOS EXPERIMENTOS CONSISTEM DE APLICAR UMA SONDA EXTERNA A UM SISTEMA DE INTERESSE E MEDIR A RESPOSTA DO SISTEMA (ALGUMA PROPRIEDADE FÍSICA) A ESSA SONDA.

i) CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO (DC OU AC) E MEDIR A MAGNETIZAÇÃO RESULTANTE

ii) APLICAR UM CAMPO ELÉTRICO (DC OU AC) E MEDIR A CORRENTE ELÉTRICA RESULTANTE.

iii) APLICAR UMA DIFERENÇA DE TEMPERATURA E MEDIR A CORRENTE DE CALOR

<u>RESPOSTA LINEAR</u>: SE A PERT. EXTERNA É FRACA $\longrightarrow$ RESPOSTA $\propto$ PERTURBAÇÃO

O PROBLEMA TEÓRICO:

$$H_T(t) = H + H_{ext}(t)$$

H = HAMILTONIANO DO SISTEMA DE INTERESSE

$H_{ext}(t)$ = ACOPLAMENTO DA SONDA COM O SISTEMA

A DINÂMICA DE SCHRÖDINGER NA AUSÊNCIA DA PERTURBAÇÃO É DADA POR:

$$i\partial_t|\Phi(t)\rangle = H|\Phi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow |\Phi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Phi(0)\rangle$$

NA PRESENÇA DA PERTURBAÇÃO, O ESTADO $|\overline{\Phi}(t)\rangle$ OBEDECE:

$$i\partial_t|\overline{\Phi}(t)\rangle = [H + H_{ext}(t)]|\overline{\Phi}(t)\rangle$$

ESTRATÉGIA: $|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}\, U(t)\, |\Psi(0)\rangle$

$$i\partial_t |\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}\left[H\, U(t) + i\partial_t U(t) \right] |\Psi(0)\rangle$$

$$= \left[H + H_{ext}(t) \right] e^{-iHt}\, U(t)\, |\Psi(0)\rangle$$

PARA $|\Psi(0)\rangle$ GENÉRICO, IGUALAM-SE OS OPERADORES:

$$\Rightarrow e^{-iHt}\left[i\partial_t U(t) \right] = H_{ext}(t)\, e^{-iHt}\, U(t)$$

$$\Rightarrow i\partial_t U(t) = \underbrace{e^{iHt} H_{ext}(t)\, e^{-iHt}}_{H_{ext\,H}(t)}\, U(t)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\partial_t U(t) = H_{ext\,H}(t)\, U(t)} \qquad (1)$$

VAMOS SUPOR QUE $H_{ext}(t) = 0$ SE $t < t_0$ (E POSSIVELMENTE $t_0 = -\infty$)

CONDIÇÃO INICIAL: $U(t) = \mathbb{1}$ SE $t < t_0$ (2)

JÁ VIMOS A SOLUÇÃO PERTURBATIVA DE (1)+(2):

$$U(t) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^{t} dt_1 \cdots dt_n \, T\left[H_{ext\,H}(t_1) \cdots H_{ext\,H}(t_n)\right]$$

EM ORDEM LINEAR:

$$U^{(1)}(t) = \mathbb{1} - i \int_{t_0}^{t} dt_1 \, H_{ext\,H}(t_1)$$

$$\Rightarrow |\Psi^{(1)}(t)\rangle = e^{-iHt} U^{(1)}(t) |\Psi(0)\rangle = e^{-iHt}\left[\mathbb{1} - i \int_{t_0}^{t} dt_1 \, H_{ext\,H}(t_1)\right] |\Psi(0)\rangle$$

AGORA QUERO MEDIR UMA QUANTIDADE FÍSICA B:

O ELEMENTO DE MATRIZ GENÉRICO DE $\underline{B}$ É:

$$\langle \Psi'(t) | B | \Psi(t) \rangle \simeq \langle \Psi'(0) | \left[\mathbb{1} + i \int_{t_0}^{t} dt_1 \, H_{ext\,H}(t_1)\right] \underbrace{e^{iHt} B e^{-iHt}}_{B_H(t)} \left[\mathbb{1} - i \int_{t_0}^{t} dt_1' \, H_{ext\,H}(t_1')\right] |\Psi(0)\rangle$$

$$= \langle \Phi'_H(0) | B_H(t) | \Phi_H(0) \rangle - i \int_{t_0}^{t} dt_1 \, \langle \Phi'_H(0) | \left[B_H(t), H_{ext\,H}(t_1) \right] | \Phi_H(0) \rangle$$

