Teoría de respuesta lineal

Fenómenos Colectivos en Sólidos – 2021

Julieta Olivo

Teoría de respuesta lineal

Chapter 6

Linear response theory

Introduction to

Many-body quantum theory in condensed matter physics

Henrik Bruus and Karsten Flensberg

Ørsted Laboratory, Niels Bohr Institute, University of Copenhagen
Mikroelektronik Centret, Technical University of Denmark

- La teoría de respuesta lineal establece que la *respuesta a una perturbación débil externa es proporcional a la perturbación*, así lo que necesitamos entender es la constante de proporcionalidad.

- La pregunta que nos hacemos es: suponiendo una perturbación H', ¿cuál es el valor esperado de un observable A a orden lineal en H'?

Fórmula general de Kubo

- Sistema descripto por el Hamiltoniano independiente del tiempo H_0, en equilibrio termodinámico. El valor esperado de una cantidad física, descripta por el operador *A*, puede ser evaluada como

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z_0} \mathrm{Tr}\left[\rho_0 A\right] = \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n|A|n\rangle e^{-\beta E_n}$$

$$\rho_0 = e^{-\beta H_0} = \sum_n |n\rangle\langle n| e^{-\beta E_n}$$

ρ_0: operador densidad
Z_0: función partición

- A $t = t_0$ se aplica una perturbación, sacando al sistema del equilibrio.

La perturbación está expresada por un término adicional que depende del tiempo en el Hamiltoniano

$$H(t) = H_0 + H'(t)\theta(t - t_0)$$

- Queremos encontrar el valor esperado del operador *A* para valores de t mayores que t_0.

Fórmula general de Kubo

- Tenemos que encontrar la evolución temporal de la matriz densidad, o lo que es lo mismo, la evolución temporal de los autoestados del Hamiltoniano sin perturbar.

$$\langle A(t)\rangle = \frac{1}{Z_0}\sum_n \langle n(t)|A|n(t)\rangle e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z_0}\mathrm{Tr}\left[\rho(t)A\right]$$

$$\rho(t) = \sum_n |n(t)\rangle\langle n(t)|e^{-\beta E_n}$$

- La idea es:

Los estados iniciales del sistema están distribuidos de acuerdo a la distribución de Boltzmann.

A tiempos posteriores el sistema está descripto por la misma distribución de estados pero los estados ahora son dependientes del tiempo y evolucionaron de acuerdo al nuevo Hamiltoniano.

Fórmula general de Kubo

- Representación interacción:

$$|n(t)\rangle = e^{-iH_0 t}|\hat{n}(t)\rangle = e^{-iH_0 t}\hat{U}(t,t_0)|\hat{n}(t_0)\rangle.$$

Dependencia temporal

$$\hat{U}(t,t_0) = 1 - i\int_{t_0}^{t} dt' \; \hat{H}'(t')$$

Evolución temporal a primer orden en *H'*

- Reemplazando en la expresión anterior, obtenemos el valor esperado de *A* a primer orden en la perturbación:

$$\begin{aligned}\langle A(t)\rangle &= \langle A\rangle_0 - i\int_{t_0}^{t} dt' \frac{1}{Z_0}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n(t_0)|\hat{A}(t)\hat{H}'(t') - \hat{H}'(t')\hat{A}(t)|n(t_0)\rangle \\ &= \langle A\rangle_0 - i\int_{t_0}^{t} dt' \langle[\hat{A}(t),\hat{H}'(t')]\rangle_0.\end{aligned}$$

Fórmula general de Kubo

$$\boxed{\begin{gathered}\delta\langle A(t)\rangle \equiv \langle A(t)\rangle - \langle A\rangle_0 = \int_{t_0}^{\infty} dt' C^R_{AH'}(t,t') e^{-\eta(t-t')} \\[1em] C^R_{AH'}(t,t') = -i\theta(t-t')\left\langle\left[\hat{A}(t), \hat{H}'(t')\right]\right\rangle_0\end{gathered}}$$

