כעת נתחיל לדון באמפליטודה קוונטית כגון $\langle 0|\psi(r,t)\psi^{\dagger}(r',t')|0\rangle$

כאשר:

$\psi(r,t)$ הינו אופרטור השדה בהצגת הייזנברג.

(להזכירכם בהצגת הייזנברג המצבים אינם תלויים בזמן והאופרטורים מתפתחים בזמן בהתאם ל: $i\frac{\partial}{\partial t}O(t) = [O(t),H]$ כך שעבור H שאינו תלוי בזמן $O(t) = e^{iHt}O(0)e^{-iHt}$)

$|0\rangle$ הינו מצב היסוד של המערכת ה N חלקיקים בהצגת הייזנברג בנוכחות אינטראקציות אם אלו קיימות.

שימו לב: נגדיר אותם ב $|n\rangle$ את המצבים העצמיים של המערכת ה N חלקיקים:

$H|n\rangle = E_n|n\rangle$

כך שהמצב $|0\rangle$ אינו הוואקום המוחלט הנוצר על ידי כל אופרטורי ההשמדה אלא מצב היסוד. לדוגמא עבור פרמיונים חופשיים

$$|0\rangle = \left(\prod_{k<k_F} a_k^{\dagger}\right)|\phi\rangle$$

הוואקום

את האמפליטודה שרשמנו היא לכן האמפליטודה הקוונטית לחלקיק שנוסף בזמן t' במקום r' למצב היסוד ה N-חלקיקים להתקדם ולהימצא בזמן t במקום r.

מסיבות שתתבררנה בהמשך נבחר לחשב אמפליטודות שונות מעט מזו שרשמנו לעיל. לצורך כך נגדיר את

פונקציית גרין החד-חלקיקית: single particle Green's functions

$$G(r,t,r',t') \equiv -i\langle 0|T\,\psi(r,t)\,\psi^{\dagger}(r',t')|0\rangle$$

כאשר T הינו אופרטור הסידור בזמן time-ordering operator

$$T\,A(t)B(t') = A(t)B(t')\,\theta(t-t') \pm B(t')A(t)\,\theta(t'-t)$$

כאשר הסימן העליון מתאים למקרה הבוזוני והתחתון לפרמיוני:

איזו אינפורמציה אצורה ב G ? ניתן להראות כי מידיעת G ניתן לחשב את ערכי התצפית (או ערך הממוצע) של כל אופרטור חד-חלקיקי.

לדוגמא:

1. הצפיפות $n = \langle \hat{n}(r) \rangle = \pm i\, G(r,t,r,t^+)$

כאשר הסימן העליון מתאים לבוזונים והתחתון לפרמיונים.

כאן $t^+ = t+0^+$, נבחר כדי להבטיח שהאופרטור ψ^+ מופיע בזמן מאוחר מ ψ ולכן אופרטור הסדר בזמן יסדר אותם כ $\psi^+\psi$ שהוא אכן אופרטור הצפיפות.

2. התנע
$$\vec{P} = \langle \int d^3r\, \psi^+(r) \left(-i\hbar\vec{\nabla}\right) \psi(r) \rangle$$
$$= \pm i \int d^3r \lim_{r'\to r} -i\hbar\nabla G(r,t,r',t^+)$$

3. עבור המילטוניאן
$$H = \int d^3r\, \psi^+(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) \psi(r) + \frac{1}{2}\iint d^3r\, d^3r'\, \psi^+(r)\psi^+(r') V(r-r') \psi(r')\psi(r)$$

אנרגית מצב היסוד נתונה ע"י
$$\langle H \rangle = \pm \frac{1}{2} i \int d^3r \lim_{r'\to r} \lim_{t'\to t^+} \left[i\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \right] G(r,t,r',t')$$

<u>תרגיל</u>: הוכח זאת. הדרכה: משוואת התנועה ל $\psi(r,t)$:

א. $$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) = [\psi(r,t), H] = e^{iHt}[\psi(r), H]e^{-iHt}$$

ב. $$[\psi(r), H] = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + \int d^3r'\, \psi^+(r') V(r-r') \psi(r') \psi(r)$$

ג. $\Leftarrow$ $$\left[i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \right] \psi(r,t) = \int d^3r'\, \psi^+(r',t) V(r-r') \psi(r',t) \psi(r,t)$$

למעשה G מכילה אינפורמציה על האנרגיות המתאימות של מערכת החלקיקים. כדי להבין זאת נשתמש בהצגה שימושית במיוחד של G הנקראת הצגה ספקטרלית או Lehmann representation.

לצורך כך נשתמש בעובדה שאוסף המצבים העצמיים של H הינו בסיס שלם כך ש

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

שימו לב כי $|n\rangle$ מייצג למעשה בנוסף לאנרגיה גם אינדקסים נוספים של המצב כגון תנע, ספין וכו' במקרה שהמצב מכיל מספרים קוונטים טובים במערכת.

$$G(r,t,r',t') = -i\sum_n \Big[\langle 0|\Psi(r,t)|n\rangle^{N+1}\langle n|\Psi^+(r',t')|0\rangle\,\theta(t-t')$$

$$\pm \langle 0|\Psi^+(r',t')|n\rangle^{N-1}\langle n|\Psi(r,t)|0\rangle\,\theta(t'-t)\Big]$$

