

# Appunti fisica dei sistemi a molti corpi

Lorenzo Monacelli

22 giugno 2015

# Indice

<b>1</b>	<b>Seconda Quantizzazione</b>	<b>3</b>
1.1	Operatori di campo . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Modello a Tight banding</b>	<b>9</b>
<b>3</b>	<b>Meccanica statistica quantistica</b>	<b>17</b>
3.1	Riepilogo . . . . .	17
3.2	Particelle non interagenti . . . . .	18
3.2.1	Statistica di Fermi-Dirac . . . . .	19
3.2.2	Statistica di Bose-Einstein . . . . .	20
3.3	Calcolo del calore specifico . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Teoria di Landau dei liquidi di Fermi</b>	<b>27</b>
4.1	Funzionale energia di Landau . . . . .	34
4.1.1	Calcolo della compressibilità . . . . .	36
4.2	Approssimazione Hartree-Fock di campo medio . . . . .	39
4.2.1	Calcolo della velocità e della massa efficace . . . . .	42
4.2.2	Corrente e velocità nel sistema interagente. . . . .	44
4.2.3	Stabilità . . . . .	45
<b>5</b>	<b>Distribuzione delle quasiparticelle</b>	<b>47</b>
5.1	Equazione di Boltzmann . . . . .	48
5.2	Suono . . . . .	50
5.2.1	Frequenza di plasma . . . . .	57
5.3	Conducibilità di Drude . . . . .	58
<b>6</b>	<b>Teoria dei campi</b>	<b>60</b>
6.1	Funzioni di Green a particella singola . . . . .	60
6.1.1	Rappresentazione di Lehmann . . . . .	64
6.1.2	Continuazione analitica delle funzioni di Green . . . . .	68
6.2	Rappresentazione di interazione . . . . .	69
6.3	Funzioni di Green nello schema di interazione . . . . .	73
6.4	Diagrammi di Feynmann . . . . .	74
6.4.1	Diagrammi del secondo ordine . . . . .	81
6.4.2	Dimostrazione del teorema di Wick . . . . .	85
6.4.3	Regole per il calcolo dei diagrammi . . . . .	87
6.5	Self-Energia . . . . .	91
6.5.1	Funzioni di green a due particelle . . . . .	93

6.6	Funzioni di Green a temperatura finita . . . . .	94
6.6.1	Sviluppo delle funzioni di Mazubara . . . . .	101
6.6.2	Dinamica di Mazubara . . . . .	103
6.6.3	Prolungamento analitico della funzione di Mazubara . . . . .	105
6.7	Self energia al secondo ordine . . . . .	105
6.8	Equazioni del moto . . . . .	109
<b>7</b>	<b>Hartree-Fock</b>	<b>111</b>
7.1	Ferromagnetismo . . . . .	111
7.1.1	Campo medio . . . . .	115
7.2	Antiferromagnetismo . . . . .	116
7.2.1	Rottura della simmetria a temperatura finita . . . . .	124
<b>8</b>	<b>Teoria della risposta lineare</b>	<b>127</b>
8.1	Relazione di Cramer-Cronig . . . . .	128
8.2	Formula di cubo . . . . .	131
8.2.1	Parte assorbitiva della funzione di risposta . . . . .	133
8.3	Teorema di fluttuazione dissipazione . . . . .	135
8.3.1	Risposta sulle funzioni di Mazubara . . . . .	137
8.3.2	Esercizio semplice - Oscillatore armonico forzato . . . . .	137
8.4	Risposta al campo elettromagnetico . . . . .	141
8.4.1	Perturbazioni nel quadrispazio . . . . .	144
8.5	Regola di somma per la conducibilità . . . . .	147
8.6	Calcolo esplicito delle funzioni di risposta . . . . .	148
8.6.1	Funzione densità-densità . . . . .	148
8.6.2	Funzione di risposta della corrente . . . . .	151
8.7	Screening elettromagnetico . . . . .	153
8.8	Funzioni di risposta interagenti . . . . .	156
8.8.1	Approssimazione RPA . . . . .	156
8.9	Teoria di Baye-McCatanof(?) . . . . .	162
8.10	Funzione di risposta spin-spin . . . . .	163
<b>9</b>	<b>Esercizi</b>	<b>169</b>
9.1	Suscettività di spin nel modello di habard . . . . .	169
9.1.1	Soluzione . . . . .	169
9.2	Modello di Ising . . . . .	171
9.3	Funzione di Lindard . . . . .	172
9.3.1	soluzione . . . . .	172

# Capitolo 1

## Seconda Quantizzazione

Abbiamo introdotto gli operatori di creazione e distruzione per bosoni e fermioni e abbiamo visto le regole di commutazione e anticommutazione che li definiscono.

Uno stato determinato da una funzione d'onda  $\varphi_k(x)$  di singola particella (autofunzione del problema a particelle non interagenti) può essere scritto in seconda quantizzazione attraverso l'operatore di creazione in questo modo:

$$a_k^+ |0\rangle \Rightarrow \varphi_k(x)$$

Da cui il corrispondente stato in seconda quantizzazione di uno stato a  $N$  particelle non interagenti si può scrivere nello spazio di Fock:

$$|n_1 n_2 \cdots n_\infty\rangle \Rightarrow \varphi_1(x) \cdots \varphi_N(x) \quad \sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$$

Dove gli  $n_i$  rappresentano quante particelle si trovano nell' $i$ -esimo autostato del problema a particelle non interagenti.

In realtà la funzione in prima quantizzazione deve essere simmetrizzata per i bosoni, o antisimmetrizzata per fermioni. Questo si può fare definendo opportunamente un determinante di Slater.

### 1.1 Operatori di campo

L'operatore di campo è definito nel seguente modo (per fermioni):

$$\psi(x) = \sum_k \varphi_k(x) a_k$$

Questo è un operatore dello spazio di Fock (infatti le  $a_k$  sono operatori), modulato con le funzioni  $\varphi_k(x)$ . Possiamo calcolarne l'hermitiano:

$$\psi^+(x) = \sum_k \varphi_k^*(x) a_k^+$$

Che soddisfano le seguenti proprietà di anticommutazione

$$\{\psi(x), \psi(x')\} = 0$$

$$\{\psi^+(x), \psi^+(x')\} = 0$$

$$\{\psi(x), \psi^+(x')\} = \sum_{k, k'} \varphi_k(x) \varphi_{k'}^*(x') \{a_k a_{k'}^+\} = \sum_k \varphi_k(x) \varphi_k^*(x') = \delta(x - x')$$

La dimostrazione che l'ultima espressione sia proprio la  $\delta$  di Dirac può essere vista in modo semplice: prendiamo una funzione  $f$  qualunque e sviluppiamola nella base delle  $\varphi$ :

$$f(x) = \sum_k c_k \varphi_k(x) \quad c_k = \int \varphi_k^*(x') f(x') dx'$$

$$f(x) = \int \underbrace{\sum_k \varphi_k^*(x') \varphi_k(x)}_{\delta(x' - x)} f(x') dx'$$

Da cui otteniamo:

$$\{\psi(x), \psi^+(x')\} = \delta(x - x')$$

In questa rappresentazione  $x$  rappresenta anche lo spin. Per essere pignoli dovremo scrivere gli operatori di creazione e distruzione specificando di volta in volta lo spin della particella:

$$a_{k\uparrow} \quad a_{k\downarrow}$$

$$\{\psi_\sigma(x), \psi_{\sigma'}^+(x')\} = \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(x - x')$$

Possiamo vedere delle forme particolari degli operatori di campo. Se le  $\varphi$  sono soluzioni del problema della particella libera, allora gli operatori di campo possono essere scritti sfruttando le onde piane:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{ikx} a_k$$

Qual è il significato di questi operatori? L'operatore  $\psi^+(x)$  crea una particella nel punto  $x$ , mentre  $a_k^+$  crea una particella nella funzione d'onda  $\varphi_k(x)$  (in questo caso un'onda piana con vettore d'onda  $\vec{k}$ ). Vediamo nel dettaglio questo concetto: applichiamo  $\psi^+(x_0)$  allo stato di vuoto.

$$\psi^+(x_0) |0\rangle$$

$$(a_{k_1}^+ + a_{k_2}^+) |0\rangle = \varphi_{k_1}(x) + \varphi_{k_2}(x)$$

$$\psi^+(x_0) |0\rangle = \sum_k \varphi_k^*(x_0) a_k^+ |0\rangle = \sum_k \varphi_k^*(x_0) \varphi_k(x) = \delta(x - x_0)$$

Abbiamo creato una particella nel punto  $x_0$ . Il significato dell'operatore di campo è indipendente dalla particolare scelta della base  $\varphi_k(x)$ , infatti la relazione con cui abbiamo ottenuto la  $\delta$  di Dirac vale per qualunque set di

funzioni di base  $\varphi$ . In altre parole potrei cambiare sistema da  $\varphi$  a  $\varphi'$ , e anche gli  $a$  cambierebbero in  $a'$ . Siccome sono definiti con una trasformazione complessa coniugata, la  $\psi(x)$  è indipendente dalla rappresentazione della base.

Un'altra interessante proprietà degli operatori di campo è il significato dell'elemento di matrice di stati ad una sola particella

$$\langle 0|\psi(x)|k\rangle = \varphi(x)$$

$$\langle 0|\sum_{k'} \varphi_{k'}(x) \underbrace{a_{k'} a_k^+}_{0 \text{ se } k \neq k'} |0\rangle = \langle 0|\varphi_k(x) a_k a_k^+ |0\rangle = \varphi_k \langle 0|a_k a_k^+ |0\rangle = \varphi_k(x)$$

Il termine  $\psi_k$  va a distruggere lo stato nel punto  $x$ . Questa cosa è generale, se abbiamo uno stato arbitrario ( $\psi_N$ , è uno stato di  $N$  particelle generico, non un operatore di campo) scritto in seconda quantizzazione

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0|\psi(x_1) \cdots \psi(x_n) |\psi_N\rangle = \psi_N(x_1, \cdots, x_n)$$

Per trovare la funzione d'onda nello stato a seconda quantizzazione mi da esattamente la funzione d'onda.

Per dimostrare questa la dimostreremo sugli stati di base.

$$\langle 0|\psi(x_1) \cdots \psi(x_n) (a_{k_1}^+ \cdots a_{k_n}^+) |0\rangle$$

$$\sum \varphi_{k'_1}(x_1) a_{k'_1} \varphi_{k'_2}(x_2) a_{k'_2} \cdots = \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \cdots$$

Se vado a vedere tutti questi oggetti ci accorgiamo che abbiamo dei termini:

$$a_{k'_1} a_{k'_2} \cdots a_{k'_n}$$

Questo elemento di matrice è non nullo solo se:

$$\langle 0|a_{k'_1} \cdots a_{k'_n} (a_{k_1}^+ \cdots a_{k_n}^+) |0\rangle$$

Se i termini a destra sono una permutazione di quelli tra parentesi. Poiché devo distruggere solo le particelle che sono state create. Le funzioni d'onda che restano sono soltanto quelle che soddisfano la permutazione. Il segno finale dipende dalla parità della permutazione (essendoci le regole di anticommutazione ogni volta che devo scambiare due operatori ottengo un segno meno) ad esempio:

$$\langle 0|a_{k_2} a_{k_1} a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ |0\rangle = 1$$

In questo modo vado a ricostruire esattamente il determinante di Slater della funzione d'onda. Nel caso dei bosoni è ancora più semplice (non c'è il segno -).

Attraverso gli operatori di campo è facile scrivere gli operatori a singola particella:

$$\mathcal{F}^{(1)} = \sum_{i=1}^N f^{(1)}(x)$$

$$F^{(1)} = \sum_{s,k} \int dx \underbrace{\varphi_s^*(x) f^{(1)}(x) \varphi_k(x)}_{f_{sk}^{(1)}} a_s^\dagger a_k$$

Questa espressione in seconda quantizzazione usando gli operatori di campo si scrive in modo molto semplice:

$$F^{(1)}(x) = \int dx \psi^\dagger(x) f^{(1)}(x) \psi(x)$$

Ad esempio per l'operatore energia cinetica diventa:

$$f^{(1)} = -\frac{\nabla^2}{2m}$$

$$T = \int dx \psi^\dagger(x) \left[ -\frac{\nabla^2}{2m} \right] \psi(x)$$

Dimostriamolo:

$$F^{(1)} = \int dx \sum_s \varphi_s^*(x) a_s^\dagger f^{(1)}(x) \sum_k \varphi_k(x) a_k$$

$$F^{(1)} = \sum_{sk} \int dx \varphi_s^*(x) f^{(1)}(x) \varphi_k(x) a_s^\dagger a_k$$

A questo punto la cosa è banale:

Alcuni classici esempi:

$$\rho(x) = \sum_i \delta(x - x_i)$$

$$f^{(1)} = \sum_i (-i\hbar \nabla_i)$$

$$f^{(1)} = \sum_i \frac{1}{2m_i} [\delta(x - x_i) p_i - p_i \delta(x - x_i)]$$

Da cui l'operatore corrispondente in seconda quantizzazione:

$$\vec{P} = \int dx \psi^\dagger(x) (-i\hbar \nabla) \psi(x)$$

$$\rho(x_0) = \int dx \psi^\dagger(x) \delta(x_0 - x) \psi(x)$$

Questo risolto diventa:

$$\rho(x_0) = \psi^\dagger(x_0) \psi(x_0)$$

Che rappresento l'operatore densità nel punto  $x_0$ . La corrente a sua volta diventa:

$$J(x_0) = \int dx \psi^\dagger(x) [\delta(x_0 - x) (-i\hbar \nabla) + (-i\hbar \nabla) \delta(x_0 - x)] \psi(x)$$

$$J(x_0) = \frac{1}{2m} \psi^+(x_0) (-i\hbar \nabla) \psi(x_0) + \frac{1}{2m} \int dx [i\hbar \nabla_x \psi^+(x)] \delta(x_0 - x) \psi(x)$$

Integrando per parti:

$$J(x_0) = \frac{1}{2m} \psi^+(x_0) (-i\hbar \nabla) \psi(x_0) + i\hbar (\nabla \psi^+(x_0)) \psi(x_0)$$

Invece all'operatore  $T + V$  corrisponderebbe:

$$\int dx \psi^+(x) \left[ -\frac{\nabla^2}{2m} + V(x) \right] \psi(x)$$

Se la  $\psi(x)$  fosse una funzione d'onda questa espressione sarebbe il valore medio dell'energia. Nel passare in seconda quantizzazione la funzione d'onda è diventata un operatore. Questo sarebbe un numero in prima quantizzazione, invece ora è un operatore nello spazio di Fock.

Chi corrisponde al potenziale di interazione?

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j} V_i(x_i - x_j)$$

Adesso l'operatore corrisponde a due campi.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int \psi^+(x) \psi^+(x') V(x - x') \psi(x) \psi(x') dx dx' \\ &= \frac{1}{2} \sum f_{smlk} a_s^+ a_m^+ a_l a_k \end{aligned}$$

La struttura è esattamente la stessa. Se ci troviamo di fronte a fermioni è critica la sequenza delle  $\psi$ .

Troviamo questa espressione scritta in onde piane:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} a_k$$

$$\frac{1}{2V^2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k_3} a_{k_4} \int V(x - x') e^{-i(k_1 x + k_2 x' - k_3 x - k_4 x')} dx dx'$$

Quell'integrale può essere scritto come trasformata di Fourier:

$$V(q) = \int dx e^{-iqx} V(x) \quad V(x) = \frac{1}{V} \sum e^{iqx} V(q)$$

Possiamo fare questa sostituzione nell'integrale:

$$\frac{1}{V^3} \sum_{q, k_1, k_2, k_3, k_4} \int dx dx_1 e^{-i(k_1 x + k_2 x' - k_3 x - k_4 x')} e^{iq(x - x')} V(q) (a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k_3} a_{k_4})$$

Di cui possiamo risolvere l'integrale

$$\int dx e^{ix(q+k_4-k_1)} \int dx' e^{-ix'(q+k_2-k_3)}$$

$$V \delta_{k_4+q, k_1} V \delta_{q+k_2, k_3}$$

Il risultato finale diventa:

$$k_3 = k_2 + q \quad k_4 = k_1 - q$$

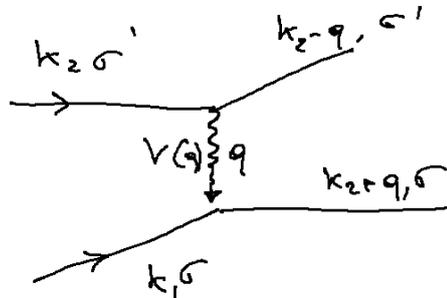
$$\frac{1}{2V} \sum_{q, k_1, k_2} \tilde{V}(q) (a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k_2+q} a_{k_1-q})$$

Questa è l'espressione del potenziale di interazione a due particelle. Questo potenziale di interazione conserva chiaramente lo spin. Se lo applichiamo ad uno stato che ha uno spin viene conservato ( $q$  non contiene spin). Tuttavia si conserva anche il momento. Viene distrutta una particella di momento  $k_1 - q$ , poi viene distrutta  $k_2 + q$ , quindi il momento totale distrutto è pari a  $k_1 + k_2$ , che viene creato dagli operatori di creazione, quindi questa interazione conserva anche il momento.

Possiamo riscriverla come Questa interazione conserva anche il momento.

$$\frac{1}{2V} \sum_{q, k_1, k_2} V(q) a_{k_1+q, \sigma}^+ a_{k_2-q, \sigma'}^+ a_{k_2, \sigma} a_{k_1, \sigma}$$

Questo processo viene rappresentato dallo scambio di impulso  $q$  fra le due particelle, rappresentabile da un grafico



Questo è il diagramma di Feynman che descrive il processo di scattering tra le due particelle attraverso il potenziale  $V(q)$ .

## Capitolo 2

# Modello a Tight banding

Vogliamo descrivere gli autostati di particelle non interagenti in presenza di un reticolo. La nostra hamiltoniana è un hamiltoniana non interagente:

$$H_0 = -\frac{\nabla^2}{2m} + V_{ion}(x)$$



Possiamo direttamente scrivere l'hamiltoniana in seconda quantizzazione:

$$H_0 = \int dx \psi^\dagger(x) H_0(x) \psi(x)$$

Gli operatori in seconda quantizzazione si calcolano come il valor medio dell'hamiltoniana in prima quantizzazione.

Al singolo ione corrispondono una serie di stati legati, dati dagli orbitali atomici. Nel modello a tight banding questi stati si considerano *separati*: la funzione d'onda che descrive l'intero sistema si può scrivere come combinazione lineare delle funzioni d'onda di una sola tipologia di livello.

L'hamiltoniana del singolo atomo:

$$H_{atom} \varphi_x(x - x_i) = \varepsilon \varphi_s(x - x_i)$$

Cerchiamo la soluzione di tutto il problema come combinazione lineare delle funzioni d'onda del singolo ione.

$$\sum_i c_i \varphi_s(x - x_i)$$

Questa approssimazione introduce due errori: A causa del fatto che è presente un potenziale ionico ci sarà una certa mescolanza fra i vari livelli energetici che non consideriamo. Se però la distanza energetica tra i livelli è sufficientemente grande c'è poco accoppiamento tra orbitali diversi, per cui questa è una buona approssimazione. Le funzioni d'onda possono quindi essere scritte quantizzando l'operatore di campo, prendendo unicamente le funzioni atomiche come funzioni di base:

$$\psi(x) = \sum_i \varphi^\alpha(x - x_i) a_i$$

In altri termini questi stati  $\varphi(x) a_i$  (autofunzioni di un solo ione) non sono un set completo.

Il secondo problema è dato dal fatto che queste funzioni non sono ortogonali:

$$\varphi_i(x) = \varphi(x - x_i)$$

$$\varphi_2(x) = \varphi(x - x_2)$$

Queste due funzioni non sono ortogonali tra di loro. Sono soluzioni a due problemi diversi quindi le due autofunzioni non sono ortogonali (sono indipendenti). Questo non è un problema, perché dato un set di funzioni indipendenti è sempre possibile costruire un set di funzioni ortogonali.

Inoltre l'overlap è molto piccolo tra le funzioni:

$$\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \alpha$$

con  $\alpha$  piccolo, allora posso ortogonalizzare le funzioni in questo modo:

$$\varphi_1(x) - \frac{\alpha}{2} \varphi_2(x)$$

$$\varphi_2(x) - \frac{\alpha}{2} \varphi_1(x)$$

Se facciamo il prodotto scalare infatti otteniamo:

$$\langle \varphi_1(x) - \frac{\alpha}{2} \varphi_2(x) | \varphi_2(x) - \frac{\alpha}{2} \varphi_1(x) \rangle =$$

$$\alpha - \frac{\alpha}{2} - \frac{\alpha}{2} + o(\alpha^2) \approx 0$$

L'ortogonalizzazione può anche essere fatto in modo non perturbativo usando il metodo di Gram-Schmidt. Le funzioni d'onda che si creano sono le funzioni di Wannier.

Adesso abbiamo le funzioni ortogonali. Purtroppo non formano un set completo. La nostra approssimazione stiamo trascurando i mescolii con altri livelli atomici vicini. In pratica in questo modo descriviamo il comportamento di una sola banda energetica. Calcoliamo l'hamiltoniana in seconda quantizzazione in questo sottoinsieme non completo. Questo processo si riesce a fare analiticamente:

$$H_0 = \sum_{ij} \int dx \varphi_1^*(x) a_i^\dagger H_0(x) \varphi_j(x) a_j$$

$$H_0 = \sum_{ij} t_{ij} a_i^\dagger a_j$$

Dove abbiamo definito il coefficiente  $t_{ij}$ :

$$t_{ij} = \int dx \varphi_i^*(x) H_0(x) \varphi_j(x)$$

Il termine  $t_{ij}$  in realtà dipende soltanto dalla differenza di  $i$  e  $j$ , inoltre ci possono essere altre relazioni di simmetria. C'è anche il termine  $t_{ii}$  che ci aspettiamo che sia il termine più grosso di tutto. Questo  $t_{ii}$  non è del tutto uguale a  $-\varepsilon_i$  (energia atomica) il primo motivo è che abbiamo ridefinito le funzioni come funzioni di Wannier, e l'altro motivo è che il potenziale non è più solo il potenziale del singolo ione, ma ci sono anche le code di tutti gli altri potenziali. Quindi  $t_{ii}$  non è proprio il livello atomico. Per semplicità prenderemo  $t_{ii}$  pari a zero in modo da riscaldare di conseguenza tutti gli altri livelli energetici.

L'elemento successivo sarà quello tra primi, secondi, terzi, ..., vicini. Siccome  $t_{ij}$  è negativo (i potenziali sono negativo) ora esplicitiamo questo segno meno nell'espressione dell'hamiltoniana:

$$H = - \sum_{ij} t_{ij} a_i^\dagger a_j$$

Prenderemo per approssimazione il conto solo i termini tra primi vicini. Lo spin non lo fissiamo. Risolvere questa hamiltoniana può essere risolto. Questo oggetto si chiama termine di Hopping. Si prende una particella nel sito  $j$  lo distrugge e la crea in  $i$  con ampiezza di probabilità  $t_{ij}$ . Se scrivessimo l'hamiltoniana in questo modo:

$$\sum \varepsilon_k a_k^\dagger a_k$$

Sapremo tutto (perché è in forma diagonale). Possiamo dire subito chi è l'autostato e chi sono gli autovalori:

$$a_k^\dagger |0\rangle \implies \varepsilon_k$$

Quindi scritto l'hamiltoniana in forma diagonale. Tutto il problema è quello di portare l'hamiltoniana in forma diagonale, in modo tale da poter diagonalizzarla. Abbiamo una forma bilineare in  $a$  e  $a^\dagger$  e dobbiamo diagonalizzarla. Il problema è invariante per traslazione. Possiamo fare traslazioni finite, di un passo reticolare. Quando abbiamo un problema invariante per traslazione possiamo sfruttare il set completo di indice. Proviamo a scrivere  $a_k$  in questo modo:

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-ikr_i} a_i$$

Con condizioni periodiche al contorno. Abbiamo  $N$  siti con simmetria traslazionale, possiamo sfruttare questa simmetria per trovare un set completo di

indici per il nostro spazio. Le onde piane consentono di risolvere il problema. Data questa esiste anche l'inversa:

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikr_i} a_k$$

Questa è la trasformazione unitaria che mi permette di diagonalizzare il problema iniziale. Il fatto che il sistema che sia invariante per traslazione ci ha suggerito questa soluzione per onde piane. Questa è una trasformazione canonica, questa matrice che fa la diagonalizzazione è unitaria.

Mettiamo questa soluzione all'interno dell'hamiltoniana:

$$\begin{aligned} H &= - \sum_{ij} \frac{1}{N} t_{ij} \sum_{kk'} e^{-ikr_i} a_k^+ e^{ik'r_j} a_{k'}' \\ H &= - \frac{1}{N} \sum_{ijkk'} e^{-ik(r_i-r_j)} e^{-ik'r_j} e^{ik'r_j} t_{ij} a_k^+ a_{k'}' \\ H &= - \frac{1}{N} \sum_{k,k',i,j} t_{ij} e^{-ik(r_i-r_j)} e^{-i(k-k')r_j} a_k^+ a_{k'}' \\ &\quad \sum_i t_{ij} e^{-ik(r_i-r_j)} \end{aligned}$$

Questa somma non dipende da  $j$ , poiché  $t_{ij}$  dipende solo dalla differenza tra  $i$  e  $j$ . Dipende da  $k$  invece. Posso chiamare  $\varepsilon_k$ :

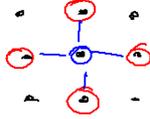
$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= - \sum_i t_{ij} e^{-ik(r_i-r_j)} \\ H &= \frac{1}{N} \sum_{k,k',j} \varepsilon_k e^{-i(k-k')r_j} a_k^+ a_{k'}' \\ \sum_j e^{-i(k-k')r_j} &= N \delta(k-k') \\ H &= \sum_k \varepsilon(k) a_k^+ a_k \end{aligned}$$

La cosa importante è che  $t_{ij}$  dipende solo dalla distanza non da  $i$  e  $j$ . In questo passaggio è racchiusa l'invarianza per traslazioni. Abbiamo diagonalizzato il sistema, con autostati:

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikr_j} a_j$$

Questa curva di dispersione ce l'andiamo a calcolare nel caso dei primi vicini:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= - \sum_i t_{ij} e^{-ik(r_i-r_j)} \\ \varepsilon(k) &= -t (e^{-ik_x a} + e^{ik_x a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_y a}) \end{aligned}$$

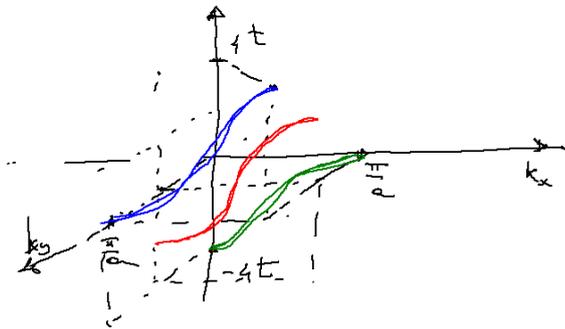
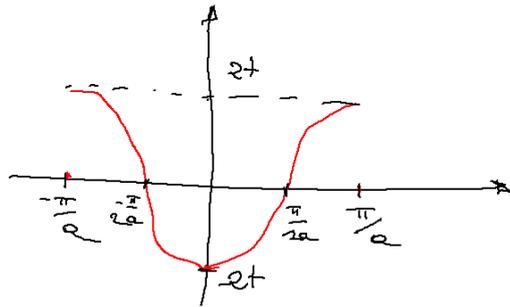


$$\varepsilon(k) = -2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$$

Questa è la nostra dispersione delle bande periodiche. Questa è la banda che esce fuori nel caso soltanto di primi vicini.

Prendiamo il caso unidimensionale:

$$\varepsilon(k) = -2t \cos(k_x a)$$



Gli  $a_i$  sono in tutto  $n$ . In caso di condizioni periodiche al contorno:

$$k = \frac{2\pi}{L} (n, l, m)$$

Questi  $k$  non possiamo prenderli tutti, se prendiamo  $k$  e ci sommiamo il vettore  $\frac{2\pi}{a}$  otteniamo lo stesso operatore  $a_k$ :

$$a_k = a_{k+\frac{2\pi}{a}}$$

Effettivamente questi sono gli stessi operatori. Dobbiamo limitare il  $k$ . C'è è definito a meno di  $2\pi/a$ . In più dimensioni è definito a meno di un vettore del reticolo reciproco  $\vec{G}$ :

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (n, l, m)$$

La prima zona di Brillouine si costruisce con il metodo di Wigner Size a partire dai vettori reciproci primitivi. Il nostro  $k$  dobbiamo prenderlo all'interno della prima zona di Brillouine. Il fatto che il  $k$  sia discreto dipende dal volume finito, la zona di Brillouine dipende dall'reticolo.

Facciamo la funzione d'onda:

$$\begin{aligned} a_k^+ |0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{ikr_j} a_i^+ |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{ikr_i} \varphi(\vec{r} - \vec{r}_i) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_i e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r})} \varphi(\vec{r} - \vec{r}_i) \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_k(\vec{r}) \end{aligned}$$

Abbiamo ricostruito le funzioni di Bloch. Le  $u_k(r)$  sono funzioni periodiche:

$$u_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r} - \vec{r}_i)} \varphi(r - r_i)$$

La funzione è periodica di periodo  $\vec{R}$ , vettore arbitrario del reticolo diretto (che connette i siti del reticolo).

La matrice che mi ha fatto cambiare base diagonalizzando l'hamiltoniana è quindi una matrice  $N$  per  $N$  unitaria. È importante ricordare che mi trovo su volume finito,  $k$  non è più arbitrario ma va scelto dentro la zona di Brillouine e del tipo:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L} (n, m, l)$$

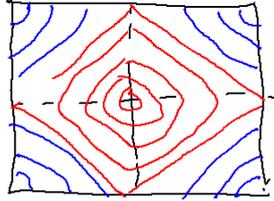
Esercizio per casa, quali sono le isoenergetiche della funzione bidimensionale:

$$\varepsilon(k) = -2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$$

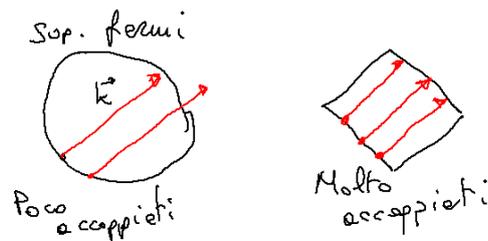
Possiamo chiederci qual è lo stato fondamentale del sistema: Il filling della banda è pari al numero di elettroni diviso il numero di siti situati nella banda:

$$n = \frac{N_{el}}{2N}$$

Il 2 è dovuto alla degenerazione di spin. Sapendo il numero di elettroni possiamo trovare il valore della superficie di Fermi. La superficie di Fermi per



oggetto reticoli quadrati monovalenti è un quadrato. Se mettiamo. Gli elettroni che si trovano sul bordo sono tanti. Supponiamo di avere un accoppiamento  $\vec{k}$  questo è importante per tantissimi elettroni: Se ho una perturbazione con una



certa onda  $q$  mi accoppia elettroni che differiscono per quell'onda. Se entra un fotone con un certo  $q$  il fotone distrugge un elettrone con  $k$  e lo crea nello stato  $k + q$ . Se sia  $k$  che  $k + q$  sono accoppiati questo oggetto è molto grosso. Questi oggetti hanno una risposta molto grande in superfici di Fermi squadrati. Se ci troviamo ad avere pochi elettroni la superficie di Fermi è quasi un centro.

$$\varepsilon(k) = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$$

( $a^2$  sta al numeratore)

$$\begin{aligned} &= -4t \left[ 1 - \frac{1}{2} (k_x^2 + k_y^2) a^2 \right] = \\ &= -4t + ta^2 k^2 \end{aligned}$$

Mi viene un oggetto con dispersione parabolica, e il termine che mi da la massa dell'elettrone: ( $1 / 2m$ ) è il coefficiente del  $k^2$  nella dispersione

$$\frac{1}{2m} = ta^2$$

Dove abbiamo posto  $\hbar = 1$ . Da cui possiamo trovare una massa di banda. Questa massa in generale è differente dalla massa elettronica. L'altro punto in cui gli elettroni si comportano di massa parabolica (a bordo zona):

$$\varepsilon(k) = 4t^2 - ta^2k^2$$

Questa banda parabolica è rivolta verso il basso. Questo comporta che la massa è negativa. Spesso quando si ha un sistema quasi tutto pieno, si passa alla rappresentazione delle buche. Non si descrive questo sistema non attraverso gli elettroni, ma le buche. Si manda l'operatore elettrone in un operatore di buca:

$$a_{k\sigma} \rightarrow h_{-k, -\sigma}^+$$

Distruggere un elettrone di impulso  $k$  e momento  $\sigma$  equivale a creare una buca di impulso  $-k$  e spin  $-\sigma$ . Questo stato lo posso descrivere dallo stato totalmente pieno, in cui vado a distruggere le particelle, posso descriverlo come uno stato in cui creo lacune. Questo dipende dal fatto che, poiché il pieno è inerte (qualunque perturbazione non fa nulla), quindi è come il vuoto. Quando il pieno è un po' meno pieno posso descriverlo con delle buche.

Lo stato fondamentale può sempre essere scritto in questo modo:

$$\prod_{\substack{k, \sigma \\ \varepsilon_k < \varepsilon_F}} a_{k\sigma}^+ |0\rangle$$

Questo stato può essere riscritto in altro modo:

$$\prod_{\substack{k, \sigma \\ \varepsilon_k > \varepsilon_F}} a_{k\sigma} \prod_{k, \sigma} a_{k\sigma}^+ |0\rangle$$

Adesso possiamo chiamare lo stato pieno, e chiamarlo come lo stato vuoto di buche

$$|\tilde{0}\rangle = \prod_{k, \sigma} a_{k\sigma}^+ |0\rangle$$

E quindi definendo

$$a_{k\sigma} = h_{-k, -\sigma}^+$$

Possiamo ridefinire lo stato generico come:

$$\prod h_{-k, -\sigma}^+ |\tilde{0}\rangle$$

## Capitolo 3

# Meccanica statistica quantistica

### 3.1 Riepilogo

La funzione di partizione  $Z$  gran canonica può essere definita:

$$Z = \text{Tr} \left[ e^{-\frac{\mu N - H}{k_b T}} \right] = e^{-\frac{\Omega}{k_b T}}$$

Dove abbiamo definito il potenziale dell'insieme gran canonico:

$$\Omega(V, \mu, T) = H - \mu N$$

Il differenziale  $d\Omega$  è il seguente:

$$d\Omega = -SdT - \langle N \rangle d\mu - PdV$$

Da cui ricaviamo le relazioni termodinamiche:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial T} = -S \quad \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -\langle N \rangle \quad \frac{\partial \Omega}{\partial V} = -P$$

Possiamo dimostrare che il potenziale gran canonico è direttamente proporzionale a  $V$  e funzione di  $P$  nel seguente modo:

$$\Omega = -VP(\mu, T)$$

Il potenziale Gran Canonico è una grandezza estensiva, funzione di  $V$  (estensiva) e  $\mu, T$  (intensive). Questo implica che è proporzionale a  $V$  per una funzione  $f$  intensiva. Poiché non c'è modo di combinare  $V$  con  $\mu$  e  $T$  in modo da ottenere grandezza intensiva, la  $f$  non può essere funzione di  $V$  (se tra le variabili ci fosse stato  $N$  allora la grandezza  $N/V$  sarebbe stata intensiva).

$$\Omega = Vf(\mu, T)$$

Ma poiché  $\partial_V \Omega = -P$ , e  $f$  è indipendente da  $V$ , ricaviamo che  $f$  è proprio pari a  $-P$ .

L'altra energia libera con cui lavoreremo è la  $F$  (energia libera di Helmholtz) canonica:

$$F(T, \langle N \rangle, V) = \Omega + \mu \langle N \rangle$$

$$dF = d\Omega + d(\mu N)$$

$$dF = -SdT + \mu d\langle N \rangle - pdV$$

Un altro potenziale usato molto dai chimici (per lavorare a pressione costante) è l'energia libera di Gibbs.

$$G = F + PV = G(T, \langle N \rangle, P)$$

La  $S$  in entrambi i casi è:

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} = -\frac{\partial F}{\partial T}$$

Ricordandosi che in realtà la definizione di entropia:

$$dS = \frac{\delta Q}{T}$$

Il calore specifico può essere scritto come:

$$c_v = \frac{\delta Q}{\delta T} = T \frac{\partial S}{\partial T}$$

### 3.2 Particelle non interagenti

In questa sezione iniziamo a studiare la termodinamica quantistica di un sistema di particelle non interagenti. Calcoliamo la funzione gran canonica, partiamo dal calcolo dell'hamiltoniana:

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

Supponiamo di aver già diagonalizzato questa hamiltoniana, trovato le autofunzioni  $\varphi_k(x)$ , e usato questa base per definire gli operatori  $a_k^+$  e  $a_k$ . Questa rappresenta l'hamiltoniana diagonalizzata per un sistema di particelle non interagenti. Il numero di particelle è dato da:

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

Da queste definizioni possiamo ricavare la funzione di partizione.

$$Z = \text{Tr} \left[ e^{-\frac{\sum_k (\varepsilon_k - \mu) a_k^+ a_k}{k_b T}} \right]$$

Adesso dobbiamo fare la traccia. L'operazione di traccia è indipendente dal set completo di stati che si prende. Facciamo la traccia proprio sulle funzioni  $\varphi_k(x)$  nello spazio di Fock.

$$Z = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \langle n_\infty \dots n_2 n_1 | e^{-\frac{1}{k_b T} \sum_k (\varepsilon_k - \mu) a_k^+ a_k} | n_1 n_2 \dots n_\infty \rangle$$

Quando  $a^+a$  agisce sullo stato di destra otteniamo il numero di occupazione:

$$Z = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \langle n_\infty \cdot n_2 n_1 | e^{-\frac{1}{k_b T} \sum_k (\varepsilon_k - \mu) n_k} | n_1 n_2 \dots n_\infty \rangle$$

Ora il termine su cui stiamo tracciando è uno scalare, poiché i vettori di base sono ortonormali,  $Z$  può essere scritta come:

$$Z = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} e^{-\frac{1}{k_b T} \sum_k (\varepsilon_k - \mu) n_k} = Z = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \prod_k e^{-\frac{1}{k_b T} (\varepsilon_k - \mu) n_k}$$

Chiamiamo per semplicità  $\xi_k = \varepsilon_k - \mu$ : Possiamo raccogliere a fattor comune tra le varie somme i termini uguali:

$$Z = \left( \sum_{n_1} e^{-\frac{1}{k_b T} n_1 \xi_1} \right) \left( \sum_{n_2} e^{-\xi_2 \frac{n_2}{k_b T}} \right) \dots = \prod_i \sum_{n_i} e^{-\beta \xi_i n_i}$$

Questo risultato è corretto sia per bosoni che per fermioni. Mentre nel caso bosonico le somme sono estese tra 0 e  $\infty$ , nel caso fermionico il numero di occupazione massimo per stato è 1.

Calcoliamo esplicitamente la  $Z$  nel caso fermionico.

$$\prod_i \left( 1 + e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)} \right)$$

$$\Omega = -k_b T \ln Z$$

$$\Omega = -k_b T \sum_k \ln \left( 1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right)$$

### 3.2.1 Statistica di Fermi-Dirac

Proviamo a ricavare il numero atteso di particelle per il caso fermionico.

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -\langle N \rangle$$

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -k_b T \sum_k \frac{\beta e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}}$$

$$\langle N \rangle = \sum_k \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1}$$

Il valor medio di  $N$  è calcolato come somma di una funzione su tutti gli stati. Statisticamente questa funzione corrisponde al valore atteso di particelle sul singolo stato  $k$ , ed è la funzione di Fermi Dirac:

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

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)}}$$

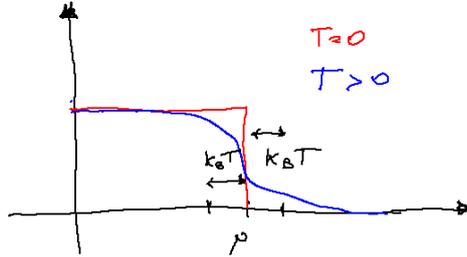


Figura 3.1: Grafico della distribuzione di Fermi-Dirac. Questa funzione ha un gradino in corrispondenza del potenziale chimico a  $T = 0$  (energia di fermi), per temperature maggiori si smussa di un ordine di grandezza pari a  $k_b T$ .

Per calcolare l'entropia di questo sistema:

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T}$$

$$S = k_B \sum_k \ln \left( 1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right) + k_B T \sum_k \frac{e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}} \frac{\varepsilon_k - \mu}{k_B T^2}$$

Con un conto un po' noioso si dimostra che questo termine è uguale a:

$$S = -k_b \sum_k n_k^0 \ln n_k^0 + (1 - n_k^0) \ln(1 - n_k^0)$$

Per dimostrarlo si sostituisce in questa espressione a  $n_k^0$  il valore della funzione di fermi, ricavando l'espressione di partenza.

$$n_k^0 = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)}}$$

A temperatura  $T = 0$  gli  $n_k^0$  sono 0 o 1, l'entropia è nulla di conseguenza. L'entropia in questo modo è definita positiva. (gli argomenti dei logaritmi sono negativi, ma c'è un segno  $-$  davanti a tutto). Questa quantità è estensiva.

### 3.2.2 Statistica di Bose-Einstein

$$Z = \pi_k \sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta n_k (\varepsilon_k - \mu)}$$

$$Z = \pi_k \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}}$$

$$\Omega = -k_b T \ln Z$$

$$\Omega = -k_b T \sum_k \ln \left( \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}} \right)$$

$$-\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = k_b T \sum_k \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \frac{1}{1 - e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)}}$$

$$-\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \sum_k \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1} = \langle N \rangle$$

L'entropia nel caso di Bosoni è data da:

$$S = k_b \sum_k (n_k + 1) \ln(1 + n_k) - n_k \ln n_k$$

### 3.3 Calcolo del calore specifico

Procediamo ora al calcolo del calore specifico

$$c_v = T \frac{\partial S}{\partial T}$$

Possiamo pensare di variare l'entropia prima rispetto alla variabile  $n$ :

$$\delta S = \sum \frac{\partial S}{\partial n} \delta n$$

$$\delta S = -k_b \sum_k \delta n \ln n + \frac{n}{n} \delta n - \delta n \ln(1 - n) - \frac{1 - n}{1 - n} \delta n$$

$$\delta S = -k_b \sum_k \delta n_k \ln \frac{n_k^0}{1 - n_k^0}$$

L'argomento del logaritmo può essere riscritto:

$$\frac{\frac{1}{1+e^\alpha}}{1 - \frac{1}{1+e^\alpha}} = \frac{1}{e^\alpha} = e^{-\alpha}$$

Da cui si ottiene:

$$\delta S = k_b \sum_k (\varepsilon_k - \mu) \beta \delta n_k^0$$

$$\delta S = \frac{\sum_k (\varepsilon_k - \mu) \delta n_k^0}{T}$$

A questo punto possiamo derivare facilmente rispetto a  $T$ :

$$\frac{\partial S}{\partial T} = \sum_k \left( \frac{\varepsilon_k - \mu}{T} \right) \frac{(-1)e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1)^2} \frac{(-1)}{k_b T^2} (\varepsilon_k - \mu)$$

Questa espressione può essere riscritta in modo un po' diverso:

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)}} = \frac{(-1)\beta e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)}}{[1 + e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)}]^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial T} n_k = -\frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} n_k \frac{\varepsilon_k - \mu}{T}$$

$$\frac{1}{V} \frac{\partial S}{\partial T} = -\frac{1}{V} \sum_k \left( \frac{\varepsilon - \mu}{T} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} n_k^0(\varepsilon_k)$$

Abbiamo diviso tutto per il volume in modo da ricavare il calore specifico per unità di volume. Questa funzione ha una bella proprietà. Abbiamo riscritto il calore specifico in funzione della derivata di  $n$  rispetto a  $\varepsilon$ , in questo modo per  $T \rightarrow 0$ , questa funzione diventa una delta di Dirac.

Per concludere i calcoli conviene introdurre il concetto di densità degli stati. Quando dobbiamo fare una somma di una certa funzione che dipende solo dell'energia, è comodo trasformare questa somma in un integrale;

$$\frac{1}{V} \sum_k F(\varepsilon_k)$$

La  $F$  dipende solo dalla dispersione e devo fare una somma su tutti i valori di  $k$ . È utile introdurre il concetto di densità degli stati. L'idea è che, dato l'elementino di volume  $dk$  quanti stati ci sono di energia compresa tra  $\varepsilon$  e  $\varepsilon + d\varepsilon$ . Nel caso di dispersione parabolica si ha:

$$\varepsilon = \frac{1}{2m} k^2$$

$$d\varepsilon = \frac{1}{\underbrace{m}_{N(k)}} k dk$$

Possiamo introdurre questa grandezza in modo più formale. Possiamo introdurre una funzione di  $\varepsilon$

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$$

Questa funzione ci da il numero di elementi che si trovano nella zona  $d\varepsilon$ . Nel volume finito sono tutte spike isolate, che diventano via via più fitte (Il  $\Delta k$  si stringe) all'aumentare di  $V$ , nel volume infinito queste delta diventano talmente fitte da diventare una funzione.

Nel caso di volume infinito la distribuzione di densità può essere riscritta:

$$N(\varepsilon) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \delta(\varepsilon - \varepsilon(k))$$

Ricaviamo in che modo questa funzione  $N(k)$  mi trasforma la sommatoria in  $k$  in un integrale in  $\varepsilon$ .

$$\frac{1}{V} \sum_k F(\varepsilon_k) = \frac{1}{V} \sum_k \underbrace{\int d\varepsilon \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)}_1 F(\varepsilon_k)$$

$$\frac{1}{V} \sum_k F(\varepsilon_k) = \int d\varepsilon \underbrace{\frac{1}{V} \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)}_{N(\varepsilon)} F(\varepsilon)$$

$$\frac{1}{V} \sum_k F(\varepsilon_k) = \int d\varepsilon N(\varepsilon) F(\varepsilon)$$

Abbiamo trasformato la sommatoria in un integrale. Adesso possiamo applicare questo “trucchetto” al caso del calore specifico.

$$\frac{1}{V} \frac{\partial S}{\partial T} = - \int d\varepsilon N(\varepsilon) \left( \frac{\varepsilon - \mu}{T} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} n^0(\varepsilon)$$

Proseguiamo con il calcolo esplicito del calore specifico.

$$c_v = \frac{T}{V} \frac{\partial S}{\partial T}$$

$$\frac{1}{V} \frac{\partial S}{\partial T} = - \frac{1}{T^2} \int d\varepsilon N(\varepsilon) \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon} (\varepsilon - \mu)^2$$

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}}$$

Abbiamo utilizzato il concetto di densità degli stati.

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$$

Questo è il punto di partenza per fare lo sviluppo di Sommerfield.

Per capire circa cosa aspettarci qualitativamente come risultato del calore specifico si può fare un ragionamento semiclassico. Se abbiamo un sistema con un certo numero di gradi di libertà, il calore specifico è pari al numero di gradi di libertà per  $R/2$ . A causa della statistica fermionica non tutti i gradi di libertà del gas di fermi sono eccitabili, ma solo quelli contenuti nella porzione di energia compresa tra  $\varepsilon_F - kT$  e  $\varepsilon_F$ ; l'ordine di grandezza che ci si aspetta in temperatura è lineare in temperatura:

$$c_v \propto k_b N(\varepsilon_F) k_b T$$

Procediamo al conto più sofisticato. La densità degli stati è moltiplicata per la derivata di  $n$  rispetto a  $\varepsilon$ , che a bassa temperatura diventa una delta di Dirac<sup>1</sup>. Lo sviluppo di Sommerfield permette quindi di approssimare questo integrale vicino alla delta, invece di stringere via via la delta, si preferisce cambiare le variabili in modo da tenere costante la larghezza di  $\partial_\varepsilon n$ , allargando la densità degli stati: Nel fare questo integrale riscaldiamo le variabili in modo da visualizzare meglio il problema. Definiamo la variabile riscalata  $x$ :

$$x = \frac{\varepsilon - \mu}{k_b T}$$

$$\varepsilon = k_b T x + \mu$$

<sup>1</sup>Diventa una delta di Dirac con un segno meno, infatti il gradino è discendente.