Fórmula de Kubo

Expresa la respuesta lineal a una perturbación *H'*

- Es conveniente expresar la respuesta a una perturbación externa en el dominio de frecuencia

$$H'(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} H'_\omega$$

$$C^R_{AH'}(t,t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t'} C^R_{AH'_\omega}(t-t')$$

$$\boxed{\begin{gathered}\delta\langle A_\omega\rangle = C^R_{AH'_\omega}(\omega), \\ C^R_{AH'_\omega}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} e^{-\eta t} C^R_{AH'_\omega}(t)\end{gathered}}$$

Fórmula de Kubo para la conductividad

- Sistema de partículas cargadas (electrones) sujetas a un campo electromagnético externo.
- El campo induce una corriente, y la conductividad es el coeficiente de respuesta lineal.

$$J_e^\alpha(\mathbf{r},t) = \int dt' \int d\mathbf{r}' \sum_\beta \sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t')\, E^\beta(\mathbf{r}',t')$$

$\sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{r}\mathrm{t},\mathbf{r}'\mathrm{t}')$ es el tensor de conductividad que describe la corriente de respuesta en la dirección $\hat{e}_\alpha$ a un campo eléctrico aplicado en la dirección $\hat{e}_\beta$.

- El campo eléctrico está dado por $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\nabla_\mathbf{r}\phi_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r},t) - \partial_t\mathbf{A}_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r},t)$

y el término perturbativo en el Hamiltoniano debido al campo externo está dado por

$$H_{\mathrm{ext}} = -e\int d\mathbf{r}\,\rho(\mathbf{r})\phi_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r},t) + e\int d\mathbf{r}\,\mathbf{J}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{A}_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r},t)$$

Fórmula de Kubo para la conductividad

- Eligiendo un gauge conveniente y tomando la transformada de Fourier de la perturbación

$$\left.\begin{aligned} \phi_{\text{ext}} &= 0 \\ \mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega) &= (1/i\omega)\mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega) \end{aligned}\right\} \qquad H_{\text{ext},\omega} = \frac{e}{i\omega}\int d\mathbf{r}\,\mathbf{J}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega)$$

- De acuerdo a la definición del operador densidad de corriente $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \mathbf{J}^{\nabla}(\mathbf{r}) + \frac{e}{m}\mathbf{A}(\mathbf{r})\rho$

y definiendo al potencial vector como $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_{\text{ext}}$

Tenemos que el Hamiltoniano de la perturbación es

$$H_{\text{ext},\omega} = \frac{e}{i\omega}\int d\mathbf{r}\,\mathbf{J}_0(\mathbf{r})\cdot\mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega) \qquad \mathbf{J}_0 = \mathbf{J}^{\nabla} + \tfrac{e}{m}\mathbf{A}_0\rho$$

- El valor esperado de la densidad de corriente está dado por

$$\langle\mathbf{J}(\mathbf{r},\omega)\rangle = \langle\mathbf{J}_0(\mathbf{r},\omega)\rangle + \langle\frac{e}{m}\mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega)\rho(\mathbf{r})\rangle$$

Fórmula de Kubo para la conductividad

Segundo término: $\langle \frac{e}{m}\mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega)\rho(\mathbf{r})\rangle = \frac{e}{m}\mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega)\langle\rho(\mathbf{r})\rangle_0 = \frac{e}{i\omega m}\mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega)\langle\rho(\mathbf{r})\rangle_0$

Primer término: $\langle J_0\rangle = \delta\langle J_0\rangle \longrightarrow \langle J_0(\mathbf{r},\omega)\rangle = \mathbf{C}^R_{J_0(\mathbf{r})H_{\text{ext},\omega}}(\omega)$.

$$\mathbf{C}^R_{\mathbf{J}_0(\mathbf{r})H_{\text{ext},\omega}}(\omega) = \int d\mathbf{r}' \sum_\beta \mathbf{C}^R_{\mathbf{J}_0(\mathbf{r})J_0^\beta(\mathbf{r}')}(\omega)\frac{e}{i\omega}E^\beta(\mathbf{r}',\omega)$$

- Tenemos entonces que la densidad de corriente es

$$\langle\mathbf{J}(\mathbf{r},\omega)\rangle = \mathbf{C}^R_{J_0(\mathbf{r})H_{\text{ext},\omega}}(\omega) + \frac{e}{m}\langle\rho(\mathbf{r})\rangle_0\mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega)$$