מכיוון ש $\Psi(r,t) = e^{iHt}\Psi(r)e^{-iHt}$

$$= -i\sum_n \Big[e^{-i(E_n^{N+1}-E_0^N)(t-t')} \langle 0|\Psi(r)|n\rangle^{N+1}\langle n|\Psi^+(r')|0\rangle\,\theta(t-t')$$

$$\pm e^{i(E_n^{N-1}-E_0^N)(t-t')} \langle 0|\Psi^+(r')|n\rangle^{N-1}\langle n|\Psi(r)|0\rangle\,\theta(t'-t)\Big]$$

נשים לב כי

$$E_n^{N+1}-E_0^N = (E_n^{N+1}-E_0^{N+1}) + (E_0^{N+1}-E_0^N)$$

$$= (E_n^{N+1}-E_0^{N+1}) + \mu^N$$

$$\simeq E_n - E_0 + \mu$$

כשהשתמשנו בעובדה ש $\mu^N = E_0^{N+1}-E_0^N$ וקיבלנו שהפרש האנרגיות $\left(\mu = \frac{\partial E}{\partial N}\Big|_V\right)$ $E_n - E_0$ אינם תלויים ב N בגבול $N\to\infty$ עבור N סופי הם תלויים כמו $\frac{1}{N}$ (E_0^N ו E_0^{N+1} שווים ב $O(E_F)$)

באופן דומה

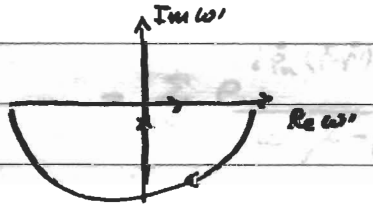
$$E_n^{N-1}-E_0^N = (E_n^{N-1}-E_0^{N-1}) - \mu^{N-1}$$

$$\simeq E_n - E_0 - \mu$$

נשתמש בייצוג האינטגרלי לפונקציית θ:

$$\theta(t-t') = -\int \frac{d\omega'}{2\pi i}\frac{e^{-i\omega'(t-t')}}{\omega'+i\delta}$$

$(\delta>0)$ כאשר האינטגרל נעשה מעל הישר הממשי:



עבור $t>t'$ האינטגרנד מתאפס עבור $Im\,\omega'\to-\infty$ במישור התחתון

$Im\,\omega\to-\infty$ נסגור לכן את האינטגרל לאורך המעגל התחתון.

כיוון המסלול

אנו מקיפים את הקוטב ב $\omega' = -i\delta$ רק שארית $-\frac{1}{2\pi i}$. משפט קושי נותן לנו $2\pi i \cdot (-1) \cdot \frac{-1}{(2\pi i)} = 1$

שארית

עבור $t < t'$ נסגור את המסלול בחצי המישור העליון האינטגרל על הקשת מתאפס מכיוון שהאקספוננט שלה הולך לאפס כאשר $\mathrm{Im}\,\omega' \to \infty$ ומשפט קושי נותן לנו אפס עבור האינטגרל על הקו הממשי.

נבצע התמרת פורייה בזמן של $G(r,t,r',t')$:

$$G(r,r',\omega) = \int d(t-t')\, e^{i\omega(t-t')}\, G(r,t,r',t')$$

$$= i \int d(t-t') e^{i\omega(t-t')} \int \frac{d\omega'}{2\pi i} \sum_n \left[\frac{e^{-i(E_n - E_0 + \mu + \omega')(t-t')}}{\omega' + i\delta} \langle 0|\psi(r)|n\rangle\langle n|\psi^{\dagger}(r')|0\rangle \right.$$

$$\left. \pm \frac{e^{-i(E_n - E_0 - \mu + \omega')(t'-t)}}{\omega' + i\delta} \langle 0|\psi(r')|n\rangle\langle n|\psi(r)|0\rangle \right]$$

$$= \sum_n \frac{\langle 0|\psi(r)|n\rangle^{N+1}\langle n|\psi^{\dagger}(r')|0\rangle}{\omega - \mu - (E_n - E_0) + i\delta} \mp \frac{\langle 0|\psi^{\dagger}(r')|n\rangle^{N-1}\langle n|\psi(r)|0\rangle}{\omega - \mu + (E_n - E_0) - i\delta}$$

שימו לב: כל התלות ב ω נמצאת במכנה. הקטבים (כפונקציה של ω) של G נותנים את אנרגיות העירור המדויקות של המערכת. $G(r,r',\omega)$ איננה אנליטית לא בחצי המישור העליון של ω ולא בחצי המישור התחתון.

<u>תרגיל</u>: הראו כי $\psi(\vec{r}) = e^{-i\hat{\vec{P}}\cdot\vec{r}}\, \psi(0)\, e^{i\hat{\vec{P}}\cdot\vec{r}}$

כאשר $\hat{\vec{P}} = \int d^3r\, \psi^{+}(r)[-i\hbar\vec{\nabla}]\psi(r)$ אופרטור התנע.