In generale vogliamo risolvere integrali della forma:

$$\int \underbrace{d\varepsilon \frac{\partial n}{\partial \varepsilon}}_{dx \frac{\partial n}{\partial x}} F(\varepsilon) \quad n(x) = \frac{1}{1 + e^x}$$

Quindi facciamo lo sviluppo della funzione in T per risolvere questo integrale:

$$F(\varepsilon) = F(k_B T x + \mu) \approx F(\mu) + F'(\mu)(k_B T x) + \frac{1}{2} F''(\mu)(k_B T x)^2 + \dots$$

Questo è lo sviluppo di Sommerfield (valido per basse temperature, dove  $\mu = \varepsilon_f$ ). Appliciamolo per calcolare  $c_v$ :

$$\frac{1}{V} \frac{\partial S}{\partial T} = -k_b^2 \int dx \frac{\partial n}{\partial x} N(\mu + k_b T x) x^2$$

Prendiamo il termine all'ordine 0 in T:

$$\frac{1}{V} \frac{\partial S}{\partial T} = -k_b^2 N(\mu) \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{1 + e^x} \right) x^2$$

L'integrale si estende tra  $-\infty$  e  $+\infty$ , se la temperatura è prossima allo 0. Questo integrale è noto analiticamente:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{1 + e^x} \right) x^2 = -\frac{\pi^2}{3}$$

Da cui si ricava l'espressione del calore specifico

$$c_v = k_b^2 N(\varepsilon_f) \frac{\pi^2}{3} T$$

Per tenere conto delle correzioni di ordine successivo avremo dovuto sostituire il termine seguente nello sviluppo di Sommerfield:

$$N(\mu) + \frac{1}{2} N''(\mu) (x k_b T)^2$$

Abbiamo saltato il termine al primo ordine poiché la  $\partial_\varepsilon n_k^0$  è una funzione dispari, deve essere moltiplicata per una potenza pari di  $x$ , perché è integrata su un dominio simmetrico all'origine. Integrando il termine successivo otteniamo un contributo cubico nella temperatura. Questo commento è necessario perché stiamo calcolando il calore specifico nel gran canonico; per cui abbiamo già fatto un'approssimazione di ordine cubico in  $T$ : il calore specifico è definito infatti come la derivata dell'entropia rispetto alla temperatura tenendo costante il numero di particelle, non il potenziale chimico. L'errore che si commette è cubico in  $T$ :

$$\left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\bar{N}} = \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\mu} - \underbrace{\frac{\left( \frac{\partial N}{\partial T} \right)^2}{\left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)}}_{\text{cubica in T}}$$

Quindi se si vuole un'espressione corretta al terzo ordine nella temperatura occorre considerare anche questo contributo. Dimostriamo questa relazione:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\bar{N}} = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\mu} - \frac{\left(\frac{\partial N}{\partial T}\right)^2}{\left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)}$$

Prendiamo il potenziale gran canonica, e per portarla nel canonico esplicitiamo la dipendenza da  $\mu$  di  $T$ ,  $N$  e  $V$

$$S(T, \mu(T, N, V), V)$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\mu} + \frac{\partial S}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial T}$$

Il termine a destra  $\mu$  è indipendente da  $T$ . Questa è un'identità che ci dice che  $\mu$  è una variabile indipendente, che non dipende da  $T$ ! La  $\mu$  è variabile indipendente del gran potenziale!

$$\mu = \mu(T, N(T, \mu, V), V) \quad \frac{\partial \mu}{\partial T} = \frac{\partial \mu}{\partial T} + \frac{\partial \mu}{\partial N} \frac{\partial N}{\partial T} = 0$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial T} = -\frac{\partial \mu}{\partial N} \frac{\partial N}{\partial T} = -\frac{\left(\frac{\partial N}{\partial T}\right)}{\left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)}$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\bar{N}} = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\mu} - \frac{\left(\frac{\partial N}{\partial T}\right)}{\left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)} \frac{\partial S}{\partial \mu}$$

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T}$$

$$\frac{\partial S}{\partial \mu} = -\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu \partial T}$$

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -N \quad \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu \partial T} = -\frac{\partial N}{\partial T}$$

$$\frac{\partial N}{\partial T} = \frac{\partial S}{\partial \mu}$$

Da cui ricaviamo la relazione precedente. Passiamo al calcolo della densità degli stati:

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$$

$$\varepsilon_k = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Poiché la dispersione ha simmetria cilindrica facciamo l'integrale in coordinate sferiche:

$$N(\varepsilon) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) =$$

$$N(\varepsilon) = 4\pi \int \frac{dk}{(2\pi)^3} k^2 \delta(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m})$$

$$N(\varepsilon) = 4\pi \int \frac{dk}{(2\pi)^3} k^2 \frac{\delta(k - k_\varepsilon)}{2\frac{\hbar^2 k_\varepsilon}{2m}}$$

(mmm. dubbi di conto)

$$N(\varepsilon) = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} k_\varepsilon \frac{m}{\hbar^2} \quad k_\varepsilon = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\varepsilon}$$

Ripetiamo il calcolo in  $d$  dimensione:

Prendiamo  $\bar{N}$  in un sistema di particelle non interagenti.

$$\langle N \rangle = \int d\varepsilon n(\varepsilon) N(\varepsilon)$$

$$\frac{\partial \langle N \rangle}{\partial T} = \int N(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial T} n(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$\frac{\partial n}{\partial T} = \frac{\varepsilon - \mu}{T} \frac{\partial n}{\partial \varepsilon}$$

$$\frac{\partial \hat{N}}{\partial T} = \int N(\varepsilon) \frac{\varepsilon - \mu}{k_b T} k_b \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} d\varepsilon$$

$$= \int \underbrace{N(k_b T x + \mu)}_{N(\mu) + N'(\mu) k_b T x + \dots} x k_b \frac{\partial n}{\partial x} dx$$

Siccome il termine di ordine zero è dispari l'integrale si annulla dobbiamo andare al primo ordine:

$$= k_b^2 T N'(\varepsilon_f) \underbrace{\int \frac{\partial n}{\partial x} x^2 dx}_{-\frac{\pi^2}{3}}$$

$$\frac{\partial N}{\partial T} = k_b^2 T N'(\varepsilon_f) \frac{\pi^2}{3}$$

Da cui abbiamo ricavato che il termine che corregge il calore specifico è un termine al terzo ordine, trascurabile rispetto a quello del primo ordine.

## Capitolo 4

# Teoria di Landau dei liquidi di Fermi

La teoria è una teoria fenomenologica che ha lo scopo di spiegare perché i sistemi fermionici siano sistemi in cui l'interazione è molto forte sembra che si comportino come se fossero completamente indipendenti. È una teoria fenomenologica che si basa su corti perturbativi. La cosa importante è che questa teoria vale se siamo interessati a bassissima temperatura (temperatura nulla). La teoria di Landau ci dice come risponde il sistema a stimoli esterni, ma non risponde a domande intrinseche: da informazioni sulle proprietà di eccitazione a bassa temperatura, ma non l'energia dello stato fondamentale. La teoria si applica a sistemi fermionici non carichi e agli elettroni nei metalli. Il modello alla base parte da un gas di fermioni, non un reticolo. L'energia del sistema può essere scritta:

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Oltre all'energia cinetica il sistema risente di un'energia di interazioni tra particelle. Se il sistema non fosse interagente lo stato fondamentale sarebbe:

$$|\psi_0\rangle = \prod_{k < k_f \sigma} a_{k\sigma}^+ |0\rangle$$

Dove  $k_f$  è determinato dalla densità

$$2 \int_{k < k_f} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \rho = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_f^3$$
$$\rho = \frac{k_f^3}{3\pi^2}$$

$k_f$  è fissato dalla densità di elettroni (non dal numero). Lo stato fondamentale sarebbe caratterizzato dalla distribuzione di Fermi-Dirac. Come faccio a costruire degli stati eccitati? Posso creare una buca e una particella.

$$a_{k_2\downarrow}^+ a_{k_1\uparrow} |k_0\rangle$$

Questo stato ha spin pari a -1, e momento pari a  $k_2 - k_1$  (una buca e una particella). La cosa importante è che questi stati sono instabili, perché sono autofunzioni dell'hamiltoniana non interagente.

Lo stato di un sistema può essere descritto attraverso la distribuzione  $n(k)$ . Questa è in corrispondenza biunivoca con gli stati. Se abbiamo una distribuzione smussata questa corrisponde ad una media su tante possibile configurazioni.

$$n_k - n_k^0 = \delta n_k$$

La differenza tra l'occupazione reale, e quella del sistema non interagente, sarà sempre negativa (o al più pari a zero) all'interno del volume di fermi, mentre per  $k$  maggiore di  $k_F$  sarà un oggetto positivo.

L'energia del sistema è

$$E = \sum_k \varepsilon(k) n_{k\sigma}$$

E può essere considerato un funzionale di  $n_{k\sigma}$ :

$$\frac{\delta E}{\delta n_{k\sigma}} = \varepsilon(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Per un gas non interagente, lo stato è descritto in modo univoco dalla distribuzione, l'energia è un funzionale della distribuzione, la derivata dell'energia rispetto alla distribuzione ottengo l'energia della singola particella.

Tutte le eccitazioni le costruisco attraverso le buche e le particelle. Posso costruire tutto attraverso l'eccitazione fondamentale. L'idea alla base della teoria di Landau è la presenza di interazioni fondamentali fermioniche. Anche nel sistema interagente ci siano eccitazioni fondamentali di natura fermionica che ci permettono di costruire eccitazioni elementari. Queste le chiameremo quasi-buche e quasi-particelle. Sono eccitazioni elementari, che rappresentano le particelle rivestite dalla nube di polarizzazione.

Anche in presenza di interazioni esiste una superficie di Fermi tale che tutte le quasi particelle si trovino confinate in  $k_f$  e non ci siano quasiparticelle fuori da  $k_f$ . Il  $k_f$  è esattamente lo stesso nei due casi (teorema di Luttinger), e il volume racchiuso dalla sfera di fermi non cambia se è presente o meno l'interazione. L'altro punto è che esiste una corrispondenza biunivoca fra le quasi-eccitazioni del sistema interagente e le eccitazioni del sistema non interagente. Immaginiamo di costruire il sistema interagente partendo da quello non interagente e accendendo l'interazione molto lentamente (in modo adiabatico). Lo stato fondamentale non interagente va a finire nello stato fondamentale interagente, e le interazioni del sistema non interagente vanno a finire nei sistemi non interagenti in modo continuo<sup>1</sup>.

Quest'ultima ipotesi non è esatta, ma comunque le deviazioni sono abbastanza irrilevanti.

La comodità di questa teoria è che l'entropia ha la stessa espressione per caso interagente o non interagente. Adesso le  $n(k)$  non rappresentano le occupazioni delle particelle ma le occupazioni delle quasi-particelle.

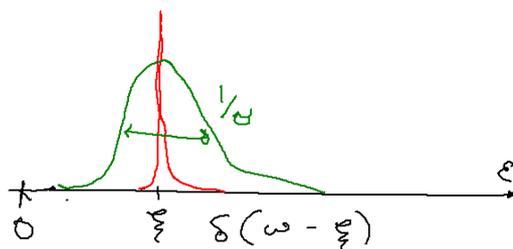
Il punto centrale della teoria di Landau è la  $E$ , funzionale della distribuzione delle quasi-particelle. Questa ipotesi è asintoticamente vera se siamo vicino all'energia di Fermi.

<sup>1</sup>Questo permette di creare una corrispondenza biunivoca tra stati interagenti e non interagenti immaginando di poter spegnere e accendere l'interazione.

Queste quasi-particelle e quasi-buche in realtà non sono degli stati stabili come nel caso non interagente; le quasi-particelle tendono a decadere, però sono asintoticamente stabili se andiamo nel limite per  $k$  che tende a  $k_f$ . Il tempo di vita di questa eccitazione va come:

$$\frac{1}{\tau} \sim (k - k_f)^2$$

Questo fatto ha come conseguenza che la larghezza spettrale in energia delle quasi particelle non è più una  $\delta$  di Dirac, ma un contributo con una certa larghezza:



La larghezza della gaussiana è proporzionale a  $\xi^2$ ; andando a  $\xi$  nullo questo termine si stringe più rapidamente rispetto alla scala  $\xi$  dell'energia. Calcolare l'energia dello stato fondamentale è impossibile con questa teoria, perché per calcolarlo contano tutti gli elettroni, non solo quelli con  $k$  vicino a  $k_F$ , mentre la teoria descrive bene solo il comportamento degli elettroni in prossimità della superficie di Fermi.

Supponiamo di avere due particelle che interagiscono (una con  $k > k_f$ , e una all'interno della sfera di fermi).

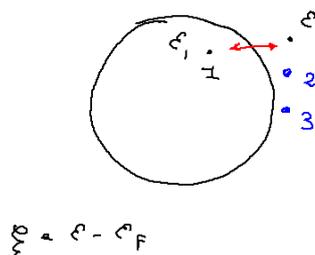


Figura 4.1: Le due particelle nere interagiscono e otteniamo uno stato in cui ci sono due particelle blu fuori (perché il resto della sfera di fermi è tutta piena)

Ovviamente in un processo del genere devono conservarsi i momenti e l'energia.

$$\xi + \xi_1 = \xi_2 + \xi_3$$

Il tempo di vita con questa quasi-particella può essere ricavato usando la regola d'oro di Fermi (trascurando l'elemento di matrice del processo di interazione, che viene supposto non singolare):

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{int} | i \rangle|^2 N(\varepsilon)$$

Andiamo a calcolare la densità degli stati finale: Abbiamo la condizione di  $\varepsilon > 0$   $\xi > 0$   $\xi_1 < 0$  poi  $\xi_2, \xi_3 > 0$  La particella  $\varepsilon$  è capace di interagire solo con elettroni che si trovano in una regione pari a  $kT$ :

$$|\xi_1| < \xi$$

Questo segue direttamente dalla conservazione dell'energia.

$$\int_0^\xi d|\xi|$$

Anche gli  $\xi_2$  e  $\xi_3$  devono essere tali che loro somma deve essere  $< \xi$ :

$$\int_0^\xi d\xi_2$$

$$\int_0^\xi d|\xi_1| \int_0^\xi d\xi_2 = \xi^2$$

Lo spazio delle fasi del processo del decadimento è proporzionale a  $\xi^2$ :

$$\frac{1}{\tau} \propto \xi^2$$

C'è davanti l'elemento di matrice, ma il tempo di vita va come  $\xi^2$  (se l'elemento di matrice non è singolare, cosa che è vera). Questo per  $\xi$  piccolo ovviamente (altrimenti non posso portar fuori dall'integrale l'elemento di matrice).

Con le particelle non sarebbe venuto lo stesso risultato. Perché stiamo assumendo che lo stato fondamentale sia quello con la sfera tutta occupato e fuori vuoto.

Lo stato fondamentale si mostra come in questa figura, c'è ancora un salto discontinuo all'energia di fermi, ma sono presenti degli stati (del sistema non integrale, che **non sono** autostati del sistema) non pieni anche a  $\varepsilon < \varepsilon_f$ . Siccome nello stato fondamentale delle particelle ci sono dei buchi, quindi il discorso che abbiamo calcolato era possibile solo per le quasi particelle che continuano ad occupare un volume di fermi fissato.

A temperatura finita, l'occupazione dello stato  $n(\varepsilon)$  si comporta esattamente come un fermione:

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}}$$

Studiamo quindi lo stesso fenomeno a temperatura finita. Mettiamoci nella condizione peggiore. Assumiamo che  $\xi = 0$ . A temperatura finita  $\xi_1$  possiamo trovarlo in uno stato fuori dalla superficie di Fermi soltanto in un range  $k_b T$ :  $\xi_1 < k_b T$

$\xi_2$  può essere creata solo nelle regioni in cui è presente una buca: possiamo cadere all'interno di una fetta  $k_b T$  nella sfera di Fermi. Facendo i conti si trova che c'è un termine che va come  $T^2$ :

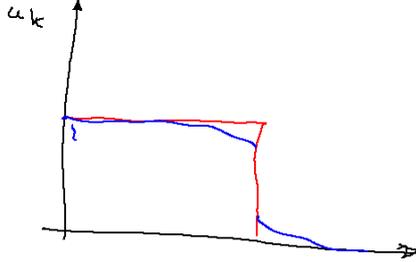


Figura 4.2: Schema degli stati di occupazione  $n_k$  delle quasi-particelle del sistema interagente e non interagente, a temperatura nulla.

$$\frac{1}{\tau} = a\xi^2 + bT^2$$

Anche quando  $\xi = 0$  il tempo di vita della particella è un tempo di vita finito (ma anche in questo caso a  $T = 0$  si ritorna a particelle a vita media infinita). Questa è una delle caratteristiche dei tempi di vita dei sistemi di fermi. Se con un esperimento troviamo un tempo di vita minore vuol dire che le approssimazioni della teoria non sono corrette.

In realtà spesso questo avviene perché non sempre è vero che accendendo l'interazione adiabaticamente lo stato non interagente vada a finire sempre nello stesso stato interagente (indipendentemente da come si accende l'interazione).

In alcuni sistemi sperimentali questo tempo di vita invece di andare come  $\xi^2$  va come  $\xi$  (sistemi superconduttori ad alta temperatura), quindi sembrerebbe che non si possano trattare la teoria di Landau.

Ad esempio questo avviene in una sola dimensione, in cui sappiamo risolvere il problema analiticamente. La teoria che descrive questi sistemi è quella dei liquidi di Luttinger. Però in una sola dimensione non è molto grave: Nel fare l'analisi del processo di Scattering abbiamo scritto

$$\xi + \xi_1 = \xi_2 + \xi_3$$

In una dimensione le cose cambiano parecchio poiché la legge di conservazione dell'impulso e dell'energia permette di risolvere esattamente questa equazione, quindi l'integrale non va più su due variabili, ma una è fissata completamente, quindi  $1/\tau$  va come  $\xi$ . L'una dimensione è un sistema particolare.

Supponiamo che l'energia del sistema sia un funzionale della distribuzione  $n_{k\sigma}$ , che è una distribuzione delle quasi particelle. La variazione dell'energia se mi sposto dallo stato fondamentale sarà:

$$\delta E = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} \delta n_{k\sigma}$$

Una variazione infinitesima della distribuzione determina una variazione dell'energia:

$$\varepsilon_{k\sigma} = \frac{\delta E}{\delta n_{k\sigma}}$$

Questa è una derivata funzionale. Nel caso non interagente  $\varepsilon$  era l'energia della particella libera, adesso non è più così, la  $\varepsilon_{k\sigma}$  è ancora un funzionale.

Possiamo dimostrare che la distribuzione delle quasiparticelle all'equilibrio soddisfa la distribuzione di Fermi. Queste quasi particelle sono dei fermioni. Partiamo dal gran canonico:

$$\Omega = E - TS - \mu N$$

$$\Omega(\mu, T, V)$$

Fissando  $\mu$ ,  $T$  e  $V$  possiamo pensare questo potenziale in termini della distribuzione di quasi particella, e questo all'equilibrio vuol dire avere una distribuzione di quasi particelle, tale che qualunque variazione ho un aumento del Gran Potenziale (è minimo all'equilibrio). La variazione di  $\Omega$  deve pertanto essere nulla:

$$\delta\Omega = 0$$

$$\delta\Omega = \delta E - T\delta S - \mu\delta N = 0$$

$$\begin{aligned} \delta\Omega &= \underbrace{\sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} \delta n_{k\sigma}}_{\delta E} - \mu \underbrace{\sum_{k\sigma} \delta n_{k\sigma}}_{\delta N} - T\delta S \\ &= \sum_{k\sigma} \delta n_{k\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu) = T\delta S \end{aligned}$$

L'entropia che descrive il numero di stati presenti deve essere la stessa del sistema non interagente, poiché l'interazione è stata accesa in maniera adiabatica.

$$S = -k_b \sum_{k\sigma} n_{k\sigma} \ln n_{k\sigma} + (1 - n_{k\sigma}) \ln(1 - n_{k\sigma})$$

$$\delta S = -k_B \sum_{k\sigma} \ln \frac{n_{k\sigma}}{1 - n_{k\sigma}} \delta n_{k\sigma}$$

$$\delta\Omega = \sum_{k\sigma} \left[ (\varepsilon_{k\sigma} - \mu) + k_b T \ln \frac{n_{k\sigma}}{1 - n_{k\sigma}} \right] \delta n_{k\sigma} = 0$$

Qualunque variazione arbitraria deve soddisfare questa condizione. Questo implica che tutto il termine che moltiplica  $\delta n_{k\sigma}$  deve essere nullo:

$$\varepsilon_{k\sigma} - \mu = -k_b T \ln \frac{n_{k\sigma}}{1 - n_{k\sigma}}$$

$$n_{k\sigma} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)}}$$

Questa è un'equazione molto più complicata della distribuzione di fermi standard, poiché  $\varepsilon$  è un funzionale della distribuzione stessa.

$$\delta E = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} \delta n_{k\sigma}$$

Espandiamo ora  $\delta E$  in potenze della deviazione di  $\delta n$  rispetto allo stato fondamentale. Sullo stato fondamentale la  $n_{k\sigma}$  è una funzione a gradino, sviluppiamo tutto rispetto a questo:

$$\delta n_{k\sigma} = n_{k\sigma} - n_{k\sigma}^0$$

Sviluppiamo la variazione del funzionale di Landau in potenze dello sviluppo rispetto alla teoria di Landau.

$$\delta E = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma}^0 \delta n_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k,k',\sigma,\sigma'} \delta n_{k\sigma} \delta n_{k'\sigma'} f_{\sigma,\sigma'}(k,k')$$

$$\varepsilon_{k\sigma}^0 = \left( \frac{\delta E}{\delta n_{k\sigma}} \right)_{n_{k\sigma}=n^0}$$

Dove abbiamo calcolato la derivata funzionale sullo stato fondamentale.

$$f_{\sigma,\sigma'}(k,k') = \left( \frac{\delta^2 E}{\delta n_{k\sigma} \delta n_{k'\sigma'}} \right)_{n_{k\sigma}=n^0}$$

Lo sviluppo di Landau al secondo ordine ci basta per trovare le risposte del sistema che ci interessano. Questa espressione mi dà automaticamente un'espressione di  $\varepsilon_{k\sigma}$ :

$$\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_{k\sigma}^0 + \sum_{k'\sigma'} f_{\sigma,\sigma'}(k,k') \delta n_{k'\sigma'}$$

Questa è l'espressione dell'energia di quasi particella, che ha due contributi. Il primo contributo è detto energia in *isolamento*, il secondo contributo è detta energia di *interazione*. Difatti il termine al secondo ordine tiene conto della variazione delle energie al cambiare di posizione reciproche di due quasi-particelle. Questa scrittura è conseguenza dell'interazione del sistema.

La scrittura di  $E$  come la variazione è molto più sensata di  $E$  scritta come funzionale, perché da ragione delle variazioni fisiche vicino alla superficie di fermi. In altre parole non possiamo dare l'energia dello stato fondamentale in assoluto, ma solo le variazioni. Ovviamente il termine  $\varepsilon_{k\sigma}^0$  non ha nulla a che vedere con  $k^2/2m$ . Quando introduciamo la quasi particella (facciamo una variazione della distribuzione rispetto allo stato fondamentale)  $\varepsilon^0$  è l'energia della quasi particella se ignoriamo il fatto di aver modificato la distribuzione. Possiamo introdurre la velocità di quasi particella:

$$\vec{v}_{k\sigma} = \frac{1}{\hbar} \frac{\vec{\partial}}{\partial k} \varepsilon_{k\sigma}^0$$

Ci poniamo proprio sulla superficie di fermi:

$$\vec{v}_{k_f\sigma} = \frac{1}{\hbar} \frac{\vec{\partial}}{\partial k} \varepsilon_{k\sigma}^0 \Big|_{k=k_f} = \frac{\hbar \vec{k}_f}{m^*}$$

Dove definiamo  $m^*$  come la massa della quasi particella. Una volta che abbiamo definito per la massa efficace dobbiamo avere un'espressione di  $\varepsilon^0$ . Oppure posso anche non fare conti perturbativi, questa massa efficace è la grandezza che appare nel calore specifico delle quasi particelle.

La cosa che esce fuori è che ha esattamente la stessa espressione del sistema delle particelle non interagenti. L'unica differenza è che la densità degli stati diventa la densità degli stati di quasiparticella. Adesso la densità degli stati diventa la stessa espressione trovata nel caso non interagente con  $m^*$  al posto di  $m$ . Se faccio una misura di calore specifico stiamo misurando la massa efficace. Il calore specifico è proporzionale alla massa efficace dell'oggetto<sup>2</sup>.

Se l'interazione è piccola mi verrà la massa della banda, se mi viene molto diversa è dovuta al fatto che c'è una grande interazione. Esistono sistemi in cui queste masse possono venire molto più grandi.

Vediamo da dove viene questo discorso sulla densità degli stati. Quando abbiamo fatto il nostro conto sulla densità degli stati:

$$N(\varepsilon) = 2 \frac{1}{V} \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_{k\sigma}^0)$$

$\varepsilon^0$  ha tutte le informazioni sull'interazione, ma calcolate sullo stato fondamentale.

$$N(\varepsilon) = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \underbrace{\delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{k\sigma}^0)}_{\frac{\delta(k-k_f)}{\hbar^2 k_f / m^*}}$$

Ma questa è lo stesso risultato che troviamo nel sistema non interagente, l'unica differenza è che al posto di  $m$  abbiamo  $m^*$

$$N(\varepsilon_f) = \frac{k_f m^*}{\hbar^2 \pi^2}$$

Quando andiamo a fare il calore specifico il conto che abbiamo fatto la scorsa volta (l'entropia è la stessa, appartiene una sottigliezza di cui non parliamo).

$$\frac{c_v}{c_{v0}} = \frac{m^*}{m}$$

Dove  $c_v^0$  è il calore specifico non interagente.

## 4.1 Funzionale energia di Landau

$$\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_{k\sigma}^0 + \sum_{k'\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k', k) \delta n_{k'\sigma'}$$

$f$  ha le dimensioni di un'energia. Se la somma è finita nel limite di grande volume  $f \sim \frac{1}{V}$  (siccome abbiamo una somma su tanti termini, questa deve essere di ordine 1)

$$f \propto \frac{l^3}{V} E$$

---

<sup>2</sup>Vedi capitolo precedente.

Dove  $l$  è un parametro per far tornare le dimensioni, e rappresenta il range di interazione.

$f$  ha una dipendenza dello spin, possiamo lavorare con due grandezze più convenienti:

$$\frac{f_{\uparrow\uparrow} + f_{\uparrow\downarrow}}{2} = f_s \quad \frac{f_{\uparrow\uparrow} - f_{\uparrow\downarrow}}{2} = f_{as}$$

Invece che lavorare direttamente con  $f_{\uparrow\uparrow}$  e  $f_{\uparrow\downarrow}$ , lavoriamo con queste combinazioni simmetrizzate e antisimmetrizzate.

Se facciamo una variazione tale che  $\delta n_{\uparrow\uparrow} = \delta n_{\uparrow\downarrow}$  avrò il termine simmetrico, mentre se facciamo perturbazioni che cambiano lo spin del sistema  $\delta n_{\uparrow\uparrow} = -\delta n_{\uparrow\downarrow}$ , comparirà nell'interazione la  $f_{as}$ .

Quindi la  $f_{as}$  mi descrive la risposta a perturbazioni che modificano lo spin e la  $f_s$  quelle che non modificano lo spin.

La  $f$  sembra una funzione di due vettori  $\vec{k}$  e  $\vec{k}'$ . Quando faremo perturbazioni alla superficie di fermi, i  $k$  che vengono modificati sono tutti circa pari a  $k_F$ . Questo mi dice che in realtà  $f$  è una funzione dell'angolo tra  $k$  e  $k'$  (poichè i moduli sono pari a  $k_F$ ):

$$f(\vec{k}_f, \vec{k}'_f) = f(\theta_{\vec{k}, \vec{k}'})$$

Diciamo che dipende dal coseno dell'angolo, che varia tra -1 e 1. Possiamo espanderla per un set completo attraverso i polinomi di Legiandre:

$$f^s(\cos \theta) = \sum_l f_l^s P_l(\cos \theta)$$

Siamo passati da un oggetto che è una funzione a un oggetto che è una successione, Questa espansione è la stessa cosa di fare l'espansione in armoniche sferiche che dipende soltanto da  $\theta$ , la parte  $\varphi$  ha sempre  $m = 0$ .

$$\int d\Omega \sin \theta d\theta d\varphi = \int d\cos \theta d\varphi$$

Gli integrali angolari possono essere espressi attraverso i polinomi di Legiandre

I polinomi di Legiandre.

$$P_n(x) = \frac{1}{n2^n} \frac{d^n(x^2 - 1)^n}{dx^n}$$

Con questa funzioni i polinomi sono ortogonali, ma non ortonormali:

$$\int dx P_l(x) P_n(x) = \delta_{ln} \frac{2}{2l + 1}$$

Da cui è semplice trovare i termini

$$f_l^{s,l} \frac{2l + 1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\cos \theta) f^s(\cos \theta) d\cos \theta$$

$$f_0 = \frac{1}{2} \int f^{(s)}(\cos \theta) d\cos \theta$$

Cioè  $f_0$  è la media angolare della nostra funzione.

Calcoliamo  $f_1$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2} [3x^2 - 1]$$

#### 4.1.1 Calcolo della compressibilità

Facendo la variazione del funzionale di Landau abbiamo scritto il valore della  $\varepsilon_{k\sigma}$  al primo ordine.

$$\vec{v}_k = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k \varepsilon_{k\sigma}^0 = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*}$$

Con questa espressione si definisce la massa efficace  $m^*$ , ed è esattamente la grandezza che viene nella densità degli stati di quasiparticella. Quindi abbiamo definito le  $f_l^{a,s}$ , come i coefficienti dello sviluppo in polinomi di Legendre della  $f_{\sigma,\sigma'}(k, k')$ . Questi oggetti hanno le dimensioni di una energia. Se la moltiplichiamo per la densità degli stati e per un volume otteniamo una grandezza adimensionale.

$$F_l^{s,a} = VN(\varepsilon) f_l^{s,a}$$

Queste  $F$  sono dette ampiezze di Landau.

Ci calcoleremo la compressibilità, che può essere scritta attraverso il fattore di interazione  $F$ .

La compressibilità è un numero positivo, definito nel seguente modo:

$$\chi_\rho = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_{N=const}$$

Si può dimostrare che è uguale:

$$\chi_\rho = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial \mu}$$

Questa espressione ci piace perché è più semplice da calcolare nell'insieme Gran Canonico. Verifichiamo come cambia il numero totale di particelle al variare del potenziale chimico:

$$\delta \bar{N} = \sum_{k\sigma} \delta n_{k\sigma}$$

Modificare il potenziale chimico corrisponde a modificare la dimensione della superficie di Fermi, ma non la sua forma. Tuttavia dobbiamo tenere conto anche di come una variazione di  $\mu$  introduce variazioni all'interno del funzionale  $\varepsilon$  stesso:

$$\delta n_{k\sigma} = \frac{\partial n}{\partial \varepsilon_{k\sigma}} [-\delta \mu + \delta \varepsilon_{k\sigma}]$$

Dove il meno davanti a  $\delta \mu$  va messo perché la  $n$  dipende da  $\mu$  con un segno meno rispetto alla  $\varepsilon$ .

Siccome siamo interessati ad avere tutto rispetto a  $\delta\mu$

$$\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_{k\sigma}^0 + \sum_{k'\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k, k') \delta n_{k'\sigma'}$$

La  $\varepsilon$  dipende da  $n$  quindi al variare di  $\mu$  cambia  $n$  e di conseguenza cambia  $\varepsilon$ :

$$\delta\varepsilon = \sum_{k'\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k, k') \delta n_{k'\sigma'}$$

A temperatura nulla la  $n$  è una funzione a gradino, da cui la derivata è una delta.

$$\frac{\partial n}{\partial \varepsilon_{k\sigma}} = -\delta(\varepsilon_f^0 - \varepsilon_f)$$

$$\delta n_{k\sigma} = -\delta(\varepsilon^0 - \varepsilon_f) \left[ \sum_{k'\sigma'k\sigma} f_{\sigma,\sigma'}(k, k') \delta n_{k'\sigma'} - \delta\mu \right]$$

Se facciamo una variazione di potenziale chimico non facciamo nessuna differenza tra particella  $\uparrow$  e particella  $\downarrow$ :

$$\delta n_{k'\uparrow} = \delta n_{k'\downarrow}$$

$$f_{\uparrow\uparrow} \delta n_{\uparrow} + f_{\uparrow\downarrow} \delta n_{\downarrow} = (f_{\uparrow\uparrow} + f_{\uparrow\downarrow}) \delta n_{\uparrow} = f^s (\delta n_{\uparrow} + \delta n_{\downarrow})$$

$$\delta n_k = -\delta(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_f) \left[ \sum_{k'\sigma'} f^s(k, k') \delta n_{k'\sigma'} - \delta\mu \right]$$

Il nostro sistema è invariante per rotazione, quindi il sistema  $\delta n_{k'\sigma'}$  non dipende dal versore di  $\hat{k}'$ . Quindi quella  $f$  integrata su  $k'$  da la media angolare. Poiché la media angolare è l'armonica zero, possiamo riscriverlo come:

$$\delta n_{k\sigma} = -\delta(\varepsilon_{k\sigma}^0 - \varepsilon_f) \left[ \underbrace{f_0^s \sum_{k'\sigma'} \delta n_{k'\sigma'}}_{\delta N} - \delta\mu \right]$$

Adesso la situazione è molto più semplice. Adesso sommiamo tutto su  $k$  e  $\sigma$ :

$$\delta N = - \underbrace{\sum_{k,\sigma} \delta(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_f)}_{VN(\varepsilon_F)} (f_0^s \delta N - \delta\mu)$$

$$\delta N = -VN(\varepsilon_f) [f_0^s \delta N - \delta\mu]$$

$$\delta N = - \underbrace{VN(\varepsilon_F) f_0^s}_{F_0^s} \delta N + VN(\varepsilon_F) \delta\mu$$

$$(1 + F_0^s)\delta N = VN(\varepsilon_F)\delta\mu$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial\mu} = \frac{N(\varepsilon_F)}{1 + F_0^s}$$

Grazie a questa formula abbiamo ottenuto la compressibilità. Cosa cambia rispetto al sistema non interagente?

$$\rho = \int^{\mu} N(\varepsilon)d\varepsilon$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial\mu} = N(\varepsilon_F)$$

La differenza è data sia dalla  $N$  (che nel sistema interagente è la densità degli stati di quasi particella), che dal nuovo contributo al denominatore.

$$\frac{\chi}{\chi^0} = \frac{m^*}{m} \frac{1}{1 + F_0^s}$$

Una misura di compressibilità e una misura di calore specifico ci definisce il termine  $F_0^s$ . In questo modo abbiamo un vincolo su  $F_0^s$ :  $F_0^s > -1$ , perché la compressibilità non può essere negativa, se fosse proprio pari a  $-1$  ci troviamo in una transizione liquido gas.

Se mettiamo un campo magnetico, vogliamo discutere l'accoppiamento di spin:

$$-g\mu_b\sigma_z H^z$$

Questa è la perturbazione, quindi si introduce all'interno dell' $\epsilon$ :

$$\delta\varepsilon_{k\sigma} = -g\mu_b \underbrace{\sigma_z}_{\pm\frac{1}{2}} h^z + \sum_{k'\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k, k')\delta n_{k'\sigma'}$$

Dove  $h^z$  è la quantità piccola piccola. Dobbiamo calcolare la stessa cosa di prima. Se vogliamo calcolare la variazione di  $n$  rispetto a  $h$ :

In teoria dentro  $\delta n$  abbiamo anche  $\delta\mu$ . Tuttavia se inseriamo un piccolo campo magnetico come si comporta il potenziale chimico? deve cambiare in modo uguale sia per elettroni  $\uparrow$  e  $\downarrow$  (ha lo stesso segno). Quindi cambia quadraticamente in  $h$  e lo posso trascurare.

In questo caso

$$\delta n_{\uparrow\uparrow} = -\delta n_{\uparrow\downarrow}$$

Il procedimento è lo stesso di quello che abbiamo fatto prima, ma questa volta avremo la sola  $f$  antisimmetrica, si ripetono tutti i passaggi del conto precedente, e troviamo la suscettività di Pauli.

$$\chi_S = \frac{\partial M}{\partial h} = \frac{g^2\mu_b^2}{4} \frac{N(\varepsilon_f)}{1 + F_0^a}$$

$$\frac{\chi_s}{\chi_S^0} = \frac{m^*}{m} \frac{1}{1 + F_0^a}$$

Si ricava che anche qui  $F_0^a > 1$ . L'instabilità di un sistema ferromagnetico è dovuta al fatto che  $F_0^a \rightarrow -1$ .

Questa è la teoria di Landau in cui questi coefficienti sono interagenti.

## 4.2 Approssimazione Hartree-Fock di campo medio

Andiamo a fare l'approssimazione di campo medio, troveremo un'espressione di tutti questi fattori in questa approssimazione.

La nostra hamiltoniana è data da:

$$H_0 + H_I = \sum_{k\sigma} \underbrace{\varepsilon_{k\sigma}}_{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} V(q) a_{k+q,\sigma}^+ a_{k'-q,\sigma'}^+ a_{k'\sigma'} a_{k\sigma}$$

Prendiamo il valor medio della nostra hamiltoniana:

$$\langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle = n_{k\sigma}$$

Il valor medio del secondo termine è difficile da calcolare:

$$\langle a^+ a^+ a a \rangle$$

Per calcolarlo possiamo fare l'approssimazione di campo medio. Questa approssimazione trascura le fluttuazioni: Immaginiamo di avere due operatori,  $A$  e  $B$ , di cui vogliamo calcolarne il valore medio:

$$\langle AB \rangle \sim \langle A \rangle \langle B \rangle$$

$$\langle AB \rangle = \langle [\bar{A} + (A - \bar{A})][\bar{B} + (B - \bar{B})] \rangle$$

$$= \bar{A}\bar{B} + \langle (A - \bar{A})(B - \bar{B}) \rangle$$

Da cui stiamo trascurando le correlazioni. Sfrutteremo questa approssimazione. Ricordiamo che

$$\langle a \rangle = 0$$

Il termine di Hartree è ottenuto comprimendo il primo con l'ultimo termine:

$$\langle a_{k+q,\sigma}^+ a_{k,\sigma} \rangle \cdot \langle a_{k'-q,\sigma'}^+ a_{k',\sigma'} \rangle$$

Poi possiamo comprimere primo e terzo:

$$- \underbrace{\langle a_{k+q,\sigma}^+ a_{k',\sigma'} \rangle \langle a_{k'-q,\sigma'}^+ a_{k\sigma} \rangle}_{\text{Fock}}$$

Il segno meno è dovuto allo scambio di operatori che abbiamo fatto. In teoria dovremo aggiungerci i termini in cui accoppiamo i due termini con  $a^+$ . Tuttavia questi sembrano nulli. (in realtà si è dimostrato che nei sistemi di

superconduttori questi termini non si annullano, tuttavia in questi sistemi si possono trascurare).

Ora la media di *Hartree* può essere diversa da zero solo se  $q$  è pari a zero. Quindi il termine di Hartree ci da una delta di dirac per  $q$ . Questa media è:

$$\langle a_{k+q,\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle \langle a_{k'-q,\sigma'}^+ a_{k'\sigma'} \rangle = \delta(q) n_{k,\sigma} n_{k'\sigma'}$$

Il termine di Fock invece ci da una  $\delta_{\sigma\sigma'}$ :

$$-\langle a_{k+q,\sigma}^+ a_{k'\sigma'} \rangle \langle a_{k'-q,\sigma'}^+ a_{k\sigma} \rangle = -\delta_{\sigma,\sigma'} \delta(k+q-k') n_{k',\sigma} n_{k\sigma}$$

$$q = k' - k$$

Da cui possiamo fare l'approssimazione Hartree-Fock per il potenziale medio:

$$\langle H \rangle_{HF} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} n_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{k,k',\sigma,\sigma'} [V(0) n_{k\sigma} n_{k'\sigma'} - V(k'-k) n_{k\sigma} n_{k'\sigma'} \delta_{\sigma\sigma'}]$$

A questo punto possiamo mettere  $n_{k\sigma} = n_{k\sigma}^0$ , cioè calcolarla nello stato fondamentale. In questo caso particelle o quasiparticelle sono la stessa cosa.

In realtà possiamo fare una cosa più raffinata, aggiungendoci una piccola modifica.

$$n_{k\sigma} = n_{k\sigma}^0 + \delta n$$

In questa aggiunta otteniamo un'espressione di  $E - E_0$  quadratica (esattamente la stessa della teoria di Landau). In questo modo abbiamo delle espressioni analitiche per calcolare i coefficienti di Landau.

$$E - E_0 = \sum_{k\sigma} \delta n_{k\sigma} \left[ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{V} \sum_{k'\sigma'} (V(0) n_{k'\sigma'}^0 - V(k'-k) n_{k'\sigma'}^0 \delta_{\sigma\sigma'}) \right] + o(\delta n^2)$$

Abbiamo trovato l'espressione analitica di  $\varepsilon_{k\sigma}^0$ :

$$\varepsilon_{k\sigma}^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{V} \sum_{k'\sigma'} [V(0) n_{k'\sigma'}^0 - \delta_{\sigma\sigma'} V(k'-k) n_{k'\sigma'}^0]$$

Possiamo naturalmente calcolare il termine al secondo ordine:

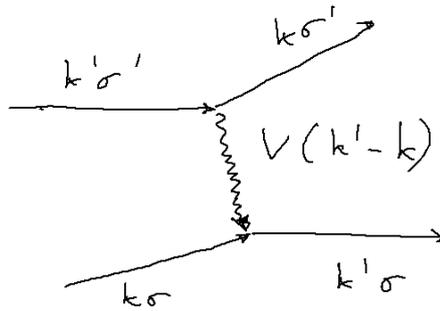
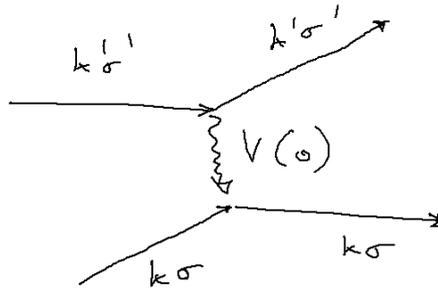
$$-\frac{1}{2V} \sum_{kk'\sigma\sigma'} [V(0) - V(k-k') \delta_{\sigma\sigma'}] \delta n_{k\sigma} \delta n_{k'\sigma'}$$

Quindi abbiamo anche trovato le funzioni  $f$ :

$$f_{\sigma\sigma'}^{HF}(k,k') = \frac{1}{V} [V(0) - \delta_{\sigma\sigma'} V(k'-k)]$$

Questa approssimazione porta solo due contributi: La seconda è possibile solo se le due particelle hanno lo stesso spin, ed è dovuto al fatto di avere particelle identiche.

In approssimazione di Hartree-Fock possiamo calcolarci la  $f^s$ :



$$f_{\uparrow\uparrow} = \frac{1}{V} [V(0) - V(k' - k)] \quad f_{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{V} V(0)$$

$$f^s = \frac{1}{V} \left[ V(0) - \frac{1}{2} V(k' - k) \right]$$

$$f^a = \frac{1}{V} \left[ -\frac{1}{2} V(k' - k) \right]$$

C'è un caso molto frequente in cui l'interazione  $V(q)$  è indipendente da  $q$  (questo implica dire che  $V(r-r')$  sia una delta di Dirac). Un'interazione a Delta è comoda soprattutto sul reticolo (interazione limitata a particelle dello stesso sito).

$$f^s = \frac{U}{2V} \quad U = V(0)$$

$$f^{as} = -\frac{U}{2V}$$

Per questo modello in cui abbiamo una forza repulsiva a cortissimo raggio abbiamo una  $f$  simmetrica positiva e una  $f$  antisimmetrica negativa.

Al crescere di  $U$  può diventare instabile per la suscettività magnetica.

Data questa come  $\varepsilon_0$ . Il primo termine è proporzionale a  $\rho$ . Ciò descrive l'interazione di una particella con la media di tutte le altre:

$$\rho V(0) = \int dr' V(r - r') \rho(r')$$

Questo termine è una costante, la sua derivata rispetto a  $k$  è nulla. Il termine di Fock è diverso:

$$\frac{1}{V} \sum_{k'} V(k' - k) n_{k'\uparrow}^0$$

Questo termine mi da effettivamente una dipendenza da  $k$  per cui ottengo una correzione alla velocità rispetto alle particelle libere.

#### 4.2.1 Calcolo della velocità e della massa efficace

L'espressione del primo termine dello sviluppo nella teoria di Hartree-Fock è data da:

$$\varepsilon_{k\sigma}^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(0) \underbrace{\frac{1}{V} \sum_{k'\sigma'} n_{k'\sigma'}^0}_{\rho} - \frac{1}{V} \sum_{k'} V(k' - k) n_{k'\sigma}^0$$

Il termine di Fock è dato da una media incrociata sugli operatori di campo. Vogliamo calcolare l'espressione del  $V(k)$ , definito come:

$$\begin{aligned} \vec{v}_k &= \frac{1}{\hbar} \frac{\vec{\partial}}{\partial k} \varepsilon_k^0 = \\ &= \frac{\hbar \vec{k}}{m} - \frac{1}{\hbar} \frac{\vec{\partial}}{\partial k} \sum_{k'} V(k' - k) n_{k'\sigma}^0 \end{aligned}$$

Il termine di Hartree non da contributi a questa derivata (è costante in  $k$ ). Ricordiamo che  $n_k^0$  è una  $\Theta$  di Heviside. Possiamo fare un cambiamento di variabili per portare la derivata sul secondo termine:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial k} \sum_{k'} V(k' - k) n_{k'\sigma}^0 &= \\ \frac{\partial}{\partial k} \sum_{\tilde{k}'} V(\tilde{k}') n_{\tilde{k}'+k,\sigma}^0 & \quad \tilde{k}' = k' - k \\ \vec{v}_k &= \frac{\hbar \vec{k}}{m} - \frac{1}{\hbar} \sum_{k'} V(k') \frac{\vec{\partial}}{\partial k} n_{k'+k,\sigma}^0 \\ \frac{1}{\hbar} \frac{\partial n_{k+k',\sigma}^0}{\partial k} &= \frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_{k+k'}^0} \underbrace{\frac{\vec{\partial}}{\partial k} \varepsilon_{k+k',\sigma}^0}_{\vec{v}_{k+k'}} \frac{1}{\hbar} \\ \frac{1}{\hbar} \frac{\vec{\partial} n_{k+k'}^0}{\partial k} &= \frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_{k+k'}^0} \vec{v}(k + k') \end{aligned}$$

$$\vec{v}_k = \frac{\hbar \vec{k}}{m} - \frac{1}{V} \sum_{k'} V(k') \frac{\partial n_{k+k'}^0}{\partial \varepsilon_{k+k'}} \vec{v}(k+k')$$

Facciamo il cambio di variabili al contrario.

$$\vec{v}_k = \frac{\hbar \vec{k}}{m} - \frac{1}{V} \sum_{k'} V(k-k') \frac{\partial n_{k'}^0}{\partial \varepsilon_{k'}} \vec{v}(k')$$

Il potenziale può essere riscritto usando le funzioni simmetriche. Riscriviamo il secondo termine dell'espressione della :

$$2 \sum_k f^{as}(k-k') \underbrace{\frac{\partial n_{k'\sigma}^0}{\partial \varepsilon}}_{-\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})} \vec{v}_k = -2 \sum_{k'} f^{as}(k-k') \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{k'}) \vec{v}_{k'}$$

Ci stiamo calcolando  $k$  intorno a  $k_f$ . Quando abbiamo da fare un integrale, questo è composto in due parti, c'è un integrale sul modulo di  $k$  che controlla la  $\delta$  e poi c'è anche l'integrale dell'angolo.

$$\begin{aligned} & 2V \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{k'}) \vec{v}_{k'} f(k\hat{k}') \\ &= 2V \int \frac{k'^2 dk'}{(2\pi)^3} \int d\Omega' \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_{k'}) \vec{v}_{k'} f(\theta) \end{aligned}$$

La delta esce fuori dall'integrale angolare.

$$2V \int \frac{k'^2 dk'}{(2\pi)^3} \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_{k'}) \int d\Omega' f^s(k\hat{k}') v_{k'}$$

Riconosciamo che il primo integrale è la densità degli stati a meno dell'integrale angolare (che posso aggiungere moltiplicando e dividendo per  $4\pi$ ). Questo integrale può essere fatto direttamente dalla formula di partenza de si mette in mezzo alla somma il termine:

$$\begin{aligned} & \underbrace{-2 \sum_{k'} \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_{k'})}_{VN(\varepsilon_F)} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} f(k\hat{k}') v_{k'} \\ & \quad - \int \frac{d\Omega'}{4\pi} F^s(k\hat{k}') v_{k'} \end{aligned}$$

Il 2 se l'assorbe la densità degli stati (non c'è la somma sugli spin quindi il 2 è la molteplicità di spin)

Dobbiamo metterci in coordinate polari per risolvere l'integrale angolare. Per farlo possiamo prendere come asse  $z$  proprio  $k$ :

$$-VN(\varepsilon_F) \int \frac{d\Omega}{4\pi} f(\cos \theta) \vec{v}_{k'}$$

La direzione di questo integrale è senza dubbio lungo  $\vec{k}$  infatti l'integrale è simmetrico rispetto a rotazioni attorno a  $k$ . Possiamo scomporlo in un pezzo

diretto lungo  $\vec{k}$  in un uno ortogonale a  $\vec{k}$ . Quello ortogonale è senza dubbio nullo, quindi possiamo riscrivere il vettore in questo modo:

$$\vec{v}_{k'} = \vec{v}_{k'} \hat{k} + \vec{v}_{\perp k'}$$

$$-VN(\varepsilon_F) \int \frac{d\Omega}{4\pi} f(\cos \theta') v_f \cos \theta' \hat{k}$$

Riscrivendo tutto quanto:

$$\vec{v}_k = \frac{\hbar \vec{k}}{m} - \vec{v}_k \int \frac{d\Omega}{4\pi} F^s(\cos \theta) \cos \theta$$

Dove il prodotto  $v_f \hat{k}$  è  $\vec{v}_k$ . Infatti  $k$  è praticamente il  $k$  di Fermi.

$$\vec{v}_k = \frac{\hbar \vec{k}}{m} - \vec{v}_k \int \frac{d \cos \theta}{2} F^s(\cos \theta) \cos \theta$$

Possiamo sviluppare  $F^s$  in polinomi di Legiandre. Poiché questo è moltiplicato per  $\cos \theta$  che è il polinomio di ordine 1, tutti gli altri termini si annullano (sono ortogonali) tranne 1. Dobbiamo metterci un fattore di normalizzazione davanti e trovare che:

$$\vec{v}_k \left( 1 + \frac{1}{3} F_1^s \right) = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

Questa espressione è esattamente quella che collega la velocità con la teoria di Landau (di cui Hartree-Fock è un caso particolare). Da questa espressione si ricava la massa efficace:

$$\vec{v}_k = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*}$$

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{1}{3} F_1^s$$

Siamo riusciti a legare la massa efficace alla  $F$ .

### 4.2.2 Corrente e velocità nel sistema interagente.

Abbiamo definito la velocità  $\vec{v}_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_k^0}{\partial \vec{k}}$ . Se abbiamo un sistema non interagente la corrente è la stessa cosa della velocità. Se abbiamo un sistema interagente, possiamo dimostrare che  $\vec{v}_k$  non è la corrente del sistema. Il problema è che abbiamo questa eccitazione che si sta muovendo con velocità  $\vec{v}_k$ . L'interazione reagisce con le altre particelle, quando si muove si porta appresso un po' del resto, polarizzando il mezzo. Il numero che passa, non è solo quello associato al  $\vec{v}_k$ , ma anche quello che fa il contorno.

In realtà la corrente si ottiene:

$$\vec{J}_k = \vec{v}_k \left( 1 + \frac{1}{3} F_l^s \right)$$

Da cui si ottiene che, in approssimazione di Hartree-Fock, vale:

$$J_k = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

Nel caso invariante per traslazioni è semplice mostrare questa regola. Facciamo una piccola eccitazione dallo stato fondamentale di tutto il sistema (quello con particelle reali):

$$a_k^+ |\psi_H^0\rangle$$

Che ha come corrente:

$$\vec{J}_k = \frac{\vec{k}}{m}$$

Lui non è un autostato del sistema, ma devo mescolarlo con tutti gli altri stati. Poiché c'è l'invarianza traslazionale per ogni  $k$  distrutto c'è un  $k$  creato. Quindi il momento totale complessivamente è ancora  $\vec{k}$ . Applicare un hamiltoniana di interazione invariante per traslazione non cambia i momenti. Lo stato vero (che posso ottenere applicando  $H$  infinite volte) ha quindi lo stesso momento e corrente dello stato di partenza, elementare che abbiamo scritto. Quindi se abbiamo un sistema interagente la corrente è una quantità conservata se l'interazione è invariante per traslazione. Se abbiamo un reticolo ovviamente non è vero (in quel caso si conserva il quasimomento). Quindi la corrente dell'autostato del sistema è semplicemente  $\vec{k}/m$ , senza la massa efficace.

