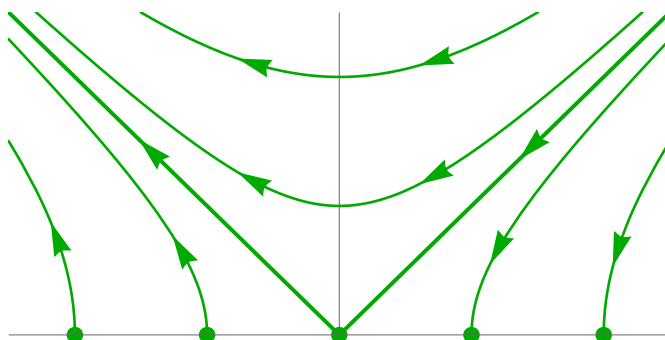


---

# КОНСПЕКТЫ ЛЕКЦИЙ ПО СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ

---

ИГОРЬ БУРМИСТРОВ и АЛЕКСЕЙ ЛУНКИН



Москва, 2024



# Оглавление

<b>1</b>	<b>Основы статистической механики</b>	<b>11</b>
1.1	Распределение Гиббса в статистической механике . . . . .	12
1.1.1	Матрица плотности . . . . .	12
1.1.2	Распределение Гиббса . . . . .	13
1.1.3	Энтропия . . . . .	14
1.1.4	Принцип максимальной энтропии . . . . .	14
1.1.5	Связь с термодинамикой . . . . .	15
1.1.6	Системы с произвольным числом частиц . . . . .	16
1.2	Термодинамические флуктуации . . . . .	20
1.2.1	Гиббсовский подход к термодинамическим флуктуациям . . . . .	20
1.2.2	Термодинамические флуктуации квантовой системы во внешнем поле . . . . .	21
1.2.3	Подход Эйнштейна к термодинамическим флуктуациям . . . . .	22
1.2.4	Термодинамические флуктуации в гранканоническом ансамбле . . . . .	24
1.3	Термодинамика идеального ферми-газа . . . . .	27
1.3.1	Распределение Ферми-Дирака . . . . .	27
1.3.2	Каноническая статистическая сумма . . . . .	28
1.3.3	Плотность состояний . . . . .	30
1.3.4	Химический потенциал и энергия Ферми . . . . .	31
1.3.5	Уравнение состояния при $d = 2$ . . . . .	32
1.3.6	Теплоёмкость . . . . .	33
1.3.7	От идеального ферми-газа к бозе-газу по Больцману . . . . .	35
1.4	Термодинамика идеального бозе-газа . . . . .	38
1.4.1	Распределение Бозе-Эйнштейна . . . . .	38
1.4.2	Canonical partition function . . . . .	40
1.4.3	Chemical potential in $d = 2$ . . . . .	40
1.4.4	Equation of state in $d = 2$ . . . . .	41