הדרכה: השתמשו בנוסחת Baker-Hausdorff ו- $-i\hbar\vec{\nabla}\psi(r) = [\psi(r), \hat{\vec{P}}]$

<u>במערכת אינווריאנטית להזזות</u> המצבים העצמיים של ההמילטוניאן הינם גם מצבים עצמיים של $\hat{\vec{P}}$.
מצב היסוד הינו בעל $P=0$ במערכת (קהנה אינטראקציה שאינה תלויה ב $\hat{\vec{P}}$) מכיוון שהאנרגיה הקינטית פרופורציונית ל $\hat{\vec{P}}^2$.

$$= \sum_n \frac{e^{i\vec{P}_n(\vec{r}-\vec{r}')}\,|\langle n|\psi^{+}(0)|0\rangle|^2}{\omega - \mu - (E_n - E_0) + i\delta} \mp \frac{e^{-i\vec{P}_n(\vec{r}-\vec{r}')}\,|\langle n|\psi(0)|0\rangle|^2}{\omega - \mu + (E_n - E_0) - i\delta}$$

נתבונן בהתמרת פוריה של $G(r-r';\omega)$ כפונ' של $\vec r-\vec r'$

$$G(\vec k,\omega) = \int d(\vec r-\vec r')\, e^{-i\vec k(\vec r-\vec r')}\, G(\vec r-\vec r',\omega)$$

$$= \underset{\text{נפח}}{V} \sum_n{}' \frac{|\langle n;\vec k|\psi^+(0)|0\rangle|^2}{\omega-\mu-(E_{n;\vec k}-E_0)+i\delta} \mp \frac{|\langle n;-\vec k|\psi(0)|0\rangle|^2}{\omega-\mu+(E_{n;-\vec k}-E_0)-i\delta}$$

סכום על מצבים עצמיים $|n\rangle$
עם תנע $\vec k$: $|n;\vec k\rangle$.

נתבונן במקרה של גז פרמיונים חופשיים.
נבחן את

$${}^{N+1}\langle n;\vec k|\psi^+(0)|0\rangle^N = \langle n;\vec k|\frac{1}{\sqrt V}\sum_{\vec k'} e^{-i\vec k'\cdot 0}\, a^+_{\vec k'}|0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt V}\,{}^{N+1}\langle n;\vec k|\sum_{\vec k'} a^+_{\vec k'}|0\rangle^N$$

מכיון ש $|0\rangle = \left(\prod_{k<k_F} a_k^+\right)|\phi\rangle$ רק איברים בסכום עם $k'>k_F$ נשארים לשרוד (בגלל $a^{+2}=0$ עבור פרמיונים). המצב המתקבל הוא של ים פרמי מלא ועוד מצב מאוכלס ב $k'>k_F$ מעליו. כשנטיל אותו על המצבים ~~...~~ של המערכת עם N+1 חלקיקים ותנע $\vec k$: $\langle n;\vec k|$ נקבל תוצאה מנוונת רק עם המצב בו החלקיק הנוסף נמצא במצב החד חלקיקי עם תנע $\vec k$. $(\vec k>k_F)$
שימו לב כי למערכת עם N+1 חלקיקים מצבים רבים עם תנע $\vec k$ שאינם מהסוג שתארנו לעיל כלומר מצבים לדוגמא

$\bullet\bullet\circ\bullet\bullet\bullet\bullet\circ\bullet\bullet\ \bullet$ ($-k_F$, k_F, k)

$\underbrace{\bullet\bullet\bullet\bullet\bullet\bullet\bullet\ \bullet}_{\text{particle states}}$ ($-k_F$, k_F, k)

אך הם לא מצב ספציפי עם תנע k
אין הרכבה שלו עם $\psi^+(0)|0\rangle^N$ מתאפסת. סך הכל קיבלנו לכן עבור המערכת החופשית

$${}^{N+1}\langle n;\vec k|\psi^+(0)|0\rangle^N = \theta(k-k_F) \qquad ; \qquad E^N_{n;\vec k}-E^N_0 = \epsilon_k - E_F \qquad \left(\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)$$

$${}^{N-1}\langle n;-\vec k|\psi(0)|0\rangle^N = \theta(k_F-k)$$

אני משאיר לכם כתרגיל להראות ש

(כמו למעלה $k=|\vec k|$). המצבים התורמים במקרה זה הינם מהצורה

$\underbrace{\bullet\bullet\bullet\bullet\bullet\bullet\circ\bullet\bullet}_{\text{hole states}}$ ($-k_F$, k, k_F)

(עם תנע $-k$)

$$; \qquad E^N_{n;-\vec k}-E^N_0 = E_F-\epsilon_k$$

לכן עבור פרמיון חופשי

$$G(\vec{k},\omega) = \underbrace{\frac{\theta(k-k_F)}{\omega-\epsilon_k+i\delta}}_{\text{particles}} + \underbrace{\frac{\theta(k_F-k)}{\omega-\epsilon_k-i\delta}}_{\text{holes.}}$$

תרגיל: חשבו את $G(\vec{k},\omega)$ באופן ישיר עבור פרמיון חופשי $H=\sum_k \epsilon(k) a_k^{+} a_k$ תוך שימוש ב $a_k(t) = e^{-i\epsilon(k)t} a_k$ המתקבל מתוך משוואות הייזנברג.

