Funciones de Green de Matsubara

Juan Herrera Mateos

Física de muchos cuerpos (2C2020)

18 de diciembre de 2020

Introducción

- **¿Qué es lo que buscamos?**
  Desarrollar un formalismo similar al estudiado que tenga en cuenta los efectos de la ***temperatura finita***.

- **¿Cómo lo conseguimos?**
  Empecemos escribiendo el valor medio de un operador en equilibrio T-μ:

$$< A >= \sum_i P_i \ < \Psi_i|A|\Psi_i > \text{, donde : } \ P_i = \frac{e^{-\beta(E_i-\mu N_i)}}{\sum_n e^{-\beta(E_n-\mu N_n)}} \text{ para el conjunto gran canónico.}$$

$$< A >= \frac{\sum_i e^{-\beta(E_i-\mu N_i)} \ < \Psi_i|A|\Psi_i >}{\sum_n e^{-\beta(E_n-\mu N_n)}} = \frac{\sum_i < \Psi_i \left| \overbrace{e^{-\beta(H-\mu N)}}^{\rho} A \right| \Psi_i >}{\sum_n < \Psi_n \left| e^{-\beta(H-\mu N)} \right| \Psi_n >} = \frac{\mathrm{Tr}(\rho A)}{\mathrm{Tr}(\rho)}$$

El valor medio de cualquier operador se puede calcular a partir de trazas con el operador densidad.

Introducción

- El siguiente paso consiste en observar, como hizo Ryogyo Kubo en la década de 1950, que:

$$U(t) \propto \exp(-i\frac{tH}{\hbar})$$

$$\rho \propto \exp(-\beta H) = U(-i\hbar\beta)$$

  Por lo que la física de muchos a temperatura finita se puede reformular usando un **tiempo imaginario**.

- La observación de Kubo fue tomada por Takeo **Matsubara** para desarrollar la primera teoría de tiempo imaginario para muchos cuerpos a temperatura finita.

Progress of Theoretical Physics, Vol. 14, No. 4, October 1955

A New Approach to Quantum-Statistical Mechanics

Takeo MATSUBARA

Research Institute for Fundamental Physics, Kyoto University

(Received August 1, 1955)

A new method of calculating the grand partition function of many-body system is developed, adopting extensively the techniques of calculus in quantum field theory. It is shown that the grand partition function, which is a trace of the density matrix expressed in terms of field operators, can be evaluated in a way almost parallel with the evaluation of the vacuum expectation value of the S-matrix in quantum field theory, provided that appropriate modifications in notation and definitions are made. As an example, the method is applied to electron-phonon system. Further, basing on this new formalism, various non-perturbational methods are discussed.

El tiempo imaginario y las descripciones

- El paso clave consiste en reemplazar

$$\frac{it}{\hbar} \to \tau \text{ , donde } \tau \in [0, \hbar\beta]$$

- Notar que si el tiempo es imaginario las cantidades físicas son oscilantes en este intervalo finito.

- A partir de ahora tomaremos $\hbar$=1.

- Descripción de Heisenberg:

Antes

$$O(t)_H = U^\dagger(t,t_0)_S O(t)_S U(t,t_0)_S$$

Y como dijimos, si H_S es independiente del tiempo:

$$O(t)_H = e^{+\frac{i}{\hbar}H_S t} O(t)_S e^{-\frac{i}{\hbar}H_S t} \qquad t_0 = 0$$

Ahora

$$O(\tau)_H \equiv e^{(H-\mu N)\tau} O_S e^{-(H-\mu N)\tau}$$

Y simplificando la notación (no arrastramos μN):

$$A_H(\tau) = e^{iH(-i\tau)} A_S e^{-iH(-i\tau)} = e^{H\tau} A_S e^{-H\tau}$$

El tiempo imaginario y las descripciones

- Si aplicamos esto al hamiltoniano de partícula libre:

$$H = \sum \epsilon_k c_k^\dagger c_k,$$

$$\frac{\partial c_k}{\partial \tau} = [H, c_k] = -\epsilon_k c_k \longrightarrow \begin{array}{rcl} c_k(\tau) & = & e^{-\epsilon_k \tau} c_k \\ c_k^\dagger(\tau) & = & e^{\epsilon_k \tau} c_k^\dagger \end{array}$$

Vemos que los operadores dejan de ser hermíticos-conjugados entre sí.

$$\frac{\partial c_k^\dagger}{\partial \tau} = [H, c_k^\dagger] = \epsilon_k c_k^\dagger,$$

Funciones de Green de tiempo imaginario

Antes

$$iG(\lambda t, \lambda' t') \equiv \frac{1}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \langle \Psi_0 | T[c_\lambda(t)_H c^\dagger_{\lambda'}(t')_H] | \Psi_0 \rangle$$

Ahora

$$\begin{aligned} G_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}\tau, \mathbf{r}'\tau') &\equiv -\langle T\left[\psi_\alpha(\mathbf{r}\tau)_H \psi^\dagger_\gamma(\mathbf{r}'\tau')_H\right]\rangle \\ &= -\frac{\mathrm{Tr}\left\{\rho_G T\left[\psi_\alpha(\mathbf{r}\tau)_H \psi^\dagger_\gamma(\mathbf{r}'\tau')_H\right]\right\}}{\mathrm{Tr}\left\{\rho_G\right\}} \end{aligned}$$

