FI 193 – Teoria Quântica de Sistemas de Muitos Corpos

2º Semestre de 2023

07/11/2023

Aula 23

Formalismo a temperatura finita

GENERALIZAÇÃO NATURAL DA FUNÇÃO DE GREEN DE T=0 PARA T>0 É:

$$iG_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = Tr\left[\frac{\rho}{Z} T\left[\psi_{\alpha H}(x_1)\psi^{\dagger}_{\beta H}(x_2)\right]\right]$$

ONDE: $\rho = e^{-\beta(H-\mu N)}$ $\beta = \frac{1}{T}$ $K = H - \mu N$

$= e^{-\beta K}$

$Z = Tr[\rho]$ = FUNÇÃO DE GRANDE-PARTIÇÃO

TUDO NO ENSEMBLE GRANDE-CANÔNICO.

Funções de Green retardada e avançada

TAMBÉM É IMPORTANTE DEFINIR VERSÕES RETARDADA E AVANÇADA:

$$iG^{R}_{\alpha\beta}(x_1,x_2) = \theta(t_1-t_2)\,\mathrm{Tr}\left\{\frac{\rho}{Z}\left[\psi_{\alpha H}(x_1),\psi^{\dagger}_{\beta H}(x_2)\right]_{\zeta}\right\}$$

$$iG^{A}_{\alpha\beta}(x_1,x_2) = -\theta(t_2-t_1)\,\mathrm{Tr}\left\{\frac{\rho}{Z}\left[\psi_{\alpha H}(x_1),\psi^{\dagger}_{\beta H}(x_2)\right]_{\zeta}\right\}$$

ONDE: $[A,B]_{\zeta} = \begin{cases} \{A,B\} & \text{SE } \zeta=-1 \text{ (FÉRMIONS)} \\ [A,B] & \text{SE } \zeta=+1 \text{ (BÓSONS)} \end{cases}$

NOTE QUE USAMOS O ANTI-COMUTADOR PARA FÉRMIONS

Relações entre as funções de Green (sistemas homogêneos)

$$\rho(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{(2s+1)Z}\sum_{m,n}\left\{e^{-\beta K_m}(2\pi)^4\,\delta\left[\omega-(K_n-K_m)\right]\delta^{(3)}\left[\mathbf{k}-(\mathbf{P}_n-\mathbf{P}_m)\right]\right.$$

$$\left.\left(1-\zeta e^{-\beta\omega}\right)\left|\langle m|\,\psi_\alpha(0)\,|n\rangle\right|^2\right\} \qquad (K_n = E_n - \mu N_n)$$

$\rho(\vec{k},\omega) \in \mathbb{R}$

$$G^R(\mathbf{k},\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\frac{\rho(\mathbf{k},\omega')}{\omega-\omega'+i\eta}$$

$$G^A(\mathbf{k},\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\frac{\rho(\mathbf{k},\omega')}{\omega-\omega'-i\eta}$$

$G^{R*} = G^A$

$$\boxed{\begin{aligned}\zeta &= 1 \text{ (bósons)}\\ \zeta &= -1 \text{ (férmions)}\end{aligned}}$$

$$G(\mathbf{k},\omega) = \left[1+\zeta f_\zeta(\omega)\right]G^R(\mathbf{k},\omega) - \zeta f_\zeta(\omega)\,G^A(\mathbf{k},\omega)$$

$$f_\zeta(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega}-\zeta} \Rightarrow \begin{cases}\zeta = 1: \; f_{+1}(\omega) = \dfrac{1}{e^{\beta\omega}-1} & \text{(BOSE-EINSTEIN)}\\[2ex] \zeta = -1: \; f_{-1}(\omega) = \dfrac{1}{e^{\beta\omega}+1} & \text{(FERMI-DIRAC)}\end{cases}$$

TUDO SAI DA <u>REPRESENTAÇÃO DE LEHMANN</u>

Relações entre as funções de Green (sistemas homogêneos)