ניתן לרשום את $G(\vec{k},\omega)$ (ניתן לעשות זאת גם כאשר המערכת אינה אינטראקטיבית חסרת הגבלה) באמצעות הפונקציות הספקטרליות

$$A_p(\vec{k},\omega) = \sum_n{}' \delta\left[\omega-(E_{n;\vec{k}}-E_0)\right]\left|\langle n;\vec{k}|\psi^{+}|0\rangle\right|^2$$

$$A_h(\vec{k},\omega) = \sum_n{}' \delta\left[\omega-(E_{n;-\vec{k}}-E_0)\right]\left|\langle n;-\vec{k}|\psi|0\rangle\right|^2$$

$$G(\vec{k},\omega) = \int d\omega' \left[\frac{A_p(\vec{k},\omega')}{\omega-\mu-\omega'+i\delta} \mp \frac{A_h(\vec{k},\omega')}{\omega-\mu+\omega'-i\delta}\right]$$

- שימו לב כי A_h, A_p מתאפסים עבור $\omega<0$ וכו' הן ממשיות חיוביות

הפונקציות הספקטרליות מקיימות את sum rules חשובים המאפשרים לנו לבדוק קירובים שלא שוברים תכונות בסיס חשובות של מערכות רב חלקיקיות. הבסיסי ביותר מבניהם הינו שימור ה single particle spectral weight:

$$\int d\omega \left[A_p(\vec{k},\omega) + A_h(\vec{k},\omega)\right] = 1$$

[illegible]: עבור פרמיון

$$\langle 0|\left[\psi(\vec{r}), \psi^{+}(\vec{r}')\right]_{+}|0\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$\parallel$$

$$\sum_n \langle 0|\psi(\vec{r})|n\rangle\langle n|\psi^{+}(\vec{r}')|0\rangle + \langle 0|\psi^{+}(\vec{r}')|n\rangle\langle n|\psi(\vec{r})|0\rangle$$

$$\parallel$$

$$\sum_n \left[e^{i\vec{P}_n(\vec{r}-\vec{r}')}\left|\langle n|\psi^{+}|0\rangle\right|^2 + e^{-i\vec{P}_n(\vec{r}-\vec{r}')}\left|\langle n|\psi|0\rangle\right|^2\right]$$

נעביר את המשוואה למרחב פורייה ונקבל

$$1 = \sum_n{}' |\langle n;\vec{k}|\Psi^+|0\rangle|^2 + |\langle n;-\vec{k}|\Psi|0\rangle|^2$$

$$= \int d\omega \sum_n{}' \left\{ \delta\left[\omega - (E_{n;\vec{k}} - E_0)\right] |\langle n;\vec{k}|\Psi^+|0\rangle|^2 + \delta\left[\omega - (E_{n;-\vec{k}} - E_0)\right] |\langle n;-\vec{k}|\Psi|0\rangle|^2 \right\}$$

$$= \int d\omega \left[A_p(\vec{k},\omega) + A_h(\vec{k},\omega) \right]$$

כבר ראינו שפונקצית גרין המסובכת כמות שהגדרנו אינה אנליטית בשום חצי המישור המרוכב.
נגדיר כעת שתי פונקציות גרין אחרות שאנליטיות בחצי מישור אחד או שני:

$$G^R(r,t;r',t') = -i\langle 0|\left[\Psi(r,t), \Psi^\dagger(r',t')\right]_{\mp}|0\rangle\, \theta(t-t')$$: retarded Green's function

$$G^A(r,t;r',t') = i\langle 0|\left[\Psi(r,t), \Psi^\dagger(r',t')\right]_{\mp}|0\rangle\, \theta(t'-t)$$: advanced Green's function

כאשר, כרגיל, הסימן העליון מתאים לבוזונים והתחתון לפרמיונים.
בעזרת העברה של הדרך בה נקטנו עבור G ניתן להראות כי ההצגה הספקטרלית של $G^{R,A}$
נתונה על ידי

$$G^{R,A}(\vec{k},\omega) = \int d\omega' \left[\frac{A_p(\vec{k},\omega')}{\omega-\mu-\omega' \pm i\delta} \overset{\text{בוזונים}}{\underset{\text{פרמיונים}}{\mp}} \frac{A_h(\vec{k},\omega')}{\omega-\mu+\omega' \pm i\delta} \right]$$

כשהסימן העליון מתאים ל G^R והתחתון ל G^A.
נשים לב כי: א. G^R אנליטית בחצי המישור המרוכב העליון של ω ו G^A בחצי התחתון.
ב. עבור ω ממשי $G^R = (G^A)^*$.

כל פונקציה מרוכבת שאנליטית בחצי מישור מקיימת את יחסי Kramers - Kronig המקשרים
תמורות של החלק המדומה והממשי של הפונקציה. עבור ω ממשי:

$$\mathrm{Re}\, G^{R,A}(\vec{k},\omega) = \mp \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathrm{Im}\, G^{R,A}(\vec{k},\omega')}{\omega-\omega'}$$

מכאן אנו רואים גם עובדה: causality רק ש־G^R ו־G^A ממלאות אחר תנאי זה.
אנו נראה בהמשך כי כל התכונות המעניינות של מערכת ניתנות לתיאור בעזרת retarded Green's functions.

נגדיר את הפונקציה הספקטרלית (spectral function)

$$A(\vec{k},\omega) = \begin{cases} A_p(\vec{k},\omega) & \omega>0 \\ \mp A_h(\vec{k},-\omega) & \omega<0 \end{cases}$$

בוזון / פרמיון

כך ש

$$G^{R,A}(\vec{k},\omega) = \int d\omega' \frac{A(\vec{k},\omega')}{\omega-\mu-\omega' \pm i\delta}$$

תוך שימוש ב: $\frac{1}{x-x_0\pm i\delta} = P\frac{1}{x-x_0} \mp i\pi\delta(x-x_0)$ (תלוי סימן האינפיניטסימל) : הוכחה בתרגול

נקבל

$$A(\vec{k},\omega) = \mp\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,G^{R,A}(\vec{k},\omega+\mu)$$

מתוך תכונות A_p ו־A_h נקבל את התכונות הבאות ל־A: רק לפרמיונים!