- Usando que $\mathbf{J}_e = -e\langle\mathbf{J}\rangle$ y comparando con la transformada de Fourier de la expresión de J_e^α

$$\sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) = \frac{ie^2}{\omega}\Pi^R_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) + \frac{e^2 n(\mathbf{r})}{\omega m}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta_{\alpha\beta}$$

$$\Pi^R_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t-t') = -i\theta(t-t')\left\langle\left[\hat{J}_0^\alpha(\mathbf{r},t),\hat{J}_0^\beta(\mathbf{r}',t')\right]\right\rangle_0$$

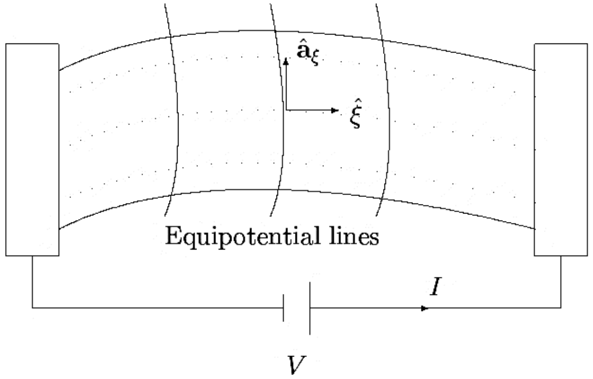
Función de correlación corriente-corriente (dominio temporal)

Fórmula de Kubo para la conductancia

- La conductancia *G* es la constante de proporcionalidad entre la corriente *I* a través de una muestra y el voltaje *V* aplicado a ella: $I = GV$.

- Frecuencias donde la longitud de onda es mucho mayor al tamaño de la muestra ($\omega = 0$).

- Elegimos una superficie equipotencial y definimos un sistema de coordenadas $(\xi, \boldsymbol{a}_\xi) \longrightarrow \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \hat{\xi} E(\xi)$



- La corriente que pasa a través de una muestra es igual a la integral de la densidad de corriente a través de una sección eficaz:

$$I_e = \int d\mathbf{a}_\xi \, \hat{\xi} \cdot \mathbf{J}_\mathbf{e}(\xi, \mathbf{a}_\xi) = \int d\mathbf{a}_\xi \int d\mathbf{r}' \; \hat{\xi} \cdot \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega = 0) \mathbf{E}(\mathbf{r}'),$$

$$= \int d\mathbf{a}_\xi \int d\mathbf{a}_{\xi'} \int d\xi' \, \hat{\xi} \cdot \sigma(\xi, \mathbf{a}_\xi, \xi', \mathbf{a}_{\xi'}; \omega = 0) \cdot \hat{\xi}' E(\xi'),$$

Fórmula de Kubo para la conductancia

- Para hallar la respuesta en DC, deberíamos tomar el límite de $\omega \to 0$ de esta expresión, y además si tomamos la parte real llegamos a

$$I_e(\xi) = \lim_{\omega\to 0} \int d\xi' \, \mathrm{Re}\left[\frac{ie^2}{\omega} C^R_{I(\xi)I(\xi')}(\omega)\right] E(\xi') \equiv \int d\xi' \, G(\xi,\xi') E(\xi')$$

- Por la conservación de la carga, la corriente DC puede ser calculada para cualquier punto ξ y el resultado no puede depender de ξ.
- Se puede mostrar que la función conductancia $G(\xi,\xi')$ es simétrica, no puede depender de ξ'.
- Encontramos que la fórmula de la respuesta lineal para la conductancia es

$$G = \lim_{\omega\to 0} \frac{ie^2}{\omega} C^R_{II}(\omega)$$

$$C^R_{II}(t-t') = -i\theta(t-t')\langle[\hat{I}(t), \hat{I}(t')]\rangle$$

Función de correlación corriente-corriente
(dominio temporal)

Fórmula de Kubo para la función dieléctrica

- Sistema de partículas cargadas (gas de electrones), sujeto a una perturbación electromagnética externa, la carga se redistribuye y el sistema se polariza.
- Aplicar un potencial externo ϕ_{ext} y medir el potencial total ϕ_{tot} resultante. El potencial total está dado por $\phi_{tot} = \phi_{ext} + \phi_{ind}$
- El cociente entre el potencial externo y el potencial total es la función de respuesta dieléctrica $\phi_{tot} = \varepsilon^{-1}\phi_{ext}$ ← Permitividad relativa ε
- Las relaciones entre los potenciales total y externo están dadas por

$$\phi_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \int dt'\, \varepsilon^{-1}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t')\, \phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}', t'),$$

$$\phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \int dt'\, \varepsilon(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t')\, \phi_{\text{tot}}(\mathbf{r}', t').$$

→ Nuestra tarea es encontrar la función dieléctrica $\varepsilon(\mathbf{r}\mathrm{t}, \mathbf{r}'\mathrm{t}')$.