Daremo una dimostrazione formale di questo quando ricaveremo esplicitamente la formula della corrente.

### 4.2.3 Stabilità

A partire dal segno della compressibilità e delle osservabili che possiamo ricavare dalla teoria di Landau possiamo imporre alcune condizioni sulla stabilità del sistema: affinché un sistema sia stabile si può dimostrare che

$$F_l^{s,a} > -(2l + 1)$$

Questa sistema ci dice che questo oggetto è stabile o meno rispetto al ferromagnetismo, ma non rispetto al antiferromagnetismo<sup>3</sup>.

Se il sistema è stabile ogni variazione che posso pensare nel funzionale di Landau aumenta l'energia del sistema. Nei dati sperimentali nell'elio 3 in fase di Fermi, ha un aumento di massa pari da 3 a 5. La compressibilità è che il rapporto tra le compressibilità che viene circa 0.1 (quasi tutto un effetto di massa efficace). Il fattore di Enhancement del magnetismo è praticamente pari a 4, cioè il sistema a causa dell'interazione reagisce 4 volte di più.

#### Dimostrazione della compressibilità

$$\chi = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_{T=const} = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial \mu}$$

<sup>3</sup>L'antiferromagnetismo è un sistema in cui tutti gli spin sono alternati a coppie, per cui l'onda di spin ha un passo molto piccolo  $\pi/a$ , e altissima velocità.

$$\chi = -\frac{1}{V \frac{\partial P}{\partial V}}$$

Bisogna sfruttare il gran canonico:

$\mu$  è intensivo, quindi deve essere funzione di  $N$  e  $V$  tramite il loro rapporto, la densità:

$$P(V, N) = \bar{P}(\mu(T, \rho), T)$$

$$\frac{\partial P}{\partial V}(\mu(T, \rho), T) = -\frac{\partial P}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial \rho} \frac{N}{V^2}$$

$$-V \frac{\partial P}{\partial V} = \frac{\partial P}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial \rho} \rho$$

$$\chi = \frac{1}{\frac{\partial P}{\partial \mu} \rho \frac{\partial \mu}{\partial \rho}}$$

$$P = -\frac{\partial \Omega}{\partial V}$$

$$\frac{\partial P}{\partial \mu} = -\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu \partial V} = -\frac{\partial^2 \Omega}{\partial V \partial \mu} = \frac{\partial}{\partial V} N = \rho$$

$$\chi = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial \mu}$$

## Capitolo 5

# Distribuzione delle quasiparticelle

Fino ad adesso abbiamo studiato un sistema omogeneo, e quando mettevamo perturbazioni le variazioni imposte erano variazioni di tipo omogeneo. Imporre-  
mo adesso un caso in cui immaginiamo di mettere una perturbazione esterna che  
possa dipendere dallo spazio e dal tempo (ad esempio un potenziale esterno).  
Occorre utilizzare delle variazioni  $\delta n_k$  che siano funzione dello spazio:  $\delta n_k(r, t)$ .

Se introduciamo un potenziale oscillante il  $k$  non è più un buon numero  
quantico per il sistema. Tutto questo ha senso solo se la lunghezza d'onda del  
potenziale esterno  $\lambda$  è sufficientemente grande, in modo che in ciascun volume  
di quantizzazione il potenziale sia circa costante. Se vale questo  $k$  è un buon  
numero quantico per ciascun volume di quantizzazione, e si può introdurre un  
diverso  $\delta n_k$  per ciascun punto dello spazio.

Perché questa approssimazione sia buona la lunghezza associata al vettore  
d'onda di Fermi,  $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_f}$ , deve essere contenuta nel volume in cui è definito il  
 $\delta n_k$ : da cui la condizione che deve soddisfare il potenziale è quello che:

$$\lambda \gg \lambda_F$$

Studieremo sempre oggetti tale che  $q \ll k_F$ , la nostra perturbazione deve  
avere un vettore d'onda molto più piccolo dei nostri fermioni. A questo punto  
 $\delta n_K$  diventa il numero di occupazione per unità di volume, quest volume è molto  
più piccolo del singolo  $\lambda$ , ma molto più grande della scala atomica. Fatta questa  
approssimazione si può generalizzare l'espressione del funzionale di Landau a  
questo caso.

$$\delta E = \int d^3r \delta E(r, t)$$

$$\delta E(r, t) = \sum_{k\sigma} [\varepsilon_{k\sigma}^0 + U(r, \sigma)] \delta n_{k\sigma}(r, t) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'kk'} f_{\sigma\sigma'}(k, k') \delta n_{k'\sigma'}(r, t) \delta n_{k\sigma}(r, t)$$

Questo è corretto nel caso di forze a corto raggio. Nel caso di forze a raggio  
lungo come la forza coulombiana c'è un problema. Dovremmo mettere oggetti

che tengono conto delle densità in posizioni differenti. Invece di scrivere le interazioni a coppie, scriviamo che la singola particella interagisca con un termine di potenziale generato dalle altre particelle. Insieme al potenziale esterno bisogna aggiungere il potenziale interno che soddisfa l'equazione di Poisson:

$$\nabla^2 \varphi(n, t) = -4\pi e^2 \sum_{k\sigma} \delta n_{k\sigma}(r, t)$$

Il termine  $f_{\sigma\sigma'}(k, k')$  è lo stesso che conosciamo sempre a meno di un fattore dimensionale, infatti  $f$  è moltiplicato tra due densità, quindi  $f$  è un'energia moltiplicata per un volume. In questo caso con questa scelta di  $f$  si può tramutare in  $F$  in questo modo:

$$Nf \rightarrow F$$

Dove il  $V$  è incluso già in  $f$ .

## 5.1 Equazione di Boltzmann

Classicamente quando si scrive l'equazione di Boltzmann si descrive il numero di punti nello spazio delle fasi che hanno posizione  $r$  e impulso  $p$ . Classicamente scriviamo che:

$$\frac{d}{dt} n(k, r, t) = \frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla}_r n \cdot \vec{r} + \vec{\nabla}_p n \cdot \vec{p} = I$$

La derivata totale della nostra distribuzione cambia perché la nostra particella urta e va in un'altra posizione. Quindi a destra ci vuole il termine  $I$  detto integrale degli urti.

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial r}$$

Questa è l'equazione classica di Boltzmann.

C'è un problema: un volume nello spazio delle fasi si evolve come un liquido incomprimibile (Teorema di Liouville). Il teorema di Liouville si applica ad un volume nello spazio delle fasi  $\Gamma$ , in cui un punto è individuato dalle coordinate canoniche di tutte le particelle:  $r_1, r_2, r_n$ , e  $p_1, p_2, \dots, p_n$ .

In realtà stiamo descrivendo il sistema con un'hamiltoniana che dipende solo da  $p$  e  $r$ , non l'hamiltoniana vera del sistema. L'interazione tra le particelle è stata inserita nel termine aggiuntivo  $I$ .

Nello scrivere questa equazione, il nostro sistema è un sistema a  $n$  particelle. C'è una parte dell'hamiltoniana che non descrive effettivamente uno scattering, ma cambia debolmente il suo impulso, tutta la parte dell'interazione che fa cambiare sostanzialmente lo stato del sistema, è messo negli integrali degli urti.

Possiamo ripetere il conto per il caso classico applicandolo alle quasi-particelle:

$$n(p, r, t) = n_{k\sigma}(r, t)$$

La teoria di Landau ci permette di descrivere queste derivate in funzione della  $\varepsilon_{k\sigma}(r, t)$ .

La teoria di Boltzmann-Landau è una teoria di Boltzmann in cui l'hamiltoniana è sostituita dall'energia di quasi-particella.

$$\frac{dn_{k\sigma}}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \vec{v}_k \vec{\nabla}_r n_{k\sigma} + \vec{k} \vec{\nabla}_k n_{k\sigma} = I$$

$$\vec{v}_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{k\sigma}}{\partial k} \quad \dot{k} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{k\sigma}}{\partial r}$$

Queste sono le equazioni sostitutive. Possiamo riscrivere tutto quanto messo insieme:

$$\frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{\vec{\partial} \varepsilon}{\partial k} \vec{\nabla}_r n_{k\sigma} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \frac{\partial}{\partial k} n_{k\sigma} \right] = I$$

Questa equazione è altamente non lineare perché la  $\varepsilon$  a sua volta dipende dalla perturbazione. Ora però per temperature molto basse nel sistema di fermioni la  $I$  descrive il fatto che una quasiparticella di momento  $k$  decade e va a finire in un altro  $k$ . Questo  $I$  descrive i processi di decadimento delle quasiparticelle. A bassa temperatura però questo  $I$  è una quantità che tende a zero, ed è collegato all'inverso del tempo di vita delle quasi-particelle.

Ci sono alcuni fenomeni che richiedono una modellizzazione con una  $I \neq 0$ , tuttavia per il caso che stiamo studiando adesso possiamo tranquillamente prendere  $I = 0$ .

Possiamo semplificare un po' questa espressione prendendo la sua realizzazione lineare, che è più semplice da studiare. Tutta la non linearità deriva dai due prodotti di  $\varepsilon$  e  $n$ . Bisogna capire se esiste un termine semplicemente lineare nella perturbazione. Il primo termine è:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \vec{\nabla}_r n_{k\sigma}$$

In assenza di perturbazione il sistema è omogeneo, quindi il gradiente di  $n$  si annulla (il contributo di  $\vec{\nabla} n$  di grado più basso è al primo ordine, quindi basta prendere il contributo di ordine 0 in  $\varepsilon$ ). La derivata rispetto a  $\varepsilon$  ha un termine di ordine zero, che è proprio la velocità. Linearizzare questo termine significa sostituire il termine  $\partial_k \varepsilon_{k\sigma}$  con il termine:  $\partial_k \varepsilon_{k\sigma}^0$ . In questo modo abbiamo linearizzato.

Per il secondo termine:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial k}$$

Il  $\partial_r \varepsilon$  ha ordine zero nullo, mentre  $\partial_k n$  no. Quindi per linearizzare dobbiamo prendere l'ordine zero di  $\partial_k n$  ( $\partial_k n^0$ ) e il primo ordine di  $\partial_r \varepsilon$ . Questo perché  $\partial_r \varepsilon_{k\sigma}^0 = 0$ .

Possiamo riscrivere l'equazione come:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{v}_k \frac{\vec{\partial}}{\partial r} n_{k\sigma} + \delta(\varepsilon_{k\sigma}^0 - \varepsilon_f) \vec{v}_k \vec{\nabla}_r \varepsilon_{k\sigma} = I$$

Dove abbiamo fatto derivata composta

$$\partial_k n^0 = \partial_\varepsilon n^0 \partial_k \varepsilon$$

$$\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_{k\sigma}^0 + U(r, t) + \sum_{\sigma' k'} f_{\sigma' \sigma}(k, k') \delta n_{k' \sigma'}$$

$$\vec{\nabla}_r \varepsilon_{k\sigma} = \vec{\nabla}_r U(r, t) + \sum_{k'\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k, k') \vec{\nabla}_r \delta n_{k\sigma}$$

Questa è la nostra equazione di Boltzmann-Landau.

Si può andare a vedere se questa equazione è ragionevole, e soddisfa l'equazione di continuità.

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$$

$$\delta \rho = \sum_{k\sigma} \delta n_{k\sigma}$$

Ricordando che:

$$\vec{\nabla} \cdot (\alpha \vec{v}(r)) = \alpha \vec{\nabla} \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \alpha$$

Possiamo riscrivere l'equazione di continuità:

$$\begin{aligned} \vec{J}_{k\sigma} &= \vec{v}_k + \sum_{k'\sigma'} \delta(\varepsilon_{k'\sigma'} - \varepsilon_f) \vec{v}_k f_{\sigma\sigma'}(k, k') \\ \vec{J} &= \sum_{k\sigma} \vec{J}_{k\sigma} \delta n_{k\sigma} \end{aligned}$$

Dove i termini  $\sum_{k\sigma} I = 0$  perché il momento totale è nullo. Con un po' di conti si può dimostrare che:

$$\vec{J} = \sum_{k\sigma} \vec{v}_k \left( 1 + \frac{1}{3} F_1^s \right) \delta n_{k\sigma}$$

Questo è vero nella teoria di Landau, non abbiamo usato le approssimazioni della teoria di Hartree-Fock. (Il trucco l'abbiamo fatto grazie al cambiamento di indici).

## 5.2 Suono

Il suono è un'oscillazione di densità, un'eccitazione di densità che avviene a temperatura costante. Il problema del suono normale è che è strettamente importante che vi sia equilibrio termico. La frequenza del suono deve essere minore della frequenza degli urti. Il tempo dell'onda deve essere maggiore del tempo degli urti. In modo che il sistema sia sempre in equilibrio. Il suono è un'oscillazione interna del sistema, che si propaga senza perturbazione esterna.

Se vado a bassa temperatura ci aspettiamo che ci siano dei problemi, il tempo di equilibratura è sempre il tempo che diventa più lungo e il suono diventa più grave. Le interazioni a lungo raggio sono importanti, quindi sistemi carichi e sistemi neutri si comportano in modo differente. Il "suono zero" è una caratteristica dei sistemi non coulombiani, gli elettroni in un metallo hanno un altro tipo di suono detto plasmone che tiene in considerazione le interazioni coulombiane a lungo raggio.

La prima curva (Figura 5.1) che all'abbassarsi di  $T$  si alza si può spiegare dicendo che il tempo d'equilibrio diminuisce sempre di più (aumentano i tempi di scattering). Se guardiamo la velocità del suono vediamo che c'è una transizione nei due regimi (Figura 5.2)

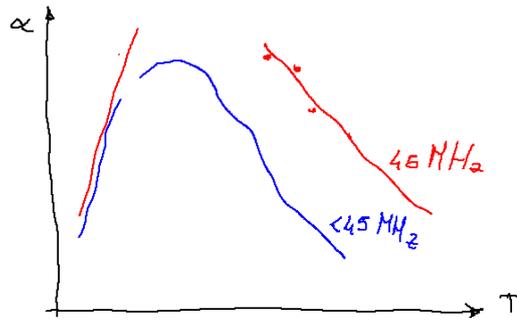


Figura 5.1: Curva di dispersione del suono in un materiale senza interazioni a lungo raggio

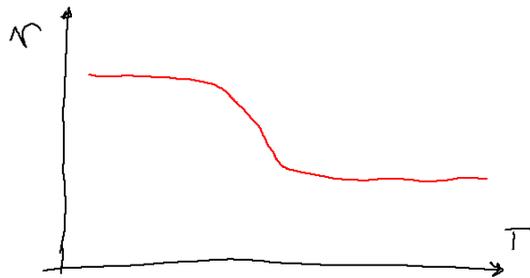


Figura 5.2: Curva della velocità del suono, transizione della velocità al variare della temperatura e suono "zero".

Nel suono allo zero assoluto, la forza che stabilisce l'equilibrio non è più data dagli urti. A bassa temperatura chi stabilisce l'equilibrio non è l'integrale degli urti  $I$  (che tende a zero) ma è l'interazione stessa che agisce come forza di richiamo.

Passiamo alle trasformate di Fourier in modo da avere un'equazione algebrica (Il suono avviene in assenza di perturbazione esterna, per cui mettiamo  $\nabla U = 0$ ).

$$\delta n_{k\sigma}(r, t) = \int dq d\omega e^{-i\omega t + iqr} \delta n_k(q, \omega)$$

$$-i\omega \delta n_{k\sigma}(q, \omega) + \vec{v}_k i q \delta n_{k\sigma}(q, \omega) + \delta(\varepsilon_{k\sigma}^0 - \varepsilon_f) \vec{v}_k i q \sum_{k'\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k, k') \delta n_{k'\sigma'}(q, \omega) = 0$$

$$(\vec{v}_k \cdot \vec{q} - \omega) \delta n_{k\sigma}(q, \omega) + \vec{v}_k \cdot \vec{q} \delta(\varepsilon_{k\sigma}^0 - \varepsilon_f) \cdot \sum_{k'\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k, k') \delta n_{k'\sigma'}(q, \omega) = 0$$

Questa è chiaramente un'equazione omogenea, ha una soluzione  $\delta n$  pari a zero. Però potrebbe ammettere anche un'autosoluzione, l'autosoluzione è il modo proprio per il sistema. Questa autosoluzione avverrà solo per una particolare relazione  $\omega(q)$ , che è la curva di dispersione, dalla quale si ricava l'espressione della velocità del suono. Prendiamo una deformazione della superficie di fermi:

$$\theta(k_f - k) \implies \theta(k_f + u(\vartheta, \varphi) - k)$$

Il nostro  $\delta n$  è dato:

$$\delta n = \theta(k_f - k) - \theta(k_f + u(\vartheta, \varphi) - k) \approx \delta(k_f - k) u(\theta, \varphi)$$

Non siamo obbligati ad usare la stessa variazione per spin  $\uparrow$  e spin  $\downarrow$ . La  $\delta$  fatta rispetto a  $k$  risulta scomoda, per cui trasformiamola in una  $\delta$  nelle energie:

$$\delta(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_f) = \frac{1}{\hbar v_f} \delta(k_f - k)$$

Dobbiamo trovare i modi normali per un sistema non carico, come l'elio 3:

$$(\vec{q} \cdot \vec{v}_1 - \omega) \delta n_k + \vec{q} \cdot \vec{v}_k \delta(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_F) \sum_{k'\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k, k') \delta n_{k'} = 0$$

$$\delta n_k = \delta(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_F) \hbar |v| u_\sigma(\hat{k})$$

Scrivendo tutto quello che otteniamo si ottiene:

$$(\vec{q} \cdot \vec{v}_k - \omega) u_\sigma(\hat{k}, \vec{q}, \omega) + \vec{q} \cdot \vec{v}_k \sum_{k'\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k, k') \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_f) u_{\sigma'}(\hat{k}', q, \omega) = 0$$

Introduciamo l'integrale in  $d\Omega/4\pi$ , in modo da esplicitare la parte angolare, la  $\delta$  si prota fuori dall'integrale angolare, la somma su  $k'$  della  $\delta$ . Poiché la somma su  $\sigma$  è esplicita è metà della densità degli stati. Questa densità degli stati moltiplicata per la  $f$  otteniamo la  $F$ :

$$(\vec{q} \cdot \vec{v}_k - \omega)u_\sigma(\hat{k}, \vec{q}, \omega) + \frac{\vec{q} \cdot \vec{v}_k}{2} \sum \int \frac{d\Omega}{4\pi} \cdot F_{\sigma\sigma'}(k, k')u_{\sigma'}(\hat{k}', \vec{q}, \omega)$$

Possiamo disaccoppiare le oscillazioni, dividiamo le oscillazione tra  $u_\uparrow + u_\downarrow$ , e quelle che riguardano  $u_\downarrow - u_\uparrow$ . In questo modo queste equazioni accoppiate per gli spin possono essere disaccoppiate prendendo gli spin simmetrici e antisimmetrici. Possiamo fare somma e sottrazione. Con questa rotazione degli spin si può diagonalizzare questa equazione.

Questo argomento è generale, e può sempre essere fatto per simmetrie invarianti sullo spin.

$$\begin{cases} u_\uparrow(\dots) + F_{\uparrow\uparrow}u_\uparrow + F_{\uparrow\downarrow}u_\downarrow \\ u_\downarrow(\dots) + F_{\downarrow\uparrow}u_\uparrow + F_{\downarrow\downarrow}u_\downarrow \end{cases}$$

Quando le sommo mi viene:

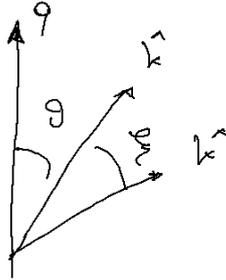
$$u_\uparrow + u_\downarrow + F^s u_\uparrow + F^s u_\downarrow = F^s u_s$$

$$(q \cdot v_k - \omega)u_s(\hat{k}, \vec{q}, \omega) + \vec{q} \cdot \vec{v}_k \int \frac{d\Omega}{4\pi} F^s(k, k')u_s(\hat{k}', q, \omega)$$

Se facessimo l'antisimmetrica sarà esattamente la stessa equazione. Studiamo solo la funzione simmetrica. Prendiamo  $\hat{q}$  equivalente alla direzione  $\hat{z}$ .

$$\vec{q} \cdot v_k = v_f q \cos \theta$$

$$(v_k q \cos \theta - \omega)u_s(\hat{k}, q, \omega) + qv_f \cos \theta \int \frac{d\Omega'}{4\pi} F^s(\cos \xi)u_s(\hat{k}', q, \omega) = 0$$



Introduciamo una variabile nuova:

$$s = \frac{\omega}{v_f q}$$

Quando troveremo la soluzione per un certo valore di  $s$  questo vuol dire che la soluzione c'è per un certo valore di  $\omega$  per  $sv_f$ , quindi  $s$  rappresenta la velocità del suono in unità di  $v_f$

$$(\cos \theta - s)u_s(q, \omega, \hat{k}) + \cos \theta \int \frac{d\Omega'}{4\pi} F^s(\cos \xi)u_s(\vec{k}, q, \omega) = 0$$

Per rendere questo integrale fattibile, facciamo l'approssimazione che il termine più grosso di tutte di queste sia la  $F_0$ , indipendente dall'angolo. In questo modo l'equazione si semplifica parecchio:

$$(\cos \theta - s)u_s(\hat{k}, q, \omega) + \cos \theta F_0^s \int \frac{d\Omega'}{4\pi} u_s(\vec{k}', q, \omega) = 0$$

Se abbiamo un'equazione matriciale

$$A\vec{v} = 0$$

ammette soluzione non banale solo se  $\det A = 0$ . Anche in questo caso possiamo introdurre un'equazione di autoconsistenza. L'idea è semplice. Tutto l'integrale è una costante, poiché è integrato su tutto  $u$ :

$$-c = F_0^s \int \frac{d\Omega'}{4\pi} u_s(\hat{k}', q, \omega)$$

Sostituendo nell'equazione otteniamo.

$$u_s(\hat{k}) = \frac{c \cos \theta}{\cos \theta - s}$$

$$-c = F_0^s \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \frac{c \cos \theta'}{\cos \theta' - s}$$

E questa equazione è di autocostistenza. Questa soluzione ha certamente  $c = 0$  (che non ci interessa). La soluzione in cui  $c \neq 0$  è quella interessante. Questa soluzione esiste solo se è soddisfatta la condizione:

$$-1 = F_0^s \int \frac{d \cos \theta'}{2} \frac{\cos \theta'}{\cos \theta' - s}$$

Questa uguaglianza è soddisfatta da un particolare valore di  $s$ . La nostra oscillazione dipende soltanto dal  $\cos \theta$ , non dipende da  $\varphi$ . Questo è conseguenza del fatto che abbiamo preso soltanto il termine  $F_0$ .

La soluzione non ci dice quanto vale  $c$ . Tuttavia questo è naturale, infatti in un sistema omogeneo la soluzione non banale è sempre determinata a meno di una costante moltiplicativa.

$$-1 = F_0^s \int_{-1}^1 \frac{dx}{2} \frac{x}{x - s}$$

Questa soluzione ha soluzione banale solo per  $|s| > 1$ , altrimenti l'integrale diverge.

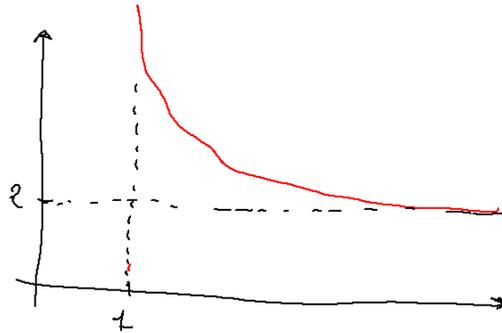
$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{2} \frac{x}{x - s} = 1 + \frac{s}{2} \ln \left( \frac{s-1}{s+1} \right)$$

$$-1 = \frac{F_0^s}{2} \left( 2 - s \ln \frac{s+1}{s-1} \right)$$

$$s \ln \frac{s+1}{s-1} = \frac{2}{F_0^s} + 2$$

Rintracciamo questa soluzione per via grafica

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \ln \frac{s+1}{s-1} = \ln \left( 1 + \frac{2}{s-1} \right) \sim \frac{2}{s-1} - \frac{1}{2} \left( \frac{2}{s-1} \right)^2 + \dots$$



C'è sempre soluzione quindi purché  $F_0^s$  sia un numero positivo. Per valori molto piccoli di  $F_0^s$  (con una debole interazione) la soluzione c'è per  $s = 1$ . Il suono tende ad avere la velocità pari alla velocità di fermi  $v_f$ .

Per grandi interazione  $F_0^s$  è molto grande, rimane il termine del secondo ordine nello sviluppo a  $s$  grandi:

$$\frac{1}{F_0^s} = \frac{1}{3} \frac{1}{s^2}$$

$$s = \sqrt{\frac{F_0^s}{3}}$$

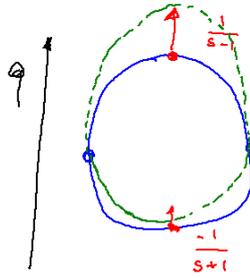
Il caso del suono normale ha una velocità che è pari a  $\frac{v_f}{\sqrt{3}}$ . In questo caso la velocità del suono è sempre maggiore della velocità del suono normale poiché  $s$  è sempre maggiore di 1. Il sistema di particelle non cariche soddisfa questa equazione. Le soluzioni armoniche sono soluzioni in  $u$  ( $u$  è la trasformata di fourier). Questa è un onda del tipo coseno di  $\omega t$ . Quindi la velocità media oscilla, se varia la densità in termini della superficie di fermi la variazione di densità genera oscillazioni nella superficie di fermi. Il modo normale è un modo in cui la superficie di fermi respira (si allarga e si stringe), e parimenti il suo baricentro si sposta un pochino, poiché la sua velocità media deve essere diversa da zero. Invece questo suono è differente. I due punti

La sfera di fermi diventa una pera, si schiaccia poiché i due vertici si muovono con differenti ampiezze:

$$u \sim \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta}$$

Vogliamo capire da dove esce fisicamente la condizione  $|s| > 1$ . Un sistema di fermi ha eccitazioni arbitrariamente piccole. In questa situazione dovremo mettere tutte le eccitazioni in modo da avere buca-particella.

$$\omega_q = \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k$$



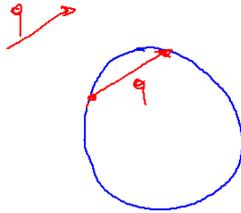
Questo è un modo collettivo, in cui tutte le quasiparticelle si organizzano.

$$\omega_q = \frac{1}{2} \frac{(k+q)^2}{m} - \frac{1}{2} \frac{k^2}{m}$$

Perché possa essere creata la buca  $k < k_f$  e  $k+q > k_f$ . Da cui dobbiamo trovare la forma di questo ensemble.

$$\omega_q = \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m} + \frac{q^2}{2m}$$

Dobbiamo trovare un modo in cui la variazione di energia deve essere nulla.



Esiste un  $q$  massimo per cui questo può essere fatto:  $q \leq 2k_f$ ,

Il massimo della curva si ha per  $\vec{k}_f$  parallelo a  $\vec{q}$

$$\omega = \frac{1}{m} kq + \frac{1}{2m} q^2$$

La figura è una parabola., la derivata in zero è la velocità di fermi. Lo stesso ragionamento può essere fatto per  $-k_f$  in modo che le eccitazioni hanno un minimo. (infatti a  $\omega = 0$  non possiamo avere eccitazioni per  $q > 2k_f$ )

Queste sono tutte eccitazioni caotiche. Per avere un'eccitazione coerente bisogna spostarle fuori dal continuo di eccitazioni. L'eccitazione del suono è:

$$\omega = sv_f q$$

Solo se  $s$  è maggiore di 1 questo suono non si distingue sul continuo, se la curva cade nel continuo non è possibile distinguere il suono dalle eccitazioni caotiche del sistema:

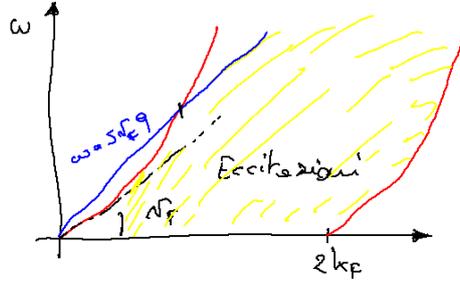


Figura 5.3: Curva delle eccitazioni massime, dove abbiamo imposto  $q$  parallelo al  $k$  di fermi. La velocità del suono si distingue dalle frequenze caotiche solo per  $s > 1$ , questa è la ragione fisica per cui  $|s| > 1$ .

### 5.2.1 Frequenza di plasma

Il suono zero è scritto per forze a corto raggio. Vogliamo andarci a mettere al posto di  $F_0^s$  l'interazione coulombiana. Questo non è strettamente corretto, perché l'equazione l'abbiamo ricavato per interazione a corto raggio. Tuttavia il risultato che otterremo è corretto (dimostreremo più avanti questa affermazione).

Andiamo a sostituire a  $F^s$  la trasformata di Fourier dell'interazione di coulomb:

$$F^s(q) = 4\pi \frac{e^2}{q^2} N(\varepsilon)$$

Questo significa mettere una  $F$  molto grande, il che implica  $s$  molto grande, prendiamo l'espansione del termine:

$$s \ln \frac{s+1}{s-1} = 2 + \frac{1}{F_0^s}$$

Sviluppiamo per grandi  $s$ :

$$2 + \frac{1}{3s^2} = 2 + \frac{1}{F_0^s}$$

$$s^2 = \frac{F_0^s}{3}$$

L'espressione per  $s$  è:

$$s^2 = \frac{\omega^2}{v_f^2 q^2}$$

$$\frac{\omega^2}{v_f^2 q^2} = \frac{4\pi e^2}{3q^2} N(\varepsilon_F)$$

$$\omega^2 = \frac{4\pi e^2 N(\varepsilon_f) v_F^2}{3}$$

Ci viene una soluzione in cui  $\omega$  non dipende da  $q$ . Questo può essere riscritto come:

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m}$$

Questa frequenza è detta frequenza di plasma, questa oscillazione non è più un suono, se il sistema è carico abbiamo un suono di plasma che parte da frequenza finita.

### 5.3 Conducibilità di Drude

$$\sigma_{drude} = \frac{ne^2\tau}{m} \frac{1}{1 - i\omega\tau}$$

Questa conducibilità può essere ricavata con modelli semiclassici, la particella viene accelerata da un campo elettrico, la particella ha degli urti dopo un tempo medio, da cui la velocità di drift la otteniamo:

$$mv_{dr} = eE\tau$$

$$j = \frac{e^2 n}{m} \tau E$$

La cosa più sofisticata è quella di scrivere l'equazione della velocità con un tempo di Damping:

$$\dot{v} = \frac{eE}{m} - \frac{v}{\tau}$$

Che risolta con le trasformate di Fourier ci viene:

$$j = nev = \sigma(\omega)E$$

Vogliamo ricavare la conducibilità usando l'equazione di Boltzmann:

$$-i\omega\delta n_{k\sigma} + i\vec{q} \cdot \vec{v}_k \delta n_{k\sigma} + \vec{v}_k \delta(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_f) \cdot \left[ \underbrace{i\vec{q}u(q)}_{\vec{\nabla}U = -e\vec{E}} + \dots \right] = -\frac{1}{\tau} (\delta n_k - \overline{\delta n_k})$$

Trascuriamo da questa espressione tutti i termini di interazione  $F$ . Per ricavare l'integrale dell'urto quello che viene fatto è spostare la particella in modo da avere una velocità isotropa. L'integrale degli urti lo scriviamo come:

$$I = -\frac{1}{\tau} (\delta n_k - \overline{\delta n_k})$$

Questo è l'effetto degli urti con le impurezze, cerca di stabilire in un tempo  $\tau$  caratteristica, una situazione in cui  $k$  è distribuito in modo isotropico, tenta di rendere tutto omogeneo (si minimizza per  $\delta n_k$  pari a quello mediato sugli angoli).

Prendiamo il limite per  $q \rightarrow 0$ . Questa equazione che rimane sembra incasinata da risolvere.

$$\left(\frac{1}{\tau} - i\omega\right) \delta n_{k\sigma} = \vec{v}_k \delta(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_F) e \vec{E} + \frac{1}{\tau} \overline{\delta n_k} \quad (5.1)$$

Adesso la cosa che ci interessa è quello di prendere la corrente. Se facciamo la somma:

$$\vec{j} = e \sum_{k\sigma} \vec{v}_k \delta n_{k\sigma}$$

Questo perché abbiamo assunto nulli tutti gli  $F$ . Se moltiplichiamo a destra la (5.1) per  $e v_k$  e sommiamo otteniamo:

$$\vec{J} = \frac{\sum_{k\sigma} e^2 \vec{v}_k}{\frac{1}{\tau} - i\omega} \left[ \vec{v}_k \delta(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_f) \vec{E} \right]$$

Il termine  $\vec{v}_k \overline{\delta n_k}$  è sicuramente nullo se sommato su tutte le particelle. Tra tutti i termini di questo sviluppo rimangono solo i termini quadratici nelle stesse componenti della velocità, poiché gli altri si annullano tutti:

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \frac{\sum_{k\sigma} e^2 v_k^2}{\frac{1}{\tau} - i\omega} \frac{1}{3} \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_k^0) E \\ \vec{J} &= \underbrace{\frac{\tau}{1 - i\tau\omega} e^2 \frac{v_f^2}{3} N(\varepsilon_f)}_{\sigma} \vec{E} \end{aligned}$$

È facile dimostrare che

$$\frac{v_f^2}{3} N(\varepsilon_f) = \frac{n}{m}$$

Da cui ci ritorna la conducibilità di Drude. Questa è una formula che può essere generalizzata in molti modi. Il vantaggio di questa trattazione rispetto a quella originale di Drude fenomenologica è che possiamo trattare oggetti più complicati, con un po' di fatica possiamo cambiare anche il termine di interazione, il termine degli impulsi.

## Capitolo 6

# Teoria dei campi

### 6.1 Funzioni di Green a particella singola

Il nostro sistema è un sistema la cui hamiltoniana è composta da una hamiltoniana non interagente  $H_0$  più un termine interagente  $H_I$ . Stiamo lavorando a temperatura nulla  $T = 0$ , e per comodità consideriamo d'ora in avanti  $\hbar = 1$ .

Si definisce la funzione di Green  $G(r, r'; t, t')$  L'oggetto che:

$$G(r, r'; t, t') = -i \langle \Phi_H | T [\tilde{\psi}(r, t) \tilde{\psi}^+(r', t')] | \Phi_H \rangle \quad \tilde{\psi}(r, t) = e^{iHt} \psi(r) e^{-iHt}$$

$$T[A(t)B(t')] = \begin{cases} A(t)B(t') & t > t' \\ \pm B(t')A(t) & t' > t \end{cases}$$

Dove gli operatori di campo evolvono nello schema di Heisenberg. Il  $\Phi_H$  è lo stato fondamentale reale del sistema. Questa  $G$  in realtà è funzione soltanto dalla differenza di  $t - t'$ . Se il sistema è invariante per traslazione la stessa cosa vale per i raggi di cui

$$G(r, t) = -i \langle \Phi_H | T [\tilde{\psi}(r, t) \tilde{\psi}^+(0, 0)] | \Phi_H \rangle$$

Fisicamente questo oggetto rappresenta la propagazione di particelle o buche. Supponiamo  $t > t'$ . Questo operatore crea una particella in  $r'$  all'istante  $t'$  nello stato fondamentale. Questa è proiettata con una particella creata al punto  $r$  al tempo  $t$ . Quindi rappresenta la propagazione di una particella da  $r'$  e  $t'$ .

Per tempi invertiti corrisponde a creare una buca al tempo  $t$  al punto  $r$  e vedere se la troviamo nel punto  $r'$  al tempo  $t'$ . Questo oggetto ci dà l'evoluzione delle particelle e delle buche. Questo oggetto è estremamente complicato.

Questa funzione di green è altamente discontinua nella variabile  $t - t'$  in  $0^\pm$ . Calcoliamo la  $G(t - t' = 0^+)$ :

$$G(r, r', t - t' = 0^+) = -i \langle \Phi_H | \tilde{\psi}(r) \tilde{\psi}^+(r') | \Phi_H \rangle$$

Dove ho potuto eliminare la dipendenza dal tempo. L'altro termine è:

$$G(r, r', t - t' = 0^-) = \pm i \langle \Phi_H | \psi^+(r') \psi(r) | \Phi_H \rangle$$

Se ne prendo la differenza ottengo anticommutatore (se sono fermioni) o commutatore (se sono bosoni), quindi otteniamo la  $\delta(r-r')$ , che è una funzione singolare.

Prendiamo il sistema invariante per traslazione, cerchiamo di capire cosa è la sua trasformata di Fourier:

$$G(k, t) = \int dr e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} G(r, t) = -i \langle \Phi_H | T [\tilde{a}_k(t) \tilde{a}_k^+(0)] | \Phi_H \rangle$$

La trasformata di Fourier della funzione di Green è in realtà la funzione di Green fatta sugli operatori di  $a_k$ . Questa affermazione può essere dimostrata esplicitando le espressioni per gli operatori di campo:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{ikr} a_k \quad \tilde{\psi}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{ikr} \tilde{a}_k$$

Andiamo a vedere come è fatta questa  $G$  nel caso non interagente.

$$G^0(k, t) = -i \langle \Phi_H^0 | T [a_k(t) a_k^+(0)] | \Phi_H^0 \rangle$$

Dove per convenzione la presenza del tilde implica l'evoluzione con l'hamiltoniana completa, l'assenza l'evoluzione con l'hamiltoniana non interagente.

$$a_k(t) = e^{iH_0 t} a_k e^{-iH_0 t}$$

Questo oggetto è molto semplice, l'evoluzione solo con  $H_0$  è banale. Non soltanto lo stato  $|\Phi_k^0\rangle$  è noto (mare di Fermi), ma anche l'evoluzione è facile:

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k$$

$$e^{it \sum_{k'} \varepsilon_{k'} a_{k'}^+ a_{k'}} a_k e^{-it \sum_{k''} \varepsilon_{k''} a_{k''}^+ a_{k''}}$$

Tutti gli  $a_k''$  commutano tra loro, quelli con  $k'' \neq k$  posso portarli a sinistra e mi si cancellano tutti, rimangono solo il  $k''$  uguale a  $k$ .

$$e^{i\varepsilon_k a_k^+ a_k t} a_k e^{-i\varepsilon_k a_k^+ a_k t}$$

Questo si applica su un certo stato. L'operatore più a destra mi conta  $n$  volte la particella con impulso  $k$ , poi applichiamo  $a_k$  distruggendo la particella, quando lo ricontiamo a sinistra la troviamo  $n-1$  volte.

$$e^{-i\varepsilon_k t} a_k$$

$$a_k(t) = e^{-i\varepsilon_k t} a_k$$

Abbiamo trovato l'espressione dell'evoluzione di  $a_k$  una fase numerica. Se  $H$  fosse stato l'hamiltoniana completa l'evoluzione sarebbe stato un casino.

$$G^0(k, t) = -i\theta(t) e^{-i\varepsilon_k t} \underbrace{\langle \Phi_k^0 | a_k a_k^+ | \Phi_k^0 \rangle}_{(1-n_k^0)=\theta(k-k_f)} + i\theta(-t) e^{-i\varepsilon_k t} \underbrace{\langle \Phi_k^0 | a_k^+ a_k | \Phi_k^0 \rangle}_{\theta(k_f-k)}$$

Andiamo a fare la trasformata di Fourier:

$$G^0(k, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G^0(k, t)$$

$$G^0(k, \omega) = -i \int_0^{\infty} e^{i(\omega - \varepsilon_k)t} \theta(k - k_f) + i \int_{-\infty}^0 e^{i(\omega - \varepsilon_f)t} \theta(k_f - k)$$

$$= \frac{\theta(k - k_f)}{\omega + i0^+ - \varepsilon_k} + \frac{\theta(k_f - k)}{\omega - i0^+ - \varepsilon_k}$$

Questo può essere riscritto in modo più compatto:

$$\frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i0^+ \text{sign}(k - k_f)}$$

Stiamo facendo la trasformata di Fourier la  $\theta$  di Heviside:

$$\int_0^{\infty} e^{i\omega t} \theta(t) = \left( \frac{1}{i\omega} e^{i\omega t} \right)_0^{\infty} = -\frac{1}{i(\omega + i0^+)}$$

Dimostriamo che antitrasformando

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega t} \frac{1}{i(\omega + i0^+)}$$

Questo integrale si fa applicando la regola dei residui. Supponiamo che  $t < 0$ : L'arco sui numeri complessi mi si annulla se giro sopra. Poiché l'unico residuo si trova sotto, non ho residui

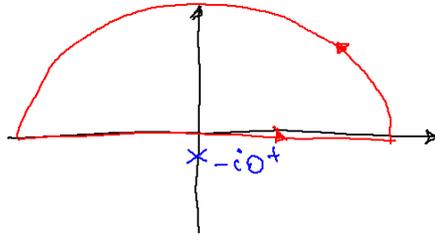


Figura 6.1: Percorso di integrazione per  $t < 0$ . Il percorso non include il polo.

Quindi solo quando giro sotto (per  $t > 0$ ) che mi da 1.

$$G^0(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i0^+ \text{sign}(k - k_f)}$$

Nella funzione di Green non interagente i poli si trovano dove mostrato in Figura 6.3

La  $G$  vera ha esattamente la stessa proprietà: i poli si trovano o sotto l'asse reale per  $\omega > \varepsilon_f$  o poli con parti immaginarie positive  $\omega < \varepsilon_f$ . Questi poli potrebbero essere così densi da essere un taglio.

Questo mi dice informazioni molto importanti per la  $G$ , ossia che ci sono regioni che conosciamo che sono sempre analitiche.

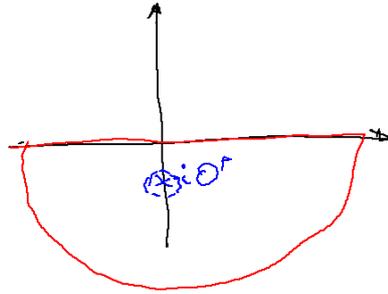


Figura 6.2: Percorso di integrazione per  $t > 0$ . Il percorso racchiude il polo.

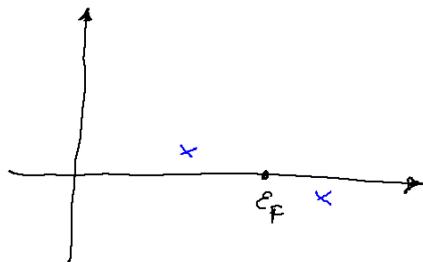


Figura 6.3: Polo della funzione di Green.

### 6.1.1 Rappresentazione di Lenmhan

Supponiamo di conoscere tutto del nostro sistema:

$$G(k, t) = -i\theta(t) \langle \Phi_H | e^{iHt} a_k e^{-iHt} a_k^+ | \Phi_h \rangle + i\theta(-t) \langle \Phi_h | a_k^+ e^{iHt} a_k e^{-iHt} | \Phi_H \rangle$$

Inseriamo un set completo di stati tra  $a^+$  e gli evolutori.

$$-i\theta(t) \sum_s e^{i(E_0 - E_s)t} \underbrace{\langle \Phi_h | a_k | s \rangle \langle s | a_k^+ | \Phi_H \rangle}_{|(a_k)_{0s}|^2} + \sum_{s'} i\theta(-t) e^{-i(E_0 - E_{s'})t} \underbrace{\langle \Phi_H | a_k^+ | s' \rangle \langle s' | a_k | \Phi_H \rangle}_{|(a_k)_{s'0}|^2}$$

In linea di principio abbiamo fatto una somma su un set completo di stati  $s$  e  $s'$ , in realtà però non sopravvivono tutti. Degli  $s$  sopravvivono solo quelli con particelle  $N + 1$ , mentre gli  $s'$  sono stati a  $N - 1$  particelle.

$$E_0(N) - E_s(N + 1) = \overbrace{E_0(N) - E_0(N + 1)}^{-\mu} + \underbrace{E_0(N + 1) - E_s(N + 1)}_{-\xi_s}$$

La prima è la definizione di potenziale chimico (differenza di energia tra stati fondamentale). Ora sono certo che  $\xi_s$  è positivo (infatti è differenza tra stato  $s$  generico e stato fondamentale con stesso numero di particelle).

La stessa cosa può essere fatta sull'altro termine:

$$E_0(N) - E_{s'}(N - 1) = \overbrace{E_0(N) - E_0(N - 1)}^{\mu} + \underbrace{E_0(N - 1) - E_{s'}(N - 1)}_{-\xi_{s'}}$$

$$-i\theta(t) \sum_s e^{-it(\mu + \xi_s)} |a_{k0s}|^2 + e^{-it(\mu - \xi_{s'})} |a_{ks'0}|^2$$

Adesso trasformiamo secondo Fourier:

$$G(k, \omega) = \sum_s \frac{|a_{k0s}|^2}{\omega - (\mu + \xi_s) + i0^+} + \sum_{s'} \frac{|a_{ks'0}|^2}{\omega - (\mu - \xi_{s'}) - i0^+}$$

Sia  $\xi_s$  che  $\xi_{s'}$  sono due numeri positivi, questo ci permette di dire che il polo sotto l'asse reale proviene dal primo termine, che sono tutti a  $\omega > \mu$ , mentre l'altro termine (poli sopra l'asse reale) si trovano per  $\omega < \mu$ .

La funzione di Green può essere scritta come:

$$G(k, \omega) = \sum_s \frac{|(a_k)_{0s}|^2}{\omega - \mu - \xi_s + i0^+} + \sum_{s'} \frac{|(a_k)_{s'0}|^2}{\omega - \mu + \xi_{s'} - i0^+}$$

Nel sistema interagente in realtà i poli sono rappresentati da un intero spettro di energia. Questo perché se creo uno stato con  $a^+$  a partire dallo stato non interagente vado in un autostato dell'energia, mentre se lo faccio sullo stato interagente non vado su un autostato e quindi ho una funzione continua dell'energia.

$$A(E, k) = \sum_s |(a_k)_{0s}|^2 \delta(E - \xi_s) \quad B(E, k) = \sum_{s'} |(a_k)_{s'0}|^2 \delta(E - \xi_{s'})$$

Possiamo scrivere la  $G$  in questo modo:

$$G(k, \omega) = \int_0^\infty dE \frac{A(E, k)}{\omega - \mu - E + i0^+} + \int_0^\infty dE \frac{B(E, k)}{\omega - \mu + E - i0^+}$$

Queste  $A$  e queste  $B$  ci danno la rappresentazione spettrale del nostro problema. L'integrale parte da zero perché la  $\xi$  è definita positiva.

Nel sistema non interagente questo  $A$  e  $B$  diventano semplicemente una delta:

$$A_0(E, k) = \begin{cases} \delta(E + \mu - \varepsilon_k) & k > k_f \\ 0 & k < k_f \end{cases}$$

E la  $B$  di conseguenza. Se prendiamo l'integrale:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dE [A(E, k) + B(E, k)] &= \sum_s |(a_k)_{0s}|^2 + \sum_{s'} |(a_k)_{s'0}|^2 \\ &= \sum_{s, s'} \langle 0 | a_k | s \rangle \langle s | a_k^\dagger | 0 \rangle + \langle 0 | a_k^\dagger | s' \rangle \langle s' | a_k | 0 \rangle \\ &= \langle \psi_H | a_k a_k^\dagger | \psi_H \rangle + \langle \psi_H | a_k^\dagger a_k | \psi_H \rangle = 1 \\ \int_0^\infty dE [A(E, k) + B(E, k)] &= 1 \end{aligned}$$

Questo vuol dire che la somma del peso delle energie che intervengono in questo processo sia sempre pari a 1.

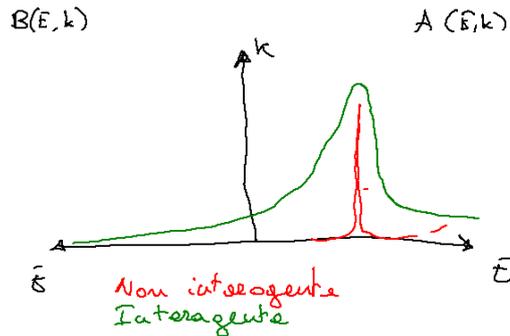


Figura 6.4: Confronto tra  $A$  e  $B$  nel caso interagente e in quello non interagente.

Nel sistema interagente otteniamo un andamento Lorentziano.

$$\delta(E - (\varepsilon_k - \mu)) \implies \frac{\pi\gamma}{(\omega - a)^2 + \gamma^2}$$

Il polo sarà ora allargato con una larghezza di quasiparticella  $\gamma$ . Questo oggetto è allargato per  $k$  lontano da  $k_f$ , questo  $\gamma_k$  rappresenta l'inverso della vita media della quasiparticella.

Questo perché quando il sistema è interagente il termine  $a_k^+ |\Phi\rangle$  non è più un autostato del sistema non interagente, quindi è composto da un set infinito di autostati, e questo dipende dal fatto che in realtà è un oggetto che decade.