א. $A(\vec{k},\omega)\geq 0$ ב. $\int A(\vec{k},\omega)d\omega = 1$

לכן, עבור פרמיונים, ניתן להתייחס לפונקציה הספקטרלית כהתפלגות הסתברות. זו ההסתברות שלפרמיון עם תנע $\vec{k}$ אנרגיה ω.
מתוך התוצאות שחישבנו עבור A_p ו־A_h עבור אלקטרונים חופשיים נקבל כי במקרה זה

$$A(\vec{k},\omega) = \begin{cases} \delta(\omega+\mu-\epsilon_k)\,\theta(k-k_F) & \omega>0 \\ \delta(\omega+\mu-\epsilon_k)\,\theta(k_F-k) & \omega<0 \end{cases}$$

לכן עבור $\vec{k}$ נתון ההסתברות זו היא פונקציית דלתא ב־$\omega=\xi_k=\epsilon_k-\mu$

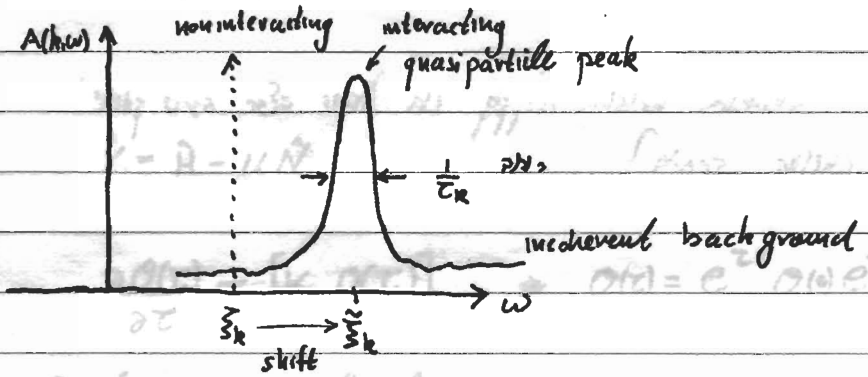
מה קורה כשנכנסות אינטראקציות בין הפרמיונים? אינטראקציות כאלה מערבבות את המצב הרב-חלקיקי המתאים לים פרמי מלא וחלקיק נוסף עם תנע $\vec{k}$ יחד עם הרבה מאוד מצבים רב-חלקיקיים אחרים. כתוצאה מכך המצב של ים פרמי מלא וחלקיק נוסף עם תנע $\vec{k}$ כבר לא הוא עוד מצב עצמי של ההמילטוניאן.

בקירוב ראשון של מערכות הפונקציה הספקטרלית משתנה מפונקציית דלתא באופן הבא:

א. תזוזה של מרכז השיא הספקטרלי

ב. מריחה של פונקציית הדלתא ללורנציאן עם רוחב סופי

$$A(\vec{k},\omega) = \frac{1}{\pi} Z_k \frac{\frac{2}{\tau_k}}{(\omega-\tilde{\xi}_k)^2+\left(\frac{2}{\tau_k}\right)^2} + A_{\text{incoherent}}(\vec{k},\omega)$$



$$\tilde{\xi}_k = \xi_k + \text{shift}$$

ו-Z_k הינו ה-"wave-function renormalization factor" המקטין את המשקל הספקטרלי (השטח הכולל מתחת לשיא) של ה-"quasiparticle peak". המשקל הספקטרלי החסר (כאשר $Z_k<1$) מפוזר בטווח רחב ב-ω.

עבור קבוצה גדולה וחשובה של מערכות הנקראות "Fermi liquid" ניתן להראות כי הרוחב $\frac{1}{\tau_k}$ קטן לאפס כאשר האנרגיה של ה-quasiparticle מתקרבת לאנרגיית פרמי באופן

$$\frac{1}{\tau_k} \simeq a\,\xi_k^2$$

כאשר a הינו מקדם מסדר של $\frac{1}{E_F}$. כתוצאה מכך קרוב לרמת פרמי, במשטח פרמי, הרוחב הופך לאפס וחיי החלקיק מוארכים באופן משמעותי כמו בגז החופשי למרות האינטראקציות. באנרגיות הרחוקות מ-E_F הרוחב וחיי החלקיק הינם קבועים כמו חיים סופיים אך זה גדול הרבה מ-$\frac{1}{\text{אנרגיה}}$ שלהם (כאשר ξ מספיק קטן) כך שניתן עדיין לדבר על קוואזי-חלקיקים עם $\vec{k}$ ו-$\omega=\tilde{\xi}_k$ נתונים. כתוצאה מכך מערכות Fermi liquid נראות בקירוב כמו חלקיקים חסרי אינטראקציה עם מסה יעילה שווה ~ $\frac{1}{Z_k}$.

בדרך כלל אנו מתעניינים בתכונות של מערכות שלהן טמפרטורה סופית. כדי לטפל במקרים כאלה עלינו להכליל את הפורמליזם שהצגנו עד כה ב $T=0$. הרעיון הבסיסי הומצא על ידי Matsubara והוא להתייחס לטמפרטורה כזמן מדומה.

