

Formalismo a temperatura finita

A extensão dos resultados anteriores a sistemas a uma temperatura finita T e um potencial químico μ é razoavelmente direta. Entretanto, teremos que introduzir novos tipos de funções de Green.

Primeiramente, consideremos a função de Green a $T \neq 0$ a tempo real (ordenada temporalmente):

$$iG_{\alpha\beta}(\bar{x}_1, t_1, \bar{x}_2, t_2) = \frac{1}{Z} \text{Tr} [\hat{\rho} T(\psi_{\alpha H}(\bar{x}_1, t_1) \psi_{\beta H}^+(\bar{x}_2, t_2))]$$

onde :

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}}{Z} \quad \beta = \frac{1}{T} \quad (k_B = 1)$$

$$Z = \text{Tr} [e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}] = \text{função de grand partição}$$

Essa é a generalização natural de $G_{\alpha\beta}(x, x_2)$ a $T=0$ para um sistema a $T \neq 0$ e μ especificado.

Usa-se nesse caso o traço do produto do operador e o operador $\hat{\rho}$ acima da distribuição do ensemble grand-canônico no lugar da média no estado fundamental.

Essa função de Green tem as propriedades desejadas para a análise das características físicas dos sistemas a serem estudados mas não é apropriada ao uso da teoria de perturbação. Por isso introduziremos um novo tipo de função de Green que pode ser calculada perturbativamente por métodos completamente análogos aos estudados anteriormente.

Seja a função de Green de TEMPO IMAGINÁRIO (ou de Matsubara ou térmica) definida como:

$$G_{\alpha\beta}(\bar{n}_1, \tau_1; \bar{n}_2, \tau_2) = -T_n \left[\frac{\hat{S}}{Z} T_z(\psi_{\alpha H}(\bar{n}_1, \tau_1) \psi_{\beta H}^+(\bar{n}_2, \tau_2)) \right]$$

onde :

$$\psi_{\alpha H}(\bar{n}_1, \tau_1) \equiv e^{+\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})} \psi_{\alpha}(\bar{n}_1) e^{-\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})}$$

$$\psi_{\alpha H}^+(\bar{n}_1, \tau_1) \equiv e^{+\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})} \psi_{\alpha}^+(\bar{n}_1) e^{-\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})}$$

e T_z ordena temporalmente como antes, mas agora seguindo o "tempo imaginário" τ .

A razão para o termo "tempo imaginário" é evidente. Os operadores com sub-índice H (operadores de Matsubara) são obtidos dos operadores de Heisenberg através da substituição:

$$t \rightarrow -i\tau$$

ATENÇÃO: $\psi_{\alpha H}^+$ NÃO É O ADJUNTO DE $\psi_{\alpha H}$ (ver acima)

Além das duas funções de Green definidas acima, podemos definir as funções retardada e avançada:

$$i G_{\alpha\beta}^R(x_1, x_2) = \theta(t_1 - t_2) T_n \left[\frac{\hat{S}}{Z} [\psi_{\alpha H}(x_1), \psi_{\beta H}^+(x_2)]_+ \right]$$

$$i G_{\alpha\beta}^A(x_1, x_2) = -\theta(t_2 - t_1) T_n \left[\frac{\hat{S}}{Z} [\psi_{\alpha H}(x_1), \psi_{\beta H}^+(x_2)]_+ \right]$$

onde Γ denota a anti-comutador ($\epsilon = -1$) para férmions.

Uma análise da representação de Lehmann completamente análoga à apresentada anteriormente nos dá que (ver Fetter e Walecka pp. 232-238):

$$\rho(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{mn} \left\{ e^{-\beta K_m} (2\pi)^3 \delta[\vec{k} - (\vec{P}_m - \vec{P}_n)] 2\pi \delta[\omega - (K_m - K_n)] \right. \\ \left. (1 - \gamma e^{-\beta \omega}) |\langle m | \psi_\alpha | n \rangle|^2 \right\}$$

onde $K_n = E_n - \mu N_n$

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

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

$$G = [1 + \gamma f_\gamma(\omega)] G^R - \gamma f_\gamma(\omega) G^A$$

onde $f_\gamma(\omega) = \frac{1}{e^{\beta \omega} - \gamma}$

Segue que:

$$\text{Re } G(\vec{k}, \omega) = \text{Re } G^R(\vec{k}, \omega) = \text{Re } G^A(\vec{k}, \omega)$$

$$\text{Im } G(\vec{k}, \omega) = \text{Im } G^R [1 + 2\gamma f_\gamma(\omega)] = \text{Im } G^R \left[\coth\left(\frac{\beta \omega}{2}\right) \right]^\gamma \\ = -\frac{1}{2} \rho(\vec{k}, \omega) \left[\coth\left(\frac{\beta \omega}{2}\right) \right]^\gamma$$

$$G(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \rho(\vec{k}, \omega') \left[\frac{1 + \gamma f_\gamma(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{\gamma f_\gamma(\omega')}{\omega - \omega' - i\eta} \right]$$

Enrudo

A função de Green de tempo imaginário tem as seguintes propriedades gerais.

$$(i) G(\bar{\tau}_1, \tau_1; \bar{\tau}_2, \tau_2) = G(\bar{\tau}_1, \bar{\tau}_2; \tau_1, -\tau_2)$$

