Formalismo à Temperatura finita: funções de Green a tempo imaginário e frequências de Matsubara

Vamos agora extender o formalismo de funções de Green, Teorema de Wick e Diagramas de Feynman para sistemas a temperatura finita. Ou seja, queremos calcular funções de correlação do tipo $f_{\hat{A}\hat{B}}(t,t',\beta) = \langle \hat{A}(t)\,\hat{B}(t')\rangle_\beta$ onde $\langle \dots \rangle$ será uma média térmica envolvendo estados excitados e não apenas $|\Psi_0\rangle$:

$$f_{\hat{A}\hat{B}}(t,t',\beta) = \frac{1}{Z}\,Tr[\hat{\rho}\,\underbrace{\hat{A}(t)\,\hat{B}(t')}_{\text{(Heisenberg)}}] = \frac{Tr}{Z}[e^{-\beta H}\,e^{iHt}\,\hat{A}\,e^{-iH(t-t')}\,\hat{B}\,e^{-iHt'}] \quad (I)$$

A questão é: se $\hat{H} = H_0 + H_1$, é possível calcular $f_{\hat{A}\hat{B}}(t,t',\beta)$ como uma expansão (temporalmente ordenada) em $\hat{H}_1(t)$ (na rep de Interação: $H_1(t) = e^{iH_0t}H_1e^{-iH_0t}$).

Para $T=0$, a resposta é sim pois a matriz densidade passa a envolver apenas o estado fundamental, o termo $e^{-\beta\hat{H}}$ "some" de (I). Para $T\neq 0$:

$$f_{\hat{A}\hat{B}}(t,t',\beta) = \frac{1}{Z}\,Tr[e^{-\beta H}\,U(0,t)\,A_I(t)\,U(t,t')\,B_I(t')\,U(t',0)]$$

$$\left(\text{pois: } \begin{cases} U(t,t_0) = e^{iH_0t}\,e^{-iH(t-t_0)}\,e^{-iH_0t_0} \\ \hat{O}_H(t) = e^{iHt}\,\hat{O}\,e^{-iHt} \\ \hat{O}_I(t) = e^{iH_0t}\,\hat{O}\,e^{-iH_0t} \end{cases} \Rightarrow \boxed{\hat{O}_H(t) = U(0,t)\,\hat{O}_I(t)\,U(t,0)}\right)$$

e, embora possamos expandir os "$U(t,0)$ etc" em ordens de $H_1(t)$, fica "sobrando" o $e^{-\beta H}$ (que não "entra" em $U(t,t')$).

Note que seria ótimo se pudéssemos "absorver" o $e^{-\beta\hat{H}}$ em $U(t,0)$: ficaríamos com uma expressão similar ao caso $T=0$.

O "truque" matemático para fazer isso é usar um "tempo imaginário" $\boxed{\tau = it}$ ao invés do tempo real. Com isso, as exponenciais e^{iHt} viram exponenciais "reais" $e^{H\tau}$ e $e^{-\beta\hat{H}} \cdot e^{\pm i\hat{H}t} \to e^{H(\pm\tau-\beta)}$.

Primeiramente, definimos a Representação de Heisenberg a tempos imaginários na forma: $\boxed{\hat{A}_H(\tau) \equiv e^{H\tau}\hat{A}\,e^{-H\tau}}$ (ou $A_H(-i\tau) = e^{+Ht} A\, e^{-H\tau}$)

Também definimos a Rep. de Interação $\boxed{\hat{A}_I(-i\tau) = e^{H_0\tau}\hat{A}\,e^{-H_0\tau} \equiv \hat{A}_I(\tau)}$

onde $H = H_0 + V$. O "truque" é simplesmente fazer $t \to -i\tau$ (imaginário)

A partir daí, podemos definir o "operador de evolução temporal imaginária"

$$\hat{A}_H(-i\tau)\,\hat{B}_H(-i\tau') = \hat{U}(0,\tau)\,\hat{A}_I(\tau)\,\hat{U}(\tau,\tau')\,\hat{B}_I(\tau')\,\hat{U}(\tau',0)$$

sendo $\boxed{\hat{U}(\tau,\tau') = e^{H_0\tau}\,e^{-H(\tau-\tau')}\,e^{-H_0\tau'}}$ e $\boxed{\hat{O}_H(-i\tau) = U(0,\tau)\,\hat{O}_I(\tau)\,U(\tau,0)}$

e valem todas as propriedades de $U(\tau,\tau')$ (unitariedade, etc)

1- $U(\tau_0,\tau_0) = \mathbb{1}$

2- $U^{-1}(\tau,\tau_0)\,U(\tau,\tau_0) = \mathbb{1}$

3- $U(\tau,\tau_0)\,U(\tau_0,\tau) = \mathbb{1} \Rightarrow U(\tau_0,\tau) = U^{-1}(\tau,\tau_0)$

4- $U(\tau_1,\tau_2)\,U(\tau_2,\tau_3) = U(\tau_1,\tau_3)$

↳ forma um grupo

Com isso, podemos utilizar os resultados obtidos na Rep. de Interação, particularmente:

$$\frac{\partial}{\partial\tau} U(\tau,\tau_0) = e^{\tau H_0} \underbrace{(H_0 - H)}_{-\hat{H}_1} e^{-H(\tau-\tau_0)} e^{-H\tau_0} = -\underbrace{e^{H_0\tau} H_1 e^{-H_0\tau}}_{H_I^1(\tau)} \underbrace{e^{H_0\tau} e^{-H(\tau-\tau_0)} e^{-H\tau_0}}_{U(\tau,\tau_0)}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial U(\tau,\tau_0)}{\partial\tau} = -H_1^I(\tau)\, U(\tau,\tau_0) \Rightarrow \boxed{U(\tau,\tau_0) = \mathbb{1} - \int_{\tau_0}^{\tau} H_1^I(\tau')\, U(\tau',\tau_0)\, d\tau'}$$

ou seja, repetindo as passagens do caso de tempo real:

$$\boxed{U(\tau,\tau_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-1)^n \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \ldots \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_n \, T_\tau\left(H_1^I(\tau_1)\ldots H_1^I(\tau_n)\right)} \qquad (I)$$

onde $T_\tau(A_I(\tau)B_I(\tau')) = \begin{cases} A_I(\tau)B_I(\tau') & \tau > \tau' \\ \pm B_I(\tau')A_I(\tau) & \tau' > \tau \end{cases}$ $\quad \begin{cases} + \rightarrow \text{BOSONS} \\ - \Rightarrow \text{FÉRMIONS (ou nº ímpar de perm. de ops fermiônicos)} \end{cases}$

é o operador de ordenamento temporal.