נגדיר את ה Matsubara Green's function. לשם פשטות אנו מניחים אינווריאנטיות תחת הזזות ואנו משתמשים בטרנספורם הפורייה של האופרטור למרחב k. כל ההגדרות מוכללות באופן פשוט למקרה הכללי בלי סימטריה זו.

$$\mathcal{G}(k,\tau,\tau') = -\langle T_\tau\, a_k(\tau)\, a_k^\dagger(\tau')\rangle$$

כאשר $\tau = it$ הינו "זמן מדומה". במערכות מרובות חלקיקים נוח לעבוד בצבר הגרנד קנוני ולהגדיר את ההתפתחות בזמן המדומה בהתאם ל $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$ כך שאופרטור הייזנברג מקיים:

$$\frac{\partial O(\tau)}{\partial\tau} = [K, O(\tau)] \;\rightarrow\; O(\tau) = e^{\tau K} O(0) e^{-\tau K}$$

T_τ הינו אופרטור הסידור בזמן מדומה המסדר את האופרטורים בסדר עולה של τ מימין לשמאל כולל חילופי סימן במקרה של אופרטורים פרמיוניים.

הממוצע $\langle\rangle$ מוגדר כ:

$$\langle A\rangle = \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta K}A\right] = \frac{\sum_n \langle n|e^{-\beta K}A|n\rangle}{\sum_n \langle n|e^{-\beta K}|n\rangle} \qquad \beta = \frac{1}{T}$$

$$Z = \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta K}\right]$$

במקרה שבו H אינו תלוי בזמן נראה כי $\mathcal{G}$ הינו פונקציה של $\tau-\tau'$ בלבד:

$$\mathcal{G}(\tau,\tau') = -\frac{1}{Z}\Big\{\theta(\tau-\tau')\,\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta K}e^{\tau K}a_k e^{-(\tau-\tau')K}a_k^{+}e^{-\tau' K}\right]$$
$$\overset{\text{בוזונים}}{\underset{\text{פרמיונים}}{\pm}}\theta(\tau'-\tau)\,\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta K}e^{\tau' K}a_k^{+}e^{(\tau-\tau')K}a_k e^{-\tau K}\right]\Big\}$$

נשתמש בתכונות הציקליות של Tr תנאי פרמיונים צקליים

$$= -\frac{1}{Z}\Big\{\theta(\tau-\tau')\,Tr\Big[e^{-\beta K}e^{(\tau-\tau')K}a_k\,e^{-(\tau-\tau')K}a_k^+\Big]$$

$$\pm\theta(\tau'-\tau)\,Tr\Big[e^{-\beta K}e^{-(\tau-\tau')}a_k^+\,e^{(\tau-\tau')K}a_k\Big]\Big\} = G(\tau-\tau')$$

נבחן את $G(k,\tau)$ ונראה כי הינה בעלת תכונות סימטריה מעניינות בזמן המדומה τ:

עבור $\tau<0$

$$G(k,\tau) = -\langle T_\tau a_k(\tau)a_k^+(0)\rangle$$

$$= \mp\frac{1}{Z}Tr\Big[e^{-\beta K}a_k^+ e^{\tau K}a_k e^{-\tau K}\Big]$$

ציקליות Tr:

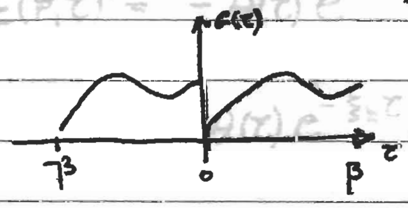
$$= \mp\frac{1}{Z}Tr\Big[e^{\tau K}a_k\,e^{-(\tau+\beta)K}a_k^+\Big]$$

$$= \mp\frac{1}{Z}Tr\Big[e^{-\beta K}e^{(\tau+\beta)K}a_k\,e^{-(\tau+\beta)K}a_k^+\Big]$$

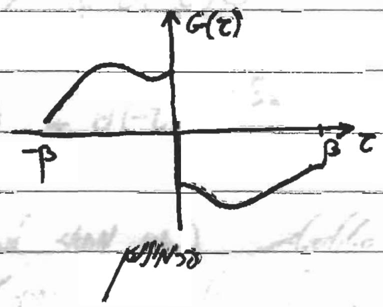
כך שאם $0<\tau+\beta$ נקבל

$$= \pm G(k,\tau+\beta)$$

לכן מספיק לדעת את $G(\tau)$ על האינטרוול $0\le\tau\le\beta$ ונקבל כי $G(\tau)$ מחזורית על קטע זה עם מחזור β עבור בוזונים ואנטי מחזורית עם מחזור β עבור פרמיונים



בוזונים



פרמיונים

נעבור לחשב את $G(k,\tau)$ עבור פרמיונים בגז החופשי

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

$$\mathcal{G}(k,\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}(k, i\omega_n)\, e^{-i\omega_n \tau}$$

כאשר ω_n הינן ה Matsubara frequencies

$$\omega_n = \begin{cases} \frac{2\pi}{\beta} \cdot n & \text{בוזונים} \\ \frac{\pi}{\beta}(2n+1) & \text{פרמיונים} \end{cases} \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots$$