Suponha que $\tau_1 > \tau_2$ e $\tau = \tau_1 - \tau_2$

$$\begin{aligned} -G &= T_n \left[\frac{1}{z} \psi_n(1) \psi_n^\dagger(2) \right] = T_n \left[\frac{e^{-\beta \hat{K}}}{z} e^{\tau_1 \hat{K}} \psi(1) e^{-\tau_2 \hat{K}} e^{\tau_2 \hat{K}} \psi^\dagger(2) e^{-\tau_2 \hat{K}} \right] \\ &= T_n \left[\frac{e^{-\beta \hat{K}}}{z} e^{(\tau_1 - \tau_2) \hat{K}} \psi(1) e^{-(\tau_1 - \tau_2) \hat{K}} \psi^\dagger(2) \right] \end{aligned}$$

onde usamos a propriedade cíclica do traço.

(ii) A função G tem período β em cada uma de suas variáveis temporais (a menos de um sinal no caso de férmions):

Na expressão acima ($\tau = \tau_1 - \tau_2 > 0$)

$$\begin{aligned} -G(\tau) &= T_n \left[\frac{e^{-\beta \hat{K}}}{z} e^{\tau \hat{K}} \psi(1) e^{-\tau \hat{K}} \psi^\dagger(2) \right] = \\ &= T_n \left[\frac{e^{-\tau \hat{K}}}{z} \psi^\dagger(2) e^{(\tau + \beta) \hat{K}} \psi(1) \right] \end{aligned}$$

Entretanto, para $\tau < 0$ ($\tau = \tau_1 - \tau_2$)

$$\begin{aligned} -G(\tau) &= 3 T_n \left[\frac{e^{-\beta \hat{K}}}{z} \psi_n^\dagger(2) \psi_n(1) \right] = \\ &= 3 T_n \left[\frac{e^{-\beta \hat{K}}}{z} e^{-\tau \hat{K}} \psi^\dagger(2) e^{\tau \hat{K}} \psi(1) \right] \end{aligned}$$

Portanto, se $\tau \in [-\beta, \beta]$

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

$$\Rightarrow \boxed{g(\tau + \beta) = \mathcal{T} g(\tau) \quad \tau < 0}$$

Podemos, portanto, expandir $g(\tau)$ no intervalo $[-\beta, \beta]$ em uma série de Fourier

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

onde a expansão em $\vec{k}$ é igual à feita anteriormente e não será explicitada e

$$\omega_n = \frac{2\pi}{2\beta} n \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$\omega_n = \pi T n$$

Observamos:

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

que pode ser verificada explicitamente. A fim disso:

$$\begin{aligned} g(\vec{k}, \omega_n) &= \int_0^{\beta} \frac{d\tau}{2} g(\vec{k}, \tau) e^{i\omega_n \tau} + \int_{-\beta}^0 \frac{d\tau}{2} g(\vec{k}, \tau) e^{i\omega_n \tau} \\ &= \int_0^{\beta} \frac{d\tau}{2} g(\vec{k}, \tau) e^{i\omega_n \tau} + \mathcal{T} \int_{-\beta}^0 \frac{d\tau}{2} g(\vec{k}, \tau + \beta) e^{i\omega_n \tau} \\ &= \int_0^{\beta} \frac{d\tau}{2} g(\vec{k}, \tau) e^{i\omega_n \tau} \left[1 + \mathcal{T} e^{-i\omega_n \beta} \right] \end{aligned}$$

Caso $\omega_n \beta = \pi n$:

$$\frac{1}{2} [1 + \mathcal{I} e^{-i\omega_n \beta}] = \frac{1}{2} [1 + \mathcal{I} (-)^n] = \begin{cases} 1 & n \text{ par} \\ 0 & n \text{ ímpar} \end{cases} \mathcal{I} = 1$$

$$\begin{cases} 0 & n \text{ par} \\ 1 & n \text{ ímpar} \end{cases} \mathcal{I} = -1$$

Portanto, para bósons só as frequências pares aparecem:

$$\omega_n = 2n\pi T \rightarrow \text{BÓSONS}$$

e para férmions as ímpares

$$\omega_n = (2n+1)\pi T \rightarrow \text{FÉRMIONS}$$

Em qualquer caso:

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

Podemos agora deduzir a representação de Lehmann para a função de Green de tempo imaginário:

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

Comparando-se essa expressão com as expressões correspondentes para G^R e G^A , vemos que as três funções correspondem a diferentes limites da mesma função da variável complexa z

Como mostraremos a seguir, $\mathcal{G}(\vec{k}, \omega_m)$ pode ser calculada perturbativamente. Uma vez calculada, nos pontos discretos:

$$\omega_m = \begin{cases} 2\pi m T & \text{BÓSONS} \\ (2m + \frac{1}{2})\pi T & \text{FÉRMIONS} \end{cases}$$

ela pode ser continuada analiticamente para se obter G^R e G^A e, conseqüentemente, G . Esse procedimento não é único, a princípio. Entretanto, a condição adicional no infinito:

$$\Gamma(\vec{k}, z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{z}$$

que segue de $\int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{S}(\vec{k}, \omega) = 1$, garante a unicidade do procedimento.