Com isso, o operador densidade $\hat{\rho} = e^{-\beta\hat{H}}$ pode ser escrito em termos de $U(\tau,\tau_0)$ e, portanto, na forma (I). Isso pois: $\boxed{e^{-\beta\hat{H}} = e^{-\beta H_0}\, U(\beta,0)}$

Já que $U(\beta,0) = e^{\beta H_0} e^{-\beta H}$ pela definição. Assim, calculamos coisas como:

$$\langle T_\tau(A_H(\tau)B_H(\tau'))\rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left\{ e^{-\beta H} \begin{matrix} A_H(\tau)B_H(\tau') & \tau > \tau' \\ (\pm B_H(\tau')A_H(\tau) & \tau' > \tau) \end{matrix} \right\} \rightarrow \text{façamos esse antes.}$$

$= A_H(t = -i\tau)$

$$\overset{\tau > \tau'}{=} \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left\{ e^{-\beta H_0} \underbrace{U(\beta,0)\,U(0,\tau)}\, A_I(\tau)\, U(\tau,\tau')\, B_I(\tau')\, U(\tau',0) \right\}$$

$$= \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left\{ e^{-\beta H_0}\, U(\beta,\tau)\, A_I(\tau)\, U(\tau,\tau')\, B_I(\tau')\, U(\tau',0) \right\}$$

Note que, cada $U(\tau,\tau') \propto T_\tau(H_1^I(\tau_1)\ldots H_1^I(\tau_n))$ com $\tau' < (\tau_1 \ldots \tau_n) < \tau$. Assim:

$$U(\beta,\tau)A_I(\tau)U(\tau,\tau')B_I(\tau')U(\tau',0) = T_\tau\left(U(\beta,\tau)A_I(\tau)U(\tau,\tau')B_I(\tau')U(\tau',0)\right) =$$

$$= T_\tau\left(U(\beta,\tau)U(\tau,\tau')U(\tau',0)A_I(\tau)B_I(\tau')\right) = T_\tau\left(U(\beta,0)A_I(\tau)B_I(\tau')\right)$$

(note que nós mudamos a ordem de A e B dentro de $T_\tau(\ldots)$)

Se tivéssemos $\tau' > \tau$, chegaríamos em um resultado parecido:

$$\langle T_\tau (A_H(\tau) B_H(\tau')) \rangle \overset{\tau'>\tau}{=} \frac{1}{Z} Tr \left\{ e^{-\beta H_0} U(\beta,\tau') (\pm B_I(\tau')) U(\tau',\tau) A_I(\tau) U(\tau,0) \right\}$$

Novamente:

$$\pm U(\beta,\tau') B_I(\tau') U(\tau',\tau) A_I(\tau) U(\tau,0) = T_\tau \left(\pm U(\beta,\tau') B_I(\tau') U(\tau',\tau) A_I(\tau) U(\tau,0) \right) =$$

(trocou a ordem de A e B → ±) → $= T_\tau \left(U(\beta,\tau') U(\tau',\tau) U(\tau,0) A_I(\tau) B_I(\tau') \right) =$

$$= T_\tau \left(U(\beta,0) A_I(\tau) B_I(\tau') \right) \quad \text{logo:}$$

$\boxed{\text{valor esperado sobre estado de } H}$

$$\langle T_\tau (A_H(\tau) B_H(\tau')) \rangle = \frac{1}{Tr\{e^{-\beta H}\}} Tr \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau (U(\beta,0) A_I(\tau) B_I(\tau') \right\}$$

$\boxed{\text{valor esperado sobre estado de } H_0!}$

$$= \frac{Tr\left\{e^{-\beta H_0} T_\tau (U(\beta,0) A_I(\tau) B_I(\tau')) \right\}}{Tr\left\{e^{-\beta H_0} U(\beta,0)\right\}} = \frac{\langle T_\tau (U(\beta,0) A_I(\tau) B_I(\tau')\rangle_0}{\langle U(\beta,0)\rangle_0}$$

Função de Correlação de Matsubara: são definidas por:

$$C_{AB}(\tau,\tau') \equiv -\langle T_\tau (A(\tau) B(\tau')) \rangle = -\langle \theta(\tau-\tau') A(\tau) B(\tau') \pm \theta(\tau'-\tau) B(\tau') A(\tau) \rangle$$

com $A(\tau)$ e $B(\tau')$ escritos na rep de Heisenberg: $A(\tau) = e^{H\tau} A e^{-H\tau}$ $(A(t=-i\tau))$. Note que:

1) $C_{AB}(\tau,\tau') = -\langle T_\tau (A(\tau-\tau') B(0)) \rangle = C_{AB}(\tau-\tau')$

Prova: da propriedade cíclica do traço, temos: (digamos, $\tau > \tau'$):

$$Tr\left\{e^{-\beta H} e^{H\tau} A e^{-H(\tau-\tau')} B e^{-H\tau'}\right\} = Tr\left\{e^{-H\tau'} e^{-\beta H} e^{H\tau} A e^{-H(\tau-\tau')} B\right\}$$

$$= Tr\left\{e^{-\beta H} \underbrace{e^{+H(\tau-\tau')} A e^{-H(\tau-\tau')}} B\right\} = Tr\left\{e^{-\beta H} A(\tau-\tau') B(0)\right\} \quad \text{CQD}$$

Similar para $\tau' > \tau$.