1.4.5	Specific heat . . . . .	41
1.4.6	The Bose-Einstein condensation in $d = 3$ . . . . .	43
<b>2</b>	<b>Thermodynamics of quantum fluids</b>	<b>47</b>
2.1	Weakly non-ideal Fermi gas . . . . .	48
2.1.1	Hamiltonian . . . . .	48
2.1.2	Thermodynamic potential . . . . .	48
2.2	Normal Fermi liquid . . . . .	52
2.2.1	Main assumptions . . . . .	52
2.2.2	Эффективная масса . . . . .	53
2.2.3	The Landau $f$ -function . . . . .	54
2.2.4	Relation between $m_*$ and $m$ . . . . .	54
2.2.5	Specific heat . . . . .	56
2.3	Weakly non-ideal Bose gas . . . . .	59
2.3.1	Hamiltonian . . . . .	59
2.3.2	Condensate . . . . .	59
2.3.3	Unitary transformation of the Hamiltonian . . . . .	60
2.3.4	Specific heat . . . . .	62
2.3.5	The number of particles in the condensate . . . . .	62
2.3.6	The Gross-Pitaevskii equation . . . . .	63
2.4	Сверхтекучесть . . . . .	66
2.4.1	Критерий сверхтекучести . . . . .	66
2.4.2	Плотность нормальной компоненты . . . . .	67
2.4.3	Теплоёмкость . . . . .	68
2.5	Сверхпроводимость . . . . .	70
2.5.1	Куперовская неустойчивость . . . . .	70
2.5.2	Среднезаполнительное решение BCS-гамильтониана . . . . .	71
2.5.3	Основное состояние . . . . .	73
2.5.4	Теплоёмкость . . . . .	75
2.6	The Luttinger liquid . . . . .	77
2.6.1	Bosonization of non-interacting spinless 1D fermions . . . . .	77
2.6.2	The interacting fermions: g-ology . . . . .	79
<b>3</b>	<b>Фазовые переходы и критические явления</b>	<b>83</b>
3.1	Одномерная модель Изинга . . . . .	84
3.1.1	Гамильтониан . . . . .	84
3.1.2	Метод передаточной матрицы . . . . .	85
3.1.3	Периодические граничные условия . . . . .	86
3.1.4	Скрученные граничные условия . . . . .	87
3.2	The Landau theory of phase transitions . . . . .	89
3.2.1	The mean-field approximation . . . . .	89

3.2.2	The Landau expansion . . . . .	90
3.2.3	Microscopic derivation of the Ginzburg-Landau theory . . . . .	92
3.2.4	The Ginzburg-Landau theory and the Ginzburg-Levanyuk criterion . . . . .	94
3.3	Scaling ideas and renormalization group . . . . .	97
3.3.1	Critical exponents . . . . .	97
3.3.2	The scale invariance and scaling laws . . . . .	98
3.3.3	The renormalization group . . . . .	99
3.3.4	The $4 - d$ expansion . . . . .	101
3.4	One-dimensional Ising model in transverse field . . . . .	105
3.4.1	The Jordan-Wigner transformation . . . . .	105
3.4.2	Fermionic parity operator . . . . .	106
3.4.3	The spectrum of Jordan-Wigner fermions . . . . .	107
3.4.4	The phase diagram and topology . . . . .	109
3.5	The Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition . . . . .	114
3.5.1	Transitions beyond the Landau paradigm . . . . .	114
3.5.2	Classical 2D XY model . . . . .	114
3.5.3	The Villain model on the dual lattice . . . . .	117
3.5.4	The renormalization group analysis . . . . .	118
<b>4</b>	<b>Statistical mechanics of open systems</b>	<b>123</b>
4.1	Fluctuation-dissipation theorem and the Kubo formula . . . . .	124
4.1.1	The generalized susceptibility . . . . .	124
4.1.2	The fluctuation dissipation theorem . . . . .	125
4.1.3	The Kramers-Kronig relations . . . . .	126
4.1.4	The Kubo formula . . . . .	127
4.2	The Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad equation . . . . .	129
4.2.1	Helical 1D electrons coupled to a magnetic impurity . . . . .	129
4.2.2	Perturbation theory for the reduced density matrix . . . . .	129
4.2.3	The Markov approximation and final form of the master equation . . . . .	131
4.2.4	The Gibbs distribution for the reduced density matrix . . . . .	132
<b>5</b>	<b>Thermalization of an isolated quantum system</b>	<b>135</b>
5.1	The eigenstate thermalization hypothesis . . . . .	136
5.1.1	Ergodicity and chaos in classical mechanics . . . . .	136
5.1.2	Chaos in an isolated quantum system . . . . .	137
5.1.3	Eigenstate thermalization hypothesis . . . . .	137