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Re}\left[G^{R}\left(\mathbf{k},\omega\right)\right] &= \mathrm{Re}\left[G^{A}\left(\mathbf{k},\omega\right)\right] = \mathrm{Re}\left[G\left(\mathbf{k},\omega\right)\right] \\
\mathrm{Im}\left[G^{R}\left(\mathbf{k},\omega\right)\right] &= -\mathrm{Im}\left[G^{A}\left(\mathbf{k},\omega\right)\right] = \left[\tanh\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)\right]^{\zeta}\mathrm{Im}\left[G\left(\mathbf{k},\omega\right)\right] \\
G^{R}\left(\mathbf{k},\omega\right) &= \left[G^{A}\left(\mathbf{k},\omega\right)\right]^{*}
\end{aligned}
$$

Função de Green de Matsubara

DEFINIMOS A FUNÇÃO DE GREEN TÉRMICA OU DE MATSUBARA OU NO TEMPO IMAGINÁRIO:

$$-\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}_1,\tau_1;\vec{r}_2,\tau_2) = \mathrm{Tr}\left\{\frac{\rho}{Z} T_\tau\left[\psi_{\alpha M}(\vec{r}_1,\tau_1)\psi^{+}_{\beta M}(\vec{r}_2,\tau_2)\right]\right\}$$

ONDE:

$$\psi_{\alpha M}(\vec{r},\tau) = e^{\tau\overbrace{(H-\mu N)}^{K}}\psi_\alpha(\vec{r})\, e^{-\tau(H-\mu N)}$$

$$\psi^{+}_{\alpha M}(\vec{r},\tau) = e^{\tau(H-\mu N)}\psi^{+}_\alpha(\vec{r})\, e^{-\tau(H-\mu N)}$$

COMENTÁRIOS:

(a) $\psi^{\dagger}_{\alpha M}(\vec{r},\tau) \neq \left[\psi_{\alpha M}(\vec{r},\tau)\right]^{+}$

(b) É COMO SE FIZÉSSEMOS: $it \to \tau$

DAÍ A NOMENCLATURA "TEMPO IMAGINÁRIO"

Algumas propriedades da função de Green de Matsubara

i) $\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\bar{r}_1 \tau_1 ; \bar{r}_2, \tau_2) = \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\bar{r}_1, \bar{r}_2 ; \tau_1 - \tau_2)$ PARA SISTEMAS FECHADOS. PROVA:

SUPONHA $\tau_1 > \tau_2$.

$$-\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\bar{r}_1 \tau_1, \bar{r}_2 \tau_2) = \mathrm{Tr}\left[\frac{\rho}{Z}\psi_H(1)\psi_H^\dagger(2)\right] =$$

$$= \mathrm{Tr}\left[\frac{e^{-\beta K}}{Z}\left(e^{\tau_1 K}\psi(1)e^{-\tau_1 K}\right)\left(e^{\tau_2 K}\psi^\dagger(2)e^{-\tau_2 K}\right)\right]$$

$$= \mathrm{Tr}\left[\frac{e^{-\beta K}}{Z} e^{\tau_1 K}\psi(1) e^{-(\tau_1-\tau_2)K}\psi^\dagger(2)e^{-\tau_2 K}\right]$$

DA PROPRIEDADE CÍCLICA DO TRAÇO:

$$= \mathrm{Tr}\left[\frac{e^{-\beta K}}{Z} e^{(\tau_1-\tau_2)K}\psi(1) e^{-(\tau_1-\tau_2)K}\psi^\dagger(2)\right]$$ QUE SÓ DEPENDE DA DIFERENÇA $\tau_1 - \tau_2$.

ii) SÓ NOS INTERESSA $g(\tau_1, \tau_2)$ PARA

$\tau_1 \in [0, \beta]$ E $\tau_2 \in [0, \beta]$

$\Rightarrow \tau_1 - \tau_2 \equiv \tau \in [-\beta, \beta]$

SEJA $\tau = \tau_1 - \tau_2 > 0$:

$$\Rightarrow -g(\tau) = Tr\left[\frac{e^{-\beta K}}{Z} e^{\tau K} \psi(1) e^{-\tau K} \psi^{+}(2)\right]$$

$$= Tr\left[\frac{e^{-\tau K}}{Z} \psi^{+}(2) \underbrace{e^{-\beta K} e^{\tau K}}_{e^{(\tau-\beta)K}} \psi(1)\right]$$