2) Para garantir a convergência, $\boxed{\beta > |\tau-\tau'|}$

<u>Prova</u>: escrevendo $C_{AB}(\tau-\tau')$ na Rep de Lehmann; temos: $(H|m\rangle = E_m|m\rangle)$

$$\tau>\tau': \quad C_{AB}(\tau-\tau') = \left(\tfrac{1}{Z}\right) Tr\left\{ e^{-(\beta-(\tau-\tau'))H} A\, e^{-H(\tau-\tau')} B \right\} =$$

$$= \left(\tfrac{-1}{Z}\right)\sum_{m,m'} e^{-(\beta-(\tau-\tau'))E_m}\, e^{-E_{m'}(\tau-\tau')} \langle m|A|m'\rangle\langle m'|B|m\rangle$$

Para garantir convergência para todo E_m, $e^{-(\beta-(\tau-\tau'))E_m} < 1 \Rightarrow \boxed{\beta > (\tau-\tau')}$ $(\tau>\tau')$

$$\tau<\tau': \quad C_{AB}(\tau-\tau') = \pm\, Tr\left\{ e^{-(\beta-(\tau'-\tau))H} B\, e^{-H(\tau'-\tau)} A \right\}\times\left(-\tfrac{1}{Z}\right)$$

$$= \pm\left(\tfrac{-1}{Z}\right)\sum_{mm'} e^{-(\beta-(\tau'-\tau))E_m}\, e^{-E_{m'}(\tau'-\tau)} \langle m|B|m'\rangle\langle m'|A|m\rangle$$

Mesma coisa: $e^{-(\beta-(\tau'-\tau))E_m} < 1 \Rightarrow \beta > \tau'-\tau$ ou $\boxed{-\beta < \tau-\tau'}$ $(\tau<\tau')$

em geral $\boxed{-\beta < \tau-\tau' < \beta}$ ou $\beta > |\tau-\tau'|$ CQD

3) $\boxed{C_{AB}(-|\tau|) = \pm\, C_{AB}(\beta-|\tau|)}$ ou $C'_{AB}(\tau) = \pm\, C_{AB}(\beta+\tau)$ p/ $\tau<0$

<u>Prova</u>: $C'_{AB}(-|\tau|) = \left(-\tfrac{1}{Z}\right)\pm Tr\left\{ e^{-(\beta-|\tau|)H} B\, e^{-H|\tau|} A\right\} = \pm\, Tr\left\{ e^{-(\beta-|\tau|)H} B\, e^{-H|\tau|}\, \overbrace{e^{\beta H}\, e^{-\beta H}}^{\mathbb{1}} A\right\}$

$$= \left(-\tfrac{1}{Z}\right)(\pm)\, Tr\left\{ e^{-\beta H}\, e^{H(\beta-|\tau|)} A\, e^{-H(\beta-|\tau|)} B\right\} = \pm\, C_{AB}(\beta-|\tau|) \quad \text{CQD}$$

Com essas três propriedades, podemos definir a Transformada de Fourier da função de correlação de Matsubara.

Pela propriedade 2), a Transformada de Fourier está limitada ao domínio $-\beta < \tau < \beta$, o que implica em frequências quantizadas:

$$\begin{cases} C'_{AB}(n) \equiv \dfrac{1}{2} \displaystyle\int_{-\beta}^{\beta} d\tau \, e^{i\pi n \tau/\beta} \, C_{AB}(\tau) \\ C_{AB}(\tau) = \dfrac{1}{\beta} \displaystyle\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{\pi n \tau}{\beta}} \, C'_{AB}(n) \end{cases}$$

Pela propriedade 3), Temos: $\displaystyle\int_{-\beta}^{0} d\tau' e^{i\pi n \tau'/\beta} C_{AB}(\tau') = \pm \int_{-\beta}^{0} d\tau' e^{i\pi n \tau'/\beta} C_{AB}(\tau'+\beta) =$

$\tau = \tau' + \beta \quad (\tau' = \tau - \beta)$ $\displaystyle = \pm \int_{0}^{\beta} d\tau \, e^{\frac{in\tau}{\beta}} C_{AB}(\tau) \cdot \left(e^{-i\pi n}\right) = \pm e^{-i\pi n} \int_{0}^{\beta} d\tau \, e^{\frac{in\tau}{\beta}} C_{AB}(\tau)$

$$\Rightarrow \boxed{C'_{AB}(n) = \frac{1}{2}\left(1 \pm e^{-i\pi n}\right) \int_{0}^{\beta} d\tau \, e^{in\tau/\beta} \, C_{AB}(\tau) \quad \begin{cases} + \rightarrow \text{bósons} \\ - \rightarrow \text{férmions} \end{cases}}$$

Note que o pré-fator será $\begin{cases} \underline{\text{zero}} \text{ se: } \begin{cases} n \text{ par e férmions } (-) \\ n \text{ ímpar e bósons } (+) \end{cases} \\ 1 \text{ se: } \begin{cases} n \text{ par e bósons } (+) & (n = 2m) \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \\ n \text{ ímpar e férmions } (-) & (n = 2m+1) \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \end{cases} \end{cases}$

<u>Logo</u>:

$$\boxed{C'_{AB}(i\omega_m) = \int_{0}^{\beta} d\tau \, e^{i\omega_m \tau} \, C_{AB}(\tau) \quad \begin{cases} \omega_m = \dfrac{2m\pi}{\beta} \text{ para } \underline{\text{bósons}} \\ \omega_m = \dfrac{(2m+1)\pi}{\beta} \text{ para férmions} \end{cases}}$$

onde os ω_m são as chamadas <u>frequências de Matsubara</u>.

Conexão com funções de correlação retardadas

É nesse ponto em que o formalismo de Matsubara "brilha"

Se escrevermos $G_{AB}(i\omega_n)$ na Rep. de Lehmann $(H|M\rangle = E_M|M\rangle)$, temos:

$$G_{AB}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau}\left(\sum_{MM'} e^{-\beta E_M} e^{(E_M-E_{M'})\tau}\langle M|A|M'\rangle\langle M'|B|M\rangle\right)\cdot\left(-\frac{1}{Z}\right)$$

$$= -\frac{1}{Z}\sum_{MM'} e^{-\beta E_M}\frac{\langle M|A|M'\rangle\langle M'|B|M\rangle}{i\omega_n + E_M - E_{M'}}\cdot\Big(\underbrace{e^{i\omega_n\beta}}_{\pm 1 \left\{\substack{\text{BÓSONS}\\ \text{FÉRMIONS}}\right.} e^{(E_M-E_{M'})\beta} - 1\Big)$$

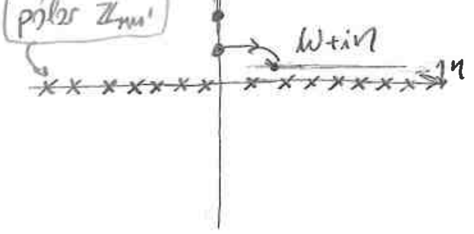
$$G_{AB}(i\omega_n) = \frac{1}{Z}\sum_{MM'}\frac{\langle M|A|M'\rangle\langle M'|B|M\rangle}{i\omega_n + (E_M - E_{M'})}\left(e^{-\beta E_M} \mp e^{-\beta E_{M'}}\right) \qquad \text{(Matsubara)}$$