נחשב את פונקצית גרין (Matsubara) לחלקיקים חופשיים עבורם

$$H = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k$$

מכיון ש

$$N = \sum_k a_k^+ a_k$$

$$K = \sum_k \xi_k a_k^+ a_k \qquad \xi_k = \epsilon_k - \mu$$

וקל לבדוק מתוך משוואת התנועה להייזנברג כי

$$a_k(\tau) = e^{-\xi_k \tau} a_k$$

$$a_k^+(\tau) = e^{\xi_k \tau} a_k^+$$

$$\Leftarrow \quad \mathcal{G}_0(k,\tau) = -\theta(\tau)\, e^{-\xi_k \tau} \times \langle a_k a_k^+ \rangle \mp \theta(-\tau)\, e^{-\xi_k \tau} \times \langle a_k^+ a_k \rangle$$

$$= -\theta(\tau)\, e^{-\xi_k \tau} \left(1 \pm \langle n_k \rangle\right) \mp \theta(-\tau)\, e^{-\xi_k \tau} \langle n_k \rangle$$

נעזר בתוצאה ממכניקה סטטיסטית (אני משאיר לכם <u>בתרגיל</u> להוציא זאת מתוך הגדרת הממוצע $\langle\rangle$ שהגדרנו ושימוש בפורמליזם של קוונטיזציה שניה)

$$\langle n_k \rangle = \begin{cases} n_b(\xi_k) = \frac{1}{e^{\beta \xi_k} - 1} & \text{בוזונים} \\ n_f(\xi_k) = \frac{1}{e^{\beta \xi_k} + 1} & \text{פרמיונים} \end{cases}$$

מכאן נוכל גם לקבל את פונקציית גרין כפונקציה של התדירות:

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

$$= -\begin{pmatrix} 1+n_b(\xi_k) \\ 1-n_f(\xi_k) \end{pmatrix} \int_0^\beta d\tau\, e^{(i\omega_n-\xi_k)\tau} = -\begin{pmatrix} 1+n_b(\xi_k) \\ 1-n_f(\xi_k) \end{pmatrix} \frac{e^{\beta(i\omega_n-\xi_k)}-1}{i\omega_n-\xi_k}$$

אבל מכיון ש

$$e^{i\beta\omega_n} = e^{i\beta\begin{pmatrix} \frac{2\pi n}{\beta} \\ \frac{\pi}{\beta}(2n+1) \end{pmatrix}} = \pm 1$$

$$= \frac{(1-e^{-\beta\xi_k})(1+n_b(\xi_k))}{(1+e^{-\beta\xi_k})(1-n_f(\xi_k))} \times \frac{1}{i\omega_n-\xi_k}$$

שימוש בהגדרה המפורשת של n_b ו n_f נגלה כי הגורם במקרה הבוזוני והפרמיוני כאחד נותן 1
ואז נשארים לבסוף עם

$$\mathcal{G}_0(k,i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n-\xi_k}$$

נוכל לבדוק את התוצאה הזו ובדרך גם ללמוד כיצד מחשבים סכום על תדירויות Matsubara אם נשתמש
לכך ש $\langle n_k \rangle = \mp \mathcal{G}(k, \tau=\delta\to 0^+)$

$$\Rightarrow \langle n_k^0 \rangle = \mp \mathcal{G}_0(k,\delta\to 0^+) = \mp \frac{1}{\beta}\sum_n e^{i\omega_n\delta}\, \mathcal{G}_0(k,i\omega_n)$$

$$= \mp\frac{1}{\beta}\sum_n \frac{e^{i\omega_n\delta}}{i\omega_n-\xi_k}$$

כיצד נוכל לחשב את הסכום על התדירויות?

נשים לב כי $\beta n_b(z) = \frac{\beta}{e^{\beta z}-1}$ קוטבים ב $z = \frac{2\pi i n}{\beta} = i\omega_n$

תדירות בוזונית

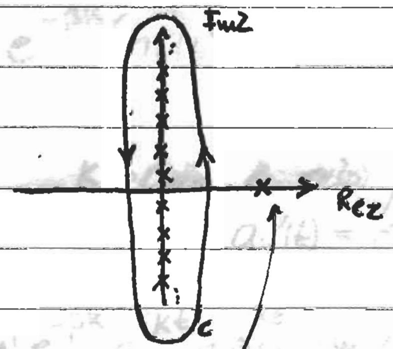
ל- $-\beta n_f(z) = \frac{-\beta}{e^{\beta z}+1}$ קטבים ב- $z = \frac{\pi}{\beta} i (2n+1) = i\omega_n$

תדירות פרמיונית

והשאריות (residues) של כל אחד מהקטבים אלה הקטבים שלהן שוות ל 1.
לכן נוכל להשתמש במשפט השאריות כדי לרשום את הסכום כאינטגרל מסלולי:

$$\pm\beta \int_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{F(z)}{e^{\beta z}\mp 1} = \sum_n F(i\omega_n)$$

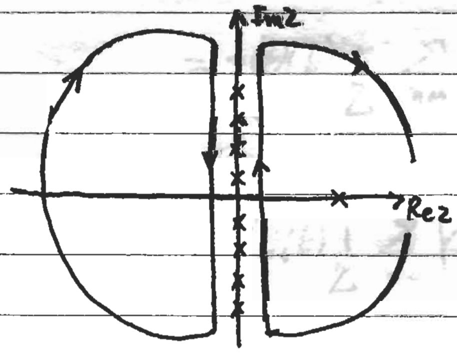
כאשר C הינו המסלול



ובהנחה כי ל F אין קטבים על ציר z המדומה.

$$\Leftarrow \quad \langle n_k^0 \rangle = -\int_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{e^{\beta z}\mp 1} \frac{e^{z\delta}}{z-\xi_k}$$