SEJA AGORA $\tau < 0$:

$$-g(\tau) = \zeta\, Tr\left[\frac{e^{-\beta K}}{Z} \psi^{+}_{n}(2) \psi_{n}(1)\right]$$

$$= \zeta\, Tr\left[\frac{e^{-\beta K}}{Z} e^{\tau_2 K} \psi^{+}(2) e^{-\tau_2 K} e^{\tau_1 K} \psi(1) e^{-\tau_1 K}\right]$$

$$= \frac{\zeta}{Z} Tr\left[\underbrace{e^{-\beta K} e^{-\tau K}}_{e^{-(\tau+\beta)K}} \psi^{+}(2) e^{\tau K} \psi(1)\right]$$

COMPARANDO:

SE $\tau < 0 \Rightarrow \tau + \beta > 0$

PORTANTO:

$$\boxed{g(\tau+\beta) = \zeta\, g(\tau) \quad (\tau < 0)}$$

PORTANTO, BASTA SABER $g(\tau)$ PARA $\tau \in [0, \beta]$ PARA SE TÊ-LA NO INTERVALO $[-\beta, 0]$

VAMOS ESCREVER $g(\tau)$ COMO UMA SÉRIE DE FOURIER NO INTERVALO $\tau \in [-\beta, \beta]$

$$g(\vec{k},\tau) = T \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} e^{-i\omega_n \tau} g(\vec{k},\omega_n)$$

COM FREQUÊNCIAS: Período $= 2\beta = P = \frac{2}{T}$

$$\omega_n = n \frac{2\pi}{P} = n \frac{2\pi}{2\beta} = \pi n T \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$$

FÓRMULA DE INVERSÃO:

$$g(\vec{k},\omega_n) = \int_{-\beta}^{\beta} \frac{d\tau}{2} e^{i\omega_n \tau} g(\vec{k},\tau)$$

$$= \int_0^{\beta} \frac{d\tau}{2} e^{i\omega_n \tau} g(\tau) + \int_{-\beta}^{0} \frac{d\tau}{2} e^{i\omega_n \tau} g(\tau)$$

$$= \int_0^{\beta} \frac{d\tau}{2} e^{i\omega_n \tau} g(\tau) + \zeta \int_{-\beta}^{0} \frac{d\tau}{2} e^{i\omega_n \tau} g(\tau+\beta)$$

[O FATOR DE $\frac{1}{2}$ VEM DA ESCOLHA DE COMO "DISTRIBUIR" $\frac{2}{T}$]

TROCANDO VARIÁVEIS NA 2ª INTEGRAL:

$$\tau + \beta \longrightarrow \tau'$$

$$\longrightarrow \zeta \int_0^\beta \frac{d\tau'}{2}\, g(\tau')\, e^{i\omega_n(\tau'-\beta)}$$

MAS: $e^{-i\omega_n\beta} = e^{-i\pi n}$

$$\Rightarrow g(\vec{k}, \omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau} g(\vec{k},\tau) \left\{ \frac{1}{2}\left[1 + \zeta e^{-i\pi n}\right] \right\}$$

$$\frac{1}{2}\left[1+\zeta e^{-i\pi n}\right] = \begin{cases} \zeta = 1: \begin{cases} 1 & \text{SE } n \text{ PAR} \\ 0 & \text{SE } n \text{ ÍMPAR} \end{cases} \\ \zeta = -1: \begin{cases} 0 & \text{SE } n \text{ PAR} \\ 1 & \text{SE } n \text{ ÍMPAR} \end{cases} \end{cases}$$

BÓSONS SÓ ENVOLVEM n PAR: $\omega_n = 2\pi n T$
$(n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$

FÉRMIONS " " n ÍMPAR: $\omega_n = (2n+1)\pi T$
$(n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$

RESTRINGINDO PARA FREQUÊNCIAS DE MATSUBARA BOSÔNICAS OU FERMIÔNICAS CONFORME O CASO:

$$\mathcal{G}(\vec{k},\omega_n) = \int_0^\beta d\tau \, e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\vec{k},\tau)$$

COM ISSO, PODE-SE OBTER A REP. DE LEHMANN DOS COEFICIENTES DA SÉRIE DE FOURIER. OBTÉM-SE:

$$\mathcal{G}(\vec{k},\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\vec{k},\omega')}{i\omega_n - \omega'}$$

ONDE $\rho(\vec{k},\omega)$ JÁ FOI DEFINIDA.