Comparando com a Transformada de Fourier de $\underline{C^R_{AB}(t) = -i\,\theta(t-t')\langle A(t)B(t')\rangle}$

$$C^R_{AB}(\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{MM'}\frac{\langle M|A|M'\rangle\langle M'|B|M\rangle}{\omega + i\eta + (E_M - E_{M'})}\left(e^{-\beta E_M} \mp e^{-\beta E_{M'}}\right) \qquad \begin{cases} - & \text{BÓSONS}\\ + & \text{FÉRMIONS}\end{cases}$$

(vide "Funções de Green")

vemos que $C^R_{AB}(\omega)$ é uma continuação analítica de $G_{AB}(i\omega_n)$ c/ $i\omega_n \to \omega + i\eta$



$G_{AB}(i\omega) \to C^R_{AB}(\omega+i\eta)$

$$\boxed{C^R_{AB}(\omega+i\eta) = G_{AB}(i\omega \to \omega + i\eta)}$$

Ou seja, definimos uma função $C_{AB}(z)$:

$$\boxed{C_{AB}(z) = \frac{1}{Z}\sum_{MM'}\frac{\langle M|A|M'\rangle\langle M'|B|M\rangle}{z + (E_M - E_{M'})}\left(e^{-\beta E_M} \mp e^{-\beta E_{M'}}\right)}$$

com pólos em $z_{MM'} = E_{M'} - E_M$ no eixo real, mas analítica nos meios-planos superior e inferior. Assim, desde que não se cruze o eixo "x", sempre podemos encontrar a continuação analítica $\boxed{C_{AB}(z = i\omega_n) \to C_{AB}(z = \omega + i\eta)}$

Funções de Green de Matsubara

A função de Green de partícula única $G_{\sigma\sigma'}(\vec{r}\tau,\vec{r}'\tau')$ é um caso particular de função de correlação de Matsubara a tempo imaginário:

$$G_{\sigma\sigma'}(\vec{r}\tau,\vec{r}'\tau') = -\langle T_\tau(\psi_\sigma(\vec{r},\tau)\,\psi^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}',\tau'))\rangle \qquad \text{(espaço real)}$$

$$G_{\nu\nu'}(\tau,\tau') = -\langle T_\tau(c_\nu(\tau)\,c^\dagger_{\nu'}(\tau'))\rangle \qquad \text{(representação } \{\nu\}\text{)}$$

e podem ser calculadas no caso interagente (via diagramas) ou diretamente no caso não interagente $H = H_0 = \sum_\nu \varepsilon_\nu c_\nu^\dagger c_\nu$. Façamos esse:

$$\boxed{c_\nu(\tau) = e^{\tau H_0}\, c_\nu\, e^{-\tau H_0}}$$

$$\Rightarrow G^{(0)}_{\nu\nu}(\tau-\tau') = -\langle T_\tau(c_\nu(\tau)\,c_\nu^\dagger(\tau'))\rangle = -\frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H_0}\, T_\tau\left(e^{\tau H_0} c_\nu e^{-H_0\tau}\, e^{\tau' H_0} c_\nu^\dagger e^{-H_0\tau'}\right)\right)$$

Usando a fórmula de Baker-Hausdorff: $\boxed{e^A B e^{-A} = B + [A,B] + \frac{1}{2!}[A,[A,B]] + \dots}$

mostramos que: $\boxed{e^{\tau H_0} c_\nu e^{-\tau H_0} = e^{-\varepsilon_\nu \tau} c_\nu}$ $\boxed{e^{\tau' H_0} c_\nu^\dagger e^{-\tau' H_0} = e^{+\varepsilon_\nu \tau'} c_\nu^\dagger}$

Prova: $\boxed{c_{\nu''}^\dagger c_\nu = \mp \delta_{\nu\nu''} \pm c_\nu c_{\nu''}^\dagger}$ $\binom{B}{F}$

Como $H_0 c_\nu = \sum_{\nu''} \varepsilon_{\nu''} c_{\nu''}^\dagger \underbrace{c_{\nu''} c_\nu}_{(\pm 1)} = (-1)\sum_{\nu''} \varepsilon_{\nu''}\delta_{\nu''\nu} c_{\nu''} + c_\nu \underbrace{\sum_{\nu''} \varepsilon_{\nu''} c_{\nu''}^\dagger c_{\nu''}}_{H_0} = -\varepsilon_\nu c_\nu + c_\nu H_0$

$$\boxed{[H_0, c_\nu] = -\varepsilon_\nu c_\nu} \Rightarrow e^{\tau H_0} c_\nu e^{-\tau H_0} = c_\nu + c_\nu(-\tau\varepsilon_\nu) + c_\nu\frac{(-\tau\varepsilon_\nu)^2}{2!} + \dots = e^{-\varepsilon_\nu\tau} c_\nu \quad // \text{ C.Q.D.}$$

(mesma coisa p/ $e^{\tau' H_0} c_\nu^\dagger e^{-\tau' H_0}$)

De modo que

$$G^{(0)}_{\nu\nu}(\tau-\tau') = \left(-\frac{1}{Z}\right)\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H_0}\left(\Theta(\tau-\tau')\, e^{-\varepsilon_\nu(\tau-\tau')} c_\nu c_\nu^\dagger \pm \Theta(\tau'-\tau)\, e^{+\varepsilon_\nu(\tau'-\tau)} c_\nu^\dagger c_\nu\right)\right)$$

$$= -\left[\Theta(\tau-\tau')\langle c_\nu c_\nu^\dagger\rangle \pm \Theta(\tau'-\tau)\langle c_\nu^\dagger c_\nu\rangle\right] e^{-\varepsilon_\nu(\tau-\tau')}$$

+ → Bósons
− → Férmions

Conforme mostrado em Lista de Exercício, temos que:

$$\begin{cases} \langle c_\nu^\dagger c_\nu \rangle = n_{F(B)}(\varepsilon_\nu) \quad \text{onde} \quad \boxed{n_{F(B)} = \left(e^{\beta\varepsilon_\nu} \underset{(-)}{+} 1\right)^{-1}} \\ \langle c_\nu c_\nu^\dagger \rangle = 1 \underset{(+)}{-} \langle c_\nu^\dagger c_\nu \rangle = 1 \underset{(+)}{-} n_{F(B)}(\varepsilon_\nu) \end{cases}$$