<b>6</b>	<b>Решения задач для семинаров</b>	<b>139</b>
6.1	Seminar I	140
6.1.1	Problems 1 and 2	140
6.1.2	Problem 3	141
6.2	Seminar II	142
6.2.1	Problem 4	142
6.2.2	Problem 5	142
6.2.3	Problem 6	143
6.3	Seminar III	144
6.3.1	Problem 7	144
6.3.2	Problem 8	144
6.3.3	Problem 9	145
6.3.4	Problem 10	145
6.3.5	Problem 11	146
6.4	Seminar IV	146
6.4.1	Problem 12	146
6.4.2	Problem 13	148
6.5	Seminar V	149
6.5.1	Problem 14	149
6.6	Seminar VI	151
6.6.1	Problem 15	151
6.6.2	Problem 16	152
6.7	Seminar VII	153
6.7.1	Problem 17	153
6.7.2	Problem 18	154
6.7.3	Problem 19	156
6.8	Семинар VIII	156
6.8.1	Задача 20	156
6.8.2	Задача 21	157
6.8.3	Задача 22	157
6.9	Seminar IX	158
6.9.1	Problem 23	158
6.9.2	Problem 24	161
6.10	Seminar X	161
6.10.1	Problem 25	161
6.10.2	Problem 26	163
6.10.3	Problem 27	164
6.11	Seminar XI	165
6.11.1	Задача 28	165
6.11.2	Задача 29	166
6.12	Seminar XII	166

6.12.1 Problem 30 . . . . .	167
6.12.2 Problem 31 . . . . .	167
6.12.3 Problems 32 . . . . .	168
6.13 Seminar XIII . . . . .	168
6.13.1 Problem 33 . . . . .	168
6.13.2 Problem 34 . . . . .	169
6.14 Seminar XIV . . . . .	170
6.14.1 Problem 35 . . . . .	171
6.14.2 Problem 36 . . . . .	171
6.15 Seminar XV . . . . .	175
6.15.1 Problem 37 . . . . .	175
6.15.2 Problem 38 . . . . .	176
6.15.3 Problem 39 . . . . .	178
6.16 Seminar XVI . . . . .	180
6.16.1 Problem 40 . . . . .	181
6.16.2 Problem 41 . . . . .	181
6.17 Seminar XVII . . . . .	182
6.17.1 Problem 42 . . . . .	183
6.17.2 Problem 43 . . . . .	185





# Предисловие

Настоящие заметки были написаны на основе лекций и семинаров, проведённых в рамках курса статистической физики для студентов бакалавриата факультета физики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» весной 2020–2024 годов. Материал этих записей предназначен для читателя, знакомого с традиционными курсами классической термодинамики и нерелятивистской квантовой механики. В заметках содержится более 40 задач с решениями, сформулировано более 80 задач для самостоятельного решения. Мы благодарны Асе Люблинской, Дмитрию Шапиро и Игорю Тимощуку, которые в разные годы проводили семинары по данному курсу.



# Глава 1

## Основы статистической механики

### Введение

В этой главе мы даём краткое введение в основы статистической механики, а затем применяем метод Гиббса к термодинамике идеальных газов Ферми и Бозе. Описывая идеальные газы Ферми и Бозе, мы избегаем вторичного квантования. Ввиду ограниченности времени мы не рассматриваем подробно термодинамику идеального газа Больцмана. Для дополнительных аспектов этой главы мы рекомендуем учебник [\[1\]](#).

## 1.1 Распределение Гиббса в статистической механике

### Введение

В этой первой лекции мы формулируем термодинамику для квантовой системы в терминах её матрицы плотности. Мы обсуждаем, почему матрица плотности в форме Гиббса является специфической для термодинамики.