ATÉ ORDEM LINEAR. PARA O VALOR ESPERADO DE B:

$$\delta\langle B \rangle(t) = \langle \Phi(t) | B | \Phi(t) \rangle - \underbrace{\langle \Phi_H(0) | B_H(t) | \Phi_H(0) \rangle}_{\text{FREQUENTEMENTE} = \text{ZERO}}$$

$$\boxed{\delta\langle B \rangle(t) = -i \int_{t_0}^{t} \langle \Phi_H(0) | \left[B_H(t), H_{ext\,H}(t') \right] | \Phi_H(0) \rangle \, dt'}$$

ESSA É A FÓRMULA CENTRAL DA TEORIA DE RESPOSTA LINEAR (FÓRMULA DE KUBO): RELACIONA UMA PROPRIEDADE DO SISTEMA FORA DE EQUILÍBRIO COM UM VALOR ESPERADO CALCULADO NO SISTEMA EM EQUILÍBRIO. (NÃO PERTURBADO).

SUPONHA QUE: $H_{ext}(t) = A\,\varphi(t)$ $\qquad \varphi(0)=0$ SE $t<t_0$

ONDE $\underline{A}$ É UM OPERADOR

$$\delta\langle B\rangle(t) = -i\int_{t_0}^{t} dt'\,\varphi(t')\,\langle\Psi_H(0)|\,[B_H(t),A_H(t')]\,|\Psi_H(0)\rangle$$

$$= -i\int_{-\infty}^{t} dt'\,\varphi(t')\,\langle\Psi_H(0)|\,[B_H(t),A_H(t')]\,|\Psi_H(0)\rangle$$

$$= -i\int_{-\infty}^{\infty} dt'\,\varphi(t')\,\theta(t-t')\,\langle\Psi_H(0)|\,[B_H(t),A_H(t')]\,|\Psi_H(0)\rangle$$

DEFINO:

$$i\,D^R_{BA}(t,t') = \theta(t-t')\,\langle\Psi_0|\,[B_H(t),A_H(t')]\,|\Psi_0\rangle$$

FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DA RETARDADA OU CAUSAL

$$\Rightarrow \delta\langle B\rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt'\,D^R_{BA}(t,t')\,\varphi(t')$$

PARA SISTEMA ISOLADO: $\delta\langle B\rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt'\,D^R_{BA}(t-t')\,\varphi(t')$

SE: $H_{ext}(t) = \int d^3x\, \varphi(\vec{x},t)\, A(\vec{x})$ E MEÇO UMA OUTRA DENSIDADE $B(\vec{x})$:

$$\delta\langle B(\vec{x})\rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int d^3x'\, D^R_{BA}(x,x')\,\varphi(\vec{x}',t')$$

ONDE:

$$i D^R_{BA}(x,x') = \theta(t-t')\langle \Phi_0 | [B_H(\vec{x},t), A_H(\vec{x}',t')] | \Phi_0 \rangle$$

PARA SISTEMAS HOMOGÊNEOS:

$$\varphi(\vec{k},\omega) = \int d^3x\, dt\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, e^{i\omega t}\, \varphi(\vec{x},t)$$

$$\delta\langle B(\vec{k},\omega)\rangle = \int d^3x\, dt\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, e^{i\omega t}\, \delta\langle B(\vec{x})\rangle(t)$$

$$D^R_{BA}(\vec{k},\omega) = \int d^3(\vec{x}-\vec{x}')\, d(t-t')\, e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\, e^{i\omega(t-t')}\, D^R_{BA}(\vec{x}-\vec{x}', t-t')$$

$$\delta\langle \vec{B}(x)\rangle(t) = \int d^4x'\, D^R_{BA}(x-x')\,\varphi(x')$$

CONVOLUÇÃO EM 4D

NO ESPAÇO DE FOURIER, ESSA CONVOLUÇÃO VIRA UM PRODUTO SIMPLES!

$$\delta \langle B(\vec{k},\omega)\rangle = D^R_{BA}(\vec{k},\omega)\,\varphi(\vec{k},\omega)$$

$$\Rightarrow D^R_{BA}(\vec{k},\omega) = \frac{\delta \langle B(\vec{k},\omega)\rangle}{\varphi(\vec{k},\omega)} =$$ SUSCEPTIBILIDADE GENERALIZADA

A TAREFA AGORA É CALCULAR TEORICAMENTE A FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO $D^R_{BA}(\vec{k},\omega)$ DE INTERESSE, POR EXEMPLO, PERTURBATIVAMENTE, PARA COMPARAR COM OS RESULTADOS DE LABORATÓRIO.