A estratégia então está bem definida:

- Calcula-se $\mathcal{G}(\vec{k}, \omega_m)$ por teoria de perturbações
- Continua-se analiticamente $\mathcal{G}(\vec{k}, \omega_m)$ para $G^R(\vec{k}, \omega)$ ou $G^A(\vec{k}, \omega)$
- Achava-se $G(\vec{k}, \omega)$ a partir de $G^R(\vec{k}, \omega)$ ou $G^A(\vec{k}, \omega)$

Vamos calcular agora $G(\vec{k}, \omega_m)$ para o sistema não-interagente de férmions ou bósons. Da definição, para $\tau > 0$:

$$-G(\vec{k}, \tau) = \text{Tr} \left[\frac{\hat{\rho}}{Z} c_{\vec{k}}(\tau) c_{\vec{k}}^+(0) \right] \\ = \text{Tr} \left[\frac{e^{-\beta \hat{K}}}{Z} e^{z \hat{K}} c_{\vec{k}} e^{-z \hat{K}} c_{\vec{k}}^+ \right]$$

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_{\vec{k}} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}}. \text{ Como antes, segue}$$

que:

$$e^{z \hat{K}} c_{\vec{k}}^+ e^{-z \hat{K}} = e^{-\xi_{\vec{k}} z} c_{\vec{k}}^+ \quad \text{onde } \xi_{\vec{k}} \equiv \epsilon_{\vec{k}} - \mu$$

$$\Rightarrow G(\vec{k}, \tau) = -e^{-\xi_{\vec{k}} \tau} \text{Tr} \left[\frac{e^{-\beta \hat{K}}}{Z} c_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^+ \right]$$

$$= -e^{-\xi_{\vec{k}} \tau} \left[1 + \langle c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} \rangle \right]$$

$$\text{Sabemos que } \langle c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} \rangle = \langle n_{\vec{k}} \rangle = f_{\frac{1}{2}}(\xi_{\vec{k}}) = \frac{1}{e^{\beta \xi_{\vec{k}}} \pm 1}$$

que é a distribuição de Fermi-Dirac. Portanto:
ou de Bose-Einstein ($\pm = +1$)

$$G(\vec{k}, \omega_m) = \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_m \tau} G(\vec{k}, \tau) = -[1 \mp f_{\frac{1}{2}}(\xi_{\vec{k}})] \int_0^{\beta} d\tau e^{(i\omega_m - \xi_{\vec{k}})\tau}$$

$$= \mp f_{\frac{1}{2}}(-\xi_{\vec{k}}) \frac{1}{i\omega_m - \xi_{\vec{k}}} \left[e^{(i\omega_m - \xi_{\vec{k}})\beta} - 1 \right]$$

Mas $\omega_m \beta = (2m+1)\pi$ (férmions) ou $(2m)\pi$ (bósons)

$$\Rightarrow G(\vec{k}, \omega_m) = \frac{1}{i\omega_m - \xi_k} = \frac{1}{i\omega_m - \epsilon_k + \mu}$$

tanto para férmions quanto para bósons.

Note que, da representação de Lehmann obtemos, para $T \neq 0$:

$$G^R(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_k + i\delta} ; \quad G^A(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_k - i\delta}$$

$$G(\vec{k}, \omega) = (-i) \left\{ \frac{f_F(-\omega)}{\omega - \xi_k + i\delta} + \frac{f_F(\omega)}{\omega - \xi_k - i\delta} \right\}$$

Para o cálculo perturbativo de $G(\vec{k}, \omega_n)$ usamos procedimento análogo ao caso $T=0$.

A primeira observação é que:

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial \beta} = \frac{\partial (e^{-\beta \hat{K}})}{\partial \beta} = -\hat{K} \hat{S}$$

que é análoga à equação de Schrödinger se fizermos as seguintes correspondências:

$$\left. \begin{array}{l} -it \rightarrow \beta \\ \hat{H} \rightarrow \hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N} \\ \Psi \rightarrow \hat{S} = e^{-\beta \hat{K}} \end{array} \right\} \Rightarrow i \partial_t \Psi = \hat{H} \Psi$$

Os passos são então os seguintes:

(i) Definimos a representação de interações:

$$\hat{O}_I(\tau) = e^{+\hat{K}_0 \tau} \hat{O}_S e^{-\hat{K}_0 \tau}$$

onde $\hat{K}_0 = \hat{H}_0 - \mu \hat{N}$ e $\hat{K}_1 = \hat{H}_1$

Como $\hat{O}_M(\tau) = e^{\hat{K}_1 \tau} \hat{O}_S e^{-\hat{K}_1 \tau}$:

$$\hat{O}_M(\tau) = e^{\hat{K}_1 \tau} e^{-\hat{K}_0 \tau} \hat{O}_I(\tau) e^{\hat{K}_0 \tau} e^{-\hat{K}_1 \tau}$$

que relaciona a RI aos operadores de Matsubara

(ii) Como antes, definimos:

$$\tilde{U}(\tau, \tau_0) = e^{\hat{K}_0 \tau} e^{-\hat{K}(\tau - \tau_0)} e^{-\hat{K}_0 \tau_0}$$

que não é unitário [$\tilde{U}^\dagger \neq \tilde{U}^{-1}$] mas satisfaz a propriedade da soma:

$$\tilde{U}(\tau_1, \tau_2) \tilde{U}(\tau_2, \tau_3) = \tilde{U}(\tau_1, \tau_3),$$

a condição inicial

$$\tilde{U}(\tau_0, \tau_0) = 1$$

e a equação diferencial

$$\begin{aligned} \partial_\tau \tilde{U}(\tau, \tau_0) &= e^{\hat{K}_0 \tau} (\hat{K}_0 - \hat{K}) e^{-\hat{K}(\tau - \tau_0)} e^{-\hat{K}_0 \tau} \\ &= - \left(e^{\hat{K}_0 \tau} \hat{K} e^{-\hat{K}_0 \tau} \right) \tilde{U}(\tau, \tau_0) \\ &= - \hat{K}_I(\tau) \tilde{U}(\tau, \tau_0) \end{aligned}$$

onde omitimos o sub-índice "I" em $\hat{K}_I(\tau)$, como antes.