$+ \to$ Férmion
$- \to$ Bósons

$$\Rightarrow \mathcal{G}_{\nu\nu}^{(0)}(\tau-\tau') = -\left[\Theta(\tau-\tau')\left(1 \underset{(+)}{-} n_{F(B)}(\varepsilon_\nu)\right) \underset{(+)}{-} \Theta(\tau'-\tau)\, n_{F(B)}(\varepsilon_\nu)\right] e^{-\varepsilon_\nu(\tau-\tau')}$$

Fazendo a transformada de Fourier para frequência, temos:

$$\mathcal{G}_{\nu\nu}^{(0)}(i\omega_m) = \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_m\tau}\, \mathcal{G}_{\nu\nu}(\tau-0) = -\int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_m\tau}\left(1 \underset{(+)}{-} n_{F(B)}(\varepsilon_\nu)\right) e^{-\varepsilon_\nu\tau}$$

$$= -\left(1 \underset{(+)}{-} n_{F(B)}(\varepsilon_\nu)\right)\int_0^\beta e^{(i\omega_m-\varepsilon_\nu)\tau}\, d\tau = -\frac{\left(1 \underset{(+)}{-} n_{F(B)}(\varepsilon_\nu)\right)}{i\omega_m-\varepsilon_\nu}\left(e^{i\omega_m\beta}e^{-\varepsilon_\nu\beta}-1\right)$$

Note que, para bósons $\omega_m = \frac{2m\pi}{\beta} \Rightarrow \omega_m\beta = 2m\pi \Rightarrow \underline{e^{i\omega_m\beta} = +1}$ logo:

$$\left(1+n_B(\varepsilon_\nu)\right)\left(e^{-\varepsilon_\nu\beta}-1\right) = \left(1+\frac{1}{e^{\beta\varepsilon_\nu}-1}\right)\cdot\left(1-e^{-\beta\varepsilon_\nu}\right)(-1) = \frac{1-e^{-\beta\varepsilon_\nu}}{1-e^{-\beta\varepsilon_\nu}}\cdot\frac{e^{\beta\varepsilon_\nu}}{e^{\beta\varepsilon_\nu}}(-1) = -1 \,//$$

Já para Férmions $\omega_m = (2m+1)\pi/\beta \Rightarrow \underline{e^{i\omega_m\beta} = -1}$

$$\left(1-n_F(\varepsilon_\nu)\right)(-1)\left(1+e^{-\varepsilon_\nu\beta}\right) = \left(1-\frac{1}{e^{\beta\varepsilon_\nu}+1}\right)\left(1+e^{-\beta\varepsilon_\nu}\right)(-1) = \frac{e^{\beta\varepsilon_\nu}}{e^{\beta\varepsilon_\nu}}\cdot\frac{1+e^{-\beta\varepsilon_\nu}}{1+e^{-\beta\varepsilon_\nu}}(-1) = -1 \,//$$

Logo:

$$\boxed{\mathcal{G}_{\nu\nu}^{(0)}(i\omega_m) = \frac{1}{i\omega_m-\varepsilon_\nu}} \qquad \omega_m = \begin{cases} 2m\pi/\beta \to \text{bósons} \\ (2m+1)\pi/\beta \to \text{Férmions} \end{cases}$$

para $H_0 = \sum_\nu \varepsilon_\nu c_\nu^\dagger c_\nu \,//$

Somas sobre frequências de Matsubara

Como as funções de Green de Matsubara são temporalmente ordenadas, poderemos utilizar todo o arcabouço matemático do Teorema de Wick e diagramas de Feynman para calcular séries perturbativas. Isso vai levar a somas sobre frequências de Matsubara do tipo:

$$S_2(\nu_1, \nu_2, i\omega_n, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \mathcal{G}^{(0)}_{\nu_1}(ik_n)\, \mathcal{G}^{(0)}_{\nu_2}(ik_n + i\omega_n)\, e^{ik_n \tau} \qquad (\tau > 0)$$

Para calcular essas somas, é útil usar resultados para somas do tipo:

$$\begin{cases} S^F(\tau) = \dfrac{1}{\beta} \displaystyle\sum_{ik_n} g(ik_n)\, e^{ik_n \tau} & ik_n = (2m+1)\, i\pi/\beta \rightarrow \text{férmions} \\[2ex] S^B(\tau) = \dfrac{1}{\beta} \displaystyle\sum_{i\omega_n} g(i\omega_n)\, e^{i\omega_n \tau} & i\omega_n = 2m\, i\pi/\beta \rightarrow \text{bósons} \end{cases}$$

para $\tau > 0$. Usaremos o seguinte "truque": consideramos $S^{F(B)}(\tau)$ como soma de resíduos resultantes de integrais no plano complexo. Para isso, precisamos de funções $n_{F(B)}(z)$ que tenham pólos em $z_0^F = ik_n$ e $z_0^B = i\omega_n$. Não por acaso:

$$\begin{cases} n_F(z) = \dfrac{1}{e^{\beta z} + 1} & \text{pólos em } z_0^F = \dfrac{i(2m+1)\pi}{\beta} = ik_n \\[2ex] n_B(z) = \dfrac{1}{e^{\beta z} - 1} & \text{pólos em } z_0^B = \dfrac{i\, 2m\pi}{\beta} = i\omega_n \end{cases}$$

com resíduos:

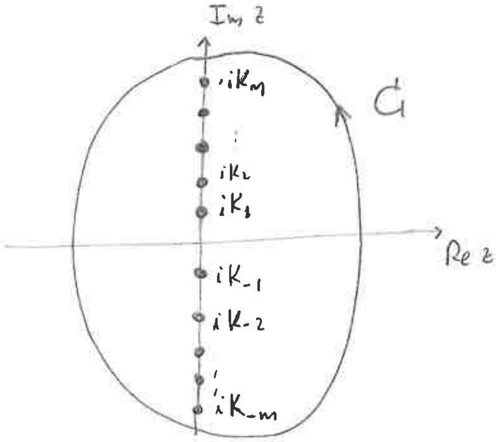
$$\begin{cases} \operatorname{Res} n_F(z = z_0^F) = \lim\limits_{z \to z_0^F} (z - z_0^F)\, n^F(z) = \lim\limits_{z \to ik_n} \dfrac{(z - ik_n)}{e^{\beta z} + 1} \overset{(\text{L'Hospital})}{=} \lim\limits_{z \to z_0^F} \dfrac{1}{\beta e^{\beta z}} = -\dfrac{1}{\beta} \\[2ex] \operatorname{Res} n_B(z = z_0^B) = \lim\limits_{z \to z_0^B} (z - z_0^B)\, n^B(z) = \lim\limits_{z \to i\omega_n} \dfrac{(z - i\omega_n)}{e^{\beta z} - 1} \overset{(\text{L'Hospital})}{=} \lim\limits_{z \to i\omega_n} \dfrac{1}{\beta e^{\beta z}} = +\dfrac{1}{\beta} \end{cases}$$