Se scriviamo la funzione esplicitando un fattore moltiplicativo  $a$ .

$$\frac{\pi\gamma_k a}{(\omega - \xi_k^{qp})^2 + \gamma_k^2}$$

Se  $a$  fosse 1 l'integrale sarebbe 1. In realtà esiste sempre un fondo costante, quindi dobbiamo pesare la lorentziana con un coefficiente  $a < 1$ :

$$\frac{\pi\gamma_k a}{(E - \xi_k^{qp})^2 + \gamma_k^2} + \text{Rest}$$

Questo può essere calcolato facendo la teoria perturbativa. Quando ci veniva un solo polo nel caso non interagente perché avevamo da fare la trasformata di Fourier del termine:

$$e^{-i(\varepsilon_k)t}$$

Se ci fosse un termine immaginario:

$$e^{-i\varepsilon_k - i\gamma t}$$

Questo oggetto descrive un'oscillazione che decade, quindi nel tempo la particella decade e si disperde nel mare di fermi. Se  $k$  è prossimo a  $k_f$ :

$$G(k, \omega) = \frac{a}{\omega - \varepsilon_k^{qp} \pm i0^+} + \text{Rest}$$

Questo  $a$  ha un significato importante, se questa è la funzione di green, poiché possiamo ricavare il valore:

$$\langle \psi_H | a_k^+ a_k | \psi_H \rangle = -iG(k, 0^-)$$

Calcoliamolo esplicitamente.

$$-i \int \frac{d\omega}{2\pi} G(k, \omega) e^{-i\omega 0^-}$$

Il resto è una funzione smooth, che non ha singolarità mentre la prima parte ci da una parte singolare:

$$\begin{cases} -ia \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega 0^-} \frac{1}{\omega - \varepsilon_k^{qp} + i0^+} & k > k_f \\ -ia \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega 0^-} \frac{1}{\omega - \varepsilon_k^{qp} - i0^+} & k < k_f \end{cases}$$

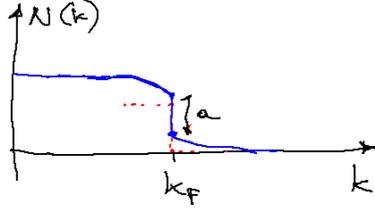
Questo integrale lo devo fare sui percorsi chiusi:

$$\begin{aligned} \omega &= \omega' + i\omega'' \\ e^{i\omega' + 0^- \omega''} \end{aligned}$$

Possiamo chiudere l'integrale di sopra.

$$\frac{-ia2\pi i}{2\pi} \text{Res}$$

Per  $k > k_f$  non ci sono poli, quindi questo contributo singolare ci da zero, per  $k < k_f$  mi da come contributo  $a$  in totale:



Il salto è dato dalla parte singolare, ed è pari ad  $a$  che è un numero minore di 1. L'altro termine è un contributo smooth, la forma di quel contributo può essere fatta usando senso fisico. Questo è un andamento molto qualitativo, quindi preso un modello specifico queste code possono essere molto differenti.

$$G(r, r', t, t') = -i \langle \Phi_H | T [\tilde{\psi}(r, t), \tilde{\psi}^+(r', t')] | \Phi_H \rangle$$

I poli di questa funzione sono allargati con residuo  $a$  che ci da il peso della particella, più un resto.

La parte in  $B$  è in realtà è misurata. Posso fare una fotoemissione, misurando  $K$  ed energia dell'elettrone uscente posso fare un'analisi dell'elettrone di partenza. Nel sistema interagente si misura effettivamente. Questa ampiezza può essere studiato o meno, è misurabile. Questo su un metallo normale vale benissimo. Se la si fa sui cuprati superconduttori, questo si restringe con una legge diversa, va a zero linearmente con  $\xi$ , Questa fase metallica ha quindi proprietà anomala rispetto al liquido normale di fermi.

Quando faccio un'eccitazione ottengo:

$$a_k^+ |\psi_H\rangle = a^{\frac{1}{2}} |\psi_{\text{metastabile}}\rangle + \sum \text{Resto}$$

La lorentziana rappresenta la quasi particella, però c'è sempre un background che non è mai nulla. Il background è generato dal fatto che creando una particella abbiamo anche stati che hanno un'energia molto lontana dall'energia che sto eccitando.

$$G(k, \omega) = \int_0^\infty dE \frac{A(E, k)}{\omega - E - \mu + i0^+} + \int_0^\infty dE \frac{B(E, k)}{\omega + E - \mu - i0^+}$$

Ansitutto questi  $A$  e questi  $B$  possiamo esprimerli attraverso la  $G$  stessa in modo molto elementare. Supponiamo  $\omega > \mu$ . Allora il termine integrato su  $B$  è sicuramente reale (infatti non ho mai singolarità del denominatore). Mentre

in  $A$  c'è un problema, poiché abbiamo una singolarità. Se abbiamo un integrale di una singolarità, la cosa che si fa è mettersi intorno alla singolarità:

$$\int_{-\infty}^{a-\varepsilon_1} \frac{dx}{x-a} + \int_{a+\varepsilon_2}^{\infty} \frac{dx}{x-a}$$

L'integrale è ben definito se esistono separatamente i due termini. Se il limite separato non esiste si fa l'integrale come parte principale, ossia prendiamo i due limiti destro e sinistro esattamente uguale. Per fare questo integrale si può deformare un po' il cammino passando sopra la singolarità. L'integrale di patenza diventa quello per cui ci avviciniamo con distanza  $\epsilon$  a sinistra e epsilon a destra. Questo termine ci da mezzo residuo (col segno invertito perché si gira in senso opposto):

$$\int \frac{F(x)}{x-a \pm i0^+} = \int \left[ \frac{F(x)}{x-a} \mp i\pi\delta(x-a) \right]$$

Questa formula può essere usata:

$$\begin{aligned} & \omega - \mu > 0 \\ & \int_0^{\infty} \frac{dEA}{\omega - E - \mu} - i\pi \int_0^{\infty} dEA(E, k)\delta(\omega - E - \mu) \\ G(k, \omega) = & \int_0^{\infty} \frac{dEA(E, k)}{\omega - E - \mu} + \int_0^{\infty} \frac{dEB(E, k)}{\omega + E - \mu} - i\pi A(\omega - \mu, k) \end{aligned}$$

Da cui abbiamo che  $A(\omega - \mu, k)$  è la parte immaginaria della funzione  $G$ . Quindi la componente spettrale che abbiamo aggiunto corrisponde direttamente ad una proprietà matematica della funzione di Green.

Se invece facciamo  $\omega < \mu$  abbiamo che la parte immaginaria della  $G$  corrisponde a:

$$\text{Im}G = \pi B(\mu - \omega, k) \quad \omega < \mu$$

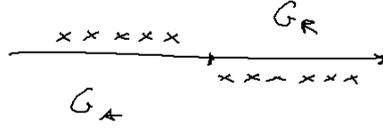
$A$  e  $B$  sono connesse con le parti immaginarie della funzione di Green stessa. Chiamando  $G''$  la parte immaginaria di  $G$  otteniamo che:

$$G(\omega, k) = - \int_0^{\infty} \frac{dE\pi G''(E + \mu)}{\omega - E - \mu + i0^+} + \int_0^{\infty} \frac{\pi G''(-E + \mu, k)dE}{\omega + E - \mu - i0^+}$$

Andiamo ad affrontare il problema della continuazione analitica.

### 6.1.2 Continuazione analitica delle funzioni di Green

Se abbiamo una funzione  $F(z)$  analitica, possiamo trovare una funzione analitica in tutto un intorno in cui la  $F(z)$  è analitica tale che  $G(z) = F(z)$  nei punti in cui la  $F$  è analitica. La cosa che si dimostra è che la continuazione analitica è sempre unica. Esiste una sola funzione. Immaginiamo che esistano due funzioni analitiche  $G_1$  e  $G$ , definiamo la funzione:  $G_1 - G$ . Questa è nulla su una linea. Ma l'unica funzione analitica che si annulla su una linea è la funzione identicamente nulla. Possimo fare una funzione analitica della funzione di Green, ovviamente a causa delle discontinuità della funzione possiamo fare solo



due continuazioni analitica, una è analitica di sopra  $G_r$ , l'altra è analitica nel semipiano inferiore  $G_a$ :

Cerchiamo di ricavare analiticamente queste funzioni. Prendiamo la funzione in cui c'è più da tutti e due i poli:

$$G(\omega) = \int_0^\infty \frac{A(E, k)}{\omega - E - \mu + i0^+} + \int_0^\infty \frac{B(E, k)}{\omega + E - \mu + i0^+}$$

Questa è esattamente la funzione di prima sulla riga, quindi per  $\omega > \mu$  il secondo termine non ha alcuna singolarità. In questo modo abbiamo una funzione che è analitica nel semipiano inferiore. Questa è proprio la  $G_r$ . Ovviamente la  $G_a$  è quella con tutti e due i poli con segno meno:

$$\begin{aligned} G_r &= G & \omega > \mu \\ G_r &= G^* & \omega < \mu \end{aligned}$$

La  $G_r$  per  $\omega < \mu$  ha stessa parte reale (infatti ho cambiato segno del polo) e parte immaginaria opposta, per cui è proprio il complesso coniugato.

$$G_r = -i\theta(t) \langle \{ \tilde{a}_k(t), \tilde{a}_k^\dagger(0) \} \rangle$$

Questo è ottenuto dal fatto che abbiamo cambiato il segno alla  $i$  che mi da entrambe le  $\theta$  con segno positivo, lo stesso vale per la  $G_a$ , con la  $\theta(-t)$ .

## 6.2 Rappresentazione di interazione

Una difficoltà è dovuta al fatto di calcolare l'evolvente temporale alla Haisemberg, che è molto complicato, invece se andiamo in schema di interazione, l'evoluzione con  $H_0$  è molto più semplice nello spazio  $k$ . L'altro problema è che lo stato fondamentale  $\phi_H$  non è noto.

Per risolvere questi problemi si usa lo schema di interazione. Nella rappresentazione di Schrödinger l'equazione che determina lo stato è:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_s(t) = H \Phi_s$$

Che si risolve:

$$\Phi_s(t) = e^{-iHt} \Phi_s(0)$$

Si introduce la rappresentazione di Heisemberg trasferendo la parte di evoluzione temporale all'interno degli operatori. Quindi è l'operatore che si evolve nel tempo:

$$\langle \Phi_H | \underbrace{e^{iHt} F e^{-iHt}}_{F(t)} | \Phi_H \rangle$$

In questo contesto quindi l'operatore è dipendente dal tempo, mentre lo stato rimane fisso. L'equazione che devono soddisfare gli operatori è la seguente:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = i [H, F]$$

Lo schema di interazione si ottiene moltiplicando gli stati per il valore:

$$\Phi_i(t) = e^{iH_0 t} \Phi_s(t)$$

$$F(t) = e^{iH_0 t} F e^{-iH_0 t}$$

Adesso con questa trasformazione la  $\Phi_s$  dipende dal tempo. Ricordiamo che la nostra hamiltoniana è composta da due termini:

$$H = H_0 + H_i$$

Adesso andiamo a calcolare che equazione deve soddisfare la funzione d'onda nello schema di interazione:

$$\Phi_s(t) = e^{-iH(t-t_0)} \Phi_s(t_0) \quad \Phi_I(t) = e^{iH_0 t} \Phi_s(t)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_I(t) = -H_0 \Phi_I + e^{iH_0 t} H \Phi_s(t)$$

$$i \frac{\partial \Phi_I(t)}{\partial t} = -H_0 \Phi_I + (H_0 + H_I(t)) \Phi_I$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_I(t) = H_I(t) \Phi_I(t)$$

Lo stato in rappresentazione di interazione si evolve con l'hamiltoniana di interazione. La soluzione di questa equazione la andremo a trovare. Esiste una soluzione formale che possiamo trovare immediatamente. Possiamo scrivere che:

$$\Phi_I(t) = e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} \Phi_s(t_0)$$

$$\Phi_I(t) = e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0} \Phi_i(t_0)$$

Questa formalmente è l'evoluzione dell'evoluzione, Il propagatore di questo oggetto è dato dalla matrice  $S$ :

$$S(t, t_0) = e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0}$$

Questa è una scrittura formale che è utile per cercare proprietà di questa matrice  $S$ , tuttavia è molto scomoda per fare i conti in pratica. Se scriviamo un operatore evoluto alla Heisemberg otteniamo che:

$$\tilde{F}(t) = e^{iHt} e^{-iH_0t} \underbrace{e^{iH_0t} F e^{-iH_0t}}_{F(t)} e^{iH_0t} e^{-iHt}$$

Sfruttando la scrittura formale di  $S$  notiamo subito che:

$$\tilde{F}(t) = S(0, t) F(t) S(t, 0)$$

Quindi la matrice  $S$  permette di passare da operatori che evolvono nello schema di interazione allo schema di Heisenberg.

Possiamo dare una soluzione particolare a questa equazione:

$$\Phi_I(t) = e^{-i \int_0^t H_I(t') dt'} \Phi_I(0)$$

Questa sarebbe la soluzione corretta dell'equazione se l'equazione differenziale fosse fatta tra funzioni, in realtà questi sono operatori. Poiché gli operatori sono definiti dal loro sviluppo in serie, sviluppiamo in serie la soluzione formale.

$$\Phi_I(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i)^n \int_0^t dt_1 H_I(t_1) \int_0^{t_1} dt_2 H_I(t_2) \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n H_I(t_n) \Phi_I(0)$$

Se facciamo la derivata rispetto al tempo di questa roba (per vedere se effettivamente soddisfa l'equazione differenziale, ci accorgiamo di un problema. Ciascuna derivata mi dà un  $H_I(t)$  (in totale sono  $n$ ). Se potessi portare questo  $H_I(t)$  davanti a tutti ho  $n - 1$  integrali, quindi ricostruisco la stessa serie di prima con un  $H_I$  davanti (l'equazione differenziale originale).

Tuttavia questo è sbagliato poiché le  $H_I$  non commutano, quindi non può essere messo in evidenza davanti a tutto.

Quindi questa non è la soluzione corretta. Trasformiamo questa equazione da un'equazione differenziale ad un'equazione integrale:

$$\Phi_I(t) - \Phi_I(0) = -i \int_0^t H_I(t') \Phi_I(t') dt'$$

Assumiamo che ci sia un parametro in  $H_I$  e troviamo questa soluzione sfruttando questo parametro. L'ordine zero della nostra  $\Phi_I$  è banale:

$$\Phi_I = \Phi_I^{(0)} + \Phi_I^{(1)} + \Phi_I^{(2)} + \dots$$

$$\Phi_I^{(0)}(t) = \Phi_I(0)$$

Andiamo a cercare il termine successivo, di ordine 1. Questo si fa mettendo nella parte destra la soluzione di ordine zero:

$$\Phi_I^{(1)}(t) = -i \int_0^t H_I(t') \Phi_I(0) dt'$$

La soluzione di ordine due è quella in cui andiamo a sostituire il termine 1 nell'equazione:

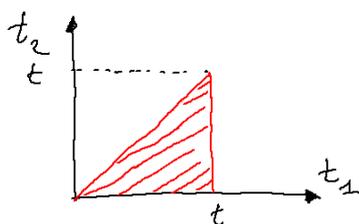
$$\Phi_I^{(2)}(t) = (-i)^2 \int_0^t H_I(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 H_I(t_2) \Phi_I(0)$$

E così via, il termine di ordine  $n$  sarà direttamente:

$$\Phi^{(2)}(t) = (-i)^n \int_0^t dt_1 H_I(t_1) \int_0^{t_1} dt_2 H_I(t_2) \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n H_I(t_n) \Phi(0)$$

$$S(t, 0) = \sum_n (-i)^n \int_0^t dt_1 H_I(t_1) \int_0^{t_1} dt_2 H_I(t_2) \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n H_I(t_n)$$

Questo oggetto è incasinatissimo, infatti il dominio di integrazione non è affatto regolare. Ad esempio prendendo solo le prime due variabili di integrazione possiamo graficarlo sul piano:



Si può modificare ad hoc la formula in modo da estendere l'integrale su tutto il quadrato. Prendiamo esplicitamente il secondo termine dello sviluppo e simmetriziamolo.

$$\Phi^{(2)}(t) = \frac{(-i)^2}{2} \left[ \int_0^t dt_1 H_I(t_1) \int_0^{t_1} dt_2 H_I(t_2) + \int_0^t dt_2 H_I(t_2) \int_0^{t_2} dt_1 H_I(t_1) \right]$$

Ora se guardiamo i due domini di integrazione la seconda zona è il triangolo complementare al quadrato. Quindi posso scriverlo come un unico integrale su tutto il rettangolo. In entrambi i domini la  $H$  che agisce per prima è quella nel tempo più lontano. Posso costruire il giusto integrando tramite il  $T$  prodotto, in questo modo l'ordinamento temporale è corretto e i due termini sono esattamente identici.

$$\Phi^{(2)} = \frac{(-i)^2}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 T[H_I(t_1), H_I(t_2)]$$

Questo stesso discorso può essere esteso a tutti i termini:

$$S(t, 0) = \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} T \int_0^t dt_1 H_I(t_1) \int_0^t dt_2 H_I(t_2) \cdots \int_0^t dt_n H_I(t_n)$$

Riscrivendo questa serie come un esponenziale troviamo:

$$S(t, t_0) = T e^{-i \int_0^t H_I(t_1) dt_1}$$

Questa è la nostra soluzione perturbativa.

Applichiamo questa soluzione al quello che stavamo studiando.

### 6.3 Funzioni di Green nello schema di interazione

Prendiamo le funzioni di Green.

$$\langle \Phi_H | T \tilde{A}(t) \tilde{B}(t') | \Phi_H \rangle = \langle \Phi_H | T S(0, t) A S(t, 0) S(0, t') B S(t', 0) | \Phi_H \rangle$$

Riscrivendole nello schema di interazione:

$$\langle \Phi_I(t_1) | T S(t, 0) S(0, t) A S(t, 0) S(0, t') B(t') S(t', 0) S(0, t_0) | \Phi(t_0) \rangle$$

Sia ora

$$t_1 > t > t' > t_0 > 0$$

$$\langle \Phi_I(t_1) | S(t_1, t) A(t) S(t, t') B(t') S(t', t_0) | \Phi_I(t_0) \rangle$$

Utilizzando il  $T$  prodotto:

$$\langle \Phi_I(t_1) | T e^{-i \int_{t_0}^{t_1} H_I(t'') dt''} A(t) B(t') | \Phi_I(t_0) \rangle$$

La matrice  $S$  che dovremo mettere in tutti i singoli pezzetti la facciamo apparire davanti a tutto. Se mettiamo il  $T$  prodotto davanti a tutto i tempi che vengono prima sono la parte dell'esponenziale che ha tempi minori (da  $t_0$  a  $t'$ ), ossia  $S(t', t_0)$ , poi agisce  $B(t')$ , la parte dell'esponenziale con tempi compresi tra  $t$  e  $t'$ , ovvero  $S(t, t')$ , poi agisce  $A(t)$  e quindi la parte rimanente dell'esponenziale:  $S(t_1, t)$ . In questa scrittura compatta abbiamo ricostruito esattamente il termine che volevamo.

Abbiamo ancora qualche problema. Abbiamo necessità di un ipotesi adiabatica a temperatura nulla. Dobbiamo studiare una nostra  $H$ :

$$H_\varepsilon = H_0 + e^{-\varepsilon|t|} H_I$$

In questo modo per  $t$  che va a  $t \rightarrow \pm\infty$  il termine di interazione sparisce. La nostra volontà è quella di studiare il limite per  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

Il vantaggio di aver introdotto questa accensione è quello di poter fare l'assunzione:

$$|\psi(-\infty)\rangle = |\psi_0\rangle$$

Quindi a meno infinito il sistema diventa lo stato fondamentale non interagente, il mare di fermi che conosciamo molto bene e possiamo studiare. Stiamo assumendo come l'accensione adiabatica dell'interazione sullo stato non interagente. Allo stesso modo possiamo prendere  $t_1$  pari a  $+\infty$ . Anche all'infinito l'hamiltoniana totale rimane solo quella non interagente. Il termine all'infinito può avere una fase rispetto al termine a  $t = -\infty$ :

$$|\Phi_I(\infty)\rangle = e^{ic} |\Phi_0\rangle$$

$$e^{-ic} \langle \Phi_0 | T e^{-i \int_{-\infty}^{\infty} H_I(t'') dt''} A(t) B(t') | \Phi_0 \rangle$$

Il termine di fase è calcolabile attraverso la matrice  $S$ :

$$|\Phi(\infty)\rangle = S(\infty, -\infty) \Phi_0$$

Per trovare la fase braketto per  $\Phi_0$ :

$$\langle \Phi_0 | \Phi(\infty) \rangle = \langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle = e^{ic}$$

Da cui si ottiene:

$$\frac{\langle \Phi_0 | T e^{-i \int_{-\infty}^{\infty} H_I(t'') dt''} A(t) B(t') | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle}$$

In tutto questo c'è il limite per  $\varepsilon$  che va a zero. Si può mostrare che la  $c$  va come  $\frac{1}{\varepsilon}$  per  $\varepsilon$  che va a zero. Tuttavia si può far vedere che c'è anche il termine al numeratore ha una fase che diverge come  $1/\varepsilon$ , quindi il loro rapporto è ben definito.

Da tutto questo possiamo dare alla funzione di Green una forma più adeguata:

$$G(r, r', t, t') = -i \frac{\langle \Phi_0 | T S(\infty, -\infty) \psi(r, t) \psi^+(r', t') | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle}$$

Abbiamo riscritto tutto attraverso lo stato fondamentale non interagente, un'evoluzione semplice, ed un'espressione che possa essere sviluppata.

Se prendiamo l'ordine zero della  $S$  abbiamo che questo quello che viene fuori è proprio  $G_0$  (quello per il sistema non interagente). Vediamo il primo ordine:

$$G^0 = \langle \Phi_0 | T(-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 H_I(t_1) \psi(r, t) \psi^+(r', t') | \Phi_0 \rangle$$

$$H_I(t_1) = \frac{1}{2} \int dr_1 dr_2 \psi^+(r_1, t_1) V(r_1 - r_2) \psi^+(r_2, t_1) \psi(r_2, t_1) \psi(r_1, t_1)$$

Questo è un  $T$  prodotto che coinvolge sei campi (4 campi vengono dall'interazione più due campi).

Questo oggetto che ha sei campi si riesce a scrivere attraverso i prodotti di due campi per volta, sfruttando il teorema di Wick.

## 6.4 Diagrammi di Feynmann

$$G(x, x') = -i \frac{\langle T S(\infty, -\infty) \psi(x) \psi^+(x') \rangle}{\langle S(\infty, -\infty) \rangle}$$

Dove  $x$  e  $x'$  rappresentano sia le  $x$  che le  $p$ , che anche gli spin delle particelle. Dove abbiamo chiamato l'operatore di evoluzione  $S$ :

$$S = T \exp \left[ -i \int_{-\infty}^{\infty} dt H_I(t) \right]$$

Dove a  $T = 0$  abbiamo preso il limite adiabatico.

Il teorema di Wick dice che il  $T$  prodotto di tanti operatori si riduce alla somma di tanti  $T$  prodotti a coppie:

$$\begin{aligned} \langle T \psi_1 \psi_2 \psi_3 \psi_4^+ \psi_5^+ \psi_6^+ \rangle &= - \langle T \psi_1 \psi_4^+ \rangle \langle T \psi_2 \psi_5^+ \rangle \langle T \psi_3 \psi_6^+ \rangle \\ &+ \langle T \psi_1 \psi_6^+ \rangle \langle T \psi_2 \psi_5^+ \rangle \langle T \psi_3 \psi_4^+ \rangle \\ &+ \langle T \psi_1 \psi_5^+ \rangle \langle T \psi_2 \psi_4^+ \rangle \langle T \psi_3 \psi_6^+ \rangle \\ &- \langle T \psi_1 \psi_6^+ \rangle \langle T \psi_2 \psi_4^+ \rangle \langle T \psi_3 \psi_5^+ \rangle \\ &- \langle T \psi_1 \psi_5^+ \rangle \langle T \psi_2 \psi_6^+ \rangle \langle T \psi_3 \psi_4^+ \rangle \\ &+ \langle T \psi_1 \psi_4^+ \rangle \langle T \psi_2 \psi_6^+ \rangle \langle T \psi_3 \psi_5^+ \rangle \end{aligned}$$

Il primo termine ha segno  $-$  perché nello scambiare gli operatori per riordinare il  $T$  prodotto di questi termini ottengo un segno  $-$ , per i segni, una volta eliminato una contrazione non va più ogni volta.

Occorre un modo meccanico per fare questa cosa qui, che sono detti diagrammi di Feynmann.

Il primo termine può essere scritta attraverso le funzioni di Green:

$$\langle T\psi_1\psi_4^+ \rangle \langle T\psi_2\psi_5^+ \rangle \langle T\psi_3\psi_6^+ \rangle = (-i)^3 (i)^3 \langle T\psi_1\psi_4^+ \rangle \langle T\psi_2\psi_5^+ \rangle \langle T\psi_3\psi_6^+ \rangle = G_{14}^0 G_{25}^0 G_{36}^0$$

Quindi queste sono tutte funzioni di Green.

$$\int dt_1 H_I(t_1) = \int dx_1 \int dx_2 \psi^+(x_1) \psi^+(x_2) U(x_1 - x_2) \psi(x_2) \psi(x_1)$$

Dove adesso tutto è fatto in tempo e spazio:

$$U(x_1 - x_2) = V(r_1 - r_2) \delta(t_1 - t_2)$$

In questo modo abbiamo simmetrizzato rispetto alla presenza del tempo aggiungendo anche la variabile temporale (siamo passati nella formulazione a quadrivettore).

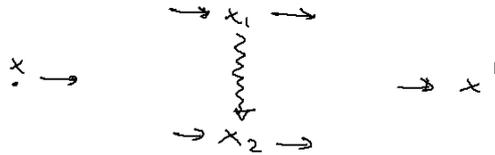
Per fare il primo ordine in  $S$  otteniamo:

$$\langle T\psi(x)\psi^+(x') \rangle \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 \psi^+(x_1) \psi^+(x_2) U(x_1 - x_2) \psi(x_2) \psi(x_1)$$

Scritta questa cosa ci accorgiamo di fare il  $T$  prodotto di sei campi come prima. Non possiamo fare esattamente come prima, diventiamo scemi.

Nel punto  $x$  esiste un operatore  $\psi$ : La  $G^0(x - x')$  si indica come una freccia che va dal punto  $x$  al punto  $x'$ .

Il punto  $x$  ha una  $\psi$ , per cui c'è la freccetta che esce, in  $x'$  c'è  $\psi^+$ , quindi una freccia che entra. Tra  $x_1$  e  $x_2$  c'è  $U$ , quindi una freccia a serpentino. Nel punto  $x_1$  e  $x_2$  esiste sia una  $\psi$  che una  $\psi^+$  quindi c'è una freccia che entra e che esce. Quando si fa il  $T$  prodotto occorre andare a collegare tutte le figure possibili che connettono in tutti i modi possibili, in modo da far saturare tutte le freccette.



$$\frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 G^0(x - x_1) G^0(x_1 - x') G^0(x_2 - x_2) U(x_1 - x_2) \quad (6.1)$$

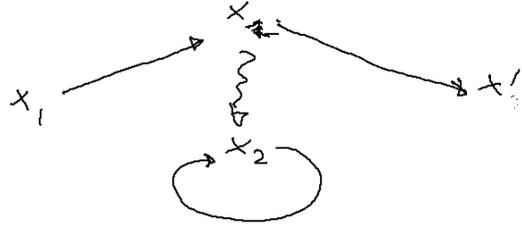


Figura 6.5: Questo è un diagramma particolare, detto diagramma di Hartree, che corrisponde ad una particolare modo di connettere le frecce, e la formula corrispondente è 6.1.

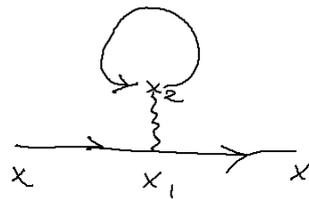


Figura 6.6: Il diagramma di Hartree può essere riscritto in questo modo più compatto.

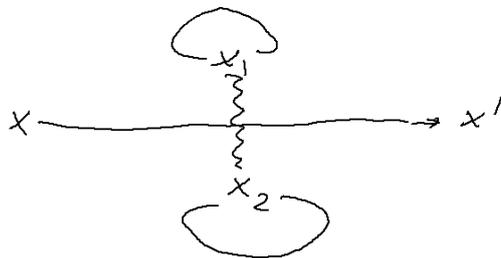
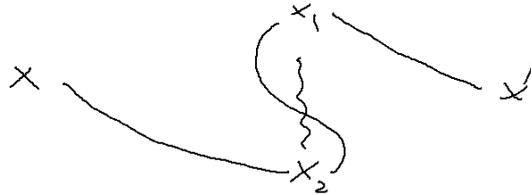
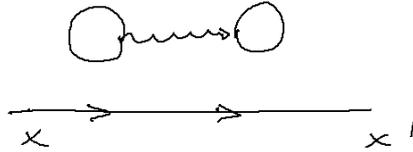


Figura 6.7: Anche questo diagramma ha formula 6.2

Il diagramma di Hartree ha un gemello identico in cui si scambia con lo scambio di  $x_1$  e  $x_2$ , questo quindi mi cancella quel fattore  $\frac{1}{2}$  davanti.

$$\frac{1}{2} \int G^0(x-x')G^0(0)G^0(0)U(x_1-x_2)dx_1dx_2 \quad (6.2)$$



$$\int G^0(x-x_2)G^0(x_2-x_1)G^0(x_1-x')U(x_2-x_1)dx_1dx_2 \quad (6.3)$$

$$\frac{1}{2} \int G^0(x-x')G^0(x_2-x_1)G^0(x_1-x_2)U(x_1-x_2)dx_1dx_2 \quad (6.4)$$

I diagrammi di Hartree e di Fock sono diagrammi connessi, mentre esistono altri due diagrammi che sono sconnessi. Si può dimostrare che la  $G$  è proprio a

$$G(x, x') = -i \langle TS(-\infty, \infty)\psi(x)\psi(x') \rangle$$

Dove si considerano solo i diagrammi connessi. I diagrammi sconnessi cancellano il denominatore. Quindi dobbiamo prendere solo i diagrammi connessi, in cui il fattore  $\frac{1}{2}$  sparisce. Il singolo diagramma può essere calcolato in questo modo:

$$(i)^n (-1)^f \langle \dots \rangle_c \langle s \rangle$$



Figura 6.8: formula: 6.3. Ovviamente esiste anche quello con  $x_1$  e  $x_2$  invertiti, che saranno uguali, ecco perché non mettiamo il fattore  $\frac{1}{2}$  nell'integrale. Questo diagramma è detto termine di Fock.

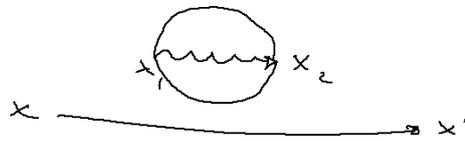
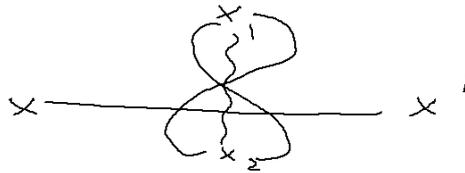


Figura 6.9: Questo diagramma è calcolato nella formula 6.4

È scomparso il termine  $1/n!$ . Infatti ciascun diagramma connesso ha esattamente  $n!$  modi di scambiare le variabili di integrazione ottenendo sempre lo stesso diagramma. Anche nel secondo ordine (o ordini superiori) valgono queste regole di calcolo.

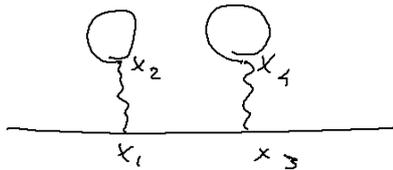


Figura 6.10: Questo è un diagramma del secondo ordine, poiché  $x_1 x_2 x_3 x_4$  sono variabili mute, posso scambiarle in tutti i possibili modi. Quindi in questi termini l' $n$  fattoriale ce lo siamo giocato subito.

Se prendiamo il valore medio di:

$$\langle T \exp \left[ -i \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 \psi^+(x_1) \psi^+(x_2) U(x_1 - x_2) \psi(x_2) \psi(x_1) \right] \rangle$$

Questo è rappresentato dai pezzi solo sconnessi.

I due termini sconnessi possono essere scritti come in Figura 6.11.

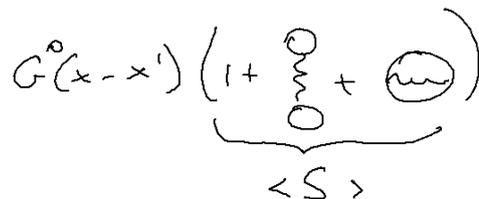


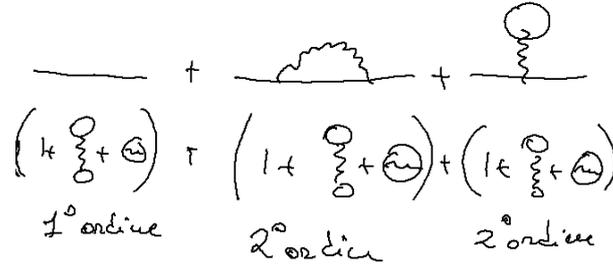
Figura 6.11: I diagrammi sconnessi sono rappresentati da una linea (la  $G^0$ ), più tutti altri pezzi, sconnessi dalla linea. Si può raccogliere la  $G^0$  a fattore comune. Quello che resta sono nuovamente tutti i diagrammi sconnessi.

Questo funziona a qualunque ordine: I diagrammi sconnessi appaiono agli ordini superiori.

Questo discorso può essere formalizzato: mettiamoci a un dato ordine  $n$  nella teoria perturbativa.

Prendiamo un diagramma di ordine  $n$ :

$$\frac{(-i)^n}{n!} \langle T \psi \psi^+ H_I(t_1) H_I(t_2) \cdots H_I(t_n) \rangle$$



Supponiamo di avere  $m$  termini connessi, quindi i  $n - m$  saranno non connessi:

$$\frac{(-i)^n}{n!} \frac{n!}{(n-m)!m!} \langle T\psi\psi^+ H_I(t_1) \cdots H_I(t_m) \rangle_c \langle H_I(t_{m+1}) \cdots H_I(t_n) \rangle$$

Quindi ciascun diagramma sconnesso può essere fattorizzato come abbiamo fatto, dividendolo in parte connessa e parte sconnessa. L'operazione non dipende dall'ordine. Quando mettiamo in evidenza la parte connessa, può esserci a moltiplicare qualunque ordine della parte sconnessa. Il numero di questi diagrammi corrisponde a quanti possibili modi ci sono di prendere  $m$  termini su  $n$ . Questo ci dà il coefficiente binomiale. Questo ci dimostra che  $n!$  si cancella:

$$\frac{(-i)^m}{m!} \langle T\psi(x)\psi^+(x') H_I(t_1) \cdots H_I(t_m) \rangle_c \frac{(-i)^{n-m}}{(n-m)!} \langle T H_I(t_m) \cdots H_I(t_n) \rangle_{nc}$$

Adesso questo è il singolo termine. Facciamo un cambiamento di variabile, e sommiamo su tutti gli ordini in  $n$ , tenendo fissa  $m$  (mettendo in evidenza quindi il diagramma di ordine  $m$  connesso), ci accorgiamo che l'altro termine è proprio la media di  $S$ :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^m}{m!} \langle T\psi(x)\psi^+(x') H_I(t_1) \cdots H_I(t_m) \rangle_c \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i)^k}{(k)!} \langle T H_I(t_k) \cdots H_I(t_n - m) \rangle_{nc}$$

Quindi il numeratore è dato dai semplici termini connessi, moltiplicato per la matrice  $S$  che mi si cancella per il denominatore. Questo è il motivo per cui la divergenza per  $\varepsilon \rightarrow 0$  si cancella con il numeratore.

Il fattore per cui va moltiplicato il diagramma connesso è dato da:

$$(i)^n (-1)^F$$

Con  $F$  numero di loop chiusi. Prendiamo i due diagrammi:

Il termine  $G^0(r=0, t=0)$  ha un piccolo problema, questi oggetti sono discontinui in genere. La regola è che si assume che

$$G^0(0) \doteq G^0(0^-)$$

Il termine in  $G^0(0)$  viene fuori quando contraggo tra loro la stessa variabile. Nell'hamiltoniana loro si trovano nell'ordine giusto, per cui  $\psi^+(x_2)$  si trova già

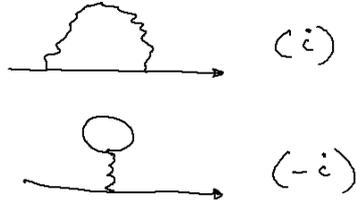


Figura 6.12: I due diagrammi di Feynmann connessi al primo ordine, con i coefficienti rispettivi a fianco, calcolati da questa regoletta.

a sinistra, questo equivale a metterci un  $T$  prodotto con tempi leggermente negativi.

$$\langle T\psi^+(x_2)\psi(x_2) \rangle = \langle T\psi(x'_2)\psi^+(x_2) \rangle = G^0(x'_2 - x_2) = G^0(0^-)$$

Questo vale se  $x'_2$  ha tempo leggermente minore di  $x_2$ , anche se nel limite che tende a zero.

Sostanzialmente il motivo è dato dal fatto che in  $G$  e nell'hamiltoniana i  $T$  prodotti sono negli ordini opposti, ecco perché devo metterci segno negativo nel termine.

### 6.4.1 Diagrammi del secondo ordine

Usando le stesse regole possiamo calcolare i diagrammi del secondo ordine. Possiamo combinare diagrammi di Hartree-Fock al primo ordine per ottenere diagrammi di ordine successivo. La formula seguente rappresenta l'integrale di due diagrammi di Fock (Figura 6.13).

$$- \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 U(x_2 - x_1) U(x_3 - x_4) G^0(x_2 - x) G^0(x_2 - x_1) G^0(x_4 - x_1) G^0(x_3 - x_4) G^0(x' - x_3) \quad (6.5)$$

All'interno di una qualunque riga ( $G^0$ ) può essere inserito un diagramma di Hartree-Fock. Quindi ciascun diagramma di ordine  $n$  può essere corretto in modo più fino sostituendo a ciascuna riga la somma di tutte le correzioni di Hartree-Fock su quel percorso (Figura 6.16).

Esistono tuttavia anche diagrammi non banali al secondo ordine, che non possono essere ottenuti combinando diagrammi di Hartree-Fock (Figura 6.17).

Grazie al fatto che non c'è il termine  $1/n!$  a moltiplicare i diagrammi, aggiungere le correzioni di Hartree-Fock ai diagrammi consiste semplicemente nel moltiplicare quella linea per il diagramma di HF. Questa correzione viene spesso indicata graficamente con una linea spessa, indicando che su quella linea si è sommato su tutti i possibili contributi di Hartree-Fock a tutti gli ordini.

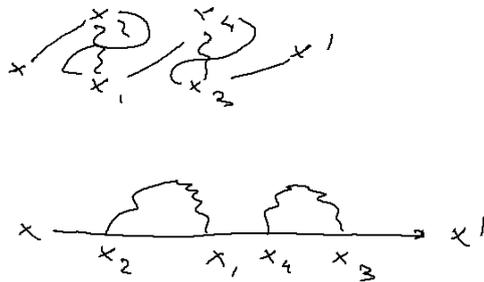


Figura 6.13: Diagramma al secondo ordine, composto da due diagrammi di Fock consecutivi. La formula di integrazione è la 6.5.

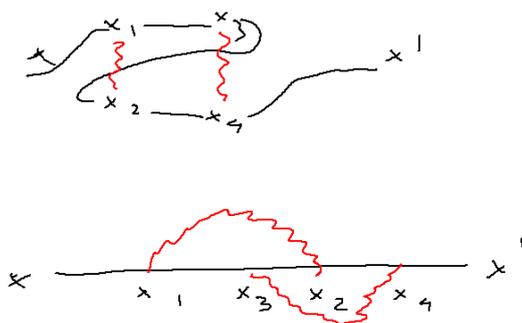


Figura 6.14: Questo è il primo dei diagrammi non banali, e ha come termine davanti un valore  $-1$  (nessun loop chiuso, e  $n = 2$ ).

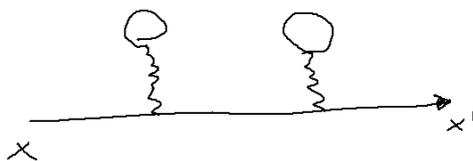


Figura 6.15: Questo diagramma ha davanti un segno  $-1$  perché abbiamo due loop chiuso. È diverso dagli altri due. A partire dal diagramma di ordine 1 abbiamo usato questo diagramma. Possiamo quindi ottenere tutta una serie di diagrammi combinando tra loro effetti di ordine inferiore.

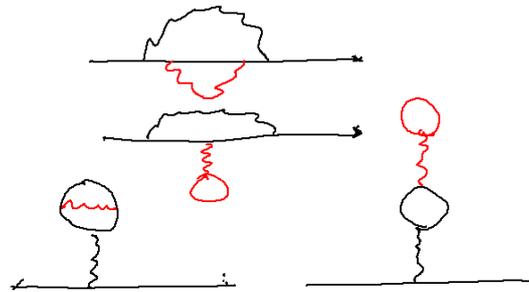
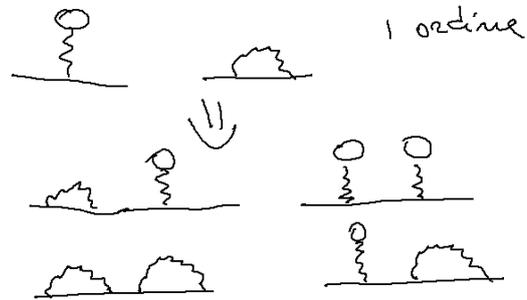


Figura 6.16: Diagrammi che si ottengono correggendo la parte intermedia del diagramma all'ordine precedente.



Figura 6.17: Diagrammi non banali del secondo ordine, che non possono essere ottenuti da diagrammi del primo ordine.

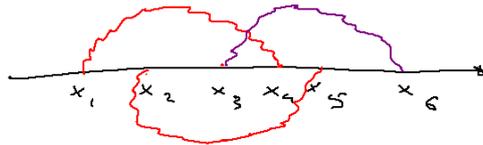


Figura 6.18: Questo è un diagramma del terzo ordine tutto nuovo. Questo è un terzo ordine intrinseco. possiamo averne anche diversi

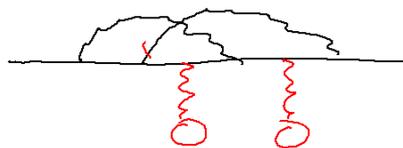


Figura 6.19: Diagramma del quarto ordine, corretto a partire da un diagramma del secondo ordine.

## 6.4.2 Dimostrazione del teorema di Wick

Daremo al teorema una dimostrazione, tratta dall'Abrikosof, nel caso di volume infinito, per temperatura finita. In realtà la dimostrazione reale può essere fatta con ipotesi meno ampie.

Supponiamo di avere dei campi:

$$\langle \Phi_0 | T \psi(x_1) \psi(x_2) \psi(x_3) \cdots \psi^+(x'_1) \psi^+(x'_2) \psi^+(x'_3) | \Phi \rangle$$

Passiamo nello spazio di Fourier:

$$\psi(x_1) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{k_1} e^{ik_1 x_1} a_{k_1}(t_1)$$

Possiamo riscrivere come:

$$\frac{1}{V^n} \sum_{k_i, k'_i} (\cdots) \langle \Phi | T a_{k_1}(t_1) a_{k_2}(t_2) \cdots a_{k'_1}^+(t'_1) a_{k'_2}^+(t'_2) | \Phi \rangle$$

Supponiamo che tutti i termini  $k'_i$  siano diversi tra di loro. Se due di loro fossero uguali, abbiamo la somma su  $n - 1$  variabili, quindi il contributo è di ordine  $1/V$  rispetto al caso con tutti i  $k_i$  diversi tra loro. Nel caso di  $V \rightarrow \infty$  possiamo trascurare questi contributi.

Questo  $T$  prodotto affinché sia diverso da zero occorre che i  $k$  e  $k'$  siano gli stessi, quindi ho tutte le permutazioni possibili che mi mandano i  $k$  nei  $k'$ . Quando andiamo a prendere il  $T$  prodotto di elementi dello stesso  $k$  dobbiamo ordinarli con l'ordine corretto. Poiché vado a calcolarmi questo oggetto sullo stato non interagente, i singoli  $a_k$  con  $k$  differente agiscono differentemente. Per cui possiamo fattorizzare questo oggetto. Le somme che abbiamo agiscono cambiando le permutazioni e quindi cambiando la corrispondenza tra  $k$  e  $k'$ . Dobbiamo prendere la somma di tutte le possibili permutazioni. L'idea di fondo è che, per ogni  $k$ , il  $T$  prodotto serve a determinare solo se c'è prima  $a_k$  o  $a_k^+$ :

$$a_k(t) = e^{-i\varepsilon_k t} a_k$$

Facciamolo con due termini:

$$\langle \Phi_0 | T a_{k_1}(t_1) a_{k_2}(t_2) a_{k'_1}^+(t'_1) a_{k'_2}^+(t'_2) | \Phi_0 \rangle$$

Esplicitando tutte le permutazioni (sommando tutti i possibili valori di  $k_1$ ):

$$\langle \Phi_0 | a_{k'_1}(t_1) a_{k'_2}(t_2) a_{k_1}^+(t'_1) a_{k_2}^+(t'_2) | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | T a_{k'_2}(t_1) a_{k'_1}(t_2) a_{k_1}^+(t'_1) a_{k_2}^+(t'_2) | \Phi_0 \rangle$$

Lo stato fondamentale è diagonale nei  $k$ , ciò che avviene su un  $k$  è indipendente da ciò che avviene negli altri  $k$ : Fattorizzando il primo termine ottengo:

$$- \langle \Phi_0 | a_{k'_1}(t_1) a_{k'_1}^+(t'_1) | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | a_{k'_2}(t_2) a_{k'_2}^+(t'_2) | \Phi_0 \rangle$$

E così via.

Possiamo fare un'estensione del  $T$  prodotto per discutere un caso interessante. Esiste un altro tipo di ordinamento, detto ordinamento normale. In questo ordine vengono messi a destra tutti gli operatori di distruzione e a sinistra tutti gli operatori di creazione.

In teoria delle particelle lo stato fondamentale è il vuoto, e questo ordinamento è molto vantaggioso, poiché distruggere il vuoto implica avere un termine nullo. Il problema in molti corpi è che lo stato fondamentale non è lo stato di vuoto. Il termine  $a_k$  annichila lo stato fondamentale solo se  $k > k_f$  (non ci sono particelle con  $k > k_f$ ), è un operatore di creazione se  $k < k_f$  (viene creata una buca). L'ordine normale mette a sinistra tutti gli  $a_k$  con  $k < k_f$ , e a destra tutti gli  $a_k$  con  $k > k_f$  ( $a_k^+$  al contrario).

Il teorema di Wick dice che il  $T$  prodotto:

$$\begin{aligned} T(ABC \cdots Z) &= N(ABC \cdots Z) + N(\underbrace{AB} C \cdots Z) + \cdots + \\ &+ N(\underbrace{AB} \underbrace{CD} \cdots Z) + \cdots + \\ &+ \underbrace{AB} \underbrace{CD} \underbrace{EF} \cdots \underbrace{YZ} \end{aligned}$$

Su tutte le possibili contrazioni, fino ad avere tutto il sistema contratto, dove le contrazioni sono definite:

$$\underbrace{AB} = T(AB) - N(AB) = c$$

Questa contrazione si può vedere che è proprio un numero.

Nel nostro caso tutti i termini con i prodotti normali sono tutti nulli poiché l'operatore di distruzione a destra mi distrugge lo stato fondamentale dandomi zero. L'unico termine che sopravvive è l'ultimo termine, che rappresenta proprio quello che abbiamo dimostrato, ossia tutte le possibili contrazione tra tutti gli operatori.

Verifichiamo che effettivamente la contrazione sia un numero:

$$\overbrace{a_p a_{p'}^+} = T a_p(t) a_{p'}^+(t') - N a_p(t) a_{p'}^+(t')$$

Supponiamo che  $t > t'$ , e  $t = t - t'$

$$e^{-i\varepsilon_p t} a_p a_{p'}^+(0) - \begin{cases} p' < k_f & e^{-i\varepsilon_p t} a_p a_{p'}^+ \\ p' > k_f & -e^{-i\varepsilon_p t} a_{p'}^+ a_p \end{cases}$$

$$t > 0 \quad \begin{cases} p' < k_f & 0 \\ p' > k_f & e^{-i\varepsilon_p t} \delta_{pp'} \end{cases} = e^{-i\varepsilon_p t} \delta_{pp'} \theta(p - p_f)$$

Per  $t < 0$ :

$$-e^{-i\varepsilon_p t} a_{p'}^+ a_p - \begin{cases} p' < k_f & e^{-i\varepsilon_p t} a_p a_{p'}^+ \\ p' > k_f & -e^{-i\varepsilon_p t} a_{p'}^+ a_p \end{cases}$$

$$t < 0 \quad \implies \quad e^{-i\varepsilon_p t} \delta_{p'p} \theta(k_f - p)$$

Da cui abbiamo che questo oggetto è proprio un numero, e in particolare il valor medio nello stato fondamentale del  $T$  prodotto tra i due operatori. Infatti se andiamo a mediarlo sullo stato fondamentale non interagente otteniamo che il prodotto normale sparisce e rimane solo il  $T$  prodotto.

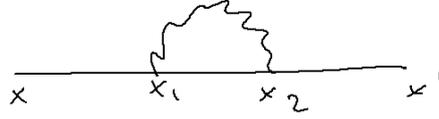


Figura 6.20: Diagramma di Fock

### 6.4.3 Regole per il calcolo dei diagrammi

Partiamo dal diagramma di Fock, e procediamo alla scrittura dell'integrale:

$$i \int dx_1 dx_2 G_0(x - x_1) G_0(x_2 - x') U(x_1 - x_2)$$

$$G^0(x) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{(2\pi)} e^{ikr} e^{-i\omega t} G^0(k, \omega)$$

La funzione  $G^0(k, \omega)$  la conosciamo:

$$G^0(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k \pm i0^+ \text{sign}(k - k_f)}$$

Passiamo alla rappresentazione gran canonica della  $G$ . Ossia misuriamo le  $\varepsilon_k$  rispetto alle energie di fermi (potenziale chimico):

$$G_\mu^0 = \frac{1}{\omega - \xi_k \pm i0^+ \text{sign}(k - k_f)} \quad \xi_k = \varepsilon_k - \mu$$

Questo si ottiene se avessimo definito l'evoluzione temporale in questo modo:

$$e^{i(H_0 - \mu N)t} \psi e^{-i(H_0 - \mu N)t} = \tilde{\psi}_\mu$$

Questo perché  $N$  è un numero quantico che mi commuta con  $H$  (o con  $H_0$ , è uguale). Quando applico  $\psi$  ad  $N$  ottengo  $N - 1$ , e quindi otteniamo che:

$$\tilde{\psi}_\mu = e^{i\mu t} \tilde{\psi}_N \quad \tilde{\psi}_N = e^{iHt} \psi e^{-iHt}$$

Se vado a fare la trasformata di Fourier:

$$\int dt e^{i\omega t} \psi_\mu = \int dt e^{i(\omega + \mu)t} \psi_n$$

Da cui si ottiene che la funzione  $G$  gran canonica è proprio questo termine.