Segue imediatamente que:

$$\tilde{U}(\tau, \tau_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n}{n!} \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \dots d\tau_n T_\tau [\hat{K}_I(\tau_1) \dots \hat{K}_I(\tau_n)]$$

(iii) De:

$$e^{-\hat{K}\tau} = e^{-\hat{K}_0 \tau} \tilde{U}(\tau, 0)$$

segue que:

$$e^{\beta \hat{K}} = e^{-\beta \hat{K}_0} \tilde{U}(\beta, 0)$$

e:

$$Z = \text{Tr}(e^{\beta \hat{K}}) = \text{Tr}[e^{-\beta \hat{K}_0} \tilde{U}(\beta, 0)]$$

$e : (\tau_1 > \tau_2)$

$$\begin{aligned}
 -G(x, x_2) &= \frac{1}{z} \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{K}} \psi_{\text{II}}(\bar{x}_1, \tau_1) \psi_{\text{II}}^+(\bar{x}_2, \tau_2) \right] \\
 &= \frac{1}{z} \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{K}} e^{\hat{K} \tau_1} e^{-\hat{K} \tau_1} \psi_{\text{II}}(\bar{x}_1, \tau_1) e^{\hat{K} \tau_1} e^{-\hat{K} \tau_1} e^{\hat{K} \tau_2} e^{-\hat{K} \tau_2} \psi_{\text{II}}^+(\bar{x}_2, \tau_2) \right. \\
 &\quad \left. e^{\hat{K} \tau_2} e^{-\hat{K} \tau_2} \right] \\
 &= \frac{1}{z} \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{K}} \tilde{U}(0, \tau_1) \Psi_{\text{II}}(\bar{x}_1, \tau_1) \tilde{U}(\tau_1, 0) \tilde{U}(0, \tau_2) \Psi_{\text{II}}^+(\bar{x}_2, \tau_2) \tilde{U}(\tau_2, 0) \right] \\
 &= \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{K}_0} \tilde{U}(\beta, 0) \tilde{U}(0, \tau_1) \psi_{\text{II}}(x_1) \tilde{U}(\tau_1, \tau_2) \Psi_{\text{II}}^+(x_2) \tilde{U}(\tau_2, 0) \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{K}_0} \tilde{U}(\beta, 0) \right]} \\
 &= \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{K}_0} \text{Tr} \left[\tilde{U}(\beta, 0) \Psi_{\text{II}}(x_1) \Psi_{\text{II}}^+(x_2) \right] \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{K}_0} \tilde{U}(\beta, 0) \right]}
 \end{aligned}$$

e analogamente para $\tau_1 < \tau_2$:

$$-G(x, x_2) = \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{K}_0} \text{Tr} \left[\tilde{U}(\beta, 0) \psi_{\text{II}}(x_1) \psi_{\text{II}}^+(x_2) \right] \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{K}_0} \tilde{U}(\beta, 0) \right]}$$

(i.e) Finalmente, da expansão de $\tilde{U}(\beta, 0)$:

$$-G(x, x_2) = \frac{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{K}_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots d\tau_n \text{Tr} [\hat{K}(\tau_1) \dots \hat{K}(\tau_n) \psi_{\text{II}}(x_1) \psi_{\text{II}}^+(x_2)] \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{K}_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots d\tau_n \text{Tr} [\hat{K}(\tau_1) \dots \hat{K}(\tau_n)] \right\}}$$

(iv) Teorema de Wick:

O teorema de Wick é válido também para os produtos ordenados temporalmente de operadores na RI quando se toma o Traco com $e^{-\beta \hat{K}_0}$. Note porém que as contrações agora são também traços com $e^{-\beta \hat{K}_0}$ de produtos ordenados temporalmente de ~~par e ímpar~~ dois operadores de criação e aniquilação (um de cada). Ou seja, funções de Green térmicas não interagentes.

Vale também a regra do sinal de cada termo como antes. A prova é bem simples (ver Fetter + Walecka, pp. 237-241).

(v) Do exposto acima, é evidente que a teoria de perturbação (diagramas de Feynman) para $G(x_1, x_2)$ é completamente análoga à sua contra-partida a $T=0$.

Em particular, o denominador $Z = \text{Tr}[e^{-\beta \hat{K}_0} \tilde{U}(\beta, 0)]$ cancela exatamente os diagramas não conectados do numerador e só é necessário considerar diagramas conectados.