Escrevemos então as somas como integrais no plano complexo:

$$\begin{cases} 2\pi i \sum\limits_{\substack{Res \\ z_0^F = iK_m}} \left(g(z) n_F(z)\, e^{z\tau} \right) = \int\limits_{C} n_F(z)\, g(z)\, e^{z\tau} dz = 2\pi i \sum\limits_{iK_m} \left(-\frac{1}{\beta}\right) g(iK_m)\, e^{iK_m \tau} \\ 2\pi i \sum\limits_{\substack{Res \\ z_0^B = i\omega_m}} \left(g(z) n_B(z)\, e^{z\tau} \right) = \int\limits_{C} n_B(z)\, g(z)\, e^{z\tau} dz = 2\pi i \sum\limits_{i\omega_m} \left(+\frac{1}{\beta}\right) g(i\omega_m)\, e^{i\omega_m \tau} \end{cases}$$

Logo

$$\boxed{\begin{aligned} S^F(\tau) &= -\int\limits_{C} \frac{dz}{2\pi i}\, n_F(z)\, g(z)\, e^{z\tau} \\ S^B(\tau) &= +\int\limits_{C} \frac{dz}{2\pi i}\, n_B(z)\, g(z)\, e^{z\tau} \end{aligned}}$$



contorno que engloba os polos iK_m ($i\omega_m$).

desde que $g(z)$ seja analítica no contorno C.

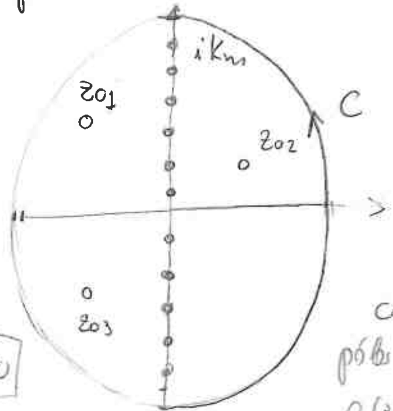
Casos em que $g(z)$ não é analítica (mais comuns)

1) $g(z)$ tem polos simples em $z^g = z_{0j}$ (por exemplo, funções de Green)

$$g(z) = \prod_j (z - z_{0j})^{-1} \quad \text{sendo que } g(|z|) \to 0 \text{ para } |z| \to \infty$$

Nesse caso $\boxed{\oint\limits_{C_\infty} \frac{dz}{2\pi i}\, n_{F(B)}(z)\, g(z)\, e^{\tau z} = 0 \quad p/\ C_\infty : z_c = Re^{i\theta},\ R \to \infty}$

pois, como $0 < \tau < \beta$, mesmo $\boxed{n_{F(B)}(z)\, e^{\tau z} = \frac{e^{-(\beta-\tau)z}}{1 \pm e^{-\beta z}} \to 0 \quad p/\ |z| \to \infty}$



contorno engloba polos de $n_F(z)$ e $g(z)$

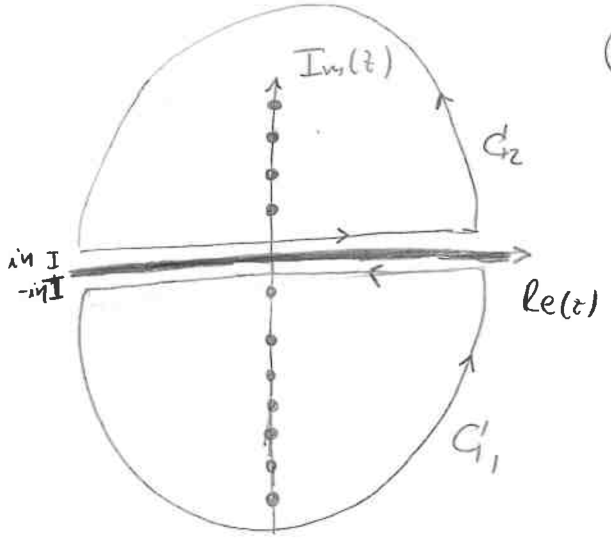
Logo: $\oint\limits_{C_\infty} \frac{dz}{2\pi i}\, n_{F(B)}(z)\, g(z)\, e^{\tau z} = \sum\limits_{iK_m} \left(\mp\frac{1}{\beta}\right) g(iK_m)\, e^{iK_m\tau} + \sum\limits_j \underset{z = z_{0j}}{Res} [g(z)]\, n_{F(B)}(z_{0j})\, e^{z_{0j}\tau} = 0$

$$\Rightarrow \boxed{S^{F(B)}(\tau) = \underset{(-)}{+} \sum_j Res[g(z)]\, n_{F(B)}(z_{0j})\, e^{z_{0j}\tau}}$$

← soma sobre resíduos dos polos do $g(z)$

2) $g(z)$ tem "branch cuts" (contínuas).

Digamos agora que $g(z)$ seja analítica no plano complexo inteiro exceto no eixo real (exemplo: uma função de Green com energias contínuas e não discretas)



Nesse caso, podemos escolher $C = C_1 + C_2$ onde C_1 e C_2 são contornos que não cortam o eixo $Re(z)$ mas que cobrem os setores $Im(z)<0$ e $Im(z)>0$ respectivamente (englobando os pólos de $n_{F(B)}(z)$). Fica claro então que:

$$(\tau>0) \qquad S^{F(B)}(\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{ik_n} g(ik_n)\, e^{ik_n\tau} = \mp_{(+)} \int_{C_1+C_2} \frac{dz}{2\pi i}\, n_{F(B)}(z)\, g(z)\, e^{z\tau}$$

$$\boxed{\varepsilon = Re(z)}$$

$$= \mp_{(+)} \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, n_{F(B)}(\varepsilon)\left[g(\varepsilon+i\eta) - g(\varepsilon - i\eta)\right] e^{\varepsilon\tau} \quad (\text{para } \eta\to 0^+)$$

Se $g(z)$ for uma função de Green de Matsubara, então $\begin{cases} g(z\to\omega+i\eta) = g^R(\omega+i\eta) \\ g(z\to\omega-i\eta) = g^A(\omega-i\eta) \end{cases}$ (*)