#### 1.1.1 Матрица плотности

Начнём со стационарного уравнения Шрёдингера для собственных энергий  $E_a$  и собственных состояний  $|a\rangle$  квантовомеханического гамильтониана  $H$ :

$$H|a\rangle = E_a|a\rangle. \quad (1.1)$$

Предположим, что  $\langle a|a'\rangle = \delta_{a,a'}$ . Произвольное стационарное нормируемое квантовое состояние можно записать как линейную комбинацию собственных состояний:

$$|\psi\rangle = \sum_a c_a |a\rangle, \quad \sum_a |c_a|^2 = 1. \quad (1.2)$$

Квантовомеханическое среднее оператора  $A$  в состоянии  $|\psi\rangle$  можно записать в виде

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \text{Tr } \rho A, \quad (1.3)$$

где мы ввели матрицу

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{a,b} c_a c_b^* |a\rangle\langle b|. \quad (1.4)$$

Матрица  $\rho$  называется *матрицей плотности* для *чистого состояния*, то есть состояния, описываемого волновой функцией. Матрица плотности чистого состояния удовлетворяет следующим соотношениям:  $\text{Tr } \rho = 1$  и  $\rho^2 = \rho$ .

Теперь расширим понятие матрицы плотности на смешанное состояние. Определим его следующим образом: система может находиться в состоянии  $|\psi_j\rangle$  с вероятностью  $p_j$ , где  $j = 1, \dots, K$  и  $\sum_{j=1}^K p_j = 1$ . Тогда квантовомеханическое среднее оператора  $A$  по состояниям  $|\psi_j\rangle$  можно естественным образом определить следующим образом:

$$\overline{A} = \sum_{j=1}^K p_j \langle\psi_j|A|\psi_j\rangle = \text{Tr } \rho A, \quad \rho = \sum_{j=1}^K p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|. \quad (1.5)$$

## 1.1. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ГИББСА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ 13

Хотя построенная таким образом матрица плотности удовлетворяет условию нормировки  $\text{Tr } \rho = 1$ , теперь необходимо, чтобы  $\rho^2 \neq \rho$  и  $\text{Tr } \rho^2 < 1$ .

Для описания динамики матрицы плотности начнём с чистого состояния. Состояние  $|\psi\rangle$  подчиняется зависящему от времени уравнению Шрёдингера:

$$i\partial_t|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle. \quad (1.6)$$

Из этого следует, что  $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle$ , а, следовательно, зависящая от времени матрица плотности принимает вид  $\rho(t) = e^{-iHt}\rho(0)e^{iHt}$ . Таким образом, она удовлетворяет следующему динамическому уравнению, называемому *уравнением Лиувилля*:

$$\partial_t \rho = i[\rho, H]. \quad (1.7)$$

Общая матрица плотности замкнутой квантовой системы, описываемой гамильтонианом  $H$ , должна удовлетворять уравнению Лиувилля. Стационарная матрица плотности должна коммутировать с гамильтонианом,  $[\rho, H] = 0$ , то есть  $\rho$  должна быть функцией гамильтониана  $H$ .

### 1.1.2 Распределение Гиббса

Для многих изолированных квантовых систем стационарная матрица плотности описывается так называемым *распределением Гиббса*, которое можно записать в виде

$$\rho = e^{-\beta H}/Z, \quad Z = \text{Tr } e^{-\beta H}. \quad (1.8)$$

Здесь  $\beta \geq 0$  — формальный параметр с размерностью обратной энергии, называемый *обратная температура*. Нормировочный множитель  $Z$  называется *статистической суммой*. В дальнейшем, за исключением последних глав, мы будем использовать только матрицу плотности Гиббса. Квантовомеханические и термодинамические средние некоторого оператора  $A$  теперь определяются как  $\langle A \rangle = \text{Tr } \rho A$ . В частности, средняя энергия  $E$  выражается следующим образом:  $E = \text{Tr } \rho H$ . Отметим, что иногда матрицу плотности в форме Гиббса, (1.8), называют *каноническим распределением*. Нормировочный множитель  $Z$  при этом называется *канонической статистической суммой*.

Квантовые системы, описываемые гиббсовской матрицей плотности, считаются находящимися в *термодинамическом равновесии*. Однако существует ряд изолированных квантовых систем, стационарная матрица плотности которых не подчиняется распределению Гиббса. Это явление называют отсутствием термализации. Сценарий, согласно которому это может произойти, будет описан в главе 5.