Definindo, como antes, para um sistema com interação de pares:

$$U(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \tau_1, -\tau_2) = V(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \delta(\tau_1, -\tau_2)$$

as regras para os diagramas de Feynman a $T \neq 0$ são as mesmas que a $T=0$ com pequenas modificações locais:

Regras para os diagramas de Feynman a $T \neq 0$:

(a) Despele todos os diagramas conectados topologicamente distintos a uma dada ordem n

(b) Associe:

$$-G^{(0)}(x_1, x_2) \longrightarrow \begin{array}{c} | \\ \uparrow \\ | \end{array} \begin{array}{c} 1 \\ \\ 2 \end{array}$$

$$-U(x_1 - x_2) \longrightarrow \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} 1 \\ \\ 2 \end{array}$$

(c) Integre sobre as variáveis internas $\bar{x}_i, \tau_i$:

$$\int d^3x_i \int_0^\beta d\tau_i$$

(d) Conserve spin nos vértices de --- e puxe sobre os índices internos

(e) Multiplique por $(-)^F$ onde F = número de circuitos fechados fermiônicos

(f) Para variáveis temporais idênticas em uma mesma G^0 faça:

$$G^{(0)}(\bar{\pi}_1, \tau_1, \bar{\pi}_2, \tau_1) = \lim_{\tau'_1 \rightarrow \tau_1^+} G(\bar{\pi}_1, \tau_1, \bar{\pi}_2, \tau'_1)$$

$$= -T \langle \psi^\dagger(\bar{\pi}_2) \psi(\bar{\pi}_1) \rangle_0$$

As regras no espaço recíproco são também bastante semelhantes, exceto que os integrais sobre frequências se tornam agora somas sobre frequências de Matsubara. As frequências das linhas de interação são pares ("bônicas") por que:

$$\delta(\tau) = T \sum_{\substack{n \\ \text{par}}} e^{-i\omega_n \tau}$$

(1) Desenhe todos os diagramas conectados topologicamente distintos a uma dada ordem n

(2) Associe:

$$-G(\vec{k}, \omega_n) \rightsquigarrow \text{---} \omega_n, \vec{k} \text{---} \quad \left(\begin{array}{l} \omega_n = \text{par p/ bóson} \\ \omega_n = \text{ímpar p/ férmion} \end{array} \right)$$

$$-U(\vec{k}, \omega_n) = -V(\vec{k}) \rightsquigarrow \text{---} \omega_n, \vec{k} \text{---}$$

e conserve momento e frequência em cada vértice

(3) Some sobre os momentos e frequências internos:

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} T \sum_n$$

(4) Conserve spin nos vértices de n e some sobre os índices internos

(5) Multiplique por $(-)^F$ onde F é como antes

(6) Insira $e^{i\omega_n \tau}$ para cada G e ω_n externo correspondem a uma mesma variável temporal.

Como exemplo, consideremos os termos de 1ª ordem. Definindo a auto-energia como antes:

$$-\Sigma(\omega_n, \vec{k}) = \text{Diagram: a circle with a cross inside}$$

$$-\tilde{\Sigma}(\omega_n, \vec{k}) = \text{Diagram: a circle with a dot inside}$$

tal que:

$$\begin{aligned} G(\omega_n, \vec{k}) &= G^{(0)}(\omega_n, \vec{k}) + G^{(0)}(\omega_n, \vec{k}) \tilde{\Sigma}(\omega_n, \vec{k}) G^{(0)}(\omega_n, \vec{k}) \\ &= G^{(0)}(\omega_n, \vec{k}) + G^{(0)}(\omega_n, \vec{k}) \Sigma(\omega_n, \vec{k}) G(\omega_n, \vec{k}) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow G(\omega_n, \vec{k}) = \frac{1}{[G^{(0)}(\omega_n, \vec{k})]^{-1} - \Sigma(\omega_n, \vec{k})}$$

temos que:

$$-\Sigma^{(1)}(\omega_n, \vec{k}) = \text{Diagram: a fermion line with a boson loop} + \text{Diagram: a fermion line with a fermion loop}$$

$$\Rightarrow \Sigma^{(1)}(\omega_n, \vec{k}) = -T \sum_{\nu_n} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} e^{i\nu_n \tau} G^{(0)}(\nu_n, \vec{q}) [V(\vec{k}-\vec{q}) + \mathcal{I} V(0)(2s+1)]$$

onde $(2s+1)$ corresponde à soma sobre os índices internos de spin e ν_n é par (bósons) ou ímpar (férmions)

Aqui aparece pela 1ª vez uma típica soma sobre frequências de Matsubara:

$$T \sum_{\nu} \frac{e^{i\nu_n \tau}}{i\nu_n - \epsilon_{\vec{q}}} \equiv H(\epsilon_{\vec{q}})$$

Vamos examinar a técnica de se avaliar essas somas:

$$H(x) = T \sum_{\nu_n} \frac{e^{i \nu_n x}}{i \nu_n - \epsilon x}$$

onde a soma é sobre $\nu_n = \begin{cases} 2n\pi T & (\text{Bósons}) \\ (2n+1)\pi T & (\text{Férmions}) \end{cases}$

Para isso, considere as funções:

$$\frac{\mathcal{I}\beta}{e^{\beta z} - \mathcal{I}} = \begin{cases} \frac{\beta}{e^{\beta z} - 1} & (\text{Bósons}) \\ \frac{-\beta}{e^{\beta z} + 1} & (\text{Férmions}) \end{cases}$$