ל $G(z)$ קוטב ב $z=\xi_k$



עקב קיום של האבר $e^{\beta z}$ האינטגרנד מתאפס עבור $ReZ\to\infty$.
קיום של $e^{z\delta}$ מבטיח שהוא מתאפס גם עבור $ReZ\to-\infty$.
כתוצאה מכך נוכל לעוות את מסלול האינטגרציה כמתואר באיור
$C\to C'$ מבלי להשפיע על תוצאת האינטגרל

$$= \int_{C'} \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{e^{\beta z}\mp 1} \frac{e^{z\delta}}{z-\xi_k}$$

(1- בגלל שינוי כיוון המסלול)

המסלול מקיף כעת רק את הקוטב ב $z=\xi_k$ שלו שארית $\frac{1}{e^{\beta\xi_k}\mp 1}$ (בגבול $\delta\to 0$) ולכן

$$= \frac{1}{e^{\beta\xi_k}\mp 1} = \begin{matrix} n_b(\xi_k) \\ n_f(\xi_k) \end{matrix}$$

אחת הסיבות העיקריות לרשום ב Matsubara Green's functions היא הקשר הקיים בזמן
בין ה advanced ו retarded , Green's functions אשר נמדדות בעזרה. מכיון שכל
שבעת כל הגדלים הנמדדים של מערכת מתקבלים ב r.G.f קשר זה הוא חשוב מאוד.
נתבונן ב retarded Green's function ונמצא את הצורה הלמאנית שלה:

$$G^R(k,t) = -i\theta(t)\langle [a_k(t), a_k^+(0)]_{\mp}\rangle$$

$$= -i\theta(t)\frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta K}\left(a_k(t)a_k^+(0) \mp a_k^+(0)a_k(t)\right)\right]$$

$$K|n\rangle = \xi_n|n\rangle$$

נשתמש בבסיס של העצמיים המשותפים של האופרטור K.
ונזכור ש $a_k(t) = e^{iKt}a_k(0)e^{-iKt}$

$$= -i\theta(t)\frac{1}{Z}\sum_{n,m}\langle n|e^{-\beta K}e^{iKt}a_k e^{-iKt}|m\rangle\langle m|a_k^+|n\rangle$$

$$\mp\langle n|e^{-\beta K}a_k^+|m\rangle\langle m|e^{iKt}a_k e^{-iKt}|n\rangle$$

$$= -i\theta(t)\frac{1}{Z}\sum_{nm}e^{-\beta\xi_n}\left[e^{i(\xi_n-\xi_m)t}|\langle n|a_k|m\rangle|^2 \mp e^{i(\xi_m-\xi_n)t}|\langle m|a_k|n\rangle|^2\right]$$

נחליף $m\leftrightarrow n$ בסכום השני

$$= -i\theta(t)\frac{1}{Z}\sum_{nm}|\langle n|a_k|m\rangle|^2 e^{i(\xi_n-\xi_m)t}\left(e^{-\beta\xi_n}\mp e^{-\beta\xi_m}\right)$$

$$\Leftarrow \quad G^R(k,\omega) = \int dt\, G^R(k,t)\,e^{i\omega t}$$

$$= \frac{1}{Z}\sum_{n,m}|\langle n|a_k|m\rangle|^2\left(e^{-\beta\xi_n}\mp e^{-\beta\xi_m}\right)\frac{1}{\omega+\xi_n-\xi_m+i\delta}$$

(כשהשתמשנו בהצגה של מקדם $\theta(t)$ כפי שהראנו בעבר).

לפורייה נעבור

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

$$= \frac{-1}{Z}\int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau} \sum_{n,m} \langle n| e^{-\beta K} e^{\tau K} a_k e^{-\tau K} |m\rangle \langle m| a_k^+ |n\rangle$$

כשמשתמשים בהגדרה של $\mathcal{G}$ עבור $\tau>0$

$$= -\frac{1}{Z}\sum_{n,m} |\langle n|a_k|m\rangle|^2 e^{-\beta\xi_n} \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau} e^{\tau(\xi_n-\xi_m)}$$

נשתמש בכך ש $e^{i\omega_n\beta}=\pm1$ לקבל

$$= \frac{1}{Z}\sum_{n,m} |\langle n|a_k|m\rangle|^2 \left(e^{-\beta\xi_n} \mp e^{-\beta\xi_m}\right) \frac{1}{i\omega_n+\xi_n-\xi_m}$$

אנו רואים לכן, כי $G^R(k,\omega)$ מתקבלת מ $\mathcal{G}(k,i\omega_n)$ על ידי המשכה אנליטית $i\omega_n \to \omega+i\delta$

$$G^R(k,\omega) = \mathcal{G}(k, i\omega_n\to\omega+i\delta)$$

עד כה עסקנו בתכונות הכלליות הנובעות מהגדרת פונקציית גרין השונות. לא דנו עדיין באופן בו אנו יכולים לחשב פונקציה עבור מערכת מלקוחים חלופיים. נפנה לעסוק בנושא זה כעת. נתרכז במקרה שבו הפרעה מתאימה ולצורך כך נגדיר בתמונת האינטראקציה כזה אנו מניחים כי

$$H = H_0 + V$$

כאשר המצבים והאופרטורים נתונים בהתאם ל

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{iH_0 t}|\psi_S(t)\rangle$$

$$O_I(t) = e^{iH_0 t}\, O_S\, e^{-iH_0 t} \quad \xrightarrow[\text{זמן מדומה}]{} \quad O_I(\tau) = e^{K_0\tau}\, O_S\, e^{-K_0\tau}$$