### 1.1.3 Энтропия

Для построения полного термодинамического описания квантовой системы необходимо ввести понятие *энтропии* на основе матрицы плотности. Стандартный способ, предложенный фон Нейманом, выглядит следующим образом

$$S = -\text{Tr } \rho \ln \rho. \quad (1.9)$$

Напомним, что энтропия это экстенсивная величина, аналогичная энергии. Как и для распределения Гиббса, строгого вывода для энтропии фон Неймана не существует. Ниже приведены два обоснования определения (1.9). Первое обоснование является чисто классическим. Рассмотрим систему, состоящую из  $K$  подсистем, каждая из которых характеризуется вероятностью  $p_j$ . Тогда, исходя из аддитивности, энтропия подсистемы, состоящей из подсистем 1 и 2, будет равна сумме энтропий  $s_1 + s_2$ , в то время как соответствующая вероятность будет равна произведению  $p_{12} = p_1 p_2$ . Если выбрать  $s_j = \ln(1/p_j)$ , то  $s_{12} = s_1 + s_2 = \ln(1/p_{12})$ . Средняя энтропия всей системы определяется как  $S = \sum_{j=1}^K p_j s_j = -\sum_{j=1}^K p_j \ln p_j$ . Поскольку собственные значения  $\lambda_j$  матрицы плотности обладают свойствами, аналогичными классическим вероятностям, мы можем определить энтропию квантовой системы как  $S = -\sum_j \lambda_j \ln \lambda_j$ , что эквивалентно уравнению (1.9).

Отметим, что определение энтропии по фон Нейману сталкивается с проблемой второго закона термодинамики, который допускает увеличение энтропии. Однако для некоторых матриц плотности, удовлетворяющих уравнению Лиувилля (1.7), энтропия сохраняется,  $S(t) = S(0)$ . Существует несколько способов решения этой проблемы, которые обсуждаются в современной научной литературе (см. например [2]).

### 1.1.4 Принцип максимальной энтропии

Второе обоснование определения энтропии фон Неймана связано с принципом максимальной энтропии. Альтернативно, его можно рассматривать как обоснование для распределения Гиббса. Пусть мы максимизируем энтропию (1.9) по всем возможным матрицам плотности, но с дополнительным условием  $\text{Tr } \rho H = E = \text{const}$ . Для решения этой задачи максимизации введём множитель Лагранжа  $\beta$  и рассмотрим функционал

$$-\text{Tr } \rho \ln \rho + \beta(E - \text{Tr } \rho H).$$

Варьируя его по  $\delta \rho$  (при условии  $\text{Tr } \delta \rho = 0$ , что вытекает из нормировочного условия  $\text{Tr } \rho = 1$ ), получаем

$$-\text{Tr } \delta \rho (\ln \rho + \beta H) = 0 \quad \Rightarrow \quad \rho \propto e^{-\beta H}. \quad (1.10)$$

## 1.1. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ГИББСА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ 15

Таким образом, принцип максимальной энтропии для энтропии фон Неймана приводит к распределению Гиббса. Это демонстрирует согласованность определения энтропии (1.9) с распределением Гиббса.

### 1.1.5 Связь с термодинамикой

Подставляя распределение Гиббса (1.8) в определение энтропии фон Неймана (1.9), получаем

$$S = \beta E + \ln Z. \quad (1.11)$$

Альтернативно, мы можем получить точно такое же выражение для энтропии, используя статистическую сумму, так как ( $T = 1/\beta$ )

$$S = \frac{\partial(T \ln Z)}{\partial T}. \quad (1.12)$$

Определим *свободную энергию* как  $F = -T \ln Z$ . Тогда уравнение (1.11) можно переписать в виде стандартного термодинамического соотношения между энергией, свободной энергией, температурой и энтропией:

$$F = E - TS. \quad (1.13)$$

Одновременно, уравнение (1.12) принимает вид стандартного термодинамического соотношения между энтропией и свободной энергией:

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V. \quad (1.14)$$

Здесь  $V$  обозначает объём, а индекс  $V$  указывает на то, что производная берётся при постоянном объёме.