- Notar que:
  - *No aparece factor i en su definición.*
  - *El valor medio se calcula pesado por el operador densidad.*

- Podemos usar una notación más general y moderna:

$$\mathcal{G}(\nu, \tau; \nu', \tau') \equiv -\langle T_\tau(c_\nu(\tau) c^\dagger_{\nu'}(\tau'))\rangle$$

- Si el hamiltoniano no depende del tiempo, entonces la función de Green depende sólo de la diferencia de tiempos imaginarios. Sin pérdida de generalidad:

$$\mathcal{G}(\nu, \nu'; \tau) \equiv -\langle T_\tau(c_\nu(\tau) c^\dagger_{\nu'}(0))\rangle \quad -\beta < \tau < \beta$$

Periodicidad y anti-periodicidad

- La función de Green de Matsubara es periódica para los bosones y anti-periódica para los fermiones. $$\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau) = \mp\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau+\beta) \; *$$

- Para verlo consideremos τ<0 y un sistema fermiónico:

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau) &= -\langle T_\tau(c_\nu(\tau)c^\dagger_{\nu'}(0))\rangle = \langle c^\dagger_{\nu'}(0)c_\nu(\tau)\rangle \\
&= \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}(e^{-\beta H}c^\dagger_{\nu'}\boxed{e^{H\tau}c_\nu e^{-H\tau}}) \\
&= \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}(e^{H\tau}c_\nu e^{-H\tau}e^{-\beta H}c^\dagger_{\nu'}) \longleftarrow \mathrm{Tr}(ABC\ldots XYZ) = \mathrm{Tr}(ZAB\ldots WXY) = \mathrm{Tr}(YZA\ldots VWX) \\
&= \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}(\underbrace{e^{-\beta H}e^{\beta H}}_{=I}e^{H\tau}c_\nu e^{-H\tau}e^{-\beta H}c^\dagger_{\nu'}) \\
&= \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}(e^{-\beta H}e^{H(\tau+\beta)}c_\nu e^{-H(\tau+\beta)}c^\dagger_{\nu'}) \\
&= \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}(e^{-\beta H}c_\nu(\tau+\beta)c^\dagger_{\nu'}(0)) = \langle c_\nu(\underbrace{\tau+\beta}_{>0})c^\dagger_{\nu'}(0)\rangle \\
&= -\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau+\beta)
\end{aligned}$$

(La prueba es similar para bosones.)

Periodicidad y anti-periodicidad

- Consecuencia importante: es periódica con periodo 2β

$$\mathcal{G}(\nu,\nu';-\beta) = \mp\mathcal{G}(\nu,\nu';0) = (\mp)^2\mathcal{G}(\nu,\nu';\beta) = \mathcal{G}(\nu,\nu';\beta)$$

y por lo tanto podemos hacer un desarrollo en serie de Fourier:

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau) &= \frac{1}{\beta}\sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\tilde{\omega}_n\tau}\mathcal{G}(\nu,\nu';i\tilde{\omega}_n), \\
\mathcal{G}(\nu,\nu';i\tilde{\omega}_n) &= \frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta} d\tau e^{i\tilde{\omega}_n\tau}\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau).
\end{aligned}
\qquad \tilde{\omega}_n = (2\pi n)/(2\beta) = \pi n/\beta.$$

aunque por (*) la frecuencia tiene restricciones adicionales:

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\nu,\nu';i\tilde{\omega}_n) &= \frac{1}{2}\left[\int_{-\beta}^{0} d\tau\, e^{i\tilde{\omega}_n\tau}\,\underbrace{\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau)}_{\mp\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau+\beta)} + \int_{0}^{\beta} d\tau\, e^{i\tilde{\omega}_n\tau}\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau)\right] \\
&= \underbrace{\frac{1}{2}\left[\mp(-1)^n + 1\right]}\int_{0}^{\beta} d\tau\, e^{i\tilde{\omega}_n\tau}\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau).
\end{aligned}$$

Periodicidad y anti-periodicidad

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\nu,\nu';i\tilde{\omega}_n) &= \frac{1}{2}\left[\int_{-\beta}^{0} d\tau\, e^{i\tilde{\omega}_n\tau}\underbrace{\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau)}_{\mp\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau+\beta)} + \int_0^\beta d\tau\, e^{i\tilde{\omega}_n\tau}\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau)\right] \\ &= \underbrace{\frac{1}{2}\left[\mp(-1)^n+1\right]}\int_0^\beta d\tau\, e^{i\tilde{\omega}_n\tau}\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau).\end{aligned}$$

= F: {0, n par; 1, n impar}. B: {1, n par; 0, n impar}.