Essa função tem pólos simples em:

$$\beta z = \begin{cases} 2n\pi i & (\text{Bósons}) \\ (2n+1)\pi i & (\text{Férmions}) \end{cases} = \beta \omega_n i$$

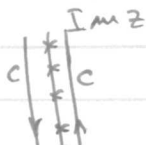
com resíduos:

$$\mathcal{I}\beta \frac{1}{\frac{\partial}{\partial z}(e^{\beta z} - \mathcal{I})} \Big|_{z=\omega_n i} = \frac{\mathcal{I}\beta}{\beta e^{\beta z}} \Big|_{z=\omega_n i} = \frac{\mathcal{I}\beta}{\beta \mathcal{I}} = 1$$

Portanto, podemos escrever:

$$H(x) = T \oint_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{\mathcal{I}\beta}{e^{\beta z} - \mathcal{I}} \frac{e^{nz}}{z - x}$$

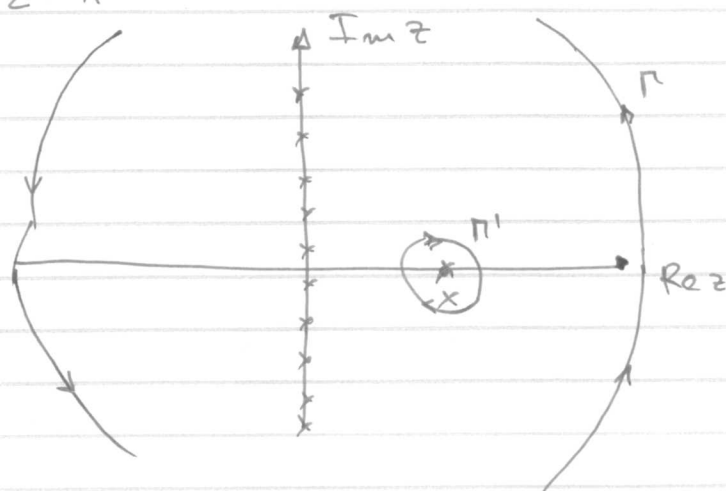
onde C é um circuito em torno dos pólos no eixo imaginário



Podemos agora distorcer C de modo a que o novo contorno seja um círculo Γ no infinito e um pequeno círculo Γ' em torno do pólo de

$$\frac{e^{nz}}{z-x}$$

em $z=x$



No círculo Γ , quando $\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{Re} z > 0 \\ |z| \rightarrow \infty \end{array} \right\}$, o integrando decai

como :

$$\frac{e^{-(\beta-n)z}}{z} \xrightarrow[\operatorname{Re} z > 0]{|z| \rightarrow \infty} 0$$

Quando $\operatorname{Re} z < 0$, o integrando decai também, desta vez como:

$$\frac{e^{n \operatorname{Re} z}}{z} \xrightarrow[\operatorname{Re} z < 0]{|z| \rightarrow \infty} 0$$

Em ambos os casos o integrando decai exponencialmente, o que é suficiente para que a contribuição de Γ seja nula. Note a importância do termo e^{nz} para o resultado acima.

A contribuição de Γ' é:

$$H(x) = -\mathcal{J} \frac{e^{\eta x}}{e^{\beta x} - \mathcal{J}} \xrightarrow{\eta \rightarrow 0^+} \frac{-\mathcal{J}}{e^{\beta x} - \mathcal{J}} = \begin{cases} -\frac{1}{e^{\beta x} - 1} = -b(x) \\ \frac{1}{e^{\beta x} + 1} = f(x) \end{cases}$$

onde $b(x)$ e $f(x)$ são as funções de distribuição de Bose-Einstein e Fermi-Dirac.

Portanto:

$$\Sigma^{(1)}(\omega_m, \vec{k}) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{\mathcal{J}}{e^{\beta \epsilon_q} - \mathcal{J}} \left[V(\vec{k} - \vec{q}) + \mathcal{J} V(0) (2s+1) \right]$$

onde $\epsilon_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \mu$. Importante: $\sum_q \frac{1}{e^{\beta \epsilon_q} - \mathcal{J}} \neq \sum_q n_0(\vec{q}) \neq N$

pois o valor de $\mu \neq \mu_0$ que corresponde a N .

Por completude, afirmamos que várias propriedades físicas do sistema podem ser diretamente obtidas de G . Em particular, qualquer valor esperado de um operador de 1 corpo:

$$\langle \hat{J} \rangle = \text{Tr} \left[\frac{\hat{J}}{Z} \right] = -3 \int d^3x \lim_{\vec{x}' \rightarrow \vec{x}} \lim_{z' \rightarrow z^+} \text{Tr} [\hat{J}(x) G(\vec{x}z, \vec{x}'z')]]$$

Por exemplo:

$$\langle \hat{N} \rangle = N = -3 \int d^3x \text{Tr} G(\vec{x}z, \vec{x}z^+) = N(T, V, \mu)$$

$$\langle \hat{T} \rangle = -3 \int d^3x \lim_{\vec{x}' \rightarrow \vec{x}} \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \text{Tr} G(\vec{x}z, \vec{x}'z^+)$$