Relação entre as funções de Green

COMPARANDO:

$$G^{R,A}(\vec{k},\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\vec{k},\omega')}{\omega \pm i\eta - \omega'}$$

$$\mathcal{G}(\vec{k},\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\vec{k},\omega')}{i\omega_n - \omega'}$$

OBSERVA-SE QUE AS 3 FUNÇÕES ACIMA SÃO LIMITES DETERMINADOS DE UMA FUNÇÃO DEFINIDA NO PLANO COMPLEXO z:

$$\Gamma(\vec{k},z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\vec{k},\omega')}{z - \omega'}$$

OBTIDA $g(\omega_n)$ TEMOS $\Gamma(z)$ EM UM NÚMERO INFINITO ENUMERÁVEL AO LONGO DO EIXO IMAGINÁRIO DE z

<u>TEOREMA</u>: SE TEMOS $\Gamma(z)$ NAS FREQÜÊNCIAS DE MATSUBARA E:

$$\Gamma(z) \xrightarrow[|z|\to\infty]{} \frac{1}{z}$$ (O QUE DE FATO ACONTECE)

ENTÃO $\Gamma(z)$ É ÚNICA

NESSE CASO, PODE-SE, EM PRINCÍPIO, FAZER A CONTINUAÇÃO ANALÍTICA E OBTER $G^{R,A}(\vec{k},\omega)$ E A PARTIR DELAS $G(\vec{k},\omega)$.

Função de Green de Matusabra não interagente

$$K_0 = \sum_{\vec{k}} \overbrace{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)}^{\xi_{\vec{k}}} c^{\dagger}_{\vec{k}} c_{\vec{k}} = H_0 - \mu N$$

PARA $\tau > 0$:

$$-\mathcal{G}^{(0)}(\vec{k}, \tau) = \mathrm{Tr}\left[\frac{\rho_0}{Z_0} c_{\vec{k}H}(\tau)\, c^{\dagger}_{\vec{k}H}(0)\right]$$

$$c_{\vec{k}H}(\tau) = e^{\tau K} c_{\vec{k}}\, e^{-\tau K} = e^{-\xi_{\vec{k}}\tau} c_{\vec{k}}$$

ONDE: $\xi_{\vec{k}} \equiv \epsilon_{\vec{k}} - \mu$

$$\mathcal{G}^{(0)}(\vec{k}, \tau) = -e^{-\xi_{\vec{k}}\tau}\,\mathrm{Tr}\left\{\frac{\rho_0}{Z_0} c_{\vec{k}} c^{\dagger}_{\vec{k}}\right\} = -e^{-\xi_{\vec{k}}\tau}\,\mathrm{Tr}\left[\frac{e^{-\beta K_0}}{Z_0}(1 + \zeta c^{\dagger}_{\vec{k}} c_{\vec{k}})\right]$$

$$= -e^{-\xi_{\vec{k}}\tau}\left[1 + \zeta \langle n_{\vec{k}} \rangle\right]; \quad \langle n_{\vec{k}} \rangle = f_{\zeta}(\xi_{\vec{k}}) = \frac{1}{e^{\beta \xi_{\vec{k}}} - \zeta}$$

$$\mathcal{G}^{(0)}(\vec{k},\omega_n) = \underbrace{\int_0^\beta d\tau\, e^{(i\omega_n - \xi_{\vec{k}})\tau}}_{I} \left[-\left(1 + \zeta f_\zeta(\xi_{\vec{k}})\right)\right]$$

$$I = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\vec{k}}}\left[e^{(i\omega_n - \xi_{\vec{k}})\beta} - 1\right] = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\vec{k}}}\left[\zeta e^{-\beta\xi_{\vec{k}}} - 1\right]$$

COMO VIMOS ANTES.

$$\mathcal{G}^{(0)}(\vec{k},\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\vec{k}}} \underbrace{\left[1 - \zeta e^{-\beta\xi_{\vec{k}}}\right]\left[1 + \zeta f_\zeta(\xi_{\vec{k}})\right]}_{=1 \text{ (VER NOTAS)}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\mathcal{G}^{(0)}(\vec{k},\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\vec{k}}} = \frac{1}{i\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu)}}$$