Como vimos anteriormente, na rep de frequência $\left[g^A(\omega)\right]^* = g^R(\omega)$ de modo que

$$g^R(\omega) - g^A(\omega) = g^R(\omega) - \left(g^R(\omega)\right)^* = +2i\, Im\left(g^R(\omega)\right) \equiv \underline{-2\pi i\, A(\omega)} \quad \text{onde}$$

$\boxed{A(\omega) \equiv -\frac{1}{\pi} Im\left(g^R(\omega)\right)}$ é a densidade espectral. Assim, $S^F(\tau)$ será dado por

$$\boxed{S^{F(B)}(\tau) = \pm_{(-)} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, n_{F(B)}(\varepsilon)\, A(\varepsilon)\, e^{\varepsilon\tau}}$$

Note que se $g(z) = G(z)$ com $G_\nu(\tau-\tau') = -T_\tau\langle c_\nu(\tau)\, c_\nu^+(\tau')\rangle$ então: (p/ férmions)

$$\boxed{\langle c_\nu^+ c_\nu\rangle = G_\nu(0^+) = \frac{1}{\beta}\sum_{ik_n} G_\nu(ik_n)\, e^{-ik_n 0^+} = S^F(0^+) = +\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, n_F(\varepsilon)\, A_\nu(\varepsilon)} \leftarrow \boxed{\text{ocupação do nível } \nu}$$

onde $A_\nu(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} Im\left(G_\nu^R(\varepsilon)\right)$ //

(*) Vide Rep de Lehmann de $g^A(\omega)$!

Diagramas de Feyman para funções de Matsubara

Voltemos agora à expressão para a função de Green de Matsubara na Rep de Interação: para $H = H_0 + H_1$:

$$\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}(\vec{r}\tau, \vec{r}'\tau') = \frac{-\mathrm{Tr}\left\{ e^{-\beta H_0} U(\beta,\tau)\, \psi^I_\sigma(\vec{r}\tau)\, U(\tau,\tau')\, \psi_{\sigma'}(\vec{r}'\tau')\, U(\tau',0) \right\}}{\mathrm{Tr}\left\{ e^{-\beta H_0} U(\beta,0)\right\}} =$$

$$= - \frac{\langle U(\beta,\tau)\, \psi^I_\sigma(\vec{r}\tau)\, U(\tau,\tau')\, \psi^I_{\sigma'}(\vec{r}'\tau')\, U(\tau',0) \rangle_0}{\langle U(\beta,0)\rangle_0}$$

A estrutura é muito parecida com a da função de Green a tempo real e $T=0$ vista anteriormente:

$$\mathcal{G}^{T=0}_{\sigma\sigma'}(\vec{r}t, \vec{r}'t') = -i\, \frac{\langle \Phi_0 | U_\eta(\infty,t)\, \psi_\sigma(\vec{r},t)\, U_\eta(t,t')\, \psi^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}'t')\, U_\eta(t',-\infty) | \Phi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | U_\eta(\infty,-\infty) | \Phi_0\rangle}$$

onde $|\Phi_0\rangle$ é o estado fundamental de H_0 sendo $H = H_0 + e^{-\eta|t|} H_1$.

De fato, podemos usar todos os "truques" usados para expandir $\mathcal{G}^{T=0}_{\sigma\sigma'}(\vec{r}t,\vec{r}'t')$ em uma série diagramática e fazer o mesmo com $\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}(\vec{r}\tau,\vec{r}'\tau)$. Temos:

$$\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}(\vec{r}\tau,\vec{r}'\tau') = - \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau (H_1(\tau_1) \ldots H(\tau_n)\, \psi_\sigma(\vec{r}\tau)\, \psi^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}'\tau'))\rangle_0}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau (H_1(\tau_1) \ldots H_1(\tau_n))\rangle_0} \qquad (\beta > \tau,\tau' > 0)$$

e a idéia é, dada uma forma para $H_1(\tau)$, utilizar o Teorema de Wick. Usaremos:

independente do tempo

$$\boxed{H_1 = \frac{1}{2}\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \sum_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}} U_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\, \psi^\dagger_\alpha(\vec{r}_1)\, \psi^\dagger_\beta(\vec{r}_2)\, \psi_{\beta'}(\vec{r}_2)\, \psi_{\alpha'}(\vec{r}_1)}$$

$\boxed{x = (\vec{r},\tau)}$ $(\tau = -it)$

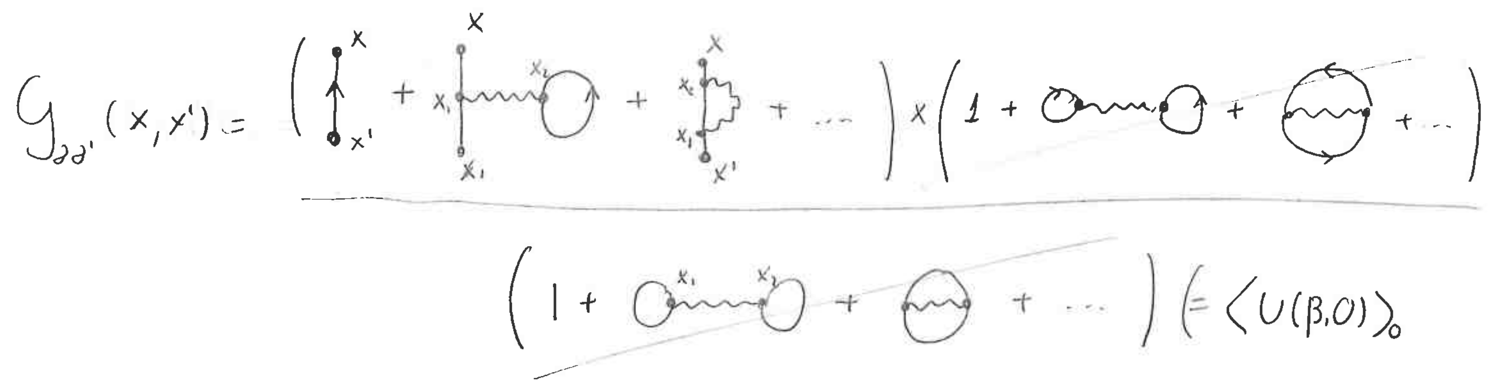
e $$\boxed{U_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}}(x_1,x_2) = U_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\, \delta(\tau_1-\tau_2)}$$