Além disso, se a interação é entre pares;

$$\langle \hat{T} + \hat{V} \rangle = E(T, \mu, V) = -\frac{3}{2} \int d^3x \lim_{\vec{x}' \rightarrow \vec{x}} \lim_{z' \rightarrow z^+} \left[-\partial_z - \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right] \times$$

$$\times \text{Tr} G(\vec{x}z, \vec{x}'z')$$

$$E \text{ e } Z = e^{-\beta \Omega} \quad \text{e} \quad Z_0 = \text{Tr} e^{-\beta \hat{K}_0} = e^{-\beta \Omega_0}$$

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0(T, V, \mu) - 3 \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^3x \lim_{\vec{x}' \rightarrow \vec{x}} \lim_{z' \rightarrow z^+} \frac{1}{2} \left[-\partial_z + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right] \times \text{Tr} G^\lambda(\vec{x}z, \vec{x}'z')$$

onde $G^\lambda(\vec{x}z, \vec{x}'z')$ é calculada com $\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N} = \hat{H}_0 - \mu \hat{N} + \lambda \hat{H}_I$,

Resposta linear a $T \neq 0$

A teoria de resposta linear a temperatura finita também é bastante análoga à sua contrapartida a $T=0$. Como vimos anteriormente a correcção em primeira ordem devido ao termo perturbador externo de quaisquer elementos de matriz de um operador $\hat{B}$ é dada por:

$$\delta \langle \hat{\Psi}'_s(t) | \hat{B} | \hat{\Psi}_s(t) \rangle = i \int_{t_0}^t dt' \langle \hat{\Psi}'_H | [H_{\text{ext},H}(t'), \hat{B}_H(t)] | \Psi_H \rangle$$

onde supusemos que a perturbação externa começa a agir em $t=t_0$ e os sufixos H denotam a R.H. Em particular, os elementos diagonais (valores esperados) em estados quaisquer $|jN\rangle$ são: (N = número de partículas do estado)

$$\delta \langle jN | \hat{B} | jN \rangle = i \int_{t_0}^t dt' \langle jN | [H_{\text{ext},H}(t'), \hat{B}_H(t)] | jN \rangle$$

Tomando agora o traço dos valores esperados acima com o peso estatístico de Gibbs obtemos:

$$\delta \langle \hat{B} \rangle = i \int_{t_0}^t dt' \text{Tr} \left\{ \frac{\hat{\rho}}{Z} [H_{\text{ext},H}(t'), \hat{B}_H(t)] \right\}$$

que é a generalização para temperatura finita do resultado a $T=0$.

Se:

$$H_{\text{ext}} = \int d^3x \hat{A}(\vec{x}) \phi(\vec{x}, t)$$

$$\delta \langle \hat{B}(\vec{x}, t) \rangle = -i \int_{t_0}^t dt' \int d^3x' \text{Tr} \left\{ \frac{\hat{\rho}}{Z} [\hat{B}_H(\vec{x}, t), \hat{A}_H(\vec{x}', t')] \right\} \phi(\vec{x}', t')$$

onde:

$$iD_{BA}(x, x') = \text{Tr} \left\{ \frac{\hat{g}}{z} [\hat{B}_H(\bar{x}t), \hat{A}_H(\bar{x}'t')] \right\} \theta(t-t')$$

e onde supomos que $\phi(\bar{x}t) = 0$ para $t < t_0$.

Como os operadores $\hat{A}(\bar{x})$ e $\hat{B}(\bar{x})$ geralmente comutam com $\hat{N}$ podemos generalizar:

$$\hat{A}_H(\bar{x}, t) \longrightarrow \hat{A}_K(\bar{x}, t) = e^{i\hat{K}t} \hat{A}_S(\bar{x}) e^{-i\hat{K}t}$$

Para o cálculo da função de correlação acima é conveniente trabalharmos com a versão de Matsubara de D_{BA} :

$$-D_{BA} = \text{Tr} \left\{ \frac{\hat{g}}{z} T_z [\hat{B}_H(\bar{x}z) \hat{A}_H(\bar{x}'z')] \right\}$$

onde obviamente: $\hat{B}_H(\bar{x}z) \equiv e^{\hat{K}z} \hat{B}_S(\bar{x}) e^{-\hat{K}z}$, etc.

Obviamente, D_{BA} pode ser relacionada com D_{BA} através da representação de Lehmann. Por exemplo, para a função de correlação da densidade usada anteriormente a $T=0$:

$$iD_{nn}^f(x, x') = \text{Tr} \left\{ \frac{\hat{g}}{z} [\tilde{n}_K(\bar{x}t), \tilde{n}_K(\bar{x}'t')] \right\} \theta(t-t')$$

$$-D_{nn}^f(x, x') = \text{Tr} \left\{ \frac{\hat{g}}{z} T_z [\tilde{n}_H(\bar{x}z) \tilde{n}_H(\bar{x}'z')] \right\}$$

temos que:

$$D_{nn}^f(\vec{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Delta(\vec{q}, \omega')}{\omega - \omega' + i\eta} \quad \text{e} \quad D_{nn}^f(\vec{q}, \nu_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Delta(\vec{q}, \omega')}{i\nu_n - \omega'}$$

onde:

$$\Delta(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \left\{ e^{-\beta K_0} (2\pi)^3 \delta[\vec{q} - \vec{P}_m + \vec{P}_e] (2\pi) \delta[\omega - (K_m - K_e)] \right. \\ \left. \times (1 - e^{-\beta \omega}) |\langle \mathbf{Q} | \hat{n} | \mathbf{m} \rangle|^2 \right\}$$

A continuação analítica de D_{nn} para D_{nn}^R é então imediata.