Ritornando abbiamo (in notazione quadrivettoriale):

$$G(x) = \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} e^{i(k^\alpha x_\alpha)} G_0(k)$$

$$\int dx_1 dx_2 \int \frac{dk_1 dk_2 dk_3 dq}{(2\pi)^{4d}} \cdot G^0(k_1) G^0(k_2) G^0(k_3) U(q) \cdot e^{ik_1(x-x_1)+ik_2(x_1-x_2)+ik_3(x_2-x')+iq(x_1-x_2)}$$

Integriamo in  $x_1$

$$\delta(-k_1 + k_2 + q)$$

L'integrale su  $x_1$  mi sta dando la conservazione del momento che entra nel vertice di interazione del diagramma. L'integrale su  $x_2$  ci darà l'altra conservazione (un'altra delta di Dirac). Rimangono da integrare solo due variabili.

$$G(x-x') = \int \frac{dk_1}{(2\pi)^4} \frac{dq}{(2\pi)^4} e^{ik_1(x-x')}$$

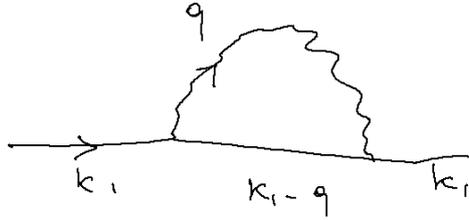


Figura 6.21: Diagramma di Fock con le leggi di conservazioni.

Il fatto che sia funzione di  $x - x'$  era ovvio dall'inizio. Siamo interessati alla trasformata di Fourier:

$$G(k) = \int d(x-x') e^{-ik(x-x')} G(x-x')$$

Sostituendo l'espressione, esce fuori un'altra  $\delta(k - k_1)$ , che mi cancella i fattori  $2\pi$  rimasti, elimina l'integrale in  $k_1$  facendolo diventare pari a  $k$ .

La prima linea di tutti i diagrammi ha il  $k$  che vogliamo studiare, dobbiamo integrare sulle variabili mute, e sulla riga finale deve tornare lo stesso momento  $k$  (conservazione dell'impulso).

Possiamo scrivere direttamente le leggi di conservazione per un diagramma più complesso (Figura 6.22)

Una volta impostati i vettori, usando le regole di integrazione, possiamo scrivere direttamente l'integrale finale.

Il diagramma di Hartree è particolare, in quanto l'interazione deve trasmettere momento nullo (Figura 6.24)

L'integrale per il diagramma di Hartree è:

$$-i \int dp G^0(k) G^0(k) U(0) G^0(p)$$

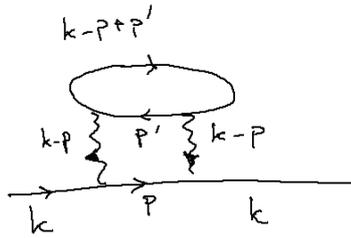


Figura 6.22: Diagramma più complicato del secondo ordine da calcolare.

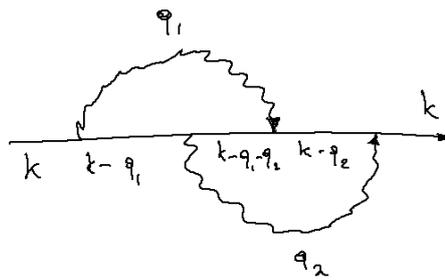


Figura 6.23: Diagramma del secondo ordine.

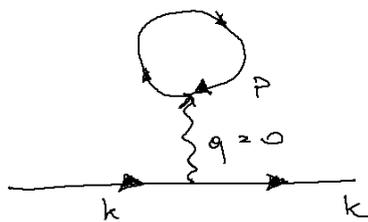


Figura 6.24: Diagramma di Hartree.

La prima e l'ultima linea non sono toccate dall'integrazione ( $U(0) = V(0)$ ):

$$-i [G^0(k)]^2 V(0) \int dp G^0(p)$$

L'ultimo integrale sarà

$$- \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \int d\varepsilon \frac{1}{\varepsilon - \xi_p \pm i0^+ \text{sign}(p - p_f)}$$

L'integrale in  $\varepsilon$  non è ben definito, in quanto all'infinito diverge (il problema sulla singolarità del denominatore è risolto dallo  $0^+$ , ma rimane l'integrazione all'infinito che mi diverge logicamente). Questo possiamo risolverlo perché abbiamo definito  $G^0$  a tempi nulli, leggermente negativi. Mettiamo questo oggetto all'interno dell'integrale:

$$\int d\varepsilon \frac{e^{-i\varepsilon 0^-}}{\varepsilon - \xi_p \pm i0^+ \text{sign}(p - p_f)}$$

Questo integrale può essere calcolato analiticamente con il metodo dei residui, e fa convergere l'integrale.

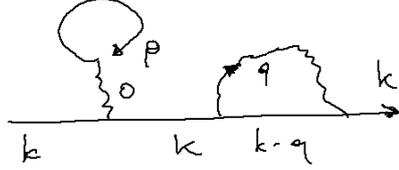


Figura 6.25: Un integrale del secondo ordine

Calcoliamo il diagramma (Figura 6.25). Possiamo accorgerci che ogni volta che abbiamo un diagramma sconnesso:

$$G^0(k)^3 \int dp \int dq U(0) G^0(p) e^{-i\varepsilon p} G^0(k - q) U(q)$$

Anche questo integrale ha bisogno di discuterne la convergenza:

$$\frac{1}{(\omega - \varepsilon_1) - \Omega - \xi_{k-q} \pm i0^+} \quad \Omega = k - q$$

Questo non sembra essere un diagramma che coinvolge la  $G$  zero, ma nella linea di interazione è un delta dei tempi. Anche lui deve essere regolarizzato nello stesso modo. Quindi sia il grafico di Fock che quello di Hartree presentano problemi di convergenza che devono essere risolti con i residui, tutti gli altri

diagrammi non presentano questa cosa. Procediamo ad integrare il diagramma di Hartree:

$$[G^0(k)]^2 (-1)i \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{e^{i\epsilon 0^-}}{\epsilon - \xi_p + i0^+ \text{sign}(k - k_f)} V(0)$$

Per  $k < k_F$  il secondo integrale diventa

$$\begin{aligned} & \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{e^{i\epsilon 0^-}}{\epsilon - \xi_p - i0^+} = \int \frac{d\epsilon}{2\pi} G^0(\epsilon, p) e^{i\epsilon 0^-} \\ & = -i \langle \Phi_0 | T a_p(t \rightarrow 0^-) a_p^\dagger(0) | \Phi_0 \rangle = -i \langle \phi_0 | a_p^\dagger a_p | \phi_0 \rangle = -i \langle N \rangle \end{aligned}$$

Da cui otteniamo:

$$G^0(k)^2 \underbrace{\int \frac{dp}{(2\pi)^3} \theta(k_f - p)}_{\rho} \langle N \rangle V(0) = G^0(k)^2 V(0) \rho$$

Abbiamo calcolato la correzione di Hartree. Analogamente possiamo procedere per il termine di Fock.

$$G^0(k)^2 \int \frac{d\Omega}{2\pi} \int \frac{dq}{(2\pi)^3} V(q) G^0(k - q) e^{i(\omega - \Omega)0^-}$$

Con un cambio di variabili,  $p = k - q$  ci accorgiamo che possiamo integrare di nuovo la  $G$  come se fosse il numero di particelle in  $\vec{p}$ :

$$= -G^0(k)^2 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} V(k - p) n_p^0$$

Questo si può riconoscere come il termine di Fock nell'approssimazione di campo medio nel limite  $V \rightarrow \infty$

$$-\frac{1}{V} \sum_{k'} V(k - k') n_{k'}^0$$

Analogamente il diagramma di Hartree (da cui derivano i loro nomi).

## 6.5 Self-Energia

Vogliamo arrivare ad ottenere un'espressione completa per la funzione di Green. Come discusso nelle sezioni precedenti ci aspettiamo di trovare una forma del tipo:

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{a}{\omega - \xi_{qp} \pm i\gamma_k} + \text{Resto}$$

Combinando tra loro i diagrammi di Hartree e di Fock possiamo ottenere delle espressioni che si auto completano. Supponiamo di voler considerare la somma di tutti i diagrammi di Hartree (a qualunque ordine). Poiché sono sequenze di diagrammi uguali, ciascun termine di ordine  $n$  è il diagramma di Hartree elevato alla  $n$ . Pertanto abbiamo:

$$G^0(k) + G^0(k)^2 V(0) \rho + G^0(k)^3 [V(0) \rho]^2 + \dots = G^0(k) \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} [G^0(k) V(0) \rho]^n \right\}$$

Queste espressioni sono molto singolari, perché ciascuna  $G^0(k)$  ha un polo. Tuttavia possiamo risommarli tutti ottenendo: Da cui otteniamo un'espressione per la  $G$  di Hartree:

$$G_H(k) = \frac{G^0}{1 - G^0 V(0)\rho} = \frac{1}{G^{0-1} - \rho V(0)} = \frac{1}{\omega - \xi_k - \rho V(0)}$$

Questa definizione è alla base del concetto di self-energia. Tutti i diagrammi sono sempre composti da due linee uguali, che iniziano e terminano il diagramma. Quindi l'intero set di diagrammi può essere scritto come:

$$G = G^0 + G^0 (\dots) G^0$$

Tra le due  $G^0$  ci stanno tutti i possibili diagrammi. È comodo dividere questi diagrammi in due categorie, quelli che non possono essere spezzati (ossia in cui c'è un'interazione che mi collega la prima riga con l'ultima) e quelli che possono essere divisi in prodotti di diagrammi di ordine inferiore (come i diagrammi composti di Hartree-Fock). Sia  $\Sigma$  la self-energia irriducibile, ossia la somma di tutti i possibili diagrammi non spezzabili. Possiamo immaginare di scrivere la  $G$  completa separando questi contributi:

$$G = G^0 + G^0 \Sigma G^0 + G^0 (\text{Diagrammi spezzabili}) G^0$$

Se spezziamo tra loro i diagrammi spezzabili in una parte irriducibile più il resto otteniamo che possiamo mettere in evidenza la parte irriducibile:

$$G = G^0 + G^0 \Sigma (G^0 + \text{Tutti i diagrammi rimanenti})$$

Tutti i diagrammi che rimangono sono sia quelli riducibili che quelli irriducibili, in altre parole nella parentesi abbiamo ricostruito la  $G$ :

$$G = G^0 + G^0 \Sigma G$$

Questa equazione alla self-energia può essere risolta:

$$G = \frac{G_0}{1 - G_0 \Sigma} = \frac{1}{\omega - \xi_k - \Sigma(\vec{k}, \omega)} \quad (6.6)$$

Conoscere la  $\Sigma$  permetterebbe di conoscere l'intera  $G$  senza approssimazione. Possiamo stimare una forma approssimata della  $\Sigma$  usando ad esempio solo i diagrammi di Hartree e Fock appena calcolati:

$$\Sigma^{HF} = V(0)\rho - \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} V(k - k') n_{k'}^0$$

La self-energia può essere spezzata in una parte reale e una parte immaginaria<sup>1</sup>

$$\Sigma = \Sigma'(k, \omega) + i\Sigma''(k, \omega)$$

La  $\Sigma^{HF}$  fornisce una predizione solo per la parte reale, perché è un'approssimazione al primo ordine<sup>2</sup>. Sviluppiamo la self-energia attorno a  $\omega = 0$  e  $k = k_F$ .

$$\Sigma = \Sigma'(k_f, 0) + \partial_\omega \Sigma'(k_f, 0)\omega + \partial_k \Sigma'(k_f, 0)(k - k_f) + \dots$$

<sup>1</sup>Si può mostrare che la parte immaginaria della self-energia è proporzionale a  $\omega^2$ .

<sup>2</sup>La  $\Sigma''$  è quadratica in  $\omega$  quindi interviene solo al secondo ordine.

Sostituendo questo sviluppo nella 6.6 otteniamo:

$$G = \frac{1}{\omega(1 - \partial_\omega \Sigma') - (k - k_f) \partial_k \Sigma' - \underbrace{\varepsilon_k - \mu + \Sigma'(k_f, 0)}_{\xi_k} - i\Sigma''}$$

Dove includiamo il termine di  $\Sigma'$  costante all'interno del potenziale chimico.

$$\mu = \mu_{old} - \Sigma'(k_f, 0)$$

Se ci mettiamo attorno al  $k_f$ , la  $\xi_k \rightarrow 0$ , prendendo un termine lineare dello sviluppo otteniamo:

$$\xi_k = 0 + V_{k_f}^0(k - k_f)$$

Dove  $V_{k_f}^0$  rappresenta difatto la derivata della  $\xi$  al  $k_f$  rispetto a  $k$ , poiché  $\xi$  è un'energia questa grandezza (a meno di un  $\hbar$ ) rappresenta la velocità di fermi del sistema non interagente. Da cui otteniamo:

$$G = \frac{1}{\omega(1 - \partial_\omega \Sigma') - (k - k_f) (\partial_k \Sigma' + V_{k_f}^0) - i\Sigma''}$$

$$G = \frac{(1 - \partial_\omega \Sigma')^{-1}}{\omega - \frac{(V_{k_f}^0 + \partial_k \Sigma')(k - k_f)}{1 - \partial_\omega \Sigma'} - \frac{i\Sigma''}{1 - \partial_\omega \Sigma'}} + \text{Resto}$$

Questa è proprio l'espressione che cerchiamo per la  $G$ , da cui possiamo ricavare effettivamente il parametro  $a$  (che abbiamo mostrato nelle precedenti lezioni rappresentare il salto all'energia di fermi dell'osservabile  $N_k^0$  per stati interagenti).

$$G = \frac{a}{\omega - v_f(k - k_f) + i\gamma}$$

Da cui ricaviamo sia  $a$ , la velocità di fermi del sistema interagente (la massa efficace) e il tempo di vita della quasiparticella:

$$a = \frac{1}{1 - \partial_\omega \Sigma'} \quad \partial_\omega \Sigma' < 0$$

$$v_f = \frac{k_f}{m^*} = \frac{v_{k_f}^0 + \partial_k \Sigma'_{k_f}}{1 - \partial_\omega \Sigma'_{\omega=0}}$$

$$\gamma = \frac{\Sigma''}{1 - \partial_\omega \Sigma'}$$

Usando l'approssimazione di Hartree-Fock abbiamo una stima per ciascuno di questi parametri, in particolare,  $\Sigma_{HF}$  non dipende da  $\omega$ , per tanto  $a = 1$ .

### 6.5.1 Funzioni di green a due particelle

Fino a questo momento abbiamo considerato solo le funzioni di Green ad una sola particella. Queste consentono di ricavare tutte le informazioni viste nella scorsa sezione. Tuttavia per calcolare il termine di interazione  $f_{\sigma\sigma'}(k, k')$  occorre studiare come due particelle si influenzano a vicenda:

$$G^{(2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = -i \langle \Phi_0 | T S \tilde{\psi}(x_1) \psi(x_2) \psi^+(x_3) \psi^+(x_4) | \Phi_0 \rangle_c$$

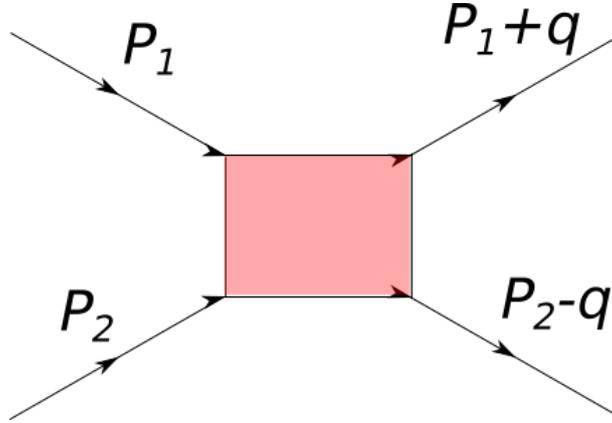


Figura 6.26: Schema del diagramma omnicomprendente, che racchiude tutte le possibili interazioni e scambi tra le particelle.

Possiamo rappresentare questa funzione con le regole dei diagrammi di Feynman. Tuttavia per il calcolo formale è conveniente usare un unico diagramma omnicomprendente (Figura 6.26).

Di questo diagramma possiamo prenderne la trasformata di Fourier e supporte di calcolarlo. L'interazione sarà una funzione  $\Gamma_{\sigma,\sigma'}(p_1, p_2, q)$ . Il diagramma sarà pertanto generato da un termine di matrice del tipo:

$$\Gamma_{\sigma,\sigma'}(p_1, p_2, q) a_{p_1\sigma}^+ a_{p_2\sigma}^+ a_{p_1+q\sigma} a_{p_2-q\sigma}$$

Questo termine rappresenta il decadimento di due particelle con impulso  $p_1 + q$  e  $p_2 - q$ , e la creazione di due nuove particelle. Nel limite  $q \rightarrow 0$  Le due particelle non decadono più, e abbiamo il termine di interazione tra le particelle di impulsi  $p_1$  e  $p_2$ . Possiamo definire l'interazione proprio in questo modo:

$$f_{\sigma\sigma'}(k, k') = a^2 \Gamma_{\sigma\sigma'}(k, k', q \rightarrow 0)$$

Dove prendiamo prima il limite per  $\omega = 0$  e poi valutiamo  $\Gamma$  quando  $q \rightarrow 0$ . Il termine  $a^2$  serve per considerare che abbiamo a che vedere con quasi-particelle.

## 6.6 Funzioni di Green a temperatura finita

Per definire le funzioni di Green a temperatura finita verrebbe spontaneo passare dalla definizione di funzione di Green a temperatura nulla reinterpretando la media sullo stato fondamentale come media termica:

$$G(x, x') = \frac{1}{Z} \text{tr} \left[ e^{-\beta(H-N\mu)} T \tilde{\psi}(x) \tilde{\psi}^+(x') \right]$$

Nel gran canonico:

$$\tilde{\psi}(r, t) = e^{i(H-\mu N)t} \psi(r) e^{-i(H-\mu N)t}$$

Il fattore di Boltzman agisce come un fattore di evoluzione temporale con un tempo immaginario dato da  $\beta$ . Questo mismatch non permette di fare una

teoria perturbativa semplice, poiché questi fattori non si cancellano. Esiste una teoria che permette di risolvere questo problema, tuttavia è complessa. Il problema è risolto da Mazubara, che manda la grandezza  $it \rightarrow \tau$  (si passa a tempi immaginari) con:

$$0 < \tau < \frac{1}{T} \quad k_b = 1$$

Viene introdotta la funzione di Green di Mazubara:

$$\mathcal{G}(r, r', \tau, \tau') \doteq -\frac{1}{Z} \text{tr} \left[ e^{-\beta(H-\mu N)} T_\tau \tilde{\psi}(r, \tau) \tilde{\psi}^+(r', \tau') \right]$$

$$\tilde{\psi}(r, \tau) = e^{\tau(H-\mu N)} \psi(r) e^{-\tau(H-\mu N)}$$

Si passa ad un evolutore temporale con la stessa struttura dell'evolutore di Heisemberg. Questa funzione di Mazubara è in realtà solo una funzione della variabile  $\tau - \tau'$ , e ci accorgiamo che se il singolo tempo va da:

$$0 < \tau < \frac{1}{T} \quad \implies \quad -\frac{1}{T} < \tau - \tau' < \frac{1}{T}$$

In questo modo si può ridefinire la funzione di Mazubara:

$$\mathcal{G}(r, r', \tau) \doteq -\frac{1}{Z} \text{tr} \left[ e^{-\beta(H-\mu N)} T_\tau \tilde{\psi}(r, \tau) \tilde{\psi}^+(r', 0) \right]$$

Se abbiamo invarianza traslazionale, possiamo ripetere lo stesso discorso per le  $r$ :

$$\mathcal{G}(r, \tau) \doteq -\frac{1}{Z} \text{tr} \left[ e^{-\beta(H-\mu N)} T_\tau \tilde{\psi}(r, \tau) \tilde{\psi}^+(0, 0) \right]$$

Questa funzione ha una discontinuità a  $\tau$  pari a zero. Se  $\tau$  è nullo otteniamo la media termica esatta delle  $\psi$ :

$$(r, 0^+) = -\langle \psi(r) \psi^+(0) \rangle \quad (r, 0^-) = \langle \psi^+(0) \psi(r) \rangle$$

Se facciamo la differenza tra le due ritroviamo l'anticommutatore, che è singolare (ha una delta di dirac).

$$\tilde{\psi}^+(r, \tau) = e^{\tau(H-\mu N)} \psi^+(r) e^{-(H-\mu N)}$$

Questo è il trasformato di Heisemberg di  $\psi^+$  che non è uguale al  $\tilde{\psi}$  evoluto di cui poi ne prendo l'aggiunto, perché adesso i tempi sono immaginari e quindi  $\tilde{\psi}(\tau)$  e  $\tilde{\psi}^+(\tau)$  non sono l'uno l'aggiunto dell'altro!

Vediamo un importante proprietà della  $\mathcal{G}$

$$\mathcal{G}(r, \tau) = \mp(r, \tau + \beta) \quad \tau < 0$$

Dove il segno  $-$  vale per i fermioni,  $+$  per i bosoni

La dimostrazione di questa proprietà sfrutta la ciclicità della traccia:

$$\mathcal{G}(\tau) = -\frac{1}{Z} \text{tr} \left[ e^{-\beta(H-\mu N)} T_\tau \tilde{\psi}(\tau) \tilde{\psi}^+(0) \right]$$

Se  $\tau < 0$

$$\mathcal{G}(\tau) = \pm \frac{1}{Z} \text{tr} \left[ e^{-\beta(H-\mu N)} \tilde{\psi}^+(0) \tilde{\psi}(\tau) \right]$$

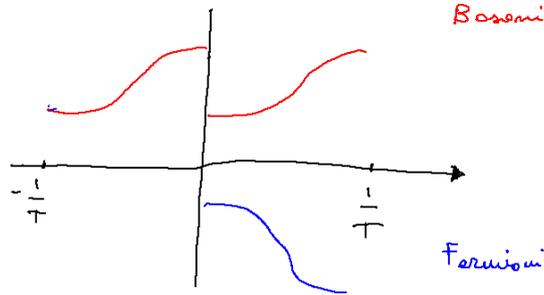


Figura 6.27: Schema di come appaiono le funzioni che soddisfano questa proprietà

Poiché la traccia gode della proprietà di permutazione ciclica:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\tau) &= \pm \frac{1}{Z} \text{tr} \left[ \tilde{\psi}(\tau) e^{-\beta(H-\mu N)} \tilde{\psi}^+(0) \right] \\ \mathcal{G}(\tau) &= \pm \frac{1}{Z} \text{tr} \left[ e^{\tau(H-\mu N)} \psi e^{-\tau(H-\mu N)} e^{-\beta(H-\mu N)} \tilde{\psi}^+(0) \right] \\ \mathcal{G}(\tau) &= \pm \frac{1}{Z} \text{tr} \left[ e^{-\beta(H-\mu N)} e^{(\tau+\beta)(H-\mu N)} \psi e^{-(\tau+\beta)(H-\mu N)} \tilde{\psi}^+(0) \right] \\ \mathcal{G}(\tau) &= \pm \frac{1}{Z} \text{tr} \left[ e^{-\beta(H-\mu N)} \tilde{\psi}(\tau + \beta) \tilde{\psi}^+(0) \right]\end{aligned}$$

Per i Fermioni abbiamo avuto un cambio di segno, per i bosoni no, quindi:

$$\mathcal{G}(\tau) = \mp \mathcal{G}(\tau + \beta) \quad \tau < 0$$

Abbiamo genericamente una funzione della variabile  $\tau$  con questo che varia nell'intervallo:

$$-\frac{1}{T} < \tau < \frac{1}{T}$$

Adesso poiché la funzione varia in un intervallo finito facciamo lo sviluppo sulla serie di Fourier

$$f(x) = \sum_n e^{inx} c_n \quad c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-inx} f(x) dx \quad -\pi < x < \pi$$

Cosa succede se l'intervallo è quello in cui  $x$  varia tra  $a$  e  $b$ :

$$\begin{aligned}n &\rightarrow \omega_n = n \frac{2\pi}{b-a} \\ c_n &= \frac{1}{b-a} \int_a^b e^{-i\omega_n x} f(x) dx\end{aligned}$$

Nel nostro caso le frequenze sono:

$$\omega_n = n\pi T$$

$$c_n = \frac{T}{2} \int_{-\frac{1}{T}}^{\frac{1}{T}} e^{-i\omega_n \tau} f(\tau) d\tau$$

$$f(\tau) = \sum_n e^{i\omega_n \tau} c_n$$

Usiamo una convenzione leggermente differente. Conviene non mettere nella definizione del  $c_n$  il  $T$ , e esplicitarlo nella somma:

$$f(\tau) = T \sum_n e^{i\omega_n \tau} c_n \quad c_n = \frac{1}{2} \int_{-\frac{1}{T}}^{\frac{1}{T}} e^{-i\omega_n \tau} f(\tau) d\tau$$

Questa espressione è carina, perché il  $T$  che moltiplica per  $T \rightarrow 0$  diventa il differenziale dell'integrale.

Quando abbiamo i bosoni ci accorgiamo che in realtà la funzione bosonica avrà il doppio delle frequenze (dalla proprietà dimostrata precedentemente). Vediamo:

$$\mathcal{G}(i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\frac{1}{T}}^{\frac{1}{T}} d\tau \mathcal{G}(\tau) e^{-i\omega_n \tau}$$

Ricordiamoci che:

$$\mathcal{G}(\tau) = \mp(\tau + \beta)$$

$$\mathcal{G}(i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\frac{1}{T}}^{\frac{1}{T}} d\tau \mathcal{G}(\tau) e^{-i\omega_n \tau} = \frac{1}{2} \int_{-\frac{1}{T}}^0 d\tau \mathcal{G}(\tau) e^{-i\omega_n \tau} + \frac{1}{2} \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau \mathcal{G}(\tau) e^{-i\omega_n \tau}$$

$$\mathcal{G}(i\omega_n) = \mp \frac{1}{2} \int_{-\frac{1}{T}}^0 d\tau \mathcal{G}\left(\tau + \frac{1}{T}\right) e^{-i\omega_n \tau} + \frac{1}{2} \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau \mathcal{G}(\tau) e^{-i\omega_n \tau}$$

$$\tau' = \tau + \beta$$

$$\mathcal{G}(i\omega_n) = \mp \frac{1}{2} \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau' e^{-i\omega_n(\tau' - \beta)} \mathcal{G}(\tau') + \frac{1}{2} \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau \mathcal{G}(\tau) e^{-i\omega_n \tau}$$

$$\mathcal{G}(i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\tau) (\pm e^{-i\omega_n \beta} + 1) \quad \omega_n = n\pi T$$

$$\mathcal{G}(i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\tau) \underbrace{(\pm e^{in\pi} + 1)}_{\mp(-1)^{n+1}}$$

Partiamo dai bosoni, i termini con frequenza dispari sono nulli.

$$\mathcal{G}_{bos}(i\omega_n) = \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\tau) \quad \omega_n = 2n\pi T$$

Per fermioni le frequenze pari sono nulle.

$$\mathcal{G}_{fer}(i\omega_n) = \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\tau) \quad \omega_n = (2n+1)\pi T$$

Calcoliamo la funzione di Green libera, possiamo farlo direttamente nello spazio degli impulsi:

$$\mathcal{G}(k, \tau) = -\frac{1}{Z} \text{tr} \left[ e^{-\beta(H - \mu N)} T_\tau \tilde{a}_k(\tau) \tilde{a}_k^\dagger(0) \right]$$

$$a_k(\tau) = e^{\tau(H_0 - \mu N)} a_k e^{\tau(H_0 - \mu N)} = e^{-\xi_k \tau} a_k$$

Possiamo calcolarla già a tempi positivo:

$$\mathcal{G}^0(k, \tau) = -\frac{1}{Z_0} e^{-\beta(H_0 - \mu N)} e^{-\xi_k \tau} a_k a_k^+ = e^{-\xi_k \tau} (1 - \langle a_k^+ a_k \rangle)$$

$$\langle a_k^+ a_k \rangle = n_k = \frac{1}{e^{\beta \xi_k} + 1}$$

Facendo i conti nel dettaglio otteniamo che la trasformata di Fourier è:

$$\mathcal{G}^0(k, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_k}$$

Questa ci ricorda moltissimo la stessa espressione a tempo nullo:

$$G^0(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_k \pm i0^+}$$

Rispetto alle frequenze abbiamo frequenze immaginarie, in realtà la conoscenza della dinamica del  $\tau$ , che sembra avvenire in un tempo immaginario, che trasformato di Fourier ci danno delle frequenze immaginarie ci permette di conoscere anche la dinamica vera. Se ci mettiamo a tempi nulli negativi otteniamo la media termica del numero di particelle:

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

$$\mathcal{G}^0(k, \tau = 0^-) = \frac{1}{e^{\beta \xi_k} + 1}$$

Antitrasformando otteniamo:

$$T \sum_n \frac{1}{i\omega_n - \xi_k} e^{-i\omega_n(0^-)} = \frac{1}{e^{\beta \xi_k} + 1}$$

Vediamo di dimostrare questa relazione. Prendiamo la funzione complessa

$$f(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1}$$

Andiamo a controllare i poli di questa funzione:

$$e^{\beta z} = -1 \quad \beta z = i(2n + 1)\pi$$

$$z = iT\pi(2n + 1) = i\omega_n$$

Che polo ha  $z$  in  $i\omega_n$ ?

$$\lim_{z \rightarrow i\omega_n} f(z)(z - i\omega_n) = \frac{z - i\omega_n}{e^{\beta z} + 1} = \frac{1}{\beta e^{\beta z}} = -T$$

La funzione  $f(z)$  ha un polo semplice con residuo  $-T$ . Supponiamo adesso di fare l'integrale su un cammino chiuso riportato in Figura 6.28, abbiamo che la sommatoria seguente può essere scritta come:

$$-\frac{1}{2\pi i} \oint_c f(z) F(z) = T \sum_n F(i\omega_n)$$

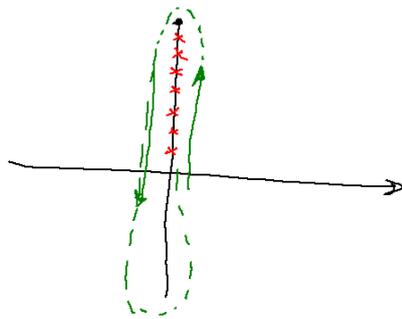


Figura 6.28: Cammino di integrazione

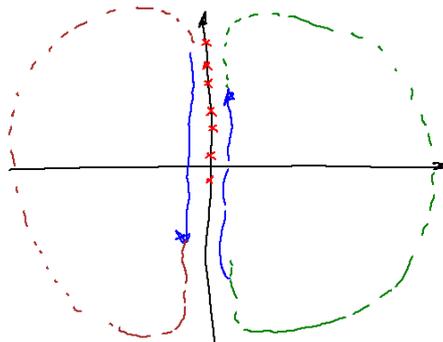


Figura 6.29: Se i due integrali laterali al contorno si annullano allora questo integrale può essere rifatto chiudendolo sulle circonferenze laterali.

Questa somma discreta può essere scritta come l'integrale su un percorso chiuso. Se per caso la funzione  $f(z)F(z)$  va a zero abbastanza velocemente lungo i cammini laterali allora i due integrali che circondano i residui sono nulli:

Ricapitolando, abbiamo visto che:

$$T \sum_{\omega_n} F(i\omega_n) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_c f(z)F(z)$$

Se questa funzione si annulla sugli archi esterni possiamo scrivere l'integrale come la somma sui residui che si trovano nei semipiani complessi a reali positivi o negativi. Abbiamo visto che:

$$T \sum \frac{1}{i\omega_n - \xi_k} e^{-i\omega_n 0^-} = f(\xi)$$

Studiamo la funzione seguente, e vediamo se effettivamente si annulla nei due archi. Se così fosse avremo dimostrato la relazione:

$$f(z)F(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{z - \xi} e^{-z0^-}$$

La funzione di fermi da sola non basta per dire che si annulla sul semicerchio. Se però supponiamo che la parte reale di  $z$  positivo,  $z \sim R$ , per cui la funzione si annulla in modo fantastico per via dell'esponenziale al denominatore. Sull'asse negativo il reale di  $z$  è negativo, quindi il termine esponenziale al numeratore ci ammazza la funzione. Se andiamo quindi a calcolare l'integrale sulla doppia  $D$  è facile dimostrare che:

$$-\frac{1}{2\pi i} \oint_c \frac{1}{1 + e^{\beta z}} \frac{e^{-z0^-}}{z - \xi_k} = \frac{1}{e^{\xi_k z} + 1}$$

### Esercizio

Calcoliamo il termine:

$$F(i\Omega_m) = T \sum_n \frac{1}{i\omega_n + i\Omega_m - a} - \frac{1}{i\omega_n - b}$$

Dove  $\omega_n$  è una frequenza fermionica, mentre  $\Omega_m$  è bosonica:

$$\omega_n = (2n + 1)\pi T \quad \Omega_m = 2m\pi T$$

Calcoliamo prima il valore per  $\Omega_m = 0$ , per semplicità.

$$T \sum_n \frac{1}{i\omega_n - a} - \frac{1}{i\omega_n - b}$$

Prendiamo la funzione  $f(z) \frac{1}{z-a} \frac{1}{z-b}$ , e scriviamo la somma dei residui. Con  $f(z)$  funzione di fermi:

$$\sum_n \frac{1}{i\omega_n - a} - \frac{1}{i\omega_n - b} = \sum_{res} R$$

$$R_a = \frac{f(a)}{a-b} \quad R_b = \frac{f(b)}{b-a}$$

$$\sum_n \frac{1}{i\omega_n - a} - \frac{1}{i\omega_n - b} = \frac{f(a) - f(b)}{a-b}$$

Questo poteva essere fatto prima:

$$T \sum_n \frac{1}{i\omega_n - a} - \frac{1}{i\omega_n - b} = T \frac{1}{a-b} \sum_n \left[ \frac{1}{i\omega_n - a} - \frac{1}{i\omega_n - b} \right]$$

Il primo termine possiamo farlo convergere, e danno:

$$T \sum_n \frac{1}{i\omega_n - a} - \frac{1}{i\omega_n - b} = \frac{f(a) - f(b)}{a-b}$$

Finire a casa l'esercizio. (Ricordare che  $\Omega_l$  è una funzione bosonica).

### 6.6.1 Sviluppo delle funzioni di Mazubara

Dobbiamo calcolare la funzione di Green di Mazubara, definita come:

$$G(r_1, r_2, \tau_1, \tau_1) = -\frac{1}{Z} \text{tr} e^{-\beta(H-\mu N)} T \tilde{\psi}(r, \tau) \tilde{\psi}^+(r', \tau')$$

$$\tilde{\psi}(r, \tau) = e^{\tau(H-\mu N)} \psi(r) e^{-\tau(H-\mu N)}$$

Dove  $\tau$  e  $\tau'$  sono definiti tra 0 e  $\frac{1}{T}$ .

La teoria perturbativa di questa funzione segue la stessa cosa che abbiamo fatto per la teoria perturbativa a temperatura zero. Introduciamo la matrice  $\sigma(\tau, 0)$ , che è definita come:

$$\sigma(\tau, 0) = e^{\tau(H_0-\mu N)} e^{-\tau(H-\mu N)}$$

Che è la stessa cosa della scrittura formale della matrice  $S$ . Vediamo che con questa matrice  $\sigma$  possiamo subito scrivere:

$$\tilde{\psi}(r, \tau) = \sigma(0, \tau) e^{(H_0-\mu N)\tau} \psi e^{-\tau(H_0-\mu N)} \sigma(\tau, 0)$$

Adesso la  $\psi$  evolve soltanto con  $H_0$  e possiamo riscrivere questa espressione come:

$$\tilde{\psi}(r, \tau) = \sigma(0, \tau) \psi(r, \tau) \sigma(\tau, 0)$$

Anche l'esponenziale lo possiamo scrivere sfruttando questo termine di integrazione:

$$e^{-\beta(H-\mu N)} = e^{-\beta(H_0-\mu N)} \sigma(\beta, 0)$$

Supponiamo che  $\tau > \tau'$ , possiamo applicare questa scrittura anche alla funzione di Green di Mazubara, esattamente allo stesso modo di quanto fatto per le funzioni di Green.

Questa è la scrittura formale di  $\sigma$ , ma per fare i conti occorre trovare una scrittura perturbativa.

$$\frac{\partial \sigma(\tau, 0)}{\partial \tau} = (H_0 - \mu N) \sigma(\tau, 0) - e^{\tau(H_0-\mu N)} (H - \mu N) e^{-\tau(H-\mu N)}$$

$$\frac{\partial \sigma(\tau, 0)}{\partial \tau} = (H_0 - \mu N) \sigma(\tau, 0) - e^{\tau(H_0 - \mu N)} (H_0 + H_I - \mu N) e^{-\tau(H_0 - \mu N)} \sigma(\tau, 0)$$

Il termine con  $H_0$  si cancella in entrambi i termini:

$$\frac{\partial \sigma(\tau, 0)}{\partial \tau} = -H_I(\tau) \sigma(\tau, 0)$$

La soluzione di questa equazione è proprio la stessa della matrice  $S$ :

$$\sigma(\tau, 0) = T_\tau e^{-\int_0^\tau H_I(\tau') d\tau'}$$

Con  $T_\tau$  T-prodotto in  $\tau$ . Con questa scrittura possiamo riscrivere le funzione di Mazubara:

$$G(r, r', \tau, \tau') = -\frac{1}{Z} \text{tr} e^{-\beta(H_0 - \mu N)} \sigma(\beta, \tau) \psi(r, \tau) \sigma(\tau, \tau') \psi^+(r', \tau') \sigma(\tau', 0) \quad \tau > \tau'$$

Possiamo accorpate le  $\sigma$  esplicitando le loro espressioni:

$$G(r, r', \tau, \tau') = -\frac{1}{Z} \text{tr} e^{-\beta(H_0 - \mu N)} T_\tau \sigma(\beta, 0) \psi(r, \tau) \psi^+(r', \tau')$$

La funzione di partizione  $Z$  può essere calcolata come la traccia del fattore di boltzman:

$$Z = \text{tr} e^{-\beta(H_0 - \mu N)} \sigma(\beta, 0)$$

Esplicitiamo la dipendenza da  $Z_0$ :

$$G(r, r', \tau, \tau') = -\frac{1}{Z} \frac{1}{Z_0} \text{tr} e^{-\beta(H_0 - \mu N)} T_\tau \sigma(\beta, 0) \psi(r, \tau) \psi^+(r', \tau')$$

In questo modo il termine con  $\frac{1}{Z_0}$  è la media termica, ma anche il fattore  $Z/Z_0$  è la media termica della matrice sigma.

$$\frac{Z}{Z_0} = \langle \sigma \rangle$$

Da cui segue:

$$G(r, r', \tau, \tau') = -\frac{\langle T_\tau \sigma(\beta, 0) \psi(r, \tau) \psi^+(r', \tau') \rangle}{\langle \sigma(\beta, 0) \rangle}$$

Da qui si ha la completa equivalenza con quello che abbiamo fatto per temperatura nulla. Si può vedere anche qui che la matrice  $S$  al denominatore cancella esattamente tutti i diagrammi sconnessi:

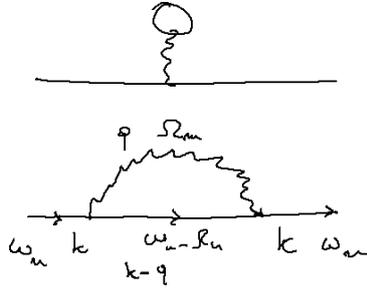
$$G(r, r', \tau, \tau') = -\langle T_\tau \sigma(\beta, 0) \psi(r, \tau) \psi^+(r', \tau') \rangle_c$$

Anche in questo caso ci sono gli stessi diagrammi, le regolette sul segno:

$$(-1)^n (-1)^F$$

Con  $n$  ordine del diagramma,  $F$  numero di loop chiusi nel diagramma. L'integrale passa invece in una sommatori:

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \longrightarrow T \sum_n \omega_n$$



Se vogliamo calcolare i Diagrammi di Hartree-Fock di Mazubara  
 Il diagramma di Fock:

$$(-1) \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} T \sum_{\Omega_m} U(q, \Omega_m) G^0(\omega_n - \Omega_m, k - q) e^{-i(\omega_n - \Omega_m)0^-}$$

L'esponenziale è stato aggiunto per tenere conto del fatto che è un diagramma a tempi uguali. Se andiamo a calcolarlo:

$$- \sum_q V(q) n_{k-q} \quad n_{k-q} = \frac{1}{e^{\beta \xi_{k-q}} + 1}$$

Dove questa volta  $n_{k-q}$  è la funzione di Fermi. Allo stesso modo anche il termine di Hartree viene come nel caso a temperatura nulla.

In questo tipo di approccio non c'è nessuna ipotesi di tipo adiabatica. Le frequenze fermioniche sono pari a:

$$\omega_n = (2n + 1)\pi T$$

Si può vedere che nelle linee di interazione hanno delle frequenze di natura bosonica, e si può vedere dal fatto che le linee di interazioni che connettono frequenze fermioniche devono per forza essere numeri pari (per mantenere la disparità delle frequenze fermioniche) da cui le linee di interazioni sono sempre dei bosoni.

### 6.6.2 Dinamica di Mazubara

Mostriamo ora il legame tra questa evoluzione immaginaria che abbiamo sviluppato e l'evoluzione reale del sistema. Delle funzioni estremamente importanti sono le funzioni di risposta del sistema, queste funzioni sono date da:

$$\chi_{BA}^R = i\theta(t - t') \langle [\tilde{B}(t), \tilde{A}(t')] \rangle$$

Questa funzione (detta funzione *ritardata*) ci dice qual è la risposta nella grandezza fisica  $B$  se abbiamo messo una perturbazione del sistema associata alla grandezza fisica  $A$ . Questa funzione da la risposta alla fisica vera del sistema. Possiamo calcolare il:

$$\chi_{BA}^M = \langle T_\tau \tilde{B}(\tau) \tilde{A}(0) \rangle$$

Questa grandezza è la funzione di Mazubare. In realtà se conosciamo la trasformata di Fourier di Mazubara abbiamo che questa funzione (che possiamo conoscere attraverso la funzione di Mazubara) ci da informazioni sulla risposta del sistema:

$$\chi^M(i\omega_n) \longrightarrow \chi_{BA}^R(\omega + i0^+)$$

Sfruttiamo la rappresentazione di Lenmann.

$$-i\theta(t) \frac{1}{Z} \text{tr} e^{-\beta(H-\mu N)} \left[ \tilde{B}(t), \tilde{A}(0) \right]$$

Immaginiamo di conoscere tutti gli autostati  $\langle n |$  del sistema tali che:

$$\langle n | e^{i(H-\mu N)t} | n \rangle = e^{iE_n t} \quad B(T) = e^{i(H-\mu N)t} B e^{-i(H-\mu N)t}$$

Esplicitiamo il conto:

$$-\frac{i\theta(t)}{Z} \sum_{n, m} [\langle n | e^{-\beta E_n} e^{iE_n t} B e^{-iE_m t} | m \rangle \langle m | A | n \rangle - \langle n | e^{-\beta E_n} A | m \rangle \langle m | e^{iE_m t} B e^{-iE_n t} | n \rangle]$$

Possiamo scambiare le label sul secondo termine:

$$\begin{aligned} &-\frac{i\theta(t)}{Z} \sum_{n, m} [\langle n | e^{-\beta E_n} e^{iE_n t} B e^{-iE_m t} | m \rangle \langle m | A | n \rangle - \langle m | e^{-\beta E_m} A | n \rangle \langle n | e^{iE_n t} B e^{-iE_m t} | m \rangle] \\ &\quad - \frac{i\theta(t)}{Z} \sum_{n, m} \langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle e^{i(E_n - E_m)t} [e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}] \end{aligned}$$

Prendiamo la trasformata di Fourier:

$$\begin{aligned} &-\frac{i}{Z} \int_0^\infty dt e^{i(\omega + i0^+)t} \sum_{n, m} \langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle e^{i(E_n - E_m)t} [e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}] = \\ &= \frac{i}{Z} \sum_{n, m} \frac{\langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle [e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}]}{i(E_n - E_m + \omega + i0^+)} \\ &\quad \frac{1}{Z} \sum_{n, m} \frac{\langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle [e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}]}{\omega - (E_m - E_n) + i0^+} \end{aligned}$$

Questo è il risultato della rappresentazione di Lenmann. Adesso dobbiamo fare la stessa cosa con la funzione di Mazubara, e si dimostra che.

$$\chi_{BA}^M(i\omega_{n'}) = \frac{1}{Z} \sum_{n, m} \frac{B_{m n} A_{m n} [e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}]}{i\omega_{n'} - (E_n - E_m)}$$

Se definiamo la funzione  $\chi_{BA}^R(z)$  con  $z = \omega + i\omega''$ , con  $\omega'' > 0$ , stiamo facendo il prolungamento analitico della funzione  $\chi_{BA}^R$  nel semipiano complesso superiore.

$$\chi_{BA}^R(z = i\omega_n) = \chi^M(i\omega_n)$$

La cosa di cui ci accorgiamo è che la funzione di Mazubare è la funzione ritardata di variabile complessa  $z$  calcolata sull'asse immaginario alle frequenze di mazubara bosoniche. Il prolungamento analitico è unico. Noi conosciamo la

$\chi^M$  in un numero discreto di punti, equispaziati. Il punto all'infinito è un punto di accumulazione, e quindi, poiché la funzione è analitica in tutto il semipiano superiore<sup>3</sup> possiamo conoscere la funzione di risposta. La conoscenza della funzione di Mazubara determina in modo univoco la  $\chi^R$ .

### 6.6.3 Prolungamento analitico della funzione di Mazubara

Il problema adesso è quello di fare la continuazione analitica. Chiaramente la funzione di green imperturbata è molto semplice:

$$\mathcal{G}^0(i\omega_n, k) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_k}$$

La funzione è ritardata:

$$G^R(z, k) = \frac{1}{z - \xi_k}$$

Da cui la funzione di Green libera è semplicemente:

$$G^R(\omega, k) = \frac{1}{\omega + i0^+ - \xi_k}$$

Se abbiamo un'espressione esplicita della funzione la sappiamo fare. In genere la situazione è molto più complicata. Spesso si utilizza il meccanismo di Mazubara non per fare un conto analitico, ma per fare un conto numerico. Abbiamo un'espressione:

$$\mathcal{G}(\tau) \quad 0 < \tau < \frac{1}{\beta}$$

Quindi conosciamo il risultato per un  $\tau$  discreto, non per tutte le frequenze, ma solo per un set discreto delle frequenze. Fare la continuazione analitica di questo oggetto non è banale. La cosa non è più esatta ma esistono metodi approssimati. Se conosciamo  $\mathcal{G}$  per un set finito, sappiamo che deve andare a zero per ordine  $n + 1$ :

$$\mathcal{G}(\omega_n) = \frac{P_n}{Q_{n+1}}$$

Dove  $P_n$  e  $Q_{n+1}$  sono due polinomi di ordine  $n$  e  $n + 1$ . Abbiamo  $N$  punti noti. Il numero di informazioni che servono sono.

$$N = 2n + 3$$

A questo punto la nostra funzione è un rapporto di polinomi e farne la continuazione analitica è banale. Ci sono tutte varie proprietà che deve soddisfare  $Q$  (ad esempio deve avere poli solo sul semipiano inferiore).

## 6.7 Self energia al secondo ordine

Considereremo un modello in cui l'interazione è una costante che non dipende da  $q$ , questo implica che sul reticolo è un'interazione puramente locale (a delta di Dirac) e quindi gli spin devono essere opposti delle particelle:

$$U(q) = U$$

---

<sup>3</sup>Due funzioni analitiche nella stessa regione che sono uguali in un intorno di un punto di accumulazione, sono uguali in qualunque punto.

$$\sum_i a_{i\sigma}^+ a_{i-\sigma}^+ a_{i-\sigma} a_{i\sigma} = n_{i\sigma} n_{i-\sigma}$$

Lavoreremo nella scrittura a temperatura finita.

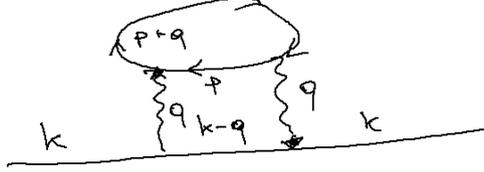


Figura 6.30: Diagramma del secondo ordine sulla self-energia

Andremo a calcolare la self-energia per il diagramma di Habard (Figura 6.30).