Откровенно говоря, выше мы не обсуждали объём, занимаемый квантовой системой. Для квантовой системы, занимающей конечный объём, энергетический спектр будет зависеть от объёма. Самым простым примером для иллюстрации этого является квантовая частица в кубической коробке размера  $L$  с бесконечным потенциальным барьером. Квантовомеханическая сила, действующая на границу коробки в собственном состоянии  $|a\rangle$ , определяется как  $-\partial E_a/\partial L$ . Поэтому среднее давление в состоянии Гиббса (в термодинамическом равновесии) можно определить как

$$P = -\frac{1}{Z} \sum_a \frac{\partial E_a}{\partial V} e^{-\beta E_a} = -\frac{1}{Z} \text{Tr} \frac{\partial H}{\partial V} e^{-\beta H} = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T. \quad (1.15)$$

Вышеуказанные результаты имеют следующие важные следствия:

- энтропия фон Неймана эквивалентна термодинамической энтропии;
- каноническая статистическая сумма  $Z$  определяет свободную энергию  $F$ ;
- вспомогательный параметр  $\beta^{-1}$  является термодинамической температурой  $T$ ;
- $F$  является функцией от  $T$  и  $V$  и определяет энтропию и давление в традиционном термодинамическом смысле.

### 1.1.6 Системы с произвольным числом частиц

Вышеописанное обсуждение предполагает постоянное число частиц в квантовой системе. Однако часто квантовая система слабо взаимодействует с другой системой, что подразумевает обмен частицами. При этом во всех остальных отношениях квантовую систему можно считать изолированной и находящейся в термодинамическом равновесии. Чтобы найти соответствующую матрицу плотности для такой ситуации, можно использовать принцип максимальной энтропии, но теперь с двумя условиями:  $\text{Tr } \rho H = E = \text{const}$  и  $\text{Tr } \rho n = N = \text{const}$ , где  $n$  обозначает оператор числа частиц, а  $N$  — среднее число частиц. Тогда вводятся два множителя Лагранжа  $\beta$  и  $\mu$ , и рассматривается функционал

$$-\text{Tr } \rho \ln \rho + \beta(E - \text{Tr } \rho H) + \beta\mu(\text{Tr } \rho n - N).$$

Варьируя его по  $\delta\rho$  (при условии  $\text{Tr } \delta\rho = 0$ , что вытекает из нормировочного условия  $\text{Tr } \rho = 1$ ), получаем

$$-\text{Tr } \delta\rho(\ln \rho + \beta H - \beta\mu n) = 0 \quad \Rightarrow \quad \rho \propto e^{-\beta H + \beta\mu n}. \quad (1.16)$$

Матрица плотности

$$\rho = e^{-\beta H + \beta\mu n} / \mathcal{Z}, \quad \mathcal{Z} = \text{Tr } e^{-\beta H + \beta\mu n} \quad (1.17)$$

называется *большой канонический ансамбль*. Обратите внимание, что теперь символ  $\text{Tr}$  включает суммирование по состояниям многих тел с любым возможным числом частиц. Большая статистическая сумма  $\mathcal{Z}$  определяет *термодинамический потенциал*:

$$\Omega = -T \ln \mathcal{Z}. \quad (1.18)$$



## 1.1. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ГИББСА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ 17

Термодинамический потенциал  $\Omega$  является функцией от  $T$ ,  $V$  и *химического потенциала*  $\mu$ . Среднее число частиц можно найти по формуле

$$N = \text{Tr } \rho n = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V}. \quad (1.19)$$

Используя уравнение (1.9), мы находим

$$S = \beta E - \beta \mu N - \beta \Omega = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V,\mu}. \quad (1.20)$$