A quantidade:

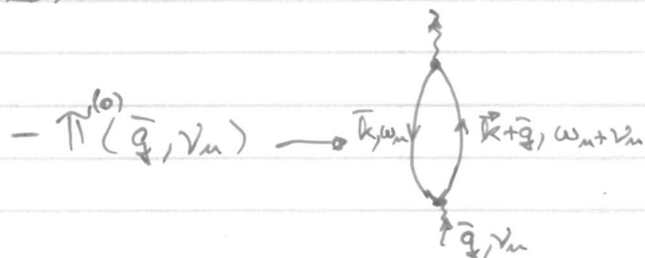
$$D_{BA}(\bar{x}z, \bar{x}'z')$$

tem uma expansão perturbativa em termos de diagramas de Feynman completamente análoga à expansão para a sua contrapartida a $T=0$, com as modificações simples já consideradas.

Como exemplo, consideremos o gás de elétrons uniforme a temperatura T e vamos tentar calcular a função de correlação de densidade em RPA. Obviamente

$$D_{nn}(\vec{q}, \nu_n) = \tilde{\Pi}(\vec{q}, \nu_n) = \frac{\Pi(\vec{q}, \nu_n)}{1 - V(\vec{q}) \tilde{\Pi}(\vec{q}, \nu_n)}$$

Na aproximação RPA, a inserção de polarização própria $\Pi(\vec{q}, \nu_n)$ é aproximada pela "bolha" simples:



Note que ω_n é fermiônica (ímpar) e ν_n é bosônica (par)

$$-\Pi^{(0)}(\bar{q}, \nu_n) = -2T \sum_{\omega_n} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} g^{(0)}(\bar{k}, \omega_n) g^{(0)}(\bar{k} + \bar{q}, \omega_n + \nu_n)$$

$$\Pi^{(0)}(\bar{q}, \nu_n) = 2T \sum_{\omega_n} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\bar{k}}} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - \epsilon_{\bar{k} + \bar{q}}}$$

onde $\epsilon_{\bar{k}} = \frac{k^2}{2m} - \mu$

$$T \sum_{\omega_n} \left[\frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\bar{k}}} \times \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - \epsilon_{\bar{k} + \bar{q}}} \right] = T \sum_{\omega_n} \left(\frac{1}{i\nu_n - \epsilon_{\bar{k} + \bar{q}} + \epsilon_{\bar{k}}} \right) \times$$

$$\times \left[\frac{e^{i\omega_n n}}{i\omega_n - \epsilon_{\bar{k}}} - \frac{e^{i\omega_n n}}{i\omega_n + i\nu_n - \epsilon_{\bar{k} + \bar{q}}} \right]$$

Note que a soma original converge absolutamente ($\rightarrow \frac{1}{\omega_n^2}$) e não necessita (nem tem) o fator de convergência $e^{i\omega_n n}$.

Este pode, entretanto, ser introduzido redundantemente e é então essencial para a convergência individual das frações parciais que aparecem no lado direito da equação acima. As somas agora são calculadas usando-se o truque já explicado anteriormente.

$$T \sum_{\omega_n} \frac{e^{i\omega_n n}}{i\omega_n - \epsilon_{\bar{k}}} = f(\epsilon_{\bar{k}})$$

$$T \sum_{\omega_n} \frac{e^{i\omega_n n}}{i\omega_n + i\nu_n - \epsilon_{\bar{k} + \bar{q}}} = f(\epsilon_{\bar{k} + \bar{q}} - i\nu_n) = f(\epsilon_{\bar{k} + \bar{q}})$$

onde usamos que $e^{i\nu_n} = 1$ porque $\nu_n = 2n\pi T$.

Obtemos finalmente:

$$\Pi^{(0)}(\bar{q}, \nu_m) = -2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{f(\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}}) - f(\epsilon_{\bar{k}})}{i\nu_m - [\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}} - \epsilon_{\bar{k}}]}$$

que é a generalização desejada para $\Pi^{(0)}$ a temperatura finita.

É óbvio que a função de correlação retardada correspondente é facilmente obtida, continuando-se analiticamente o resultado acima para

$$i\nu_m \rightarrow \omega + i\eta$$

$$\left\{ \begin{aligned} D_{\bar{n}\bar{n}}^R(\bar{q}, \omega) &= \frac{\Pi^{(0)R}(\bar{q}, \omega)}{1 - V(\bar{q}) \Pi^{(0)R}(\bar{q}, \omega)} \\ \Pi^{(0)R}(\bar{q}, \omega) &= -2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{f(\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}}) - f(\epsilon_{\bar{k}})}{\omega - [\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}} - \epsilon_{\bar{k}}] + i\eta} \end{aligned} \right.$$

(*) NOTA IMPORTANTE: A continuação analítica de $i\nu_m \rightarrow \omega + i\delta$ só deve ser feita ao final do cálculo, depois que todas as somas sobre frequências de Matsubara internas já tenham sido feitas. Da discussão acima, fica claro que, se tivéssemos feito $i\nu_m \rightarrow \omega + i\delta$ antes do final, teríamos encontrado:

$$f(\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}} - \omega - i\delta) \neq f(\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}})$$