PORÉM, A TEORIA QUE CONSTRUÍMOS, QUE PODE SER GENERALIZADA PARA FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO DEPENDE DE TRABALHARMOS COM UMA ESTRUTURA ORDENADA TEMPORALMENTE

$$i D_{BA}(x,x') = \langle \Psi_0 | T[B_H(\vec{x},t) A_H(\vec{x}',t')] | \Psi_0 \rangle$$

Representação de Lehmann para a função resposta linear

Definindo a função ordenada temporalmente:

$$iD_{BA}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = \frac{\langle \Psi_{0H}|\, T\left[B_H(\mathbf{r},t)\, A_H(\mathbf{r}',t')\right]|\Psi_{0H}\rangle}{\langle \Psi_{0H}|\Psi_{0H}\rangle}$$

e analisando a representação de Lehmann:

$$D_{BA}(\mathbf{k},\omega) \;=\; V\sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0|\,\hat{B}(\mathbf{0})\,|n\mathbf{k}\rangle\,\langle n\mathbf{k}|\,\hat{A}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle}{\omega-(E_n-E_0)+i\eta} - \frac{\langle \Psi_0|\,\hat{A}(\mathbf{0})\,|n\mathbf{k}\rangle\,\langle n\mathbf{k}|\,\hat{B}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle}{\omega+(E_n-E_0)-i\eta}\right]$$

$$D^R_{BA}(\mathbf{k},\omega) \;=\; V\sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0|\,\hat{B}(\mathbf{0})\,|n\mathbf{k}\rangle\,\langle n\mathbf{k}|\,\hat{A}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle}{\omega-(E_n-E_0)+i\eta} - \frac{\langle \Psi_0|\,\hat{A}(\mathbf{0})\,|n\mathbf{k}\rangle\,\langle n\mathbf{k}|\,\hat{B}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle}{\omega+(E_n-E_0)+i\eta}\right]$$

$\omega = -\Delta E_n + i\eta$

$$D_{BA}(\mathbf{k},\omega) = V\sum_n \left[\frac{\langle\Psi_0|\,\hat{B}(\mathbf{0})\,|n\mathbf{k}\rangle\,\langle n\mathbf{k}|\,\hat{A}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle}{\omega-(E_n-E_0)+i\eta} - \frac{\langle\Psi_0|\,\hat{A}(\mathbf{0})\,|n\mathbf{k}\rangle\,\langle n\mathbf{k}|\,\hat{B}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle}{\omega+(E_n-E_0)-i\eta}\right]$$

$$D^R_{BA}(\mathbf{k},\omega) = V\sum_n \left[\frac{\langle\Psi_0|\,\hat{B}(\mathbf{0})\,|n\mathbf{k}\rangle\,\langle n\mathbf{k}|\,\hat{A}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle}{\omega-(E_n-E_0)+i\eta} - \frac{\langle\Psi_0|\,\hat{A}(\mathbf{0})\,|n\mathbf{k}\rangle\,\langle n\mathbf{k}|\,\hat{B}(\mathbf{0})\,|\Psi_0\rangle}{\omega+\underbrace{(E_n-E_0)}_{>0}+i\eta}\right]$$

$\omega = -\Delta E_n - i\eta$

$$\mathrm{Re}D^R_{BA}(\boldsymbol{k},\omega) = \mathrm{Re}D_{BA}(\boldsymbol{k},\omega)$$

$$\mathrm{Im}D^R_{BA}(\boldsymbol{k},\omega) = \mathrm{sgn}(\omega)\,\mathrm{Im}D_{BA}(\boldsymbol{k},\omega)$$

A ESTRATÉGIA É CALCULAR D_{BA} PERTURBATIVAMENTE E OBTER D^R_{BA} COM AS FÓRMULAS ACIMA.