Кроме того, поскольку квантовомеханическое выражение для среднего значения силы в виде производной энергии состояния не искажается возможностью изменения числа частиц, давление можно найти как

$$P = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T,\mu}. \quad (1.21)$$

Уравнение (1.20) связывает термодинамический потенциал и свободную энергию (ее определение  $F = E - TS$  остаётся неизменным) следующим соотношением:  $F = \Omega + \mu N$ . Учитывая уравнение (1.19), можно сказать, что потенциалы  $\Omega$  и  $F$  связаны преобразованием Лежандра таким образом, что  $F$  является функцией от  $T$ ,  $V$  и  $N$ . Тогда химический потенциал определяется как

$$\mu = \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V}. \quad (1.22)$$

Пусть теперь мы применим преобразование Лежандра и введём ещё один потенциал  $\Phi = F + PV$ . Тогда  $\Phi$  является функцией от  $T$ ,  $P$  и  $N$ . Потенциал  $\Phi$  должен быть экстенсивной величиной, но поскольку  $T$  и  $P$  не являются экстенсивными, мы получаем  $\Phi = \mu(T, P)N$ . Иными словами, химический потенциал как функция от  $T$  и  $P$  является потенциалом  $\Phi$  на одну частицу. Следовательно, можно записать  $\mu N = F + PV$ . Сравнивая это с соотношением между  $F$  и  $\Omega$ , получаем неожиданное соотношение между термодинамическим потенциалом, давлением и объёмом:

$$\Omega = -PV. \quad (1.23)$$

Это уравнение вместе с уравнением (1.19) определяет уравнение состояния для квантовой системы в равновесии, т.е. соотношение между давлением, объёмом, числом частиц и температурой. Типичной задачей статистической механики является вычисление термодинамического потенциала  $\Omega$ .

В дополнение к термодинамическим потенциалам  $E$ ,  $\Omega$ ,  $F$  и  $\Phi$ , можно ввести ещё один потенциал, называемый энтальпией  $W(S, P, N) = E + PV$  как функцию от энтропии  $S$ , давления  $P$  и числа частиц  $N$ .

*Задача на семинар 1:* Вычислите свободную энергию, энергию и энтропию для системы из  $N$  независимых спинов  $s = 1/2$  в магнитном поле.

*Задача на семинар 2:* Найдите химический потенциал и давление для системы из  $N$  независимых спинов  $s = 1/2$  в магнитном поле.

*Задача на семинар 3:* С использованием метода якобиана докажите, что  $C_P > C_V$  при условии  $(\partial P / \partial V)_T < 0$ . Здесь  $C_P$  и  $C_V$  — теплоёмкости при постоянном давлении и постоянном объёме соответственно.

*Упражнение 1:* Докажите, что собственные значения  $\lambda_m$  матрицы плотности удовлетворяют соотношениям:  $0 \leq \lambda_m \leq 1$  и  $\sum_m \lambda_m = 1$ .

*Упражнение 2:* Демонстрируйте, что максимальное значение энтропии фон Неймана (1.9) равно  $\dim \rho$ . Найдите вид матрицы плотности, которая максимизирует энтропию.

*Упражнение 3:* Стационарное состояние спина  $S = 5/2$  описывается следующей матрицей плотности

$$\rho = \begin{pmatrix} u & -u & -u & 0 & 0 & m \\ -u & u & u & 0 & 0 & -m \\ -u & u & u & 0 & 0 & -m \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ m & -m & -m & 0 & 0 & 1 - 3u \end{pmatrix}$$

Найдите область в параметрическом пространстве  $\{u, m\}$ , в которой данная матрица удовлетворяет всем условиям, накладываемым на матрицу плотности. При каких значениях параметров данная матрица описывает чистое состояние? Определите максимальную величину энтропии фон Неймана для данной матрицы плотности. Достигается ли она в смешанном или чистом состоянии?