Fórmula de Kubo para la función dieléctrica

- Para encontrar la función dieléctrica necesitamos el potencial inducido. La perturbación externa está dada por el siguiente término en el Hamiltoniano

$$H' = \int d\mathbf{r}\ \rho_e(\mathbf{r})\ \phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$$

- Asumiendo que $\langle \rho_e(\mathbf{r}, t) \rangle_0 = 0$

- La densidad de carga inducida está dada por la teoría de respuesta lineal $\delta\langle A(t)\rangle = \langle A(t)\rangle - \langle A\rangle_0$

$$\rho_{e,\text{ind}}(\mathbf{r}, t) = \langle \rho_e(\mathbf{r}, t) \rangle = \int d\mathbf{r}' \int_{t_0}^{\infty} dt' C^R_{\rho_e \rho_e}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') e^{-\eta(t-t')}\ \phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}', t'),$$

$$C^R_{\rho_e \rho_e}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') \equiv \chi^R_e(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = -i\theta(t - t')\langle [\hat{\rho}_e(\mathbf{r}, t), \hat{\rho}_e(\mathbf{r}', t')] \rangle_0$$

Función de correlación carga-carga o Función de polarizabilidad.

Fórmula de Kubo para la función dieléctrica

- Una vez encontrada la densidad de carga inducida, podemos encontrar el potencial dado por la interacción Coulombiana $V_c(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = 1/(\epsilon_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$

$$\phi_{\text{ind}}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}'\, V_c(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, \rho_{e,\text{eind}}(\mathbf{r}')$$

- El potencial total está dado por

$$\phi_{\text{tot}}(\mathbf{r},t) = \phi_{\text{ext}}(\mathbf{r},t) + \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \int_{t_0}^{\infty} dt' V_c(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\chi^R(\mathbf{r}'t,\mathbf{r}''t')\, \phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}'',t')$$

- De esta expresión, y recordando que $\phi_{tot} = \varepsilon^{-1}\phi_{ext}$, encontramos la inversa de la función dieléctrica

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t-t') + \int d\mathbf{r}''V_c(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')\chi^R(\mathbf{r}''t,\mathbf{r}'t').$$

Fórmula de Kubo para la función dieléctrica

→ Caso invariancia traslacional:

$\chi^R(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \chi^R(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t')$ → Depende de la diferencia de los argumentos

- Los potenciales ahora tienen la forma

$$\phi_{\rm tot}(\mathbf{q},\omega) = \varepsilon^{-1}(\mathbf{q},\omega)\phi_{\rm ext}(\mathbf{q},\omega),$$

$$\phi_{\rm ext}(\mathbf{q},\omega) = \varepsilon(\mathbf{q},\omega)\phi_{\rm tot}(\mathbf{q},\omega)$$

con

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{q},\omega) = 1 + V_c(\mathbf{q})\chi_e^R(\mathbf{q},\omega)$$

Función dieléctrica

→ Relación entre ε y σ :

- Usando la definición de conductividad y la ecuación de continuidad

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{J}(\mathbf{q},\omega) = \sigma(\mathbf{q},\omega)\mathbf{E}_{\rm ext}(\mathbf{q},\omega) = -i\sigma(\mathbf{q},\omega)\mathbf{q}\phi_{\rm ext}(\mathbf{q},\omega) \\ &-i\omega\rho(\mathbf{q},\omega) + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{J}(\mathbf{q},\omega) = 0, \end{aligned}\right\} \quad \varepsilon^{-1}(\mathbf{q},\omega) = 1 - i\frac{q^2}{\omega}V_c(\mathbf{q})\sigma(\mathbf{q},\omega).$$

Muchas gracias