Il  $(-1)^2$  viene dal fatto che è un diagramma del secondo ordine, l'altro  $-1$  è dovuto al loop chiuso. Le due somme nelle frequenze si portano un  $T^2$  e la somma spaziale si porta un  $\frac{1}{V}$

$$k = \vec{k} i\omega \quad q = \vec{q} i\Omega \quad p = \vec{p} i\varepsilon$$

$$\Sigma(\vec{k}, i\omega) = (-1)^2 (-1) U^2 \frac{T^2}{V^2} \sum_{\vec{p}\vec{q}, i\varepsilon_m, i\Omega_m} \frac{1}{i\omega_l - i\Omega_m - \xi_{k-q}} \frac{1}{i\varepsilon_m + i\Omega_m - \xi_{p+q}} \frac{1}{i\varepsilon_m - \xi_p}$$

Le frazioni sono le funzioni di Green calcolate per le tre linee fermioniche (non si considerano quelle entranti e uscenti). Si nota che  $\omega$  e  $\varepsilon$  sono frequenze fermioniche,  $\Omega$  è una frequenza bosonica. Ricordiamoci la scrittura in fratti semplici:

$$T \sum_{\varepsilon} \frac{1}{i\varepsilon_n - \alpha} = f(\alpha)$$

Dividiamo la scrittura in fratti semplici

$$\frac{1}{i\varepsilon_m + i\Omega_m - \xi_{p+q}} \frac{1}{i\varepsilon_m - \xi_p} = \left[ \frac{1}{i\varepsilon_m - \xi_p} - \frac{1}{i\varepsilon_m + i\Omega_m - \xi_{p+q}} \right] \frac{1}{i\Omega_m - \xi_{p+q} + \xi_p}$$

Adesso sommiamo sulle frequenze fermioniche, il primo termine ci da:

$$[f(\xi_p) - f(\xi_{p+q})] \frac{1}{i\Omega - \xi_{p+q} + \xi_p}$$

Abbiamo quindi risolto una somma:

$$\Sigma(\vec{k}, i\omega) = (-1)^2 (-1) U^2 \frac{T}{V^2} \sum_{\vec{p}\vec{q}, i\Omega_m} \frac{1}{i\omega_l - i\Omega_m - \xi_{k-q}} [f(\xi_p) - f(\xi_{p+q})] \frac{1}{i\Omega - \xi_{p+q} + \xi_p}$$

Facciamo la stessa cosa con i due termini che avanzano:

$$\frac{1}{i\omega_l - i\Omega_m - \xi_{k-q}} \frac{1}{i\Omega - \xi_{p+q} + \xi_p} = - \left[ \frac{1}{i\Omega_m - (\xi_{p+q} - \xi_p)} - \frac{1}{i\Omega_m - i\omega_l + \xi_{k-q}} \right] \frac{1}{\xi_{k-q} + \xi_{p+q} - \xi_p - i\omega_l}$$

Quel segno meno davanti ci mangia il meno 1 davanti a tutto. Se facciamo la somma, poiché le frequenze sono puramente bosoniche, il primo termine è un fattore di Bose. Essendo bosoni la funzioni di Green per tempi leggermenti negativi, non devo cambiare segno quindi questa somma ha un segno opposto rispetto alla funzione di fermi. Il termine è una frequenza fermionica. Quindi questo termine diventa:

$$\Sigma(\vec{k}, i\omega) = U^2 \frac{1}{V^2} [-b(\xi_{p+q} - \xi_p) - f(-\xi_{k-q})] [f(\xi_p - f(\xi_{p-q}))] \frac{1}{\xi_{k-q} + \xi_{p+q} - \xi_p - i\omega_l}$$

A questo punto si passa dalla funzione di Mazubara alla self-energia ritardata, facendo il prolungamento analitico:

$$\Sigma(\vec{k}, z) = U^2 \frac{1}{V^2} [-b(\xi_{p+q} - \xi_p) - f(-\xi_{k-q})] [f(\xi_p - f(\xi_{p-q}))] \frac{1}{\xi_{k-q} + \xi_{p+q} - \xi_p - z}$$

Adesso siamo interessanti all'asse reale:

$$z \rightarrow \omega + i0^+$$

$$\Sigma(\vec{k}, z) = U^2 \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}\vec{q}} [-b(\xi_{p+q} - \xi_p) - f(-\xi_{k-q})] [f(\xi_p - f(\xi_{p-q}))] \frac{1}{\xi_{k-q} + \xi_{p+q} - \xi_p - (\omega + i0^+)}$$

Scriviamola meglio

$$\Sigma(\vec{k}, z) = U^2 \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}\vec{q}} [b(\xi_{p+q} - \xi_p) + f(-\xi_{k-q})] [f(\xi_p - f(\xi_{p-q}))] \frac{1}{\omega + i0^+ - \xi_{k-q} - \xi_{p+q} + \xi_p}$$

Questo oggetto può avere dei poli. Per calcolarli bisogna immaginare di spezzare l'integrando in una parte principale (reale) più un termine immaginario, che ha una delta di Dirac nel polo ( $-i\pi\delta$ ). Studiamo la parte immaginaria:

$$\Sigma'' = -i\pi \frac{U^2}{V^2} \sum_{\vec{p}\vec{q}} \delta(\omega - \xi_{k-q} - \xi_{p+q} + \xi_p) [b(\xi_{p+q}) + f(-\xi_{k-q})] [f(\xi_p) - f(\xi_{p+q})]$$

C'è una parte che è una  $\delta$ . Questa parte è ovvia, deve essere che:

$$\omega + \xi_p = \xi_{k-q} + \xi_{p+q}$$

Questa regola rappresenta la conservazione dell'energia. La presenza delle funzioni di fermi ci da quello che avevamo discusso nella teoria di Landau, a temperatura nulla le funzioni di fermi sono delle  $\theta$ , la funzione di bose è sempre nulla:

$$\xi_p < 0 \quad [f(\xi_p) - f(\xi_{p+q})]$$

Se  $f(\xi_p) = 1$  allora per non ammazzare la differenza  $f(\xi_{p+q}) = 0$  quindi  $\xi_{p+q} > 0$ . Stessa cosa per le funzioni di Bose, per argomento positivo è nulla:

$$b(\xi_{p+q} - \xi_p) = 0 \quad f(-\xi_{k+q}) = 1 \quad \Rightarrow \quad \xi_{k-q} > 0$$

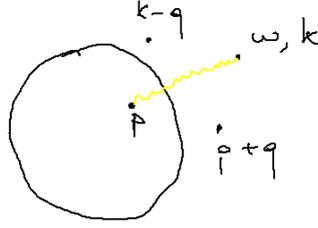


Figura 6.31: Schema di interazione che abbiamo studiato con questo diagramma.

Abbiamo raggiunto la conclusione che la particella a  $k - q$  e a  $p + q$  sono in uno stato non eccitato, mentre  $p$  è una particella che si trova nel mare di fermi. Stiamo descrivendo un'interazione tra una particella fuori il mare di fermi, una dentro che vanno a finire in due stati fuori dalla sfera di fermi

Questo oggetto a temperatura nulla è proporzionale a  $\omega^2$ , questo si vede applicando la regola d'oro di fermi alla delta di Dirac.

$$\Sigma'' \propto \omega^2$$

Nel conto per la teoria di Landau veniva  $\Sigma'' \propto \xi_k^2$ , perché nella  $\delta$  appariva  $\xi_k$  non  $\omega$ .

Andiamo a fare un po' di manipolazioni algebriche sul termine scritto con le funzioni di Bose e Fermi. Snelliamo gli indici, definendo:

$$p = 1 \quad p + q = 2 \quad k - q = 3 \quad f(\alpha) = 1 - f(-\alpha)$$

$$[b(2 - 1) + f(-3)] [f(1) - f(2)] = [1 - f(3)] [f(1) - f(2)] + \frac{1}{e^{\xi_2 - \xi_1} - 1} \left[ \frac{1}{e^{\xi_1} + 1} - \frac{1}{e^{\xi_2} + 1} \right]$$

Facciamo il minimo comune multiplo tra dell'ultimo pezzo

$$\frac{1}{e^{\xi_2 - \xi_1} - 1} \left[ \frac{1}{e^{\xi_1} + 1} - \frac{1}{e^{\xi_2} + 1} \right] = \frac{e^{\xi_2} - e^{\xi_1}}{(e^{x_1} + 1)(e^{x_2} + 1)} \frac{e^{\xi_1}}{e^{\xi_2} - e^{\xi_1}}$$

$$\frac{1}{e^{x_2} + 1} \left[ 1 - \frac{1}{e^{\xi_2 + 1}} \right] = f(2) [1 - f(1)]$$

$$[b(2 - 1) + f(-3)] [f(1) - f(2)] = [1 - f(3)] [f(1) - f(2)] + f(2) [1 - f(1)]$$

Svolgendo tutti i conti:

$$[b(2 - 1) + f(-3)] [f(1) - f(2)] = f(1)[1 - f(2)][1 - f(3)] + [1 - f(1)]f(2)f(3)$$

Questa è una bella interpretazione, a temperatura finita stiamo facendo il processo di scattering, questo è proporzionale alla probabilità che la linea 1 sia occupata, per la probabilità che la particella 2 sia vuota e la probabilità che la particella 3 sia vuota, ossia di avere una particella in 1 e una buca in 2 e 3, il secondo termine il contrario, una buca in 1 e particelle in 2 e 3.

Questo oggetto ci descrive sia l'interazione di particelle, che l'interazione tra le buche. Se mettiamo a frequenza nulla il termine di occupazione questo termine diventa  $T^2$ .

## 6.8 Equazioni del moto

Il modo di studiare le funzioni di Green è la teoria perturbativa. Riscriviamo le equazioni del moto usando le funzioni di Green, troveremo che per conoscere il moto della singola particelle, occorre conoscere anche la propagazione a due particelle, c'è un mescolamento tra i termini di particella singola e le interazioni a coppie.

La definizione della funzione di green a temperatura nulla.

$$G(r, r', t, t') = -i \langle \Phi | T \tilde{\psi}(r, t) \tilde{\psi}^+(r', t') | \Phi \rangle$$

La nostra hamiltoniana non perturbata è:

$$H = H_0 + H_i$$

$$H = \underbrace{\sum_{\sigma} \int dr \psi_{\sigma}^+(r_1) \left( -\frac{\nabla^2}{2m} \right) \psi_{\sigma}(r_1)}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int dr_1 dr_2 \psi_{\sigma}^+(r_1) \psi_{\sigma'}^+(r_2) V(r_1 - r_2) \psi_{\sigma'}(r_2) \psi_{\sigma}(r_1)}_{H_i}$$

Scriviamo la pittura di Heisemberg:

$$\partial_t \tilde{\psi} = i [H, \tilde{\psi}]$$

$$G(r, r', t, t') = -\theta(t - t') i \langle T \tilde{\psi}_{\sigma}(r, t) \tilde{\psi}_{\sigma'}^+(r', t') \rangle + \theta(t' - t) i \langle T \tilde{\psi}_{\sigma}(r', t') \tilde{\psi}_{\sigma'}^+(r, t) \rangle$$

Calcoliamo l'equazione del moto per la  $G$ :

$$\begin{aligned} \partial_t G &= -i\theta(t - t') \langle i [H, \tilde{\psi}_{\sigma}(r, t)] \tilde{\psi}_{\sigma'}^+(r', t') \rangle + i\theta(t - t') \langle \tilde{\psi}_{\sigma'}^+(r', t') i [H, \tilde{\psi}_{\sigma}(r, t)] \rangle - \\ &\quad - i\delta(t - t') \langle \psi_{\sigma}(r) \psi_{\sigma'}^+(r) \rangle - i\delta(t - t') \langle \psi_{\sigma'}^+(r) \psi_{\sigma}(r) \rangle \end{aligned}$$

$$\partial_t G = -i \langle T i [H, \tilde{\psi}_{\sigma}(r, t)] \tilde{\psi}_{\sigma'}^+(r', t') \rangle - i\delta(x - x') \delta_{\sigma\sigma'}$$

Dove il coefficiente del termine con la delta temporale viene l'anticommutatore che mi da la delta nelle  $x$  per i fermioni

$$i[H_0, \psi] = i \left\{ \sum_{\sigma_1} \int dr_1 \psi_{\sigma_1}^+(r_1) \left( -\frac{\nabla_{r_1}^2}{2m} \right) \psi_{\sigma_1}(r_1) \psi_{\sigma}(r) - \sum_{\sigma_1} \int dr_1 \psi_{\sigma}(r) \psi_{\sigma_1}^+(r_1) \left( -\frac{\nabla_{r_1}^2}{2m} \right) \psi_{\sigma}(r_1) \right\}$$

Posso prendere la  $\psi_{\sigma}(r)$  del primo termine e scambiarla con la  $\psi_{\sigma_1}(r_1)$ , ottenendo un segno negativo. Possiamo portarla davanti al laplaciano, e ottenere:

$$i[H_0, \psi] = -i \sum_{\sigma_1} \int dr_1 \{ \psi_{\sigma_1}^+(r_1), \psi_{\sigma}(r) \} \left( -\frac{\nabla_{r_1}^2}{2m} \right) \psi_{\sigma_1}(r_1)$$

L'anticommutatore tira fuori una delta di Dirac che risolve l'integrale.

$$i[H_0, \psi] = i \frac{\nabla_r^2}{2m} \tilde{\psi}_{\sigma}(r)$$

$$\partial_t G = -i \langle T i \frac{\nabla_r^2}{2m} \tilde{\psi}_{\sigma}(r) \tilde{\psi}^+(r', t') \rangle - i\delta_{\sigma\sigma'} \delta(x - x')$$

Il laplaciano possiamo portarlo fuori e moltiplicare tutto per  $i$ :

$$i\partial_t G = -\frac{\nabla^2}{2m} [G(r, r', t, t')] + \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(x - x')$$

$$\left( i\partial_t + \frac{\nabla^2}{2m} \right) G^0 = \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(x - x')$$

La  $G_0$  soddisfa un'equazione alle derivate parziali. La soluzione dell'equazione non ci dà la prescrizione di come girare attorno al polo, ma è nelle condizioni al contorno. Adesso calcoliamo il termine di interazione, prendiamo il commutatore tra  $H_I$  e  $\psi(r)$

$$[H_I, \psi(r)] \propto \psi^+(r_1)\psi^+(r_2)\psi(r_2)\psi(r_1)\psi(r) - \psi(r)\psi^+(r_1)\psi^+(r_2)\psi(r_2)\psi(r_1)$$

Dove abbiamo sottinteso gli integrali e il potenziale di interazione:

$$\psi^+(r_2)\psi(r) = -\psi(r)\psi^+(r_2) + \delta(r_2 - r)$$

Da cui, riscrivendo tutti i pezzi.:

$$\partial_t \tilde{\psi} = i[H_I, \tilde{\psi}(r)] = \int dr_1 dr_2 [\psi^+(r_1)\delta(r_2 - r)\psi(r_2)\psi(r_1) - \delta(r_1 - r)\psi^+(r_2)\psi(r_2)\psi(r_1)] \frac{1}{2} iV(r_1 - r_2)$$

Sul secondo termine possiamo cambiare  $r_1$  ed  $r_2$ , e i due termini sono uguali a meno di un segno (e due operatori scambiati che cambiano il segno). Svolgendo i conti arriviamo al termine aggiuntivo all'equazione:

$$\left( i\partial_t + \frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\sigma, \sigma'}(x - x') = \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(x - x') - i \sum_{\gamma} \int dr_1 V(r - r_1) \langle T \tilde{\psi}_{\gamma}^+(r_1, t) \tilde{\psi}_{\gamma}(r_1, t) \tilde{\psi}_{\sigma}(r, t) \tilde{\psi}_{\sigma}^+(r', t') \rangle$$

L'ultimo termine è una funzione di Green a due particelle, questo termine correttivo mi tiene conto dell'interazione. Ci potremo scrivere l'evoluzione dell'operatore a 4 campi, e vedremo che viene funzione di un operatore a 6 campi, e così via. Posso chiudere l'equazione con approssimazioni, ad esempio il teorema di Wick mi permette di spezzare questa funzione di Green come il prodotto di più funzione di green a due campi. Questa è l'approssimazione di campo medio.

## Capitolo 7

# Hartree-Fock

Il metodo di Hartree-Fock è un metodo molto facile per studiare le simmetrie del sistema, studieremo il ferromagnetismo itinerante attraverso lo studio dell'equazione di Hartree-Fock, studieremo anche le instabilità antiferromagnetiche.

### 7.1 Ferromagnetismo

L'energia di Hartree-Fock è data dalla somma dei diagrammi di Hartree e Fock

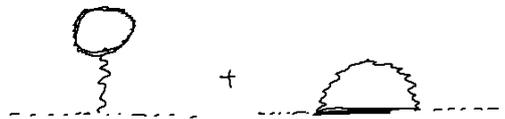


Figura 7.1: Diagrammi di Hartree Fock, dove le linee spesse rappresentano la  $G_{HF}$  non la  $G_0$

$$G_{HF} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_1 - \Sigma_{HF}}$$

$$\Sigma_H = V(0)\rho$$

$$\Sigma_F = - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} V(q)n_{k-q}^0$$

Prendiamo come hamiltoniana a riposo quella del modello a *tight-banding*

$$H_0 = - \sum_k \varepsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}$$

L'interazione la scegliamo locale, sullo stesso sito

$$H_I = U \sum_i a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow}$$

Una volta scritto questo oggetto l'interazione esiste solo tra spin opposti (le particelle fermioniche sono sullo stesso stato). Dato che  $V(q)$  è costante, indipendente da  $q$ , la  $\Sigma$  di Fock diventa:

$$\Sigma_F = -\frac{1}{2} V \rho \delta_{\sigma\sigma'}$$

Il diagramma di Fock mi cancella il diagramma di Hartree con spin uguali, mi rimane solo il diagramma di Hartree con spin opposti.

Quindi in questo caso l'unico diagramma è quello di Hartree, che vive con spin opposto. La nostra funzione di Hartree Fock può essere rappresentata dal solo diagramma di Hartree:

$$G_{\uparrow} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_1 - U\rho_{\downarrow}} \quad G_{\downarrow} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_1 - U\rho_{\uparrow}}$$

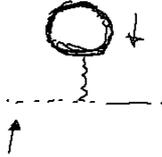


Figura 7.2: Uno dei termini di Hartree che sopravvive.

Per il sistema può essere conveniente sbilanciare le due bande. Se abbiamo che

$$\rho_{\uparrow} = \rho_{\downarrow} = \frac{\rho}{2}$$

Il sistema conserva la simmetria. Cerchiamo però soluzioni più interessanti, di rottura della simmetria in cui:

$$\rho_{\downarrow} \neq \rho_{\uparrow}$$

Per quale motivo dovrebbe succedere qualcosa?

Se abbiamo due bande riempite fino all'energia di fermi:

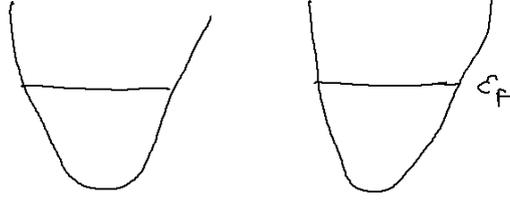
$$n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$$

Da cui:

$$\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle = \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$$

Posso scrivere questi termini in questa convenzione.

$$n_{\uparrow} = \frac{\rho}{2} + \frac{m}{2} \quad n_{\downarrow} = \frac{\rho}{2} - \frac{m}{2}$$



La differenza del numero di spin rappresenta la magnetizzazione:

$$m = \langle n_{\uparrow} \rangle - \langle n_{\downarrow} \rangle$$

Riscrivendo l'energia usando questa convenzione l'hamiltoniana di interazione diventa<sup>1</sup>:

$$H_I = U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle = U \sum_i \left[ \left( \frac{\rho}{2} \right)^2 - \left( \frac{m}{2} \right)^2 \right]$$

L'hamiltoniana di interazione si minimizza quando  $m$  è molto grande. Questo crea uno svuotamento in una banda, questo aumenta l'energia cinetica. Il problema del ferromagnetismo è un equilibrio tra energia cinetica, che tende a eguagliare  $n_{\uparrow}$  e  $n_{\downarrow}$  e l'interazione che tende invece ad allineare tutti gli spin. Se vince l'interazione si ottiene un ferromagnete, se vince l'energia cinetica otteniamo un paramagnete.

Dobbiamo trovare il valore di  $\rho_{\downarrow}$ . Per ricavarlo usiamo la funzione di Green, è l'integrale della funzione di Green, sappiamo già che esce fuori la funzione di Fermi:

$$\rho_{\downarrow} = \frac{1}{N} \sum_k f(\xi_k + U\rho_{\uparrow}) \quad \rho_{\uparrow} = \frac{1}{N} \sum_k f(\xi_k + U\rho_{\downarrow})$$

Abbiamo queste due equazioni, e cerchiamo una soluzione per  $\rho_{\uparrow} \neq \rho_{\downarrow}$ . Possiamo mostrare che se ammettono la soluzione definiscono un minimo di energia di campo medio.

$$\rho_{\downarrow} = \frac{1}{N} \sum_k f\left(\xi_k + U\frac{\rho}{2} + U\frac{m}{2}\right) \quad \rho_{\uparrow} = \frac{1}{N} \sum_k f\left(\xi_k + U\frac{\rho}{2} - U\frac{m}{2}\right)$$

$$\rho_{\downarrow} = \int d\xi N(\xi) f\left(\xi + U\frac{m}{2}\right) \quad \rho_{\uparrow} = \int d\xi N(\xi) f\left(\xi - U\frac{m}{2}\right)$$

Abbiamo due equazioni che possiamo sommare:

$$\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow} = \int d\xi N(\xi) \left[ f\left(\xi + U\frac{m}{2}\right) + f\left(\xi - U\frac{m}{2}\right) \right]$$

$$\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow} = m = - \int d\xi N(\xi) \left[ f\left(\xi - U\frac{m}{2}\right) - f\left(\xi + U\frac{m}{2}\right) \right]$$

<sup>1</sup>Questa hamiltoniana di interazione è detta modello di Hubbard.

La seconda è l'equazione di *self-consistenza* che andremo a studiare che definisce la magnetizzazione del materiale.

Iniziamo studiandola a temperatura nulla  $T = 0K$ . A temperatura nulla le  $f$  sono delle  $\theta$ .

$$m = \int_{-\frac{U}{2}m}^{\frac{U}{2}m} \dots$$

L'equazione, per piccoli  $m$ , può essere soddisfatta solo ad una condizione: la funzione integranda<sup>2</sup>, se  $m$  è piccolo, è lineare in  $m$ . L'equazione ha soluzione quando la funzione di sinistra (retta con pendenza 1) e quella di destra si incrociano.

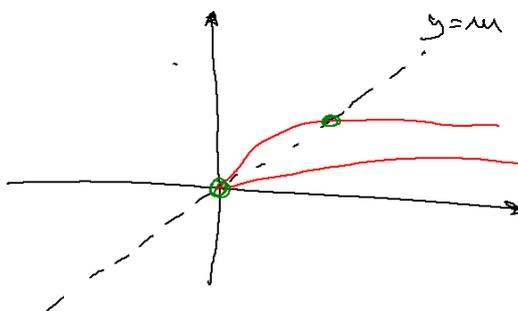


Figura 7.3: Le soluzioni ci sono se la pendenza della curva è maggiore di 1.

Le soluzioni dell'equazione ci sono se la pendenza della funzione di destra ha pendenza maggiore di 1.

$$m = -Um \int d\xi N(\xi) f'(\xi)$$

$$1 = -U \int d\xi N(\xi) f'(\xi)$$

Se ci mettiamo a temperatura nulla la derivata della funzione di Fermi diventa la delta di Dirac (con segno meno):

$$1 = UN(0) \quad T = 0$$

Questa è la condizione di ferromagnetismo a temperatura nulla:

$$1 = UN(\varepsilon_f)$$

Quando abbiamo visto il modello di Landau per il ferromagnetismo veniva che il fattore di enhancement di Stoner è dato da:

$$\frac{1}{1 + F_0^a}$$

<sup>2</sup>L'integranda è una funzione dispari in  $m$ , quindi il suo sviluppo per piccoli  $m$  contiene solo potenze dispari in  $m$ .

Usando il modello di Habard in approssimazione di campo medio questa condizione diventa:

$$\frac{1}{1 - U \frac{N(\epsilon)}{2}}$$

Il 2 mancante deriva dal fatto che non abbiamo incluso la molteplicità di spin all'interno di  $N$ . Questa condizione può essere studiata anche a temperatura finita. In questo caso il diagramma di fase è rappresentato in Figura 7.4.

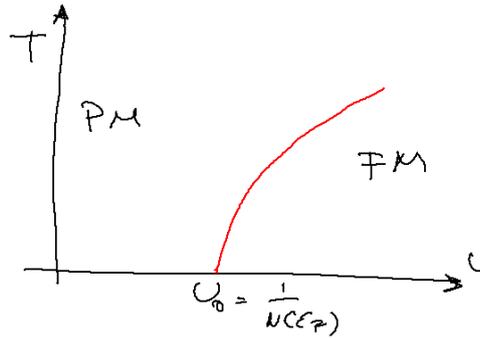


Figura 7.4: A temperatura finita il paramagnetismo e ferromagnetismo sono rappresentati da una transizione del secondo ordine.

Questa è una tipica transizione di fase descritta in campo medio. Se si guarda la magnetizzazione questa viene proporzionale a:

$$m \propto (U - U_c)^{\frac{1}{2}}$$

Queste sono le tipiche relazioni che vengono fuori in approssimazione di Hartree-Fock.

### 7.1.1 Campo medio

L'approssimazione di campo medio si può ricavare da tanti modi equivalenti. I diagrammi di Hartree-Fock vengono fuori se si fa una approssimazione di linearizzazione dell'hamiltoniana di interazione. Se abbiamo un hamiltoniana di spin, possiamo linearizzarla.

$$AB \sim A \langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (7.1)$$

Questa è una linearizzazione che corrisponde esattamente all'approssimazione di campo medio. Da cui l'hamiltoniana di interazione che dipende dagli spin:

$$H = \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j = \sum_i \sigma_i \langle \sigma_j \rangle$$

La stessa cosa si fa con i fermioni:

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_q V(q) a_{k-q}^+ a_{k'-q'}^+ a_{k'} a_{k\sigma}$$

$$H_I = \sum_{kk' \sigma \sigma'} V(0) \langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle a_{k'\sigma'}^+ a_{k'\sigma'} + \dots$$

In più ci sarebbero i termini mediati tra di loro,

$$H_I = \dots + \sum_q V(q) \langle a_{k+q\sigma}^k a_{k+q\sigma} a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} \rangle$$

L'ultimo termine va sottratto all'hamiltoniana per ottenere l'approssimazione corretta (vedi l'equazione 7.1).

$$H_I = \frac{1}{V} \left[ \sum_{kk' \sigma \sigma'} V(0) \langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle a_{k'\sigma'}^+ a_{k'\sigma'} - \sum_q V(q) \langle a_{k+q\sigma}^k a_{k+q\sigma} a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} \rangle \right]$$

La linearizzazione trasforma un problema interagente in un problema non interagente. Ci si accorge facilmente che questi due termini rappresentano esattamente:

$$H_I = \sum_k (\Sigma_H + \Sigma_F) a_k^+ a_k$$

Quindi la linearizzazione da esattamente lo stesso risultato dei diagrammi che abbiamo ottenuto.

L'approssimazione di campo medio può essere ottenuta anche dal principio variazionale. Supponiamo di prendere i termini  $\langle A \rangle$  definiti come le medie termodinamiche:

$$\langle A \rangle = \frac{\text{tr} A e^{-\beta H}}{Z_0}$$

E di trattarle come variabili libere. I valori di  $\langle \dots \rangle$  definiti sulle medie termodinamiche sono proprio quelli che minimizzano l'energia libera  $F(\langle A \rangle, \langle B \rangle)$ . Questo dimostra che l'ipotesi di campo medio è la migliore approssimazione lineare che possiamo avere.

## 7.2 Antiferromagnetismo

Partiamo dal modello di Habard:

$$-t \sum_{n.n.} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Questo modello è nato per descrivere sistemi fortemente correlati, nato perché i sistemi dovevano essere a banda semipiena, e un sistema semipiena a banda è necessariamente un metallo, invece esistono un sacco di sistemi che a banda mezza pieni sono degli isolanti, molto spesso sono isolanti antiferromagnetici. La pittura a bande non descriveva correttamente questi comportamenti. Prendiamo quindi la banda mezza piena. Prendiamo il termine di Hopping nullo ( $t = 0$ ). Lo stato fondamentale sarà quindi un solo elettrone per sito, poiché quando accoppio due elettroni sullo stesso sito l'energia di interazione aumenta. Lo stato è altamente degenere senza hopping, poiché qualunque configurazione abbiamo gli spin degli elettroni, otteniamo sempre un'energia nulla. Ogni volta che si crea una buca abbiamo uno stato eccitato.

Il termine seguente spezza la degenerazione. Supponiamo di avere gli stati in Figura 7.6



Figura 7.5: Stato fondamentale

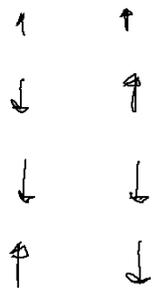


Figura 7.6: Stati degeneri.

Il termine di Hopping al primo ordine da come contributo:

$$t(a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma})$$

Quando andiamo a fare teoria perturbativa sul termine di Hopping abbiamo il termine correttivo in energia che sarà dato da:

$$-\frac{t^2}{U}$$

s Il termine di hopping offre un guadagno energetico solo per stati che tra primi vicini hanno spin opposto, perché il principio di Pauli evita l'hopping. Il termine con spin opposti guadagna grazie all'hopping. La configurazione antiferromagnetica ha un guadagno energetico, quindi il sistema preferisce avere una configurazione antiferromagnetica.

Si può fare teoria perturbativa rispetto al parametro  $t$ . Per piccoli valori del rapporto  $\frac{t}{U}$  il modello di Hubbard resta un isolante con un hamiltoniana del tipo:

$$\sum J \vec{s}_i \vec{s}_j$$

Questo è il modello di Heisenberg quantistico, il modello antiferromagnetico. Vogliamo trovare che lo stato è instabile rispetto alla formazione di un antiferromagnetismo. Il prodotto  $n_\uparrow n_\downarrow$  si sbilancia. Nell'antiferromagnetismo abbiamo due rotture di simmetria, sia la simmetria di spin che la simmetria traslazionale. La rottura traslazionale è mostrata in Figura 7.7

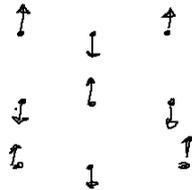


Figura 7.7: Rottura della simmetria nel reticolo, ogni punto ha primi vicini di spin opposti al suo, questo mi allarga la cella unitaria.

$$\rho_\uparrow = \frac{\rho}{2} + \frac{m}{2} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

Per descrivere l'alternanza degli spin usiamo questa scrittura dove  $\vec{q}$  è metà del vettore del reticolo reciproco:

$$\vec{q} = \left( \frac{\pi}{2} \quad \frac{\pi}{2} \right) + \vec{G}$$

Questo reticolo reciproco rispetto a quello di partenza è spaziato di  $2\pi/a$ . Il vettore  $\vec{q}$  è mezza diagonale del vecchio vettore del reticolo reciproco. Per via

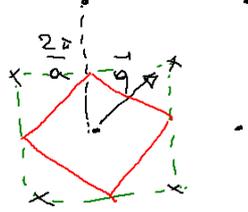


Figura 7.8: Vettori reticolo reciproco, la zona di Brillouin si è dimezzata (nuova in rosso, vecchia in verde)

del fatto che la zona di Brillouin si dimezza (Figura 7.8),  $\vec{q}$  diventa un vettore del reticolo reciproco nuovo.

La rottura della simmetria traslazionale fa nascere una nuova media anomala:

$$\langle a_{k+q}^+ a_k \rangle \neq 0$$

Questo nuovo termine esce dall'oggetto che oscilla sull'hamiltoniana, e queste medie non si annullano più. Le funzioni di Green che dobbiamo studiare adesso sono anche le  $G_{k,k+q}$  e così via. Qui siamo fortunati perché mettendo il termine oscillante in  $q$  generiamo un accoppiamento tra  $k$  e  $k+q$  che a sua volta è accoppiato con  $k+q+q$ . Tuttavia siamo fortunati perché  $q+q$  è un vettore del reticolo reciproco, e quindi questi doppi accoppiamenti non li dobbiamo considerare. A rendere possibile questa semplificazione è il fatto che il periodo della perturbazione è esattamente pari al reticolo reciproco. Procediamo al calcolo della magnetizzazione. Il modello della hamiltoniana è un modello tra primi vicini:

$$H = -t \sum_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Dove il primo termine è l'hopping tra primi vicini che trattiamo perturbativamente, e l'altro è il problema diagonale che abbiamo già affrontato per il ferromagnetismo.

Cercheremo soluzioni il cui valor medio è differente tra sito e sito.

$$\begin{aligned} \langle n_{i\uparrow} \rangle &= \frac{\rho}{2} + e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i} \frac{m}{2} \\ \langle n_{i\downarrow} \rangle &= \frac{\rho}{2} - e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i} \frac{m}{2} \end{aligned}$$

Dove

$$\begin{aligned} \vec{Q} &= \left( \frac{\pi}{2} \quad \frac{\pi}{2} \right) \\ \langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle &= m e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}_i} \end{aligned}$$

Questo significa che la magnetizzazione in questo caso è modulata sui siti: tra i primi vicini c'è magnetizzazione opposta, tra secondi vicini ritorna la stessa

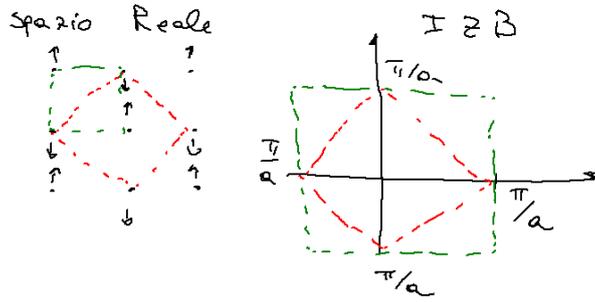


Figura 7.9: Schema di come cambiano le celle unitarie nello spazio reale e nella I zona di Brillouin.

magnetizzazione. Questo corrisponde a modificare la cella unitaria, raddoppiandone l'area. La prima zona di Brillouin invece dimezza di conseguenza l'area

A causa di questa situazione di rottura di simmetria abbiamo che il termine seguente non si annulla.

$$\langle a_{k+q}^+ a_k \rangle \neq 0$$

Usiamo l'approssimazione di campo medio:

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \approx \langle n_{i\uparrow} \rangle a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow} + \langle n_{i\downarrow} \rangle a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow}$$

Da cui possiamo diagonalizzare separatamente per i due spin:

$$H = -t \sum_{ij} a_{i\uparrow}^+ a_{j\uparrow} + U \sum_i \left( \frac{\rho}{2} - \frac{m}{2} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i} \right) a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow}$$

In questo modo possiamo trovare le funzioni di Green di questo sistema. Passiamo nello spazio di Fourier, introducendo la scrittura:

$$a_{i\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikr_i} a_{k\uparrow}$$

$$\sum_k \varepsilon_k a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} + \frac{U}{N} \sum_i \left( \frac{\rho}{2} - \frac{m}{2} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i} \right) \sum_{k,k'} e^{-ikr_i} a_{k\uparrow}^+ e^{ik'r_i} a_{k'\uparrow}$$

Facciamo la somma su  $i$ :

$$\sum_k \varepsilon_k a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} + U \frac{\rho}{2} \sum_k a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} - U \frac{m}{2} \sum_k a_{k+q\uparrow}^+ a_{k\uparrow}$$

Oltre al termine diagonale abbiamo anche il termine fuori diagonale. Abbiamo una mescolanza fra lo stato  $k$  e lo stato  $k+q$ . Il primo termine diagonale lo possiamo inglobare nel termine  $\varepsilon_k$  nel potenziale chimico.

$$H = \sum_k \xi_k a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} - \frac{U}{2} m \sum_k \underbrace{a_{k+q\uparrow}^+ a_k}_{\text{Termine off-diagonal}}$$

Per risolvere questo problema basta una trasformazione. Questo termine aggiuntivo funziona come self-energia nella formula di Dyson, perché connette  $k$  in  $k + q$ . Adesso non solo dovremo studiare la funzione di Green  $G_{kk}$  ma dovremo connetterla con la funzione di Green  $G_{k,k+q}$ . Questo problema è di fatto un problema 2x2, prendiamo  $k$  nella zona di Briulvine ridotta:

$$H = \sum_{k \in RBZ} \xi_k a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} + \sum_{k \in RBZ} \xi_{k+q} a_{k+q\uparrow}^+ a_{k+q\uparrow} - \frac{U}{2} m \sum_{k \in RBZ} a_{k+q\uparrow}^+ a_k + a_{k\uparrow}^+ a_{k+q\uparrow}$$

I  $k$  fuori dalla zona di Briulvine ridotta li chiameremo  $k + q$  (con  $q$  il vettore precedentemente definito mi porta dalla RBZ alla parte restante).

Avendo spezzato in questo modo le somme abbiamo un sistema 2x2 in cui nella diagonale principale abbiamo le energie, e fuori diagonale abbiamo i due termini nati dalla rottura della simmetria:

$$G^{-1} = \hat{\omega} - \hat{\varepsilon} - \hat{\Sigma}$$

Dove i termini sono delle matrici,  $\varepsilon$  sono i termini in diagonale mentre  $\Sigma$  è la self-energia rappresentata dai termini fuori diagonale. La nuova funzione di hartre-Fock è:

$$G_{HF}^{-1} = \begin{pmatrix} i\omega_N - \xi_k & \frac{U}{2} m \\ \frac{U}{2} m & i\omega_n - \xi_{k+q} \end{pmatrix}$$

Nella funzione di Green la self-energia è un oggetto che si somma all'energia. Quello che dobbiamo fare è risolvere la funzione di Green. Questo oggetto mescola  $k$  e  $k + q$ , quindi la sua risoluzione impiega questo sistema 2x2.

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} -\langle T a_k(\tau) a_k^+(0) \rangle & -\langle T a_k(\tau) a_{k+q}^+(0) \rangle \\ -\langle T a_{k+q}(\tau) a_k^+(0) \rangle & -\langle T a_{k+q}(\tau) a_{k+q}^+(0) \rangle \end{pmatrix}$$

Questa funzione di Green anomala ha elementi off-diagonal non nulli (non presenti nello stato senza rottura di simmetria).

Notiamo che se calcoliamo  $\varepsilon_{k+q}$  si ottiene:

$$\varepsilon_{k+q} = -\varepsilon_k \quad \varepsilon_k = -2t (\cos k_x a + \cos k_y a)$$

Questa è una simmetria del modello a tight banding che abbiamo visto.

$$G_{HF}^{-1} = \begin{pmatrix} i\omega_N - \xi_k & \frac{U}{2} m \\ \frac{U}{2} m & i\omega_n + \xi_k \end{pmatrix}$$

Nel fare questo stiamo assumendo che non vi sia potenziale chimico  $\mu = 0$ . Questo caratterizza la situazione di metà banda piena. In questo caso

$$\xi = \varepsilon$$

$$G_{HF}^{-1} = \begin{pmatrix} i\omega_N - \varepsilon_k & \frac{U}{2} m \\ \frac{U}{2} m & i\omega_n + \varepsilon_k \end{pmatrix}$$

Andiamo subito a vedere quanto vale la funzione di Green. Dobbiamo invertire questa matrice. Dobbiamo trovare il determinante:

$$\det G^{-1} = -\omega_n^2 - \varepsilon_k^2 - \left(\frac{U}{2}\right)^2 m^2$$

$$G_{HF} = -\frac{1}{\omega_n^2 + \varepsilon_k^2 + \left(\frac{U}{2}\right)^2 m^2} \begin{pmatrix} i\omega_n + \varepsilon_k & -\frac{U}{2}m \\ -\frac{U}{2}m & i\omega_n - \varepsilon_k \end{pmatrix}$$

Questa è la funzione di Green di Mazubara, facciamo il prolungamento analitico e andiamo sul piano reale. I poli non sono più quelle del sistema libero ( $\omega = \pm\varepsilon_k$  dove il  $-$  è dovuto ad aver usato solo la zona ridotta di Brilluine). Ora i poli sono:

$$\omega = \pm\sqrt{\varepsilon_k^2 + \frac{U^2}{4}m^2}$$

Adesso è nata una gap

$$\Delta = \frac{U}{2}m$$

$$\omega = \pm\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}$$

La gap si è creata a bordo zona.

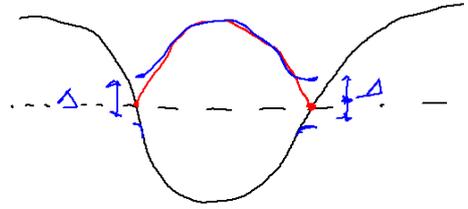


Figura 7.10: Si apre una Gap a bordo zona per via dell'accoppiamento tra la zona a vettore  $k$  e quella a  $k+q$ . Il sistema apre una Gap, perdendo in energia cinetica ma guadagnando in energia potenziale. Questo potenziale perturbante apre una gap.

Se prima il sistema era un metallo (privo di gap) adesso diventa un isolante, poiché è presente una Gap a metà della zona di Brilluine. Lo spettro è gappato. Adesso il punto importante è trovare quanto vale  $m$ . Abbiamo assunto a priori che  $m$  c'è bisogno vedere se effettivamente questa soluzione esiste e quali sono le condizioni che mi determinano  $m$ . Bisogna scrivere un'equazione di self-consistenza. Useremo le funzioni di Green per determinare  $m$ .

$$\langle n_{i\uparrow} \rangle = \frac{\rho}{2} + \frac{m}{2} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}_i}$$

Ma questa stessa cosa possiamo calcolarla dalla funzione di Green

$$\langle n_{i\uparrow} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{kk'} e^{-ikr_i} \langle a_{k\uparrow}^+ e^{ik'r_i} a_{k'\uparrow} \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \langle a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} \rangle + e^{iQr_i} \langle a_{k\uparrow}^+ a_{k+q\uparrow} \rangle$$

Paragonandolo a quello di sopra abbiamo:

$$\frac{m}{2} = \frac{1}{N} \sum_k \langle a_{k\uparrow}^+ a_{k+q\uparrow} \rangle$$

Dobbiamo calcolare  $\langle a_{k+q}^+ a_k \rangle$ , si può fare attraverso la funzione di Green:

$$\mathcal{G}_{k,k+q}(0^-) = \langle a_{k+q}^+ a_k \rangle$$

Calcoliamo la funzione di green:

$$\frac{m}{2} = \frac{T}{N} \sum_{n,k} \mathcal{G}_{k,k+q}(k, i\omega_n)$$

Sostituendo la funzione di Green che abbiamo calcolato (il termine off-diagonal)

$$T \sum_n \frac{1}{-\omega_n^2 - E_k^2} \left( -\frac{U}{2} m \right) \quad E_k^2 = \varepsilon_k^2 + \Delta^2$$

Moltiplicando per  $U$  da ambo i lati e ricordando che  $\Delta = \frac{U}{2} m$

$$\Delta = -UT \sum_n \frac{1}{-\omega_n^2 - E_k^2} \Delta$$

Escludendo la soluzione banale  $\Delta = 0$

$$1 = UT \sum_n \frac{1}{\omega_n^2 + E_k^2}$$

Usiamo il solito teorema del calcolo delle funzioni di Green.

$$T \sum_n \frac{1}{\omega_n^2 + E_n^2} = T \sum_n \frac{1}{(i\omega_n + E_k)(i\omega_n - E_k)} = T \sum_n \left[ \frac{1}{i\omega_n + E_k} - \frac{1}{i\omega_n - E_k} \right] \frac{1}{2E_k}$$

Occorrerebbe aggiungere il fattore di convergenza, abbiamo fatto questo calcolo molte volte, e il risultato è la funzione di Fermi.

$$T \sum_n \frac{1}{\omega_n^2 + E_n^2} = \frac{f(-E_k) - f(E_k)}{2E_k}$$

E la nostra equazione di self-consistenza diventa:

$$1 = \frac{U}{N} \sum_k \frac{f(-E_k) - f(E_k)}{2E_k}$$

Questa differenza la possiamo riscrivere:

$$\frac{1}{e^{-\alpha} + 1} - \frac{1}{e^{\alpha} + 1} = \frac{e^{\frac{\alpha}{2}}}{e^{-\frac{\alpha}{2}} + e^{\frac{\alpha}{2}}} - \frac{e^{-\frac{\alpha}{2}}}{e^{\frac{\alpha}{2}} + e^{-\frac{\alpha}{2}}} = \tanh \frac{\alpha}{2}$$

Da cui abbiamo:

$$1 = \frac{U}{N} \sum_k \frac{\tanh\left(\beta \frac{E_k}{2}\right)}{2E_k}$$

La risoluzione di questa equazione ci da la condizione di esistenza della Gap.

$$1 = U \int d\varepsilon N(\varepsilon) \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}\right)}{2\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}$$

## 7.2.1 Rottura della simmetria a temperatura finita

Si può dimostrare che a temperatura nulla la simmetria viene sempre rotta. Ci si accorge che appena si devia da potenziale chimico  $\mu = 0$  è molto difficile diventare antiferromagnetici. La soluzione antiferromagnetica scompare sia aumentando la temperatura sia spostandosi dal caso 1 elettrone per sito. Questa peculiarità dipende dal tipo di Tightbanding che abbiamo preso, per altri modelli ci potrebbe essere un  $U$  critico. Tantissimi sistemi sono antiferromagnetici.

Dimostriamo che l'equazione scritta precedentemente ha sempre soluzione a temperatura nulla. Se  $T$  è nulla  $\beta \rightarrow \infty$  e quindi la tangente iperbolica va a 1.

$$\frac{1}{U} = \int_{-4t}^{4t} d\varepsilon N(\varepsilon) \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}$$

Per risolvere questa equazione. Grafichiamo la funzione a destra come funzione di  $\Delta$ , e vedere quando attraversa il valore  $\frac{1}{U}$ .

Possiamo riscriverla come:

$$\frac{1}{U} = \int_0^{4t} d\varepsilon N(\varepsilon) \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \quad (7.2)$$

Se  $\Delta \rightarrow 0$  l'integrale diverge. Per  $\Delta \rightarrow \infty$  va a zero. Non importa quanto piccolo sia  $U$  la soluzione esisterà sempre:

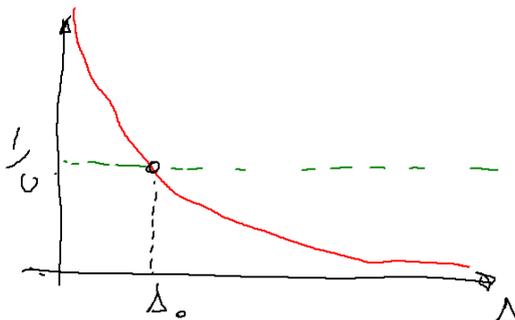


Figura 7.11: Grafico della funzione in dell'equazione 7.2, il sistem ha sempre una soluzione per ogni valore di  $U$ .

Nella situazione in cui  $\xi_k$  e  $\xi_{k+q}$  sono entrambi alla superficie di Fermi si mescolano molto facilmente, questo giustifica la nostra singolarità della funzione, infatti se  $\xi_{k+q} = -\xi_k$  quando uno è nullo anche l'altro è nullo e questa mescolanza esplode. Tuttavia questo vale solo se il potenziale chimico è nulla, aumentando il potenziale chimico mischiamo due stati  $\xi_k$  e  $\xi_{k+q}$  mescoliamo due termini a energia differente e l'accoppiamento è molto minore, In questo caso la funzione non diverge ed è finita quindi esiste un  $U$  critico al di sopra del quale esiste la soluzione.

Proviamo a vedere cosa succede in temperatura

$$1 = U \int d\varepsilon N(\varepsilon) \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2}\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}\right)}{2\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}$$

Possiamo provare a chiederci cosa sia la temperatura critica. Il valore di  $\beta$  critico ha per soluzione  $\Delta = 0$ , questo è l'ultimo valore buono della temperatura, è il valore in cui nasce la gap. La temperatura critica si ottiene sostituendo a questa equazione  $\Delta = 0$

$$\frac{1}{U} = \int_{-4t}^{4t} d\varepsilon N(\varepsilon) \frac{\tanh(\beta_c \varepsilon)}{\varepsilon}$$

Adesso non c'è più una singolarità poiché per  $\varepsilon \rightarrow 0$  si annulla anche il denominatore. Dobbiamo fare l'approssimazione forte che  $N(\varepsilon)$  sia una costante. Questa forte approssimazione serve per dare una stima almeno di ordine di grandezza.

$$\frac{1}{U} = N_0 \int_0^{4t} d\varepsilon \frac{\tanh(\beta_c \varepsilon)}{\varepsilon}$$

Possiamo considerare la tangente iperbolica costante oltre  $t$ . Il punto più grande dell'integrale è quello in cui la tangente di  $\varepsilon$  è 1, perché tutto ciò che viene prima è molto piccolo:

$$\begin{aligned} N_0 \int_{T_c}^{4t} d\varepsilon \frac{1}{\varepsilon} &= N_0 \ln \frac{4t}{T_c} = \frac{1}{U} \\ \frac{1}{N_0 U} &= \ln \frac{4t}{T_c} \\ T_c &= 4t e^{-\frac{1}{N_0 U}} \end{aligned}$$

Abbiamo ottenuto una temperatura critica che è esponenziale nella grandezza  $N_0 U$ , una grandezza adimensionale, che possiamo chiamarla come  $\lambda$  (costante di accoppiamento efficace). Questa è un'espansione per  $\beta \rightarrow \infty$ . Questa è una soluzione non perturbativa, infatti c'è una singolarità essenziale per  $U \rightarrow 0$ . Il diagramma di Fase rispetta questa equazione (Figura 7.12)

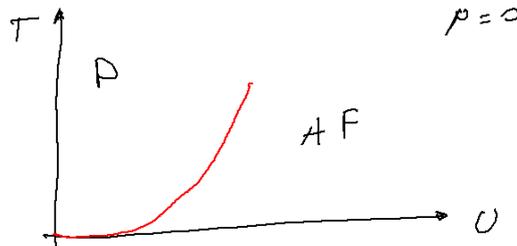


Figura 7.12: Diagramma di fase a  $\mu = 0$  per transizione tra antiferromagnetismo e paramagnetismo.

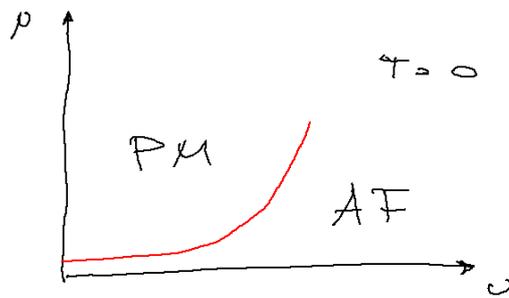


Figura 7.13: Diagramma di fase a  $T = 0$ . Notare che per  $\mu \rightarrow 0$  per qualunque  $U$  esiste soluzione antiferromagnetica.

## Capitolo 8

# Teoria della risposta lineare

Immaginiamo di mettere nel sistema una perturbazione, ad esempio un campo elettrico, e si studia la risposta del sistema, ad esempio la corrente. Tutto questo va fatto nel limite in cui la perturbazione è molto piccola tale da prendere solo lo sviluppo lineare. Nel caso sopra esposto la legge è:

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}$$

Un altro esempio è l'aggiunta di un campo magnetico  $\vec{H}$  e si genera una magnetizzazione:

$$\vec{M} = \chi \vec{H}$$

La situazione è molto complicata poiché la perturbazione può essere una funzione del tempo e dello spazio. In questo caso la risposta è lineare nella trasformata di Fourier:

$$\vec{J}(\vec{k}, \omega) = \sigma(\omega, \vec{k}) \vec{E}(\vec{k}, \omega)$$

Immaginiamo di fare una perturbazione che è proporzionale ad una grandezza fisica del sistema.

$$v(t) = -Aa(t)$$

In cui  $A$  è una caratteristica del sistema, e  $a(t)$  è la grandezza del sistema, dove  $v(t)$  è la funzione modulante. Se moduliamo il potenziale chimico andiamo a modulare la densità.

La nostra perturbazione  $v(t) = -a(t)A$ .

Questo è un caso molto semplice in cui la perturbazione è indipendente dallo spazio; per introdurre una perturbazione modulata si può sommare su tante perturbazione, ciascuna su un differente sito. Questo caso è quello più generico, infatti per tante perturbazioni data la linearità la risposta è la somma delle risposte.

Se mettiamo il potenziale elettrico possiamo anche studiare grandezze non direttamente legate, come ad esempio la densità.