Com essa definição para $U_{\substack{\alpha\alpha' \\ \beta\beta'}}(\vec{r}\,\tau, \vec{r}\,'\tau)$, podemos escrever:

$$\int_0^\beta d\tau_j \, H_1(\tau_j) = \frac{1}{2} \int dx_j \, dx_j' \; \psi^\dagger_{\alpha_j}(x_j^+) \, \psi^\dagger_{\alpha_j'}(x_j'^+) \, U_{\substack{\alpha_j\alpha_j \\ \alpha_j'\alpha_j'}}(x_j, x_j') \, \psi_{\alpha_j'}(x_j') \, \psi_{\alpha_j}(x_j)$$

onde $\int dx_j = \sum_{\alpha_j} \int_0^\beta d\tau_j \int d\vec{r}_j$ (assumimos que U conserva o spin $\begin{matrix} \alpha_j \to \alpha_j \\ \alpha_j' \to \alpha_j' \end{matrix}$)

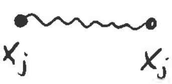
Note que a integral no tempo vai de 0 a β. O último passo é usar o Teorema de Wick para "quebrar" os valores esperados de ordenamento temporal em pares. Isso é feito de forma análoga ao caso $T=0$. Assim:



onde os diagramas não conectados "cancelam", e $\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}(x,x')$ depende apenas dos "conectados".

As "regras" continuam idênticas, com a diferença (importante) que $\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dt \to \int_0^\beta d\tau}$:

1) Desenhe todos os diagramas $\overbrace{\text{conectados e}}$ topologicamente distintos c/ n linhas de interação com início em (x',σ') e final em (x,σ). Associe (x_j, α_j) aos $2n$ vértices

2) Linhas de interação:  $\equiv -U_{\alpha_j\alpha_j'}(x_j, x_j')$.

Linhas de propagação  $\equiv \mathcal{G}^0_{\alpha_1\alpha_2}(x_2, x_1)$ $(\tau_1 \to \tau_1 + \eta)$

$\boxed{\text{Vértices: } \int dx_j}$

3) Loops fechados fermiônicos: $(-1)^F \to F$ número de circuitos fechados.

4) Some sobre todos os diagramas, ordem a ordem.

Diagramas de Feynman no espaço de momentos e frequências de Matsubara $\mathcal{G}_{\alpha\alpha'}(\vec{k}, i\omega_n)$

Novamente, a analogia com o caso a $T=0$ é grande. A grande diferença vem da transformada de Fourier no tempo, que dá origem às frequências de Matsubara.

A interação Coulombiana fica escrita na forma

$$U(\overbrace{\vec{r}_1\tau_1}^{\equiv x_1}, \overbrace{\vec{r}_2\tau_2}^{\equiv x_2}) = \frac{1}{V}\sum_{\vec{q}} \frac{1}{\beta}\sum_{iq_n} U(\vec{q}, iq_n)\, e^{i[\vec{q}\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2) - iq_n(\tau-\tau')]}$$

É importante notar que $iq_n = 2\pi i n/\beta$ são bosônicas uma vez que a função de correlação de Matsubara correspondente envolve pares de operadores fermiônicos que obedecem à estatística de Bose-Einstein. No limite contínuo, obtem

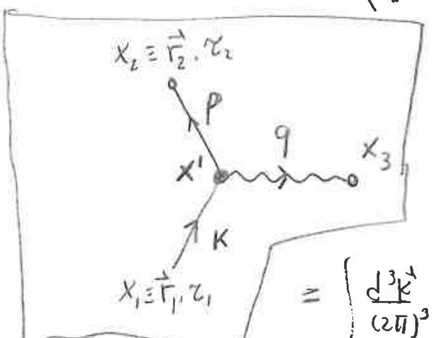
$$U(x_1,x_2) = \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3}\left(\frac{1}{\beta}\sum_{iq_n}\right) U(\vec{q}, iq_n)\, e^{iq\cdot(x_1-x_2)} \qquad \boxed{q\cdot x \equiv \vec{q}\cdot\vec{r} - iq_n\tau}$$

As funções de Green livres ficam:

$$\mathcal{G}^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{r}\tau, \vec{r}'\tau') = \left(\frac{1}{V}\sum_{\vec{k}}\right)\left(\frac{1}{\beta}\sum_{ik_n} \mathcal{G}^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{k}, ik_n)\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}') - ik_n(\tau-\tau')}\right)$$

. Logo, em cada vértice temos:

EXEMPLO:



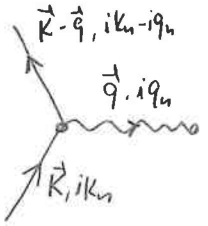
$$= \int d^4x'\, \mathcal{G}^{(0)}_{\alpha}(x', x_1)\, \mathcal{G}^{(0)}_{\alpha}(x_2, x')\, U(x_3, x') =$$

$\boxed{p = K - q}$

(cons. de momento)

$$= \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3}\frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta^3}\sum_{\substack{ik_n\\ ip_n\\ iq_n}} \mathcal{G}^{(0)}_{\alpha}(k)\,\mathcal{G}^{(0)}_{\alpha}(p)\,U(q) \int \underbrace{e^{ik\cdot(x'-x_1)}\, e^{ip(x_2-x')}\, e^{iq(x_3-x')}}_{e^{i(k-p-q)\cdot x'}\, e^{-ikx_1}\, e^{ipx_2}\, e^{iqx_3}} d^4x' =$$

$$= \int \frac{d^4k}{(2\pi)^3\beta}\frac{d^4p}{(2\pi)^3\beta}\frac{d^4q}{(2\pi)^3\beta}\, \mathcal{G}^{(0)}_{\alpha}(k)\,\mathcal{G}^{(0)}_{\alpha}(p)\,U(q) \Big[\underbrace{\int d^4x'\, e^{i(k-p-q)\cdot x'}}_{(2\pi)^3\beta\,\delta(k-(p+q)) \Rightarrow k=p+q \text{ ou } \boxed{p=k-q}}\Big]\, e^{-ikx_1}\, e^{ipx_2}\, e^{iqx_3} =$$



$$= \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3}\left(\frac{1}{\beta^2}\sum_{\substack{ik_n\\ iq_n}} \underline{\mathcal{G}^{(0)}_{\alpha}(\vec{k}, ik_n)}\, \mathcal{G}^{(0)}_{\alpha}(\vec{k}-\vec{q}, ik_n - iq_n)\, U_{\alpha\alpha}(\vec{q}, iq_n)\, e^{+ik\cdot(x_2-x_1)}\, e^{iq(x_3-x_2)}\right)$$