EXEMPLO: UMA CARGA ESTÁTICA Q NA ORIGEM NUM GÁS DE ELÉTRONS:

$$H_{ext} = \int d^3x \, \varphi(\vec{x}) \, n(\vec{x}) = \int d^3x \, \varphi(\vec{x}) \sum_\alpha \psi^\dagger_\alpha(\vec{x}) \psi_\alpha(\vec{x})$$

$$\varphi(\vec{q},\omega) = \int d^3x \, dt \, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} e^{i\omega t} \varphi(\vec{x}) \qquad \varphi(\vec{x}) = -\frac{Qe}{x}$$

$$= 2\pi\delta(\omega) \frac{4\pi}{q^2} (-Qe) = -\frac{8\pi^2 Qe}{q^2} \delta(\omega)$$

RESPOSTA: MODIFICAÇÃO DA DENSIDADE DO GÁS

$$\delta\langle n(\vec{x},t)\rangle = \int \frac{d^3k \, d\omega}{(2\pi)^4} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} e^{-i\omega t} D^R_{nn}(\vec{k},\omega) \varphi(\vec{k},\omega)$$

ONDE:

$$i D^R_{nn}(x-x') = \theta(t-t') \langle \Phi_0 | [n_H(\vec{x},t), n_H(\vec{x}',t')] | \Phi_0 \rangle$$

$$\delta\langle n(\vec{x})\rangle = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} D^R_{nn}(\vec{k},\omega)\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} e^{-i\omega t} \left(-\frac{8\pi^2 eQ}{k^2}\right)\delta(\omega)$$

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} D^R_{nn}(\vec{k},0)\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \underbrace{\left(-\frac{4\pi eQ}{k^2}\right)}_{\left(-\frac{Q}{e}\right)\frac{4\pi e^2}{k^2} = \left(-\frac{Q}{e}\right)U(\vec{k})}$$

$$\boxed{\delta\langle n(\vec{x})\rangle = \left(-\frac{Q}{e}\right)\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, U(\vec{k})\, D^R_{nn}(\vec{k},0)}$$

COMO CALCULAR $D^R_{nn}(k)$?

PRIMEIRO: DEFINO $\tilde{n}(\vec{x}) = n(\vec{x}) - n$ ONDE $n = \frac{N}{V}$

COMO A DIFERENÇA ENTRE $n(\vec{x})$ e $\tilde{n}(\vec{x})$ É UMA CONSTANTE ADITIVA, SEUS COMUTADORES SÃO IGUAIS:

$$i D^R_{nn}(x,x') = \theta(t-t')\langle\Phi_0|\left[\tilde{n}_H(x), \tilde{n}_H(x')\right]|\Phi_0\rangle$$

DEFINO:

$$\sum_\alpha \psi^\dagger_{\alpha H}(x)\psi_{\alpha H}(x) - n$$

$$i D_{\tilde{n}\tilde{n}}(x,x') = \langle\Phi_0|T\left[\tilde{n}_H(x)\,\tilde{n}_H(x')\right]|\Phi_0\rangle$$

$$\sum_\beta \psi^\dagger_{\beta H}(x')\psi_{\beta H}(x') - n$$

VAMOS OLHAR INICIALMENTE O CASO NÃO INTERAGENTE:

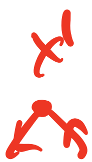
$$i D^{(0)}_{\tilde{n}\tilde{n}}(x,x') = \sum_{\alpha,\beta}\langle\Phi_0|T\left[\psi^\dagger_{\alpha H}(x)\psi_{\alpha H}(x)\psi^\dagger_{\beta H}(x')\psi_{\beta H}(x')\right]|\Phi_0\rangle$$

$$- n^2$$

$$= \langle \Phi_0 | T\Big[\sum_\alpha \psi^\dagger_{\alpha H}(x)\,\psi_{\alpha H}(x)\Big] | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | T\Big[\sum_\beta \psi^\dagger_{\beta H}(x')\,\psi_{\beta H}(x')\Big] | \Phi_0 \rangle$$

$\cancel{-n^2}$ + OUTRA CONTRAÇÃO

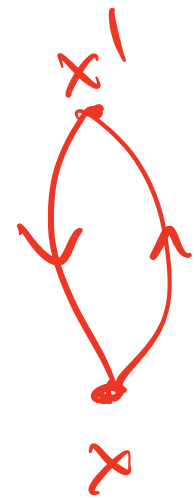
$$= (-2)\, iG^{(0)}(x,x')\, iG^{(0)}(x',x) = 2\, G^{(0)}(x,x')\, G^{(0)}(x',x)$$



$\rightarrow \psi^\dagger_{\beta H}(x')\,\psi_{\beta H}(x')$

$\rightarrow \psi^\dagger_{\alpha H}(x)\,\psi_{\alpha H}(x)$

DUAS CONTRAÇÕES:



$\Downarrow$

$\Pi^{(0)}(x-x')$

FUNÇÃO DE LINDHARD