Studiamo quindi l'osserabile  $B$ :

$$\langle B(t) \rangle_v - \langle B \rangle = \int dt' \chi_{BA}(t-t') a(t') \quad (8.1)$$

Il valor medio di  $B$  con e senza perturbazione è proporzionale alla perturbazione. In questa scrittura c'è la linearità con la perturbazione esterna.

In questo abbiamo due condizioni:  $|\chi_{BA}(t)| < c$ , ossia la risposta non diverge. L'altra condizione è quella di causalità. Il risultato ad un tempo  $t$  dipende solo dai tempi precedenti. Questo implica:

$$\chi_{BA}(t - t') \propto \theta(t - t')$$

È più conveniente non mettere il cutoff nell'integrale, ma esplicitare la  $\theta$  di Heaviside dentro la  $\chi$ . Questa causalità ha conseguenze importanti sulla trasformata di Fourier:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \chi_{BA}(t) dt = \int_0^{\infty} e^{i\omega t} \chi_{BA}(t) dt$$

La trasformata di Fourier può essere fatta in generale:

$$\int_0^{\infty} e^{izt} \chi_{BA}(t) dt = \chi_{BA}(z)$$

Questa funzione è analitica nel semipiano superiore. Immaginiamo infatti di scrivere

$$z = z' + iz''$$

Se  $z'' > 0$  questo integrale converge benissimo ( $t > 0$ ). Se facciamo la derivata rispetto a  $z$  ci accorgiamo che anche la derivata esiste:

$$\partial_z^n \chi_{BA}(z) = (i)^n \int_0^{\infty} e^{iz't} e^{-z''t} t^n \chi_{BA}(t) dt$$

Infatti la  $\chi_{BA}(t)$  è non singolare per ipotesi, il fattore esponenziale mi ammazza il  $t^n$ , e quindi l'integrale converge senza dubbio per  $z'' > 0$ . Quindi la funzione è analitica nel semipiano superiore. Se prendiamo l'espressione 8.1 e ne facciamo la trasformata di Fourier otteniamo:

$$\beta(z) = \int dt' (\langle B \rangle_v - \langle B \rangle) e^{izt'}$$

Per il teorema della convoluzione otteniamo:

$$\beta(\omega) = \chi_{BA}(\omega + i0^+) \alpha(\omega)$$

Questo oggetto, data la definizione di risposta lineare dipende da  $A$  e  $B$  come forma, ma è calcolata nel sistema senza perturbazione. Poiché la risposta è un numero reale anche la  $\chi(t - t')$  è una funzione reale. Da cui la sua trasformata di Fourier ha come proprietà:

$$\chi^*(\omega) = \chi(-\omega)$$

Da questa proprietà di analiticità del piano superiore esce fuori la relazione di Cramers-Cronig.

## 8.1 Relazione di Cramers-Cronig

La relazione di Cramers Cronig nel caso in cui  $B = A$ . Studiamola nel caso:

$$\chi_{AA}(\omega)$$

Sottointendendo che  $\omega$  ha una parte immaginaria leggermente positivo. Queste relazioni legano la parte reale e la parte immaginaria. La parte immaginaria è connessa all'assorbimento. Se dobbiamo fare una misura conviene fare una misura sulla parte immaginaria allora conosciamo quella reale. Parleremo di parte reattiva e parte dissipativa.

$$\chi_{BA}(\omega) = \chi'_{BA} + i\chi''_{BA}(\omega)$$

Con  $\chi'$  è la parte reattiva e  $\chi''$  la parte dissipativa.

$$\chi'_{BA}(\omega) = \frac{\chi_{BA}(\omega) + \chi_{AB}(-\omega)}{2}$$

Se  $A$  è uguale a  $B$  questa coincide con la parte reale della  $\chi$ . La parte dissipativa invece:

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{\chi_{BA}(\omega) - \chi_{AB}(\omega)}{2i}$$

Se  $A$  è uguale a  $B$  questa coincide con la parte immaginaria.

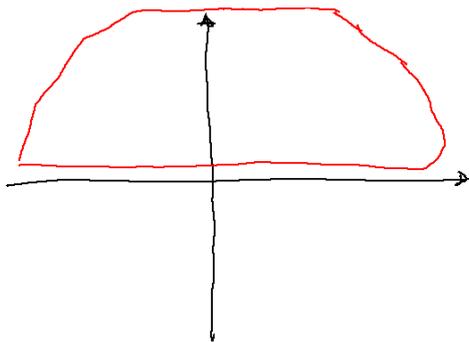
Mostriamo che la  $\chi''$  è legata all'assorbimento. Scritto in trasformata di Fourier questo oggetto ha degli integrali di parte principale più una somma di  $\delta$ . L'assorbimento corrisponde alla parte delle delta. Vedremo che la  $\chi'$  elimina la parte con le  $\delta$  e vice versa  $\chi''$  elimina la parte principale.

Applichiamo il teorema di Cauchy. Se abbiamo una funzione analitica  $\chi(z)$  in un certo intervallo, e  $z$  è un punto interno all'intervallo:

$$\chi(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C dz' \frac{\chi(z')}{z' - z}$$

Facciamo un cammino dato da un semicerchio sopra all'asse:

$$\chi_{BA}(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} 0$$



$$\chi_{BA}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_c \frac{\chi_{BA}(z')}{z' - z} dz'$$

Poiché l'integrale superiore possiamo ignorarlo, perché abbiamo che la  $\chi$  si annulla, in più c'è anche il denominatore:

$$\chi_{BA}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{BA}(\omega' + i\varepsilon)}{\omega' + i\varepsilon - z} d\omega'$$

Prendiamo  $i\varepsilon \rightarrow 0$ .

$$\chi_{BA}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{BA}(\omega')}{\omega' - z} d\omega'$$

$$\chi_{BA}(\omega + i\varepsilon) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{BA}(\omega')}{\omega' - \omega - i\varepsilon} d\omega'$$

Adesso prendiamo  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Questo mi da un termine che è una parte principale + la delta:

$$\frac{1}{2\pi i} \left[ \int \frac{\chi_{BA}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega + i\pi\chi_{BA}(\omega) \right]$$

$$\frac{1}{2}\chi_{BA}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int \frac{\chi_{BA}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega$$

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{1}{\pi i} \int \frac{\chi_{BA}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega \quad (8.2)$$

Studiamo l'equazione della risposta 8.2 nel caso in cui  $A = B$ :

$$\chi_{AA}(\omega) = \frac{1}{\pi i} \int d\omega' \frac{\chi'_{AA}(\omega) + i\chi''_{AA}(\omega')}{\omega' - \omega}$$

Da cui, ripetendo la sostituzione a sinistra otteniamo:

$$\chi'_{AA}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int \frac{\chi''_{AA}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega''$$

$$\chi''_{AA}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int \frac{\chi'_{AA}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$

Si possono vedere parecchie cose, ad esempio la parte assorbitiva è in fase con la perturbazione, mentre la parte reattiva è in contro fase. Questo si può ripetere anche nel caso  $A \neq B$ :

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{1}{\pi i} \int d\omega' \frac{\chi_{BA}(\omega')}{\omega' - \omega}$$

$$\chi_{AB}(-\omega) = -\frac{1}{\pi i} \int d\omega' \frac{\chi_{AB}(-\omega')}{-\omega' + \omega}$$

Facciamo la somma:

$$\int \frac{1}{\omega' - \omega} \left[ \frac{\chi_{BA}(\omega') - \chi_{AB}(-\omega')}{2\pi i} \right] = \chi'_{BA}(\omega)$$

$$\chi''_{BA}(\omega) - \frac{1}{\pi} \int \frac{\chi'_{BA}(\omega')}{\omega' - \omega}$$

Queste relazioni collegano le parti reattive e assorbitive attraverso la trasformata di Hilbert.

## 8.2 Formula di cubo

Questa formula è utile per calcolare direttamente la forma esplicita della nostra funzione di risposta. Questa dimostrazione si può fare sia per sistema classico che sistema quantistico. Supponiamo per semplicità che:

$$\langle B \rangle = 0$$

Per calcolare il valor medio dell'operatore dobbiamo tracciare la matrice densità per l'operatore:

$$\text{tr } \rho B$$

Dove la matrice densità è definita nel gran canonico:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$$

Con  $H$  che contiene anche il potenziale chimico.

$$\rho = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle e^{-\beta E_{\alpha}} \langle \psi_{\alpha}|$$

Dove gli stati  $|\psi_{\alpha}\rangle$  sono autostati dell'hamiltoniana. La  $\rho$  non dipende dal tempo anche se  $\text{ket}\psi_{\alpha}$  dipende dal tempo.

$$H_t = H + v(t)$$

In questo modo la nuova equazione di Schrödinger è:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H_t |\psi\rangle$$

In questo modo gli autostati dipenderanno dal tempo in presenza della perturbazione in modo non banale (le  $\psi$  non sono autostati dell'hamiltoniana totale, ma autostati dell'hamiltoniana non interagente):

$$\rho(t) = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}(t)\rangle e^{-\beta E_{\alpha}} \langle \psi_{\alpha}(t)|$$

In questo caso la  $\rho$  è funzione del tempo poiché l'evoluzione non è più banale:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [H_t, \rho]$$

Questa non è proprio l'equazione di Heisenberg. L'equazione di Heisenberg viene la stessa, ma cambiata di segno.

Non stiamo derivando gli operatori ma la matrice densità, che rappresenta uno stato. L'evoluzione di questo operatore concettualmente è molto interessante. Se mettiamo un campo elettrico otteniamo una corrente. Questo oggetto che stiamo studiando ci descrive il transiente o il caso limite a  $t \rightarrow \infty$ . Quando il conduttore arriva la corrente, si riscalda, e si arriva ad un caso stazionario, quale stiamo descrivendo? Con questa risposta stiamo descrivendo l'inizio. Se il sistema è in un ensemble, e facciamo evolvere solo le funzioni d'onda, il peso delle funzioni d'onda rimane fermo. Infatti i fattori  $e^{-\beta H}$  non dipendono dall'ambiente, quindi la temperatura è costante! La teoria della risposta lineare descrive piccole perturbazioni dall'equilibrio.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_t = [H + v(t), \rho + \Delta\rho]$$

Andando a fare questo commutatore abbiamo:

$$[H, \rho] = 0$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_t = [v(t), \rho] + [H, \Delta\rho]$$

Dove abbiamo trascurato il termine al secondo ordine.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_t = [H, \Delta\rho] - a(t) [A, \rho]$$

La soluzione di questa equazione è

$$\Delta\rho = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t e^{-i(t-t')\frac{H}{\hbar}} [A, \rho] e^{i(t-t')\frac{H}{\hbar}} a(t') dt'$$

Possiamo verificarla sostituendola nella precedente.

Quando deriviamo questa rispetto a  $t$ , ha due pezzi, uno rispetto all'estremo e uno rispetto all'interno

$$i\hbar \partial_t \Delta\rho = -[A, \rho] a(t) - i\hbar \left( -i\frac{H}{\hbar} \Delta\rho + i\Delta\rho \frac{H}{\hbar} \right)$$

Adesso vogliamo calcolare  $\langle B \rangle_v$

$$\langle B \rangle_v = \text{tr} \Delta\rho B = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \text{tr} \left\{ e^{-i(t-t')\frac{H}{\hbar}} [A, \rho] e^{-i(t-t')\frac{H}{\hbar}} B \right\} a(t') dt'$$

Tutti i termini che dipendono da  $t$  possono essere riassorbiti scrivendo  $B(t)$  ( $B$  che si evolve alla Heisemberg) sfruttando le proprietà cicliche della traccia. Allo stesso modo, il  $t'$  sta nel posto giusto per essere riassorbito nella dipendenza da  $A$ :

$$\langle B \rangle_v = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \text{tr} \{ [A(t'), \rho] B(t) \} a(t') dt'$$

Da cui possiamo riscriverlo esplicitamente:

$$\langle B \rangle_v = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \text{tr} \{ BA\rho - B\rho A \} a(t') dt' = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \text{tr} \{ BA\rho - AB\rho \} a(t') dt'$$

$$\langle B \rangle_v = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \text{tr} \{ [B(t), A(t')] \rho \} a(t') dt'$$

$$\langle B \rangle_v = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \langle [B(t), A(t')] \rangle a(t') dt'$$

$$\langle B \rangle_v = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t-t') \langle [B(t), A(t')] \rangle a(t') dt'$$

Dalla definizione di funzione di risposta otteniamo:

$$\langle B \rangle_v = \int_0^t \chi(t-t') a(t') dt'$$

$$\begin{aligned}\chi(t-t') &= \frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \langle [B(t), A(t')] \rangle \\ \chi(t) &= \frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [B(t), A(0)] \rangle\end{aligned}\quad (8.3)$$

Da cui la funzione di risposta dipende dal commutatore. Questo è davvero un numero reale? Sì, perché gli operatori  $A$  e  $B$  sono hermitiani, quindi quando faccio il complesso coniugato la  $i$  cambia segno, ma il commutatore si rovescia, quindi ottengo che  $\chi^* = \chi$ , quindi effettivamente è un numero reale. La funzione di risposta 'è se  $B$  ed  $A$  non sono grandezze conservate, se  $B$  commutasse con  $H$  questo oggetto darebbe zero.

Il limite classico si fa sostituendo il commutatore con la parentesi di Poisson.

### 8.2.1 Parte assorbitiva della funzione di risposta

Prendiamo una perturbazione  $v(t)$  e scriviamo che questo è pari a

$$v(t) = - \sum_i a_j(t) A_j$$

Questo modifica l'hamiltoniana totale:

$$H_t = H + v(t)$$

Prendiamo l'energia del sistema  $H$ , e vediamo come varia in funzione della perturbazione. Possiamo scrivere l'equazione di Heisemberg:

$$i\hbar \frac{d}{dt} H = [H, H_t] = - \sum_j a(t) [H, A_j]$$

Dato che  $H$  e  $H$  commutano rimane solo la perturbazione. Se calcolassimo il valore medio di questo senza perturbazione viene zero. Questo è naturale, perché l'assorbimento di energia non può essere lineare nella perturbazione. L'assorbimento è sempre un fenomeno la cui derivata è positiva, quindi non cambia al variare del segno della perturbazione. QUindi l'effetto è di ordine pari nella perturbazione (almeno quadratico).

Per applicare la risposta lineare dobbiamo chiamare l'osservabile un termine al secondo ordine:

$$\begin{aligned}B &= [H, A_j(t)] \\ \langle B \rangle_v &= \frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \sum_j \int dt' \langle [B(t), A_j(t')] \rangle a_j(t') \\ i\hbar \frac{d}{dt} \langle H \rangle_v &= - \sum_{ij} a(t) \int_{-\infty}^t dt' \frac{i}{\hbar} \langle [[H, A_j(t)], A_i(t')] \rangle a_i(t')\end{aligned}$$

Il commutatore tra  $H$  e  $A_j(t)$  ci da la derivata della  $A_j$ :

$$\frac{i}{\hbar} [H, A_j(t)] = \frac{d}{dt} A_j(t)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = - \sum_{ij} a(t) \int_{-\infty}^t dt' \langle [\dot{A}_j(t), A_i(t')] \rangle a_i(t')$$

La derivata, essendo fatta rispetto a  $t$  (e non  $t'$ ) può essere portata fuori dal commutatore

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = - \sum_{ij} a(t) \int_{-\infty}^t dt' \frac{d}{dt} \langle [A_j(t), A_i(t')] \rangle a_i(t')$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = - \sum_{ij} a(t) \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t-t') dt' \frac{d}{dt} \langle [A_j(t), A_i(t')] \rangle a_i(t')$$

Se potessimo portare la derivata davanti alla  $\theta$  abbiamo la derivata della funzione di risposta.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = - \sum_{ij} a(t) \int_{-\infty}^{\infty} dt' \left[ \frac{d}{dt} \theta(t-t') \langle [A_j(t), A_i(t')] \rangle + \delta(t-t') \langle [A_j(t), A_i(t)] \rangle \right] a_i(t')$$

Il secondo termine è nullo, poiché abbiamo davanti tutta la somma, quindi abbiamo la somma su tutti i commutatori, e ci sono i commutatori degli operatori con se stessi.

Possiamo riscrivere questo termine come:

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = \sum_{ij} a_j(t) \int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{d}{dt} \underbrace{\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \langle [A_j(t), A_i(t')] \rangle}_{\chi_{ji}(t-t')} a_i(t')$$

Riconosciamo la funzione di risposta in questo integrale.

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = \sum_{ij} a_j(t) \int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{d}{dt} \chi_{ji}(t-t') a_i(t')$$

Adesso prendiamo una perturbazione monocromatica reale:

$$a_i(t) = \frac{1}{2} [a_i e^{-i\omega t} + a_i^\dagger e^{i\omega t}]$$

Stessa cosa per  $a_j(t)$ .

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = \sum_{ij} a_j(t) \int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{d}{dt} \chi_{ji}(t-t') \frac{1}{2} [a_i e^{-i\omega t} + a_i^\dagger e^{i\omega t}]$$

Per fare i conti in modo pulito scriviamo che:

$$\chi_{ji}(t-t') = \int \frac{d\omega'}{2\pi} e^{-i\omega'(t-t')} \chi_{ji}(\omega')$$

$$\frac{d}{dt} \chi_{ji}(t-t') = -i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \omega' e^{-i\omega'(t-t')} \chi_{ji}(\omega')$$

Facciamo l'integrale con il termine  $e^{i\omega t'}$ . l'integrale in  $t'$  mi da una  $\delta(\omega + \omega')$ , l'integrale con  $e^{-i\omega t'}$  da la delta rovesciata, che integrata in  $\omega'$  seleziona i seguenti termini

$$i\omega \chi_{ji}(-\omega) a_i^* - i\omega \chi_{ji}(\omega) a_i$$

Da cui la nostra funzione diventa:

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = \sum_{ij} a_j(t) [i\omega \chi_{ji}(-\omega) e^{i\omega t} a_i^* - i\omega \chi_{ji}(\omega) e^{-i\omega t} a_i]$$

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = \frac{1}{2} \sum_{ij} (a_j e^{-i\omega t} + a_j^* e^{i\omega t}) [i\omega \chi_{ji}(-\omega) e^{i\omega t} a_i^* - i\omega \chi_{ji}(\omega) e^{-i\omega t} a_i]$$

Adesso di tutto questo termine prendiamo la media temporale. Se prendiamo la media temporale si conservano solo i termini non oscillanti.

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = \frac{1}{2} i\omega \sum_{ij} [a_j a_i^* \chi_{ji}(-\omega) - a_j^* a_i \chi_{ji}(\omega)]$$

Possiamo cambiare gli indici del secondo per ottenere il fattore davanti alle  $\chi$  uguale.

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = \sum_{ij} \omega a_j^* a_i \frac{\chi_{ji}(\omega) - \chi_{ij}(-\omega)}{2i}$$

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle_v = \sum_{ij} \omega a_j^* a_i \chi_{ji}''(\omega)$$

Vediamo che l'assorbimento è effettivamente quadratico nella perturbazione e connesso alla  $\chi''$ . Notiamo che questo termine sia senza dubbio positivo. Quindi la  $\chi''$  è una funzione dispari in  $\omega$  ( $\omega \chi''(\omega)$  deve sempre essere positiva). Se questa è una forma definita positiva abbiamo che la matrice  $\chi_{ij}$  ha tutti gli autovalori positiva.

### 8.3 Teorema di fluttuazione dissipazione

Se abbiamo due operatori  $B$  e  $A$ , possiamo studiare la fluttuazioni tra i due operatori:

$$\langle B(t)A(t') \rangle$$

Poiché siamo in presenza di operatori che potrebbero non commutare, per aver ben definita la fluttuazione si simmetrizza l'operazione:

$$F_{BA}(t-t') = \frac{1}{2} \langle B(t)A(t') + A(t')B(t) \rangle$$

Possiamo fare la trasformata di Fourier di questo oggetto, potremo dimostrare che questo è proporzionale alla  $\chi''$ . Quindi assorbimento è connesso alla fluttuazione.

Usiamo la rappresentazione di Lenmann per dimostrare questo teorema ( $H$  è l'hamiltoniana gran canonica, include il potenziale chimico e il numero di particelle).

$$F_{BA}(t-t') = \frac{1}{2} \frac{1}{Z} \text{tr} \left\{ e^{-\beta H} \left[ e^{i\frac{H}{\hbar}t} B e^{-i\frac{H}{\hbar}t} A + A e^{i\frac{H}{\hbar}t} B e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \right] \right\}$$

Ignorando per ora la funzione di partizione:

$$F_{BA}(t) \propto \sum_{m,n} \langle m | e^{-\beta E_m} e^{i\frac{E_m}{\hbar}t} B e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} | n \rangle \langle n | A | m \rangle + \sum_{m,n} \langle m | e^{-\beta E_m} A | n \rangle \langle n | B | m \rangle e^{i\frac{E_n}{\hbar}t - i\frac{E_m}{\hbar}t}$$

Nel secondo termine possiamo scambiare  $n$  con  $m$

$$F_{BA}(t) = \frac{1}{2} \frac{1}{Z} \sum_{m,n} B_{mn} A_{nm} e^{i \frac{E_m - E_n}{\hbar} t} (e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n})$$

Calcoliamone la trasformata di Fouireir

$$\Phi_{BA}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} F_{BA}(t)$$

$$\Phi_{BA}(\omega) = \frac{1}{2Z} \sum_{mn} B_{mn} A_{nm} (e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n}) 2\pi \delta \left( \omega + \frac{E_m - E_n}{\hbar} \right)$$

Cambiamo gli indici per poterla confrontare con la trasformata di Fourier della  $\chi_{BA}(\omega)$

$$\Phi_{BA}(\omega) = \frac{1}{2Z} \sum_{nm} B_{nm} A_{mn} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) 2\pi \delta \left( \omega + \frac{E_n - E_m}{\hbar} \right)$$

La rappresentazione spettrale della  $\chi_{BA}(\omega)$  l'abbiamo già calcolata:

$$\chi_{BA}(\omega) = -\frac{1}{Z} \sum_{mn} B_{nm} A_{mn} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\hbar \omega - (E_m - E_n) + i0^+}$$

Adesso aggiustiamo la  $\Phi$  per farle combaciare:

$$\Phi_{ba}(\omega) = \frac{\pi}{Z} \sum_{nm} B_{nm} A_{mn} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \delta(\hbar \omega - (E_m - E_n)) \hbar$$

Calcoliamo  $\chi_{AB}(-\omega)$ , avendo scambiato gli operatori lasciamo gli stessi elementi di matrice ma dobbiamo cambiare anche gli indici

$$\chi_{AB}(-\omega) = -\frac{1}{Z} \sum_{mn} B_{nm} A_{mn} \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{-\hbar \omega - (E_n - E_m) + i0^+}$$

$$\chi_{AB}(-\omega) = -\frac{1}{Z} \sum_{mn} B_{nm} A_{mn} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\hbar \omega - (E_m - E_n) - i0^+}$$

Al solito quando abbiamo:

$$\frac{1}{\hbar \omega - (E_n - E_m) + i0^+} = \frac{P}{\hbar \omega - (E_n - E_m)} - i\pi \delta(\hbar \omega - (E_m - E_n))$$

Per isolare la  $\delta$  dobbiamo fare la differenza tra  $\chi_{BA}(\omega)$  e  $\chi_{AB}(-\omega)$  in questo modo rimane solo la  $\delta$  (se  $A$  e  $B$  sono uguali allora questo coincide con prendere la parte immaginaria):

$$\chi_{BA}(\omega) - \chi_{AB}(\omega) = -\frac{1}{Z} \sum_{mn} B_{nm} A_{mn} (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) 2\pi i \delta(\hbar \omega - (E_m - E_n))$$

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{\chi_{BA}(\omega) - \chi_{AB}(\omega)}{2i} = \frac{\pi}{Z} \sum_{mn} B_{nm} A_{mn} (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \delta(\hbar \omega - (E_m - E_n))$$

I due termini sono quasi uguali; Adesso siccome c'è la delta abbiamo una condizione:

$$\hbar\omega = E_m - E_n$$

Da cui

$$e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m} = e^{-\beta E_m} [1 + e^{-\beta \hbar\omega}]$$

$$e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} = e^{-\beta E_m} [1 - e^{-\beta \hbar\omega}]$$

$$\Phi_{ba}(\omega) = \hbar \frac{\pi}{Z} [1 + e^{-\beta \hbar\omega}] \sum_{nm} B_{nm} A_{mn} e^{-\beta E_m} \delta(\hbar\omega - (E_m - E_n))$$

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{\pi}{Z} [1 - e^{-\beta \hbar\omega}] \sum_{mn} B_{nm} A_{mn} e^{-\beta E_m} \delta(\hbar\omega - (E_m - E_n))$$

Da cui

$$\frac{\chi''_{BA}(\omega)}{\Phi_{BA}(\omega)} = \frac{1}{\hbar} \tanh \frac{\beta \hbar\omega}{2}$$

Questo è il teorema di fluttuazione e dissipazione.

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \tanh \frac{\beta \hbar\omega}{2} \Phi_{BA}(\omega)$$

Questa ha anche un limite classico. Basta che prendiamo  $\hbar \rightarrow 0$

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{\beta\omega}{2} \Phi_{BA}(\omega)$$

### 8.3.1 Risposta sulle funzioni di Mazubara

$$\chi_{BA}(\omega) = -\frac{1}{Z} \sum_{nm} [e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}] \frac{B_{mm} A_{mn}}{\hbar\omega - (E_m - E_n) + i0^+}$$

Possiamo sempre calcolarci la funzione di Mazubara al posto della funzione di risposta. Se lo facciamo con la funzione di Mazzubara al posto di  $\hbar\omega$  otteniamo le frequenze di Mazubara:

$$\hbar\omega \rightarrow ik_b\omega_n$$

Questo dimostra che effettivamente la funzione di risposta è la continuazione analitica della funzione di Mazubara. La funzione di Mazubara è quindi un modo per calcolare la funzione di risposta. Il vantaggio della funzione di Mazubara è la facilità della teoria perturbativa (però c'è da fare le continuazioni analitiche).

### 8.3.2 Esercizio semplice - Oscillatore armonico forzato

Partiamo da un oscillatore armonico smorzato, in presenza di una forza esterna:

$$m\ddot{x} + \gamma\dot{x} + m\omega_0^2 x = f(t)$$

Possiamo applicare la teoria della risposta lineare a questo sistema. Questo non è strettamente un sistema hamiltoniana, la nostra perturbazione è un potenziale:

$$v = -xf$$

Quindi la funzione di risposta può essere riscritta come:

$$x(t) = \int \chi_{xx}(t-t')f(t') \implies x(\omega) = \chi_{xx}f(\omega)$$

Il termine di frizione è un termine fenomenologico che rende il sistema non hamiltoniano, tuttavia possiamo sempre calcolare questo oggetto. La soluzione di questo oggetto si risolve in trasformata di Fourier:

$$-\omega^2 m x(\omega) - i\gamma \omega x(\omega) + m\omega_0^2 x(\omega) = f(\omega)$$

$$x(\omega) [m(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\omega] = f(\omega)$$

$$x(\omega) = \frac{f(\omega)}{m(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\omega}$$

$$\chi_{xx}(\omega) = \frac{1}{m(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\omega}$$

Questa è la funzione di risposta che abbiamo calcolato. Cerchiamo i poli di questa funzione:

$$m\omega^2 + i\gamma\omega - m\omega_0^2 = 0$$

$$\omega = \frac{1}{2m} \left( -i\gamma \pm \sqrt{-\gamma^2 + 4m^2\omega_0^2} \right)$$

Abbiamo un oscillatore debolmente smorzato per:

$$2m\omega_0 > \gamma$$

In questo caso le soluzioni si trovano:

$$\omega_1 = \frac{1}{2m} \left( \sqrt{4m^2\omega_0^2 - \gamma^2} - i\gamma \right)$$

$$\omega_2 = \frac{1}{2m} \left( -\sqrt{4m^2\omega_0^2 - \gamma^2} - i\gamma \right)$$

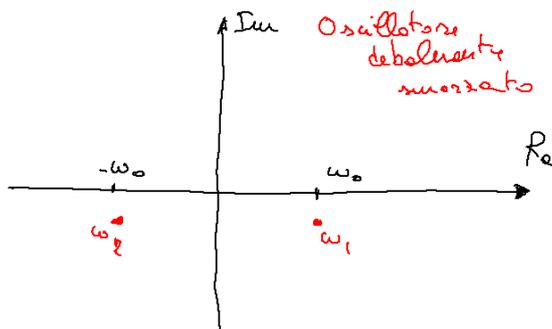


Figura 8.1: Poli della  $\chi$  nel caso  $2m\omega_0 > \gamma$ .

Si può ripetere lo stesso calcolo nel caso fortemente smorzato:

$$\gamma > 2m\omega_0$$

$$\omega_1 = \frac{i}{2m} \left( \sqrt{\gamma^2 - 4m^2\omega_0^2} - \gamma \right)$$

$$\omega_2 = \frac{i}{2m} \left( -\sqrt{\gamma^2 - 4m^2\omega_0^2} - \gamma \right)$$

I poli sono sull'asse immaginario entrambi due numeri negativi.

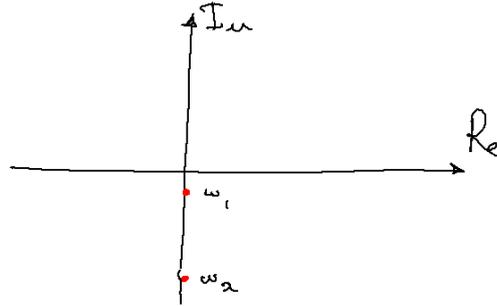


Figura 8.2: Poli nel caso fortemente smorzato.

Adesso vediamo la parte reale e la parte immaginaria di questa funzione:

$$\Re\chi_{xx} = \frac{m(\omega_0^2 - \omega^2)}{m^2(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$

$$\Im\chi_{xx} = \frac{\gamma\omega}{m^2(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$

Prendiamo la parte reale nel limite  $\gamma \rightarrow 0$ :

$$\Re\chi = \frac{1}{m(\omega_0^2 - \omega^2) - i0^+}$$

$$\Re\chi = \left( \frac{1}{\omega_0 - \omega - i0^+} - \frac{1}{\omega - \omega_0 + i0^+} \right) \frac{1}{2m\omega_0}$$

L'assorbimento avviene solo per  $\omega = \omega_0$ . Lo stesso grafico può essere fatto nel caso  $\gamma$  finito.

Usando il teorema di fluttuazione e dissipazione:

$$\frac{\chi''}{\Phi} = \frac{1}{\hbar} \tanh \frac{\beta\hbar\omega}{2} \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{2}\beta\omega$$

Da cui le fluttuazioni sono:

$$\frac{\Phi}{\chi''} = \frac{1}{\frac{1}{2}\beta\omega}$$

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \Phi(\omega) = \frac{1}{\beta\pi} \int \frac{\chi''}{\omega} d\omega = \frac{kT}{\pi} \int \frac{\chi''(\omega)}{\omega} d\omega$$

Poiché la  $\chi''$  si annulla in zero questo integrale non ha poli, quindi l'integrale è uguale alla parte principale:

$$\frac{kT}{\pi} \int \frac{d\omega \chi''(\omega)}{\omega} = k_b T \chi'(0) = \frac{k_b T}{m\omega_0^2}$$

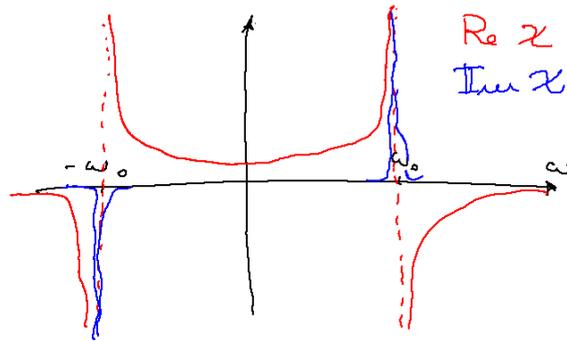


Figura 8.3: Grafico della  $\chi$  di risposta nel caso  $\gamma \rightarrow 0$ . La parte immaginaria ha due funzioni  $\delta$ .

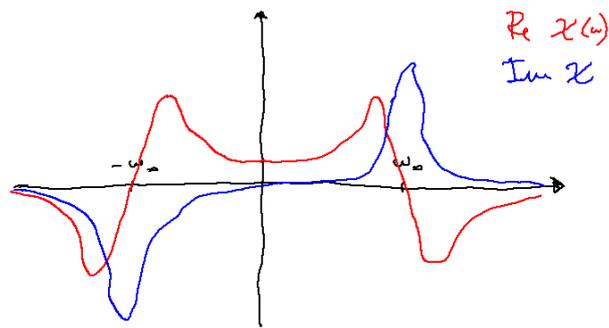


Figura 8.4: Schema della  $\chi$  di risposta nel caso di  $\gamma$  finito. La parte immaginaria è una figura lorentziana.

Abbiamo usato il teorema che lega  $\chi'$  e  $\chi''$ . La fluttuazione è :

$$\Phi = \langle x(t)x(0) \rangle$$

Il termine che abbiamo calcolato è a tempi identici:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{k_b T}{m\omega_0^2}$$

$$\frac{1}{2}k \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2}k_b T$$

Abbiamo riottenuto il teorema di equipartizione dell'energia. Se quell'equazione rappresenta un qualche sistema fisico ad una qualche temperatura, segue che quel sistema fisico rispetta questo teorema di equipartizione dell'energia. Il teorema di fluttuazione e dissipazione collega l'equazione con l'energia.

## 8.4 Risposta al campo elettromagnetico

Il campo elettromagnetico si introduce con un potenziale scalare e un potenziale vettore. Spesso questi sono introdotti con un potenziale quadridimensionale.

I campi fisici sono dati dalle relazioni:

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\partial_t \vec{A} - \nabla\phi$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

C'è un'invarianza di gauge. In trasformata di Fourier si ottiene:

$$\vec{E} = i\frac{\omega}{c}\vec{A} - i\vec{k}\phi$$

$$\vec{B} = i\vec{k} \times \vec{A}$$

L'accoppiamento con la materia si fa con la sostituzione lineare:

$$\vec{p} \longrightarrow \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$$

Dove  $e$  è negativa (carica dell'elettrone). In seconda quantizzazione l'energia cinetica diventa:

$$H \rightarrow \int dr \psi^\dagger(r) \frac{1}{2m} \left( p - \frac{e}{c} A \right) \psi(r) + e \int dr \phi(r) \psi^\dagger(r) \psi(r)$$

La nostra perturbazione dobbiamo prendere il termine lineare ad  $A$  e a  $\phi$ . Il termine lineare in  $\phi$  è proprio il secondo termine dell'hamiltoniana:

$$v(t) = -\frac{1}{2m} \frac{e}{c} \int dr j(r) \vec{A}(r) + e \int dr \phi(r) \psi^\dagger(r) \psi(r)$$

Il termine in  $A$  avrebbe due termini:  $PA$  e  $AP$  poiché  $P$  nel primo agisce su  $A$  abbiamo integrato per parti e si ottiene esattamente l'operatore che abbiamo già chiamato  $J$ :

$$j(r) = \frac{1}{2m} [(\nabla\psi^\dagger)\psi - i\psi^\dagger\nabla\psi]$$

Possiamo scegliere una Gauge in cui  $\phi = 0$  L'unica perturbazione che rimane è il termine con l'hamiltoniana. Dobbiamo calcolare la corrente fisica  $J(r)$ . La corrente fisica è data da:

$$J(r) = e \langle j(r) \rangle - \frac{e^2}{cm} A(r, t) \langle \psi^\dagger \psi \rangle$$

Il termine aggiunto è dato dal contributo diamagnetico:

$$\dot{q} = \frac{1}{m} p \rightarrow \frac{1}{m} \left( p - \frac{e}{c} A \right)$$

Ecco da dove viene quel secondo termine nella formula della corrente fisica. Una volta che abbiamo scritto questa cosa ci accorgiamo che esiste questo termine.

$$J(r) = e \langle j(r) \rangle_v - \frac{e^2}{cm} A(r, t) \rho$$

Dobbiamo prendere la perturbazione del primo termine (l'altro è già lineare in  $A$ ). Questa è una funzione di risposta in cui studiamo  $j$  messa una perturbazione che è  $j$

$$J_\alpha(r, t) = \frac{e^2}{c} \int dt' \int dr' \chi_{j_\alpha(r), j_\beta(r')}(t - t', r - r') A_\beta(r', t') - \frac{e^2}{cm} A(r, t) \rho$$

L'integrale aggiuntivo è dovuto al fatto che la nostra perturbazione c'è su tanti diversi  $r$ , quindi è come se avessimo tante perturbazioni tutti a  $r$  fissato, poiché la teoria è lineare posso sommare tutti i risultati con un integrale aggiuntivo.

$$\chi_{\alpha, \beta}(t - t', r - r') = i\theta(t - t') \langle [j_\alpha(r, t), j_\beta(r', t')] \rangle$$

In questa scrittura abbiamo assunto il sistema invariante per traslazione.

$$J_\alpha(r, t) = \frac{e^2}{c} \int dt' \int dr' \left[ \chi_{\alpha, \beta}(t - t', r - r') - \delta(r - r') \delta(t - t') \frac{\rho}{m} \delta_{\alpha, \beta} \right] A_\beta(r', t')$$

In questo passaggio abbiamo raccolto tutto sotto l'integrale (anche il termine diamagnetico) per cui sono apparse le delte. Trasformiamo secondo fourieri:

$$J_\alpha(\vec{k}, \omega) = \frac{e^2}{c} \overbrace{\left[ \chi_{\alpha, \beta}(\vec{q}, \omega) - \frac{\rho}{m} \delta_{\alpha, \beta} \right]}^{K_{\alpha, \beta}(\vec{q}, \omega)} A_\beta(\vec{q}, \omega)$$

$$J_\alpha(\vec{q}, \omega) = K_{\alpha, \beta}(\vec{q}, \omega) A_\beta(\vec{q}, \omega)$$

Questa è la relazione che lega la  $J$  alla  $A$ . Nella gauge  $\phi = 0$  il campo elettrico abbiamo scritto che vale:

$$\vec{E} = \frac{i\omega}{c} \vec{A} \quad \vec{A} = \frac{c}{i\omega} \vec{E}$$

Da cui otteniamo:

$$J_\alpha(\vec{q}, \omega) = \frac{e}{i\omega} \underbrace{\left[ \chi_{\alpha, \beta}(\vec{q}, \omega) - \frac{\rho}{m} \delta_{\alpha, \beta} \right]}_{\sigma_{\alpha, \beta}(\vec{q}, \omega)} E_\beta(\omega)$$

Da cui abbiamo ricavato l'espressione della conducibilità, come risposta al primo ordine:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) = \frac{e}{i\omega} \left[ chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) - \frac{\rho}{m} \delta_{\alpha,\beta} \right]$$

La parte assorbitiva è determinata da  $\chi''$ . Poiché la relazione tra  $\chi$  e  $\sigma$  c'è una  $i$  di mezzo, la  $\chi''$  è  $\sigma'$ . La parte reale di  $\sigma$  determina l'assorbimento. L'assorbimento può essere ricavato come:

$$W \approx \frac{e^2}{c} \omega \chi'' AA \sigma E^2 = JE$$

Che è la relazione di Joule dell'assorbimento. La conducibilità è in generale un tensore, che si può dividere in un tensore longitudinale e un tensore trasverso.

Il vettore  $\vec{A}(\vec{q}, \omega)$  può essere longitudinale, ossia una componente diretta lungo  $\vec{q}$ :

$$\vec{A}(\vec{q}, \omega) = \underbrace{\hat{q}\hat{q} \cdot A}_{\vec{A}_L} + \vec{A}_t$$

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \partial_t \vec{A}$$

Se prendiamo un  $\vec{A}_L$  indipendente dal tempo abbiamo preso un campo magnetico nullo, e campo elettrico nullo.

Un  $\vec{A}$  longitudinale e indipendente dal tempo deve avere risposta nulla. Questo oggetto si deve annullare ad  $\omega = 0$ . Questa è connesso da una regola di invarianza di gauge.

La del tensore può essere quindi suddivisa nel seguente modo

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_L \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2} + \left( \delta_{\alpha\beta} - \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2} \right) \sigma_T$$

Il termine

$$P_L = \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2} = \hat{q} \otimes \hat{q}$$

Quindi proietta un vettore sulla componente longitudinale, ovviamente l'altro è il proiettore trasverso.

$$\sigma_L(\omega = 0, q \neq 0) = 0$$

Perché  $\omega = 0 \rightarrow E = 0$  e  $\sigma_L \rightarrow B = 0$ . Per trovare la parte longitudinale di un tensore si fa semplicemente:

$$\sum_{\alpha\beta} \frac{q^\alpha \chi^{\alpha\beta} q^\beta}{q^2} = \chi_L$$

La Gauge

$$\phi = 0$$

Consente di studiare sia il campo elettrico che il campo magnetico usando solo il potenziale vettore.

$$J_\alpha(\vec{q}, \omega) = \frac{e^2}{c} \left[ \chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) - \frac{n}{m} \delta_{\alpha,\beta} \right] \vec{A}_\beta(\vec{q}, \omega)$$

Si può riscrivere questo attraverso il campo elettrico e quindi ricavare la conducibilità:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{i\omega} \left[ \chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) - \frac{n}{m} \delta_{\alpha\beta} \right]$$

Nel sistema non interagente il termine con  $\chi$  vale a zero e questa si riconduce alla conducibilità di Drude

$$\sigma_{drude}(\vec{q} = 0) = \frac{e^2 n}{m} \frac{\tau}{1 - i\omega\tau}$$

Per  $\tau \rightarrow \infty$ .

### 8.4.1 Perturbazioni nel quadrispazio

In realtà quando introduciamo la perturbazione, possiamo prendere anche altre Gauge, e potremmo studiare anche la densità oltre che la corrente. Infatti densità e corrente sono grandezze accoppiate dall'equazione di continuità:

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$$

Per lavorare con entrambe queste quantità usiamo i quadrivettore:

$$J_\mu = (e\rho \quad \vec{J})$$

$$A_\mu = (c\varphi \quad \vec{A})$$

Se prendiamo l'hamiltoniana in cui si perturba con i potenziali, possiamo riscrivere in notazione quadridimensionale la nostra perturbazione:

$$v(t) = -\frac{e}{c} \int dr j_\mu A^\mu$$

$$j_\mu = (c\hat{\rho}, \hat{\vec{j}})$$

Il prodotto scalare quadridimensionale è fatto come da norma usando la metrica di Minkosky. Il primo termine ha segno negativo e diventa:

$$v(t) = \frac{e}{c} \int dr \psi^+(r) \psi(r) c\varphi$$

Questo è esattamente la formula per l'accoppiamento scalare.

La risposta può essere scritta in generale come

$$J_\mu = K_{\mu\nu} A^\nu$$

Abbiamo messo la risposta sui quattro oggettini. La risposta è densità-corrente, quindi la risposta in sola densità è  $K_{00}$ .

$$K_{\mu\nu} = \frac{e^2}{c} \left\{ i\theta(t) + \langle [j_\mu(r, t), j_\nu(0, 0)] \rangle - \frac{n}{m} \delta(t) \delta(r - r') \delta_{\mu\nu} (1 - \delta_{\nu 0}) \right\}$$

Il termine diamagnetico esiste solo nella componente in corrente, questo è ottenuto aggiungendo il fattore  $(1 - \delta_{\nu 0})$ .

Ci si accorge che le correlazioni densità e corrente hanno una certa dipendenza. Le funzioni di risposta devono soddisfare un'identità connessa all'invarianza di Gauge e alla continuità della corrente:

$$e\dot{\rho} + \nabla J = 0$$

In termini di trasformata di Fourier diventa:

$$-\omega e\rho + \vec{q} \cdot \vec{J} = 0$$

Una volta introdotto i vettori quadridimensionali possiamo intenderla come:

$$q_\mu J^\mu = 0$$

Cioè il vettore  $J_\mu$  ha quadridivergenza nulla. Se introduciamo una perturbazione che mi crea una deviazione rispetto all'equilibrio della quadricorrente, possiamo imporre che la perturbazione soddisfi l'equazione di continuità:

$$q^\mu K_{\mu\nu} A^\nu = 0$$

Questa deve essere vera qualunque sia il potenziale vettore (a prescindere dalla perturbazione). Questo implica che la funzione di risposta deve soddisfare l'equazione:

$$q^\mu K_{\mu\nu}(\vec{q}) = 0$$

Anche la Gauge invarianza impone delle condizioni su  $K$ :

$$A \rightarrow A + \nabla\Lambda \quad c\varphi \rightarrow c\varphi - \partial_t\Lambda$$

Nello spazio quadridimensionale questo equivale a dire:

$$A_\mu = A_\mu + iq_\mu\Lambda$$

Questa trasformazione non cambia né campo elettrico né campo magnetico (trasformazione di gauge).

$$J_\mu = K_{\mu\nu}A^\nu = K_{\mu\nu}(A^\nu + iq^\nu\Lambda)$$

La risposta fisica deve rimanere invariata. Il termine che abbiamo aggiunto deve quindi essere nullo:

$$K_{\mu\nu}q^\nu = 0$$

Riassumendo le due condizioni abbiamo:

$$K_{\mu\nu}q^\nu = 0 \quad K_{\mu\nu}q^\mu = 0$$

Sono due condizioni simmetriche. Se il  $K_{\mu\nu}$  non soddisfa queste condizioni c'è un problema, che può essere più o meno grave. Questo ci dirà che il comportamento delle funzioni di risposta corrente-corrente è collegata alle funzioni di risposta densità-densità.

Immaginiamo di studiare la densità di un sistema. In condizioni standard la densità evolve secondo l'equazione di diffusione. Se mettiamo un campo elettrico sempre le particelle facciamo muovere, però questi due fenomeni non sono completamente differenti. Deve esserci una relazione tra coefficiente di diffusione e conducibilità. I fenomeni sono abbastanza collegati, sempre movimento di

particelle stiamo osservando. Il fatto che ci siano relazioni tra corrente-corrente e densità-densità è un risultato abbastanza aspettato.

Si può patire da:

$$q^\mu K_{\mu 0} = 0$$

Moltiplichiamola per  $q_0$ :

$$\begin{aligned} q_0 q^\mu K_{\mu 0} &= 0 \\ -q_0^2 K_{00} + q_0 q_i K_{i0} &= 0 \end{aligned}$$

Dove con  $i$  si indicano gli indici latini (e abbiamo esplicitato i segni degli apici). Riscriviamo l'altra relazione per indici latini:

$$\begin{aligned} K_{i\nu} q^\nu &= 0 \\ q_i K_{i\nu} q^\nu &= 0 \\ q_i K_{ij} q_j - q_i K_{i0} q_0 &= 0 \end{aligned}$$

Possiamo sommare queste relazioni:

$$\begin{aligned} -q_0^2 K_{00} + q_i K_{ij} q_j &= 0 \\ q_i K_{ij} q_j &= \omega^2 K_{00} \end{aligned}$$

Il termine a destra possiamo riscriverlo facilmente perché assomiglia al proiettore longitudinale:

$$q^2 \frac{q_i q_j}{q^2} K_{ij} = q^2 K_L(\vec{q}, \omega) = \omega^2 K_{00}(\vec{q}, \omega)$$

Se andiamo a riscrivere questi due termini come le risposte densità-densità e corrente-corrente:

$$\sigma_L(\vec{q}, \omega) = \frac{e^2 \omega}{i q^2} \chi_{\rho\rho}(\vec{q}, \omega)$$

Una volta che abbiamo la funzione di risposta densità densità abbiamo automaticamente anche la  $\sigma_L$ .

Immaginiamo di prendere un sistema che diffonde, con approssimazioni ragionevoli la funzione di risposta densità-densità si può dimostrare che vale:

$$\chi_{\rho\rho} = \frac{\partial n}{\partial \mu} \frac{Dq^2}{Dq^2 - i\omega}$$

La funzione di risposta presenta un polo diffusivo. Questo non deve sorprendere perché se scriviamo un equazione di diffusione:

$$\partial_t \rho = D \nabla^2 \rho$$

Mi da esattamente quel tipo di andamento in trasformata di Fourier. Quindi il polo che abbiamo trovato si chiama polo diffusivo. Questa è una funzione di densità strana:

$$\begin{aligned} \omega \neq 0 \quad q \rightarrow 0 \\ \chi_{\rho\rho} \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Questo ci dice che la densità a  $q \rightarrow 0$  è l'operatore numero

$$\int dr \psi^\dagger(r) \psi(r) = N$$

Che commuta con hamiltoniana, quindi la risposta dell'operatore numero è zero (perché è una quantità conservata). Se prendiamo  $\omega = 0$  la cosa non funziona più. Se prendiamo prima il limite per  $\omega \rightarrow 0$  poi prendo il limite per  $q \rightarrow 0$  questo mi da un risultato finito, perché facciamo una risposta statica di una grandezza che non varia nel tempo. Quindi i due limiti non commutano (se facciamo prima  $q \rightarrow 0$  andiamo nell'operatore  $N$  che si conserva per ogni  $\omega$ , il contrario non è vero).

$$\sigma_L = \frac{e^2 \omega}{iq^2} \chi_{\rho\rho} = \frac{e^2 \omega}{iq^2} \frac{\partial n}{\partial \mu} \frac{Dq^2}{Dq^2 - i\omega}$$

A questo punto prendiamo il limite  $q \rightarrow 0$ :

$$\sigma_L(q \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0) = e^2 \frac{\partial n}{\partial \mu} D$$

Questa si chiama relazione di Einstein, che lega il coefficiente di diffusione alla conducibilità. La  $\sigma$  è finita solo in casi diffusivi, per moti superdiffusivi (come il balistico) è infinita, o moti sottodiffusivi è nulla.

## 8.5 Regola di somma per la conducibilità

Prendiamo la conducibilità per  $q = 0$ , possiamo dimostrare che la seguente quantità è una costante:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sigma'(\omega) \frac{d\omega}{\pi}$$

Dove  $\sigma'$  è la parte reale della conducibilità.

Questa può essere subito vista in un caso particolare con la formula di Drude:

$$\sigma = \frac{e^2 n}{m} \frac{\tau}{1 - i\tau\omega}$$

$$\sigma' = e^2 \frac{n}{m} \frac{\tau}{1 + \tau^2 \omega^2}$$

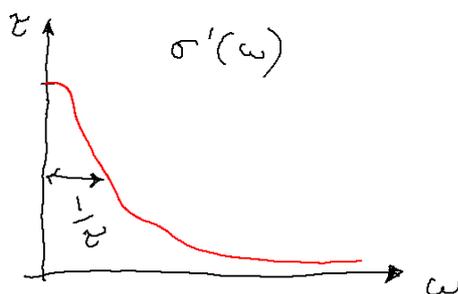


Figura 8.5: Profilo della parte reale della conducibilità di Drude, profilo lorentziano di larghezza  $\frac{1}{\tau}$ , con  $\tau$  tempo medio di scattering.