- Frecuencias de Matsubara (que dependen de la temperatura):

$$\omega_n \equiv \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$$ **Fermiones**

$$\omega_n \equiv \frac{2n\pi}{\beta}$$ **Bosones**

$$\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau}\mathcal{G}(\nu,\nu';i\omega_n),$$

$$\mathcal{G}(\nu,\nu';i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}(\nu,\nu';\tau).$$

Ejemplo: sistema de fermiones no interactuantes

$$\mathcal{G}(\nu, \nu'; \tau) \equiv -\langle T_\tau (c_\nu(\tau) c^\dagger_{\nu'}(0)) \rangle \quad -\beta < \tau < \beta$$

$$H_0 = \sum_\nu \xi_\nu c^\dagger_\nu c_\nu.$$

$$\mathcal{G}^{(0)}(\nu, \tau);$$

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

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}^{(0)}(\nu, \tau) &= -\langle T_\tau (c_\nu(\tau) c^\dagger_\nu(0) \rangle \\
&= -\theta(\tau) \langle c_\nu(\tau) c^\dagger_\nu(0) \rangle + \theta(-\tau) \langle c^\dagger_\nu(0) c_\nu(\tau) \rangle \\
&= -e^{-\xi_\nu \tau} [\theta(\tau) \langle c_\nu c^\dagger_\nu \rangle - \theta(-\tau) \langle c^\dagger_\nu c_\nu \rangle] \\
&= -e^{-\xi_\nu \tau} [\theta(\tau)(1 - n_F(\xi_\nu)) - \theta(-\tau) n_F(\xi_\nu)].
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}^{(0)}(\nu, ip_n) &= \int_0^\beta d\tau \, e^{ip_n \tau} \mathcal{G}^{(0)}(\nu, \tau) \\
&= -(1 - n_F(\xi_\nu)) \int_0^\beta d\tau \, e^{(ip_n - \xi_\nu)\tau} \\
&= \frac{1}{ip_n - \xi_\nu} \cdot \underbrace{(-1)(1 - n_F(\xi_\nu)) \left[e^{(ip_n - \xi_\nu)\beta} - 1 \right]}_{=1} \\
&= \frac{1}{ip_n - \xi_\nu}
\end{aligned}$$

$$ip_n \to \omega + i\eta$$

$$G^R_0(\boldsymbol{k}\sigma, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\boldsymbol{k}} + i\eta}$$

Conclusión

- En esta charla vimos generalidades de la función de Green de Matsubara.
  - Formalismo válido a temperatura finita que usa tiempo imaginario
  - Las magnitudes son oscilatorias.
  - Para calcularlas en sistemas homogéneos temporalmente intervienen las frecuencias de Matsubara de fermiones y bosones.

- Hay una conexión inmediata entre función de Green de Matsubara y la función de Green retardada via continuación analítica.

- El formalismo desarrollado permite continuar el camino tomado por nosotros en la materia y hacer desarrollos perturbativos, entre otras cosas.

Table 8.1 The link between real- and imaginary-time formalisms.

Time	$t \in [-\infty, \infty]$	$it \longrightarrow \tau \in [0, \beta]$
Schrödinger equation	$\lvert\psi_S(t)\rangle = e^{-itH}\lvert\psi_S(0)\rangle$	$\lvert\psi_S(\tau)\rangle = e^{-\tau H}\lvert\psi_S(0)\rangle$
Heisenberg representation	$A_H(t) = e^{itH} A_s e^{-itH}$	$A_H(\tau) = e^{\tau H} A_s e^{-\tau H}$
Interaction representation	$\lvert\psi_I(t)\rangle = e^{itH_0}\lvert\psi_S(t)\rangle$	$\lvert\psi_I(\tau)\rangle = e^{\tau H_0}\lvert\psi_S(\tau)\rangle$
Time evolution in interaction representation	$U(t) = e^{iH_0 t} e^{-iHt}$ $= T\exp\left[-i\int_0^t V_I(t')dt'\right]$	$U(\tau) = e^{H_0\tau} e^{-H\tau}$ $= T\exp\left[-\int_0^\tau V_I(\tau')d\tau'\right]$
Perturbation expansion	$S = \langle-\infty\rvert T\exp\left[-i\int_{-\infty}^{\infty} V_I(t)dt\right]\lvert-\infty\rangle$	$\frac{Z}{Z_0} = \mathrm{Tr}\left[Te^{-\int_0^\beta V d\tau}\right]$
Wick's theorem (non-interacting particles)	$\psi(1)\psi^\dagger(2) = \langle\phi\rvert T\psi(1)\psi^\dagger(2)\lvert\phi\rangle$	$\psi(1)\psi^\dagger(2) = \langle T\psi(1)\psi^\dagger(2)\rangle$
Green's function	$G_{\lambda\lambda'}(t) = -i\langle\phi\rvert T\psi_\lambda(\tau)\psi^\dagger_{\lambda'}(0)\lvert\phi\rangle$	$\mathcal{G}_{\lambda\lambda'}(\tau) = -\langle T\psi_\lambda(\tau)\psi^\dagger_{\lambda'}(0)\rangle$
Feynman diagrams	$\ln S = TV\sum\{\text{linked clusters}\} = -iT\Delta E$	$\ln\frac{Z}{Z_o} = \beta V\sum\{\text{linked clusters}\}$ $= -\beta\Delta F$

¡Muchas gracias!