*Упражнение 4:* Среднее давление можно определить как след среднего тензора напряжений,  $P = \langle T_{jj} \rangle / (dV)$ , где  $V$  — объём, а  $d$  — размерность пространства. Оператор тензора напряжений для невзаимодействующей системы определяется как  $T_{jk} = m(\hat{v}_j \hat{v}_k + \hat{v}_k \hat{v}_j)/2$ , где  $\hat{v}_j$  обозначает оператор скорости. Для невзаимодействующей системы докажите соотношение  $P = 2E/(dV)$ .

## 1.2 Термодинамические флуктуации

### Введение

В предыдущей лекции мы продемонстрировали, что подход, основанный на гиббсовской форме матрицы плотности и определении энтропии фон Неймана, даёт описание квантовой системы в терминах средних физических величин, эквивалентное традиционной термодинамике. В этой лекции мы покажем, как можно включить термодинамические флуктуации в подход, основанный на гиббсовской матрице плотности.

#### 1.2.1 Гиббсовский подход к термодинамическим флуктуациям

Поскольку собственные значения  $\lambda_j$  матрицы плотности лежат в диапазоне  $0 \leq \lambda_j \leq 1$ , гиббсовское распределение (1.8) можно интерпретировать как распределение вероятностей для гамильтониана  $H$ . Тогда можно вычислить дисперсию энергии как

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = \text{Tr } \rho H^2 - (\text{Tr } \rho H)^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = -\frac{\partial E}{\partial \beta}. \quad (1.24)$$

Отметим, что в этом подходе к термодинамическим флуктуациям температура (или  $\beta$ ) является фиксированным параметром (множителем Лагранжа), которому не допускается флуктуация. Как и в предыдущей лекции, производные по  $\beta$  (или  $T$ ) берутся при естественном условии постоянного объёма  $V$ . Тогда получаем следующее соотношение между дисперсией энергии и теплоёмкостью при постоянном объёме:

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle_V = T^2 C_V, \quad C_V = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V. \quad (1.25)$$

Результат (1.25) демонстрирует важное свойство термодинамических флуктуаций. Поскольку энергия и энтропия являются экстенсивными величинами, т.е. пропорциональны числу частиц  $N$ , относительные флуктуации энергии  $\sqrt{\langle (\Delta E)^2 \rangle_V} / E$  пропорциональны  $1/\sqrt{N}$ . Поэтому термодинамические флуктуации исчезают в термодинамическом пределе  $N \rightarrow \infty$ .

Аналогично дисперсии энергии можно определить дисперсию флук-

туаций давления:

$$\begin{aligned}\langle(\Delta P)^2\rangle_V &= \frac{1}{Z} \sum_a e^{-\beta E_a} \left( \frac{\partial E_a}{\partial V} \right)^2 - \left( \frac{1}{Z} \sum_a e^{-\beta E_a} \frac{\partial E_a}{\partial V} \right)^2 \\ &= T \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T + T \operatorname{Tr} \left( \frac{\partial^2 H}{\partial V^2} \rho \right).\end{aligned}\quad (1.26)$$

В общем случае последний член не может быть выражен через средние термодинамические величины и их производные. Это хорошо известная проблема применения гиббсовского подхода для вычисления флуктуаций давления [3].

### 1.2.2 Термодинамические флуктуации квантовой системы во внешнем поле

Рассмотрим квантовую систему в присутствии внешнего поля  $\varphi$ , которое линейно связано с оператором  $q$ , так что полный гамильтониан принимает вид  $H = H_0 - q\varphi$ . Тогда среднее значение оператора  $q$  можно найти из гиббсовского распределения:

$$Q = \operatorname{Tr} \rho q = - \left( \frac{\partial F}{\partial \varphi} \right)_{T,V} \quad (1.27)$$

где  $F$  — свободная энергия, зависящая от  $T$ ,  $V$  и  $\varphi$ . Например, в задаче о спинах в магнитном поле именно магнитное поле