Siccome la  $\sigma'$  è una lorentziana, l'area sotto la curva non dipende da  $\tau$ . Questa relazione può essere dimostrata in generale:

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{i(\omega + i0^+)} \left[ \chi_{jj}(\omega) - \frac{n}{m} \right]$$

Esplicitiamo il polo come parte principale più una delta:

$$\sigma' = \mathcal{P} \frac{e^2 \chi''}{\omega} + e\pi \delta(\omega) \left[ \chi' - \frac{n}{m} \right]$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} e^2 \frac{\chi''}{\omega} - e^2 \left[ \chi'(0) - \frac{n}{m} \right] = \chi'(0)e^2 - 2^2 \chi'(0) + \frac{e^2 n}{m} - e^2 \frac{n}{m}$$

Da cui abbiamo la regola di somma della conducibilità del tutto generale:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sigma'(\omega) \frac{d\omega}{\pi} = e^2 \frac{n}{m}$$

Chi sono  $n$  ed  $m$ ? Riscriviamo questo come:

$$2 \int_0^{\bar{\omega}} \sigma'(\omega) \frac{d\omega}{\pi} = \frac{e^2 n}{m}$$

Se prendiamo che  $\omega$  è infinito ci stiamo mettendo dentro anche le transizioni interne al cut-off. Questo integrale fatto per  $\bar{\omega} \rightarrow \infty$  prendo tutte le transizioni che coinvolgono anche i raggi X. Se prendiamo tutte le transizioni possibili il termine di destra è effettivamente scritto con  $n$  come densità di elettroni (anche quelli di core). Se però ci mettiamo un cut-off di banda in questo integrale,  $n$  diventa la densità di elettroni di banda. Il valore di  $n$  dipende da range di integrazione. Questo perché la  $\sigma$  avrà per altri  $\omega$  altri picchi che corrispondono alle transizioni degli elementi più profondi. Se integriamo su tutti  $m$  sarà la massa totale dell'elettrone, se mettiamo il cutoff  $m$  diventa la massa efficace.

In alcuni modelli le grandezze  $n$  e  $m$  possono dipendere dalla temperatura.

## 8.6 Calcolo esplicito delle funzioni di risposta

Partiamo da un sistema non interagente e calcoliamo le funzioni di risposta:

### 8.6.1 Funzione densità-densità

$$\chi_{\rho\rho} = i\theta(t) \langle [\rho(r, t), \rho(0, 0)] \rangle$$

Nelle funzioni di Mazubara diventano:

$$\langle T\rho(r, \tau)\rho(0, 0) \rangle$$

Dove per  $\rho$  intendiamo la fluttuazione dal valore medio  $\bar{\rho}$ . Calcoliamo il  $T$  prodotto:

$$\langle T\psi^+(r, \tau)\psi(r, \tau)\psi^+(0, 0)\psi(0, 0) \rangle$$

Applichiamo il teorema di Wick, con tutte le contrazioni. La contrazione tra valori vicini è proprio il valor medio di  $\rho$ , che non dipende dal tempo, che ci da

una componente ad  $\omega = 0$ , che annulliamo, perché rappresenta proprio il campo medio (che è nullo perché sottraiamo tutto per  $\bar{\rho}$ ).

$$\langle T\psi^+\psi \rangle \langle T\psi^+\psi \rangle = \langle \rho \rangle \langle \rho \rangle = 0$$

L'unica contrazione che rimane è:

$$\langle T\psi^+(r, \tau)\psi(0, 0) \rangle \langle T\psi(r, \tau), \psi^+(0, 0) \rangle = -\mathcal{G}(r, \tau)\mathcal{G}(-r, -\tau)$$

In figurina questa è:

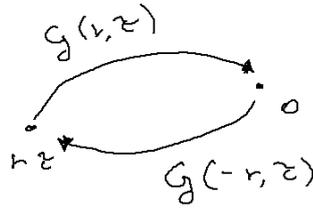


Figura 8.6: Schema della funzione di risposta della densità. Siccome in ogni punto abbiamo una linea che entra e una che esce. (Diagramma di Feynman a due interazioni)

Questo oggetto è più facile da calcolare nello spazio di Fourier:

$$\int dr e^{-iqr} \int d\tau e^{i\omega_n \tau} G(r, \tau) G(-r, -\tau)$$

Prendiamo la  $G(r, \tau)$  la scriviamo come:

$$G(r, \tau) = T \frac{1}{V} \sum_{\varepsilon_n} \sum_k e^{-i\varepsilon_n \tau} e^{ikr} \underbrace{\mathcal{G}(\vec{k}, \varepsilon_n)}_{\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_k}}$$

I segni degli esponenziali sono gli opposti della trasformata. Poi facciamo l'integrale in  $dr$  ci da una regola di somma con  $k, k'$  dove gli indici primati rappresentano la somma sulla funzione di green di ritorno.

$$G(-r, -\tau) = T \frac{1}{V} \sum_{\varepsilon'_n} \sum_k e^{i\varepsilon'_n \tau} e^{-ik'r} \mathcal{G}(\vec{k}', \varepsilon'_n)$$

Da cui integrando il prodotto Da cui il diagramma diventa usando i momenti:

Adesso possiamo direttamente scrivere il risultato dell'integrale:

$$\frac{1}{V} \sum_k T \sum_{\varepsilon_n} \frac{1}{i\varepsilon_n + i\omega_n - \xi_{k+q}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_k}$$

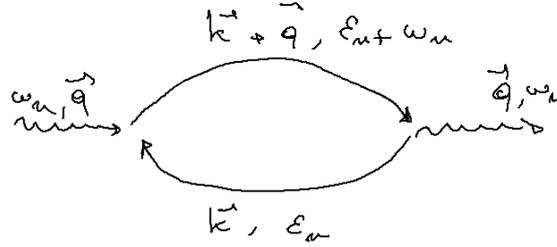


Figura 8.7: Diagramma di Feynman del processo.

Scriviamolo sottoforma di fratti semplici:

$$\frac{1}{V} \sum_k T \sum_{\varepsilon_n} \left[ \frac{1}{i\varepsilon_n + i\omega_n - \xi_{k+q}} - \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_k} \right] \frac{1}{-i\omega_n + \xi_{k+q} - \xi_k}$$

Sommiamo sulle frequenze sfruttando la regola solita in cui vengono fuori le funzioni di fermi (le frequenze sono fermioniche):

$$\frac{1}{V} \sum_k [f(\xi_{k+q}) - f(\xi_k)] \frac{1}{-i\omega_n + \xi_{k+q} - \xi_k}$$

Abbiamo un segno - che avevamo lasciato dietro e un fattore di molteplicità di spin 2:

$$-\frac{2}{V} \sum_k [f(\xi_{k+q}) - f(\xi_k)] \frac{1}{-i\omega_n + \xi_{k+q} - \xi_k}$$

A questo punto facciamo la continuazione analitica della funzione di Mazubara per trovare la funzione di risposta:

$$\chi_{\rho\rho}^0(\vec{q}, \omega) = -\frac{2}{V} \sum_k \frac{f(\xi_{k+q}) - f(\xi_k)}{\omega + i0^+ - (\xi_{k+q} - \xi_k)}$$

Questa funzione di risposta soddisfa alcune proprietà interessanti, ci possiamo calcolare cosa succede se prendiamo  $\omega \neq 0$  e  $q \rightarrow 0$ , in questo caso viene zero, perché otteniamo una quantità conservata. Se invece facciamo l'altro limite:

$$\chi \xrightarrow{\omega=0} -\frac{2}{V} \sum_k \frac{f(\xi_{k+q}) - f(\xi_k)}{\xi_{k+q} - \xi_k}$$

Per piccoli  $q$  questa è :

$$-\frac{2}{V} \sum_k f'(\xi_k)$$

A temperatura molto bassa questa diventa  $-\delta$ :

$$\frac{2}{V} \sum_k \delta(\xi_k) = N(\varepsilon_F)$$

Otteniamo al densità degli stati all'energia di fermi.

$$\chi_{\rho\rho}(q \rightarrow 0, \omega = 0) = N(\varepsilon_F) = \frac{\partial n}{\partial \mu}$$

Questo potevamo arrivarci, perché una perturbazione in densità corrisponde a una variazione del potenziale chimico, quindi in questo limite la funzione di risposta ci sta dicendo come variano gli stati al variare del potenziale chimico. In questo limite  $\omega = 0$   $\mu$  non dipende dal tempo e vediamo il limite per fluttuazioni spaziali che tendono a zero.

### 8.6.2 Funzione di risposta della corrente

Abbiamo calcolato la funzione di risposta del sistema libero  $\chi_{\rho\rho}^0$  in modo analitico.

$$T \langle \psi^+(r, \tau) \psi(r, \tau) \psi^+(0, 0) \psi(0, 0) \rangle$$

Che abbiamo calcolato con la tecnica dei diagrammi di Feynman

$$\frac{1}{V} \sum_k \frac{f(\varepsilon_{k+q}) - f(\varepsilon_k)}{\omega + i0^+ - (\xi_{k+q} - \xi_k)}$$

Se volessimo calcolare direttamente questo diagramma dovremo scrivere direttamente l'operatore densità nello spazio di Fourier:

$$\frac{1}{\sqrt{V}} \int dr e^{-iqr} \psi^+(r) \psi(r) = \rho_q \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k a_k^+ a_{k+q}$$

$$\langle T \rho_q \rho_{-q} \rangle$$

In un vertice abbiamo una linea che esce con  $a_{k+q}$  e una linea che entra di vettore d'onda  $q$ . La stessa cosa può essere fatta con l'operatore di corrente:

$$\vec{J}_q = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \frac{\vec{k}}{m} a_{k-\frac{q}{2}}^+ a_{k+\frac{q}{2}}$$

Se siamo su un reticolo la velocità non è più  $\vec{k} + \vec{q}$  ma

$$\vec{v}_k = \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \vec{k}}$$

Questo diventa:

$$\langle T \sum_k \frac{k}{m} a_{k-\frac{q}{2}}^+ a_{k+\frac{q}{2}} \sum_{k'} \frac{k'}{m} a_{k'+\frac{q}{2}}^+ a_{k'-\frac{q}{2}} \rangle$$

Lo sviluppo con le contrazioni di questo termine ci da quello in Figura 8.8

$$-\frac{1}{V} \sum_k T \frac{k_\alpha k_\beta}{m^2} \sum_n \frac{k_\alpha k_\beta}{m m} \frac{1}{i\varepsilon_n + i\omega_n - \xi_{k+\frac{q}{2}}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{k-\frac{q}{2}}}$$

$$-\frac{1}{V} \sum_k T \sum_n \frac{k_\alpha k_\beta}{m^2} \left[ \frac{1}{i\varepsilon_n + i\omega_n - \xi_{k+\frac{q}{2}}} - \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{k-\frac{q}{2}}} \right] \frac{1}{-i\omega_n + \xi_{k+\frac{q}{2}} - \xi_{k-\frac{q}{2}}}$$

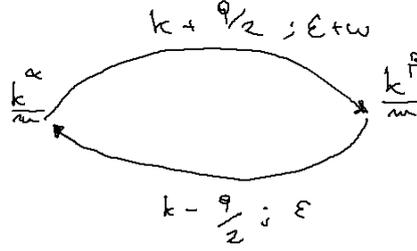


Figura 8.8:

$$\frac{1}{V} \sum_k \frac{k_\alpha k_\beta}{m^2} \frac{f(\xi_{k+\frac{q}{2}}) - f(\xi_{k-\frac{q}{2}})}{i\omega - \xi_{k+\frac{q}{2}} + \xi_{k-\frac{q}{2}}}$$

$$\chi_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_k \frac{k_\alpha k_\beta}{m^2} \frac{f(\xi_{k+\frac{q}{2}}) - f(\xi_{k-\frac{q}{2}})}{\omega + i0^+ - \xi_{k+\frac{q}{2}} + \xi_{k-\frac{q}{2}}}$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{i\omega} \left[ \chi_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta} \frac{n}{m} \right]$$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\rho = 0, \omega \neq 0) = -\frac{e^2}{i\omega} \delta_{\alpha\beta} \frac{n}{m}$$

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega = 0, q \rightarrow 0) = \frac{1}{V} \sum_k \frac{k_\alpha k_\beta}{m^2} \delta(\xi_q)$$

Integrando in  $k$

$$\frac{k_f^2}{3m^2} N(\varepsilon_f)$$

Dove  $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$  quindi se voglio mettere il  $k$  di fermi devo dividere per 3.

$$\frac{k_f^2}{3m^2} N(\varepsilon_f) = \frac{n}{m}$$

Da cui otteniamo il limite:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega = 0, q \rightarrow 0) = 0$$

Infatti abbiamo messo un campo costante in frequenza (statico), non c'è il campo magnetico ( $q = 0$ ) e quindi la conducibilità è pari a zero. Si può dimostrare che anche a  $q \neq 0$  se  $\omega = 0$  allora  $\sigma = 0$ . Questo perché mettere  $\omega = 0$  e campo longitudinale,  $\omega = 0$  ci da assenza di campo elettrico, campo longitudinale ci da assenza di campo magnetico e quindi  $\sigma = 0$ .

$$\chi_{\rho\rho}^0 = \frac{2}{V} \sum_k \frac{f(\xi_{k+q}) - f(\xi_k)}{\omega + i0^+ - (\xi_{k+q} - \xi_k)}$$

Per questa espressione prendiamo lo sviluppo per piccoli  $q$ :

$$\chi_{\rho\rho}^0 = \frac{2}{V} \sum_k \frac{f'(\xi_k)(\xi_{k+q} - \xi_k)}{\omega + i0^+ - (\xi_{k+q} - \xi_k)}$$

Per piccoli  $q$  vale che:

$$\begin{aligned} \xi_{k+q} - \xi_k &= \vec{v}_k \cdot \vec{q} \\ \frac{2}{V} \sum_k \frac{-\delta(\xi_k) \vec{v}_k \cdot \vec{q}}{\omega + i0^+ - \vec{v}_k \cdot \vec{q}} \\ \frac{2}{V} \int d^3k \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{-\delta(\xi_k) \vec{v}_k \cdot \vec{q}}{\omega + i0^+ - \vec{v}_k \cdot \vec{q}} \\ \chi_{\rho\rho\rho}^0 - N(\varepsilon_f) \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{\vec{v}_k \cdot \vec{q}}{\omega + i0^+ - \vec{v}_k \cdot \vec{q}} \end{aligned}$$

Spesso al grafico associato a questo processo è chiamato grafico di polarizzazione e si indica con una  $\Pi$ .

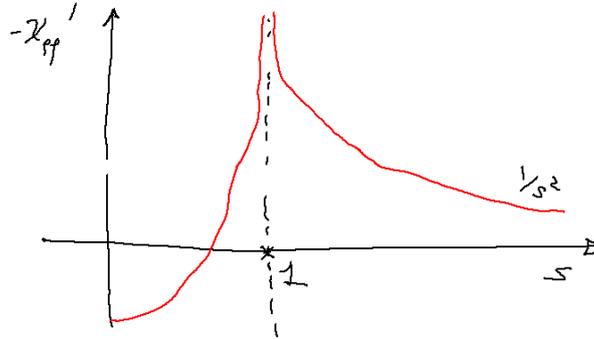
Mettiamo  $q$  lungo l'asse  $z$ :

$$\chi_{\rho\rho\rho}^0 - N(\varepsilon_f) \int_{-1}^1 \frac{d \cos \theta}{2} \frac{v_f q \cos \theta}{\omega + i0^+ - v_f q \cos \theta}$$

Questo integrale l'abbiamo già visto nei suoni. Una volta che abbiamo il termine  $i0^+$  lo sappiamo fare sia quando  $s > 1$  e  $s < 1$

$$s = \frac{\omega}{v_f q}$$

Per  $s > 1$  l'abbiamo già visto questo integrale:



Se il denominatore si annulla (per  $s < 1$ ) abbiamo una parte immaginaria in questa risultato.

$$f \dots - i\pi\delta(\omega - v_f q \cos \theta)$$

Questa parte immaginaria corrisponde alla regione in cui c'erano le eccitazioni buca-particella, e quindi compare un termine assorbitivo.

## 8.7 Screening elettromagnetico

Se abbiamo l'interazione coulombiana, che è del tipo:

$$V = \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

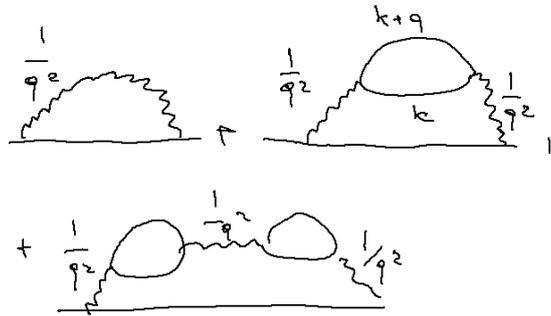


Figura 8.9: Schema dei diagrammi più singolari, perché mettiamo fattori  $1/q$  non integrati.

Se proviamo ad usare la teoria perturbativa delle forze a lungo raggio abbiamo dei problemi. Dobbiamo parlare dell'effetto di screening.

Ci sono tutta una serie di diagrammi singolari, tuttavia possiamo vedere di studiarne i segni. Ciascun diagramma si somma con gli altri:

$$\text{---} + \text{---} \Pi \text{---} = \text{---}$$

Riconoscendo che mettendo in evidenza il primo pezzo riotteniamo esattamente lo stesso sviluppo:

$$V_{eff}(q, \omega) = \frac{V(q)}{1 - \Pi(q, \omega)V(q)}$$

Mentre  $V$  diverge,  $V_{eff}$  converge. Questo corrisponde al termine di screening. Calcoliamolo nel limite statico:

$$V_{eff}(q, 0) = \frac{\frac{4\pi e^2}{q^2}}{1 + \chi_{\rho\rho}(q, \omega = 0) \frac{4\pi e^2}{q^2}}$$

$$V_{eff}(q, 0) = \frac{\frac{4\pi e^2}{q^2}}{1 + \frac{\partial n}{\partial \mu} \frac{4\pi e^2}{q^2}}$$

$$V_{eff}(q, 0) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_s^2}$$

$$k_s^2 = \frac{\partial n}{\partial \mu} 4\pi e^2$$

Il nostro potenziale non è più singolare, e la singolarità è schermata da  $k_s^2$  (momento di screening). Se trasformiamo questo secondo Fourier diventa:

$$V(r) = \frac{e^2}{r} e^{-k_s r}$$

Ossia abbiamo una decadenza esponenziale, il suo inverso è la lunghezza di screening. Questo si chiama screening di *Thomas-Fermi*. Siamo passati da un'interazione a lungo raggio ad un'interazione a corto raggio. Abbiamo un'eccitazione che emette una coppia buca-particella che polarizza il sistema, e questa polarizzazione schermo l'interazione. Il denominatore in  $V_{eff}$  lo chiamiamo costante dielettrica:

$$V_{eff} = \frac{V}{\varepsilon} \quad \varepsilon = 1 + \Pi(q, \omega)V(q) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_{\rho\rho}(q, \omega)$$

Mettiamo una carica esterna, la carica esterna crea una carica indotta:

$$\delta\rho = \delta\rho_{ext} + \delta\rho_{indotta}$$

La densità indotta possiamo introdurla usando la teoria di risposta lineare indotta:

$$\delta\rho_{indotta} = K_{00}\varphi \quad V_{eff} = \frac{\delta\rho}{q^2}$$

Da cui si ricava il campo efficace. Se mettiamo un potenziale dell'hamiltoniana  $\phi$

$$\delta\rho = -\chi_{\rho\rho}\varphi = -\chi_{\rho\rho} \frac{4\pi\delta\rho}{q^2}$$

$$\delta\rho = \delta\rho_{ex} - \chi_{\rho\rho} \frac{4\pi\delta\rho}{q^2}$$

$$\delta\rho = \frac{\delta\rho_{ex}}{1 + \chi_{\rho\rho}^0} \frac{4\pi}{q^2}$$

Il potenziale che vediamo è quello creato da  $\delta\rho$

$$V(r) = \frac{\delta\rho 4\pi e^2}{q^2} = \frac{\delta\rho_{ex}}{1 + \chi_{\rho\rho}^0} \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

Da cui abbiamo ricavato in questo modo alternativo il campo efficace. La carica elettrica di un isolante è la costante dielettrica del mezzo. In questo caso siamo dentro i metalli, quindi lo screening diventa totale, si passa da un potenziale a lungo range ad un potenziale a corto range.

Vediamo se riusciamo a legare la  $\varepsilon$  con la  $\sigma$

$$\frac{e^2\omega}{iq^2} \chi_{00} = \sigma_L(q, \omega)$$

Otteniamo:

$$\varepsilon = 1 + i \frac{4\pi}{\omega} \sigma_L(q, \omega)$$

Usando la conducibilità di Drude:

$$\sigma = e^2 \frac{n}{m} \frac{\tau}{1 - i\omega\tau} = -\frac{n}{i\omega m}$$

$$\varepsilon = 1 - \frac{4\pi e^2 n}{m\omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

Dove la frequenza di plasma è:

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi n}{m} e^2$$

Il campo elettrico è

$$\varepsilon E = D$$

Abbiamo preso un limite per cui siamo abbastanza ad alta energia  $\omega\tau \gg 1$  la conducibilità diverge. Se  $\varepsilon = 0$  abbiamo un  $E$  finito anche in assenza di  $D$ , questa è un'onda di plasma, ossia il modo proprio del sistema, c'è un'onda che risuona anche se abbiamo un  $D = 0$ . Questa onda di plasma possiamo averla solo per  $\omega = \omega_p$  ( $\varepsilon = 0$ )

## 8.8 Funzioni di risposta interagenti

Non esiste una teoria perturbativa per le funzioni di risposta in se stessa, ma la teoria perturbativa può essere fatta per le funzioni di Mazubara, e poi sappiamo passare dalle funzioni di mazubara alle funzioni di risposta. Questo calcolo si riduce a calcolare un  $T$  prodotto:

$$\chi_{\rho\rho} = \langle T \rho_q(\tau) \rho_{-q}(0) \rangle$$

Dove la media è intesa media termica. In teoria perturbativa i due operatori evolvono alla heisemberg, e possiamo riscriverla attraverso la matrice  $\sigma$ .

$$\langle T \sigma(\beta, 0) \rho_q(\tau) \rho_{-q}(0) \rangle_c$$

$$\rho_q = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k a_{k-\frac{q}{2}}^+ a_{k+\frac{q}{2}}$$

La scrittura dell'operatore è sempre di questo tipo che coinvolge due operatori, uno di creazione e uno di distruzione. In teoria perturbativa questo è sempre rappresentato dai diagrammi a bolla. Possiamo raffinare la teoria usando le varie correzioni. Possiamo sostituire alle stesse linee con la approssimazione di Hartree-Fock per ottenere un approssimazione migliore. Possiamo andare oltre

### 8.8.1 Approssimazione RPA

*Random Phase Approximation*, questa è una particolare approssimazione che soddisfa l'invarianza di Gauge.

Il potenziale coulombiano era stato approssimato come:

Possiamo raccogliere la risommazione, in modo da risommare la bolla densità-densità:

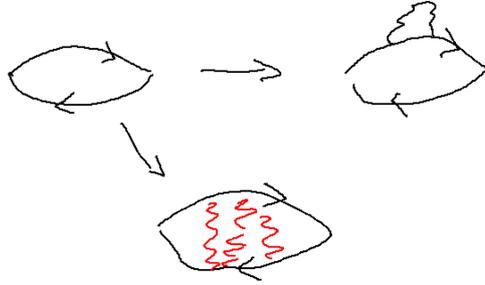


Figura 8.10: Dobbiamo trovare quello che succede tra le due linee dei diagrammi, mentre conosciamo quello che succede sostituendo ciascuna linea le relative approssimazioni di Hartree-Fock.

$$\begin{aligned}
 \overline{\text{---}} &= \overline{\text{---}} + \overline{\text{---}} \text{---} \overline{\text{---}} + \\
 &+ \overline{\text{---}} \text{---} \text{---} \overline{\text{---}} + \dots
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} &= \\
 \text{---} &
 \end{aligned}$$

Da cui abbiamo che la risommazione di bolle ci da:

$$\chi_{\rho\rho}^{AB} = \frac{\chi_{\rho\rho}^0}{1 + V(q)\chi_{\rho\rho}^0(q, \omega)}$$

Se guardiamo questa approssimazione abbiamo un risultato molto buono per la forza coulombiana. Se andiamo a studiare aspetti quando ci sia un modo proprio del sistema la nostra funzione di risposta debba divergere. Se esaminiamo quando il denominatore si annulla:

$$1 + U(q)\chi_{\rho\rho}^0(q, \omega) = \varepsilon = 0$$

Questo ci da proprio la stessa equazione del modo di plasma (il suono zero). Questa equazione giustifica quando abbiamo trovato il modo di plasma nella teoria di Landau per i suoni. Vediamo se questa equazione da esattamente il suono zero (dobbiamo usare il potenziale a corto raggio). L'espressione di  $F_0^s$  è sostituita da:

$$F_0^s \Rightarrow N(\varepsilon)V(q=0)$$

Questo non ci piace tanto, perché l'approssimazione di campo medio ci dava:

$$F_0^s \Rightarrow N(\varepsilon_f) \left( V(0) - \frac{1}{2} \overline{V(k-k')} \right)$$

Questa approssimazione sembra che trascuri il secondo pezzo della  $F_0^s$  rispetto alla teoria di Landau in approssimazione Hartree-Fock. C'è qualcosa che manca. Rispetto all'altro diagramma

L'interazione mancante è dovuto al fatto che non abbiamo risommato gli scambi di particelle (gli elettroni sono identici). Dobbiamo pensare l'interazione considerando anche gli scambi. Prendendo solo i diagrammi di scambio li possiamo risommare in questo modo:

Dobbiamo sommare sia i diagrammi a scala che i diagrammi a bolla. Immaginiamo di sostituire l'interazione con un quadratino, otteniamo la stessa figura. Questi sono i due tipi di interazione che descrivono uno lo scattering a piccoli  $q$  e uno lo scattering a grandi  $q$ . Se mettiamo entrambi gli schemi otteniamo l'approssimazione RPA. Dobbiamo sommare con l'interazione che una volta è un'interazione a piccoli  $q$  e una volta a grandi  $q$ .

Naturalmente a seconda di quello che mettiamo ai vertici cambia il tipo di quantità calcolata. Se mettiamo ai vertici 1, otteniamo l'operatore densità,

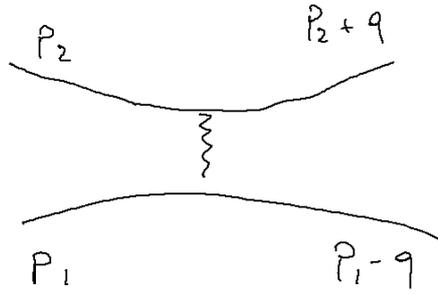


Figura 8.11: Diagramma responsabile del termine in comune.

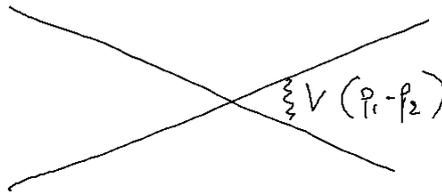


Figura 8.12: Sembra che nei nostri conti abbiamo trascurato questo diagramma.

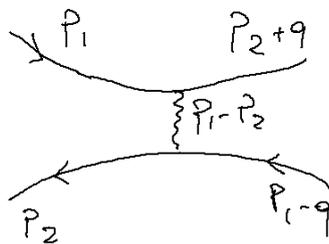


Figura 8.13: Diagramma mancante rovesciato.

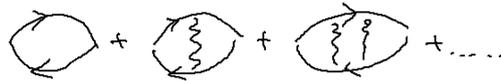


Figura 8.14: Diagramma a scala (*ladder*), risommazione dei diagrammi per scambi, questo rappresenta le particelle che scambiano interazione. Se  $V(q)$  non dipendesse da  $q$  le due risommazioni (a bolla e a scala) darebbe esattamente la stessa cosa).

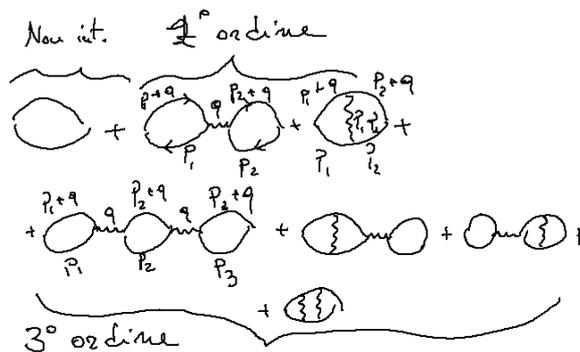


Figura 8.15: Schema di tutti i diagrammi in RPA, la somma sui diagrammi a bolla è molto semplice perché è data dal prodotto di diagrammi a bolla  $\Pi$ . La risommazione dei diagrammi a scala è più complicata perché l'interazione si porta a presso un momento  $p_1 - p_2$ . Quindi la somma è più complicata perché non possiamo fare la somma separatamente, su  $p_1$  e  $p_2$  perché c'è un termine che li mescola. Per andare ancora meglio sostituiamo a ciascuna linea la linea di hartree-fock che mi somma tutti i singoli possibili diagrammi di hartree-fock su quella linea.

se mettiamo il vettore d'onda diviso  $2m$  otteniamo la corrente. Ovviamente possiamo mettere ai due vertici ciascun operatore ottenendo la risposta densità-densità, densità-corrente, corrente-densità, corrente-corrente.

In questa approssimazione mancano un sacco di cose (Figura 8.16)



Figura 8.16: Esempio di diagramma mancante. Tutte le interazioni incrociate sono non considerate dalla RPA, un po' come hartree-fock.

Possiamo provare a calcolare la funzione di risposta usando la RPA. Questo risultato analitico è ottenuto approssimando al valor medio di  $V(p_1 - p_2)$  nei diagrammi a scala (altrimenti non si fa analiticamente).

$$\chi_{\rho\rho}^{RPA} = \frac{\chi_{\rho\rho}^0(q, \omega)}{1 + [V(q) - \frac{1}{2}\bar{V}(p_1 - p_2)] \chi_{\rho\rho}^0(q, \omega)}$$

Con questo il suono zero è effettivamente ben descritto. Questa approssimazione ci riproduce bene questo conto. La teoria di Landau è una RPA in cui però le funzioni di Green sono effettivamente le funzioni  $F$ . I parametri non sono i parametri approssimati, la velocità non è la velocità di hartree-fock, ma sono i parametri fenomenologici veri, e l'interazione è la vera interazione tra le particelle.

Nel modello di Habard quello che otteniamo è che:

$$\chi_{\rho\rho}^{Habard}(\omega = 0, q \rightarrow 0) = \frac{\chi_{\rho\rho}^0}{1 + \frac{U}{2}N(\varepsilon)}$$

Questa grandezza è stabile se  $\frac{U}{2}N(\varepsilon) > -1$ , e questa è proprio la  $F_0^s$ . Potremo calcolare la stessa cosa per la suscettività di spin:

$$\chi_{\sigma}(q, \omega = 0) = \frac{\chi_{\sigma}^s}{1 - \frac{U}{2}N(\varepsilon_f)}$$

Se studiamo il ferromagnetismo ci aspettiamo che dove nasce il ferromagnetismo la suscettività di spin deve divergere, questa è la stessa condizione che otteniamo nell'approssimazione di campo medio usando le funzioni di Green. Se andiamo a studiare questo oggetto per

$$\vec{Q} = (\pi \quad \pi)$$

La funzione di risposta diverge per  $\vec{q} = \vec{Q}$  nella suscettività di spin per anti-ferromagnetismo. Questo significa che stiamo facendo una transizione delle due fasi ed è naturale che la funzione di risposta diverga, perché le fluttuazioni sono enormi nel cambio di fase.

## 8.9 Teoria di Baye-McCatanof(?)

Questa teoria ci permette, data una self-energia, di calcolare la funzione di risposta del sistema.

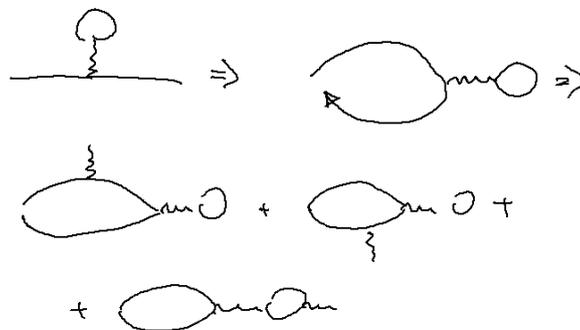
Supponiamo che la nostra self-energia sia proprio la self-energia di Hartree. Possiamo sostituire al secondo vertice del grafico nudo e associandovi un vertice incasinato: Immaginiamo di pensare di prendere la funzione di Green chiusa:



Proviamo a fare la derivata rispetto al potenziale chimico della funzione di Green:

$$\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu} \xrightarrow{\partial_\mu} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu}$$

Questo è come spezzare la linea di Green in un punto. La bolla nuda possiamo potenzialo come la funzione di green derivata rispetto al potenziale chimico. Infatti la derivata della densità (la linea di Green) rispetto al potenziale chimico è proprio la funzione di risposta del sistema non interagente (la bolla nuda). Dobbiamo fare l'inserzione di una derivata, e la derivata mi si porta via un momento  $q$ . (le due linee possono avere  $q$  diversi). Quello che facciamo è un inserzione di vertici. Possiamo rifarlo su hartree fock:



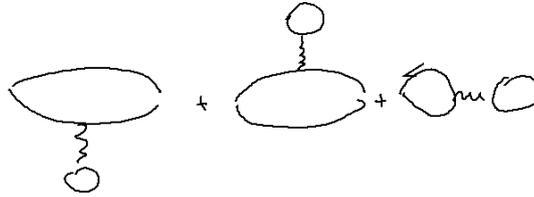
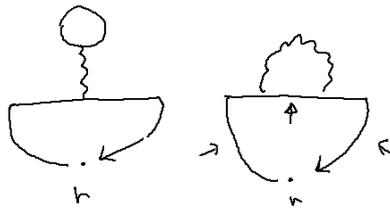


Figura 8.17: Riscrivendo le tre inserzioni. Le prime due corrispondono a sostituire i rami nudi con la correzione di Hartree self-consistente.

Se andiamo ad aggiungere tutti i diagrammi self-consistenti otteniamo una somma a bolle di cui ogni linea è la somma di tutti i possibili diagrammi di Hartree su quella linea. Possiamo aggiungere a questo ragionamento anche i diagrammi di Fock.



Ci accorgiamo che aggiungendo sia i diagrammi di Hartree-Fock questo giochetto delle inserzioni mi ricostruisce tutti i diagrammi RPA. Ovviamente si potrebbe andare avanti, prendendo anche gli altri diagrammi. Questo permette, a partire da una self-energia (un set di diagrammi iterati su una linea) ricavare una nuova serie di diagrammi da sommare.

## 8.10 Funzione di risposta spin-spin

Scriviamo l'operatore di spin:

$$\frac{1}{2} (\psi_{\uparrow}^{\dagger}(r)\psi_{\uparrow}(r) - \psi_{\downarrow}^{\dagger}\psi_{\downarrow}(r))$$

Questo è l'operatore di spin  $S_z$ . Questo termine è molto facile, e può essere scritto come:

$$\frac{1}{2}\psi_{\alpha}^{\dagger}\sigma_{\alpha\beta}^z\psi_{\beta}$$



Figura 8.18: Schema delle inserzioni sui diagrammi di Fock al primo ordine. Siccome anche in questo caso ciascuna linea può essere presa self-consistenza. L'ultimo diagramma è proprio un diagramma a scala. Quindi dalle correzioni di Fock vengono fuori i diagrammi a scala.

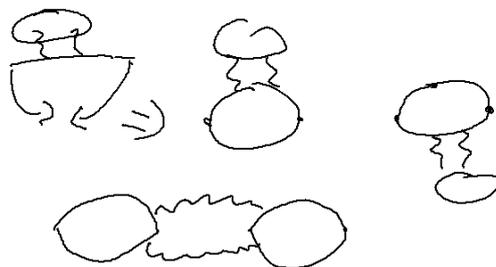


Figura 8.19: Questa self-energia va oltre l'approssimazione RPA, e prevede di calcolare anche quest'altra forma.

Dove abbiamo sott'inteso la somma su indici ripetuti (e abbiamo preso la componente lungo  $z$ ). Per scrivere l'operatore di spin:

$$s^i = \frac{1}{2} \psi_\alpha^+ \sigma_{\alpha\beta}^i \psi_\beta$$

Dove le  $\psi$  sono spinori, e d'ora in avanti saranno sott'intese le componenti spinorali, e i prodotti sono da intendersi come prodotti tra matrici e vettori.

Se siamo nella fase isotropica, senza rottura di simmetria, ci aspettiamo che la suscettività di spin è uguale su tutti gli spin, e non dipende da  $q$ . Il problema è

$$s^z = \frac{1}{2} \psi_\alpha^+ \sigma_\alpha^z \alpha \psi_\alpha$$

Il vertice del diagramma ha:

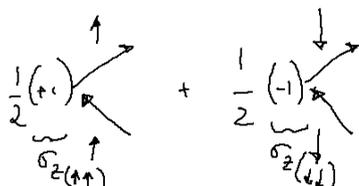


Figura 8.20: Schema dei due vertici.

Il primo vertice che ha  $\uparrow\uparrow$  si connette solo con il vertice in cui gli spin sono uguali:

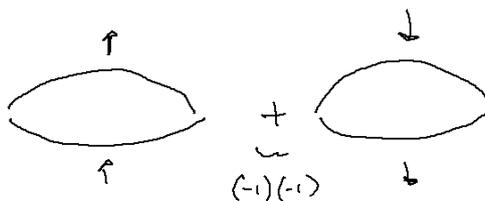
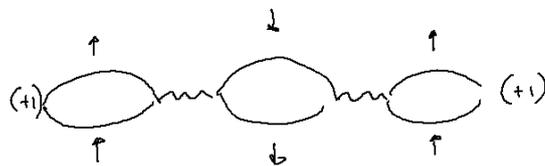
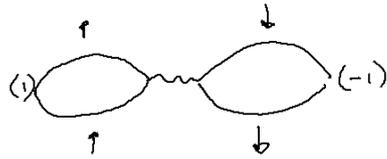


Figura 8.21: Diagramma per sistemi non interagenti.

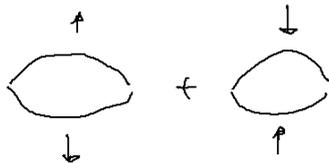
Se andiamo a metterci l'interazione dobbiamo ricordarci che l'interazione c'è solo tra spin opposti. I diagramma a scala non ci sono per questo motivo:

A seconda delle linee finali cambia un segno. Per spin  $s_x - s_x$  è ancora più complicato:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$



Quindi i diagrammi sono:



Nel momento in cui aggiungiamo l'interazione abbiamo soltanto diagrammi ladder, perché l'interazione avviene solo tra spin opposti, che sono tra i due rami della bolla. La cosa ancor più curiosa è quando facciamo  $s^+$  e  $s^-$

$$\langle Ts^+s^- \rangle$$

Questa è una mescolanza fra  $s_x$  e  $s_y$ . Ma questo è facilissimo:

$$\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Usando questi diagrammi la serie è molto facile da scrivere

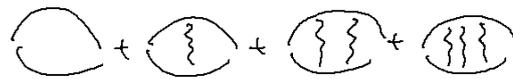
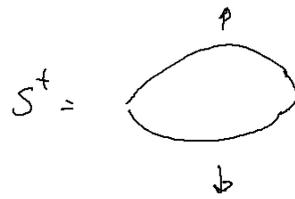
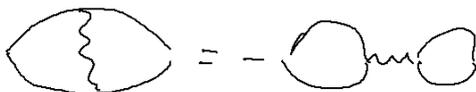


Figura 8.22: Somma del diagramma  $s^+s^-$ , composto solo dai ladder.

Questa somma la possiamo scrivere di botto. Perché questa è identica della densità a bolle. Perché le interazioni non trasmettono impulso per cui questi diagrammi sono esattamente come se fossero bolle. Rispetto alla densità a bolle cambia solo una cosa: i diagrammi a bolle hanno un loop in più quindi cambia per un segno



Quindi otteniamo lo stesso risultato della densità, con un segno meno:

$$\frac{\chi_{00}}{1 - \frac{U}{2}\chi_{00}}$$

E abbiamo ottenuto esattamente quello che ci aspettavamo. Ovviamente si può fare anche con le  $s_z$  sfruttando delle regole per quel segno.

# Capitolo 9

## Esercizi

### 9.1 Suscettività di spin nel modello di habard

Prendiamo il modello di habard

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Vogliamo calcolare la suscettività di spin  $s_-(q)$  e  $s_+(q)$  in funzione di  $\omega$  in approssimazione RPA.

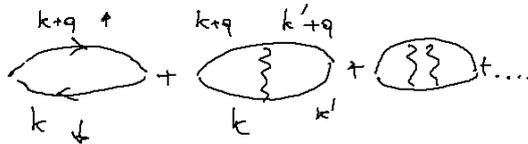
$$\chi_{s^-s^+}$$

#### 9.1.1 Soluzione

Scriviamo gli operatori:

$$S^-(q) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k a_{k\uparrow}^\dagger a_{k+q\downarrow}$$

Invece di calcolare la funzione di risposta calcoliamo il  $T$  prodotto. Usiamo il grafico di Feynman.



Calcoliamo il primo diagramma a bolla.

$$\frac{1}{V} T \sum_{k, \varepsilon_n} G^0(k+q, \varepsilon_n + \omega_m) G^0(k, \varepsilon_n)$$

La somma su  $k$  si porta la normalizzazione del volume, la somma sulle frequenze si porta la normalizzazione della temperatura.

Poiché la  $U$  non dipende da  $k$  il secondo diagramma è il primo messo in evidenza.

$$\frac{T}{V} \sum_{k, \varepsilon_n} \frac{1}{i\varepsilon_n + i\omega_m - \xi_{k+q}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_k}$$

Sviluppiamo in fratti semplici:

$$\frac{T}{V} \sum_{k, \varepsilon_n} \left[ \frac{1}{i\varepsilon_n + i\omega_n - \xi_{k+q}} - \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_k} \right] \frac{1}{-i\omega_n + \xi_{k+q} - \xi_k}$$

Facciamo la somma otteniamo la bolla di polarizzazione<sup>1</sup>

$$\Pi^0(q, i\omega_n) = \frac{1}{V} \sum_k \frac{f(\xi_{k+q}) - f(\xi_k)}{-i\omega_n + \xi_{k+q} - \xi_k}$$

Raccogliendo nello sviluppo del diagramma la bolla otteniamo

$$\begin{aligned} \Pi^{RPA} &= \Pi^0 - \Pi^0 U \Pi^{RPA} \\ \Pi^{RPA} &= -\frac{\Pi^0}{1 + \Pi^0 U} \end{aligned}$$

In tutto la nostra funzione di risposta ha un segno meno che appare quando si scrive il  $T$  prodotto con le contrazioni delle funzioni di green. Quindi da questo viene il segno negativo.

Facciamo la continuazione analitica della bolla di polarizzazione

$$\Pi^0(q, i\omega_n) = \frac{1}{V} \sum_k \frac{f(\xi_{k+q}) - f(\xi_k)}{-\omega_n - i0^+ + \xi_{k+q} - \xi_k}$$

Da cui possiamo scrivere la funzione di risposta

$$\chi^{RPA} = -\frac{\Pi^0}{1 + \Pi^0 U}$$

Questa possiamo studiarla, ad esempio a  $q = 0$ , vediamo di studiare questa risposta nel caso:

$$q = Q = \left( \frac{\pi}{a} \quad \frac{\pi}{a} \right)$$

Questa è l'instabilità antiferromagnetica. Che condizioni abbiamo sul denominatore perché si abbia una transizione di fase (divergenza della  $\chi$ ). Prendiamo la condizione  $\mu = 0$  (banda semipiena)

$$\varepsilon_{k+Q} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) = -\varepsilon_k$$

Ribaltando le bande possiamo riscriverlo come:

$$\Pi^0(q, \omega + i0^+) = -\frac{1}{V} \sum_k \frac{f(-\xi_k) - f(\xi_k)}{\omega + i0^+ + 2\xi_k}$$

<sup>1</sup>In realtà qui non c'è la molteplicità di spin perché lo spin è fissato dall'interazione.

La condizione di instabilità ad  $\omega = 0$  è

$$1 + \sum_k \frac{U}{2\xi_k V} \tanh \frac{\beta \xi_k}{2} = 0$$

Questa è la condizione di instabilità antiferromagnetica. Da sotto studiavamo la soluzione antiferromagnetica e ci veniva questa condizione come quella per cui cessava di esistere, in questo caso siamo nel sistema non antiferromagnetico e studiamo la divergenza della suscettività.

## 9.2 Modello di Ising

Se prendiamo un modello in cui non c'è dinamica, tipo il modello di Ising

$$-J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z$$

Solo accoppiamento fra primi vicini, il segno meno tende a favorire spin uguali. Questo modello non ha dinamica. È un modello in cui la variabile non ha dinamica, lui di per se non si muove. Abbiamo un modello in cui tutti gli operatori non dipendono dal tempo. In questo modello la funzione di risposta è statica, perché non abbiamo dinamica.

Se  $B$  non ha dinamica, se facciamo la trasformata di Fourier otteniamo:

$$\begin{aligned} B &= \bar{B} & \beta(\omega) &= 2\pi\delta(\omega)\bar{B} \\ a(t) &= a & \alpha(\omega) &= 2\pi\delta(\omega)a \end{aligned}$$

La definizione di funzione di risposta nello spazio di Fourier è:

$$\begin{aligned} \beta(\omega) &= \chi_{BA}(\omega)\alpha(\omega) \\ 2\pi\bar{B}\delta(\omega) &= \chi_{BA}(\omega)a2\pi\delta(\omega) \\ \bar{B}_v &= \chi_{BA}(0)a \end{aligned}$$

Scriviamo il teorema di fluttuazione e dissipazione perché  $\chi_{BA}(0) = \chi'_{BA}(0)$ :

$$\begin{aligned} \chi'_{BA}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \int \frac{\chi''_{BA}(\omega')d\omega'}{\omega' - \omega} \\ \chi'_{BA}(0) &= \frac{1}{\pi} \int \frac{\chi''_{BA}(\omega')d\omega'}{\omega'} \end{aligned}$$

La  $\chi''$  può essere calcolata col teorema di dissipazione e fluttuazione.

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{\beta\omega}{2} \Phi_{BA}(\omega)$$

Calcoliamo la fluttuazione:

$$\begin{aligned} \Phi(t) &= \langle BA \rangle & \Phi_{BA}(\omega) &= \langle BA \rangle 2\pi\delta(\omega) \\ \chi'(0) &= \frac{1}{\pi} \int \frac{1}{\omega'} \frac{\beta\omega'}{2} \langle BA \rangle 2\pi\delta(\omega')d\omega' \end{aligned}$$

$$\chi'(0) = \beta \langle BA \rangle$$

Da cui abbiamo ricavato:

$$\langle \bar{B} \rangle_v = \beta \langle BA \rangle a$$

Questo corrisponde al caso classico in cui non c'è dinamica.

$$\langle \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr} \sigma_j e^{-\beta H + h_i \sigma_i} \sim \frac{1}{Z} \text{tr} \sigma_i \sigma_j h_i e^{\beta H}$$

In realtà bisogna togliere il valore medio (rimangono le fluttuazioni) perché  $h$  è presente anche nel denominatore. In questo modello la fluttuazione controlla la risposta, perché non abbiamo dinamica.

### 9.3 Funzione di Lindard

Calcolare la funzione di risposta di Lindard, definita in questo modo:

$$-\chi_{\rho\rho} = -\frac{2}{V} \sum_k \frac{f(\xi_{k+q}) - f(\xi_k)}{\omega + i0^+ - (\xi_{k+q} - \xi_k)}$$

Sviluppata per piccoli  $q$ .

#### 9.3.1 soluzione

$$\begin{aligned} -\chi_{\rho\rho} &= -\frac{2}{V} \sum_k \frac{f'(\xi_k) (\vec{v}_k \cdot \vec{q})}{\omega - \vec{v}_k \cdot \vec{q} + i0^+} = \frac{2}{V} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \int d\xi N(\xi) \delta(\xi) \frac{\vec{v}_k \cdot \vec{q}}{\omega + i0^+ - \vec{v}_k \cdot \vec{q}} \\ -\chi_{\rho\rho} &= N(\varepsilon_f) \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{\vec{v}_{k_f} \cdot \vec{q}}{\omega + i0^+ - \vec{v}_{k_f} \cdot \vec{q}} \end{aligned}$$

Risololviamo questo integrale.

$$-\chi_{\rho\rho} = N(\varepsilon_f) \int_{-1}^1 \frac{d \cos \theta}{2} \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta + i0^+} \quad s = \frac{\omega}{qv_f}$$

Prendiamo la  $\Pi'$

$$\begin{aligned} \Pi' &= N(\varepsilon_f) \int_{-1}^1 \frac{dx}{2} \frac{x}{s-x} = N(\varepsilon_f) \left[ -1 - \frac{s}{2} \ln \left| \frac{s-1}{s+1} \right| \right] \\ \frac{\Pi'}{N(\varepsilon_f)} &= -1 + \frac{1}{2} s \ln \left| \frac{1+s}{1-s} \right| \end{aligned}$$

Questo vale per ogni  $s$  perché l'integrale è stato fatto con la parte principale.

Questo oggetto diverge per  $s = 1$

Calcoliamo ora  $\Pi''$ :

$$\begin{aligned} \frac{\Pi}{N(\varepsilon_f)} &= \int_{-1}^1 \frac{dx}{2} \frac{x}{s-x+i0^+} \\ \frac{\Pi''}{N(\varepsilon_f)} &= -\frac{s\pi}{2} \theta(s+1) \theta(+1-s) \end{aligned}$$

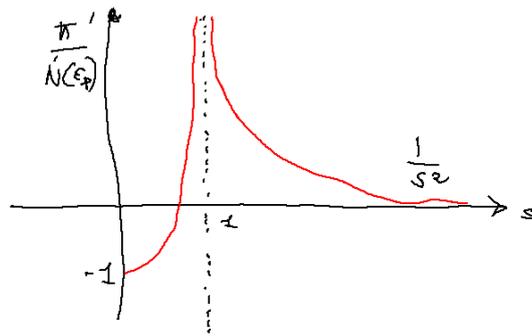


Figura 9.1: Schema di  $\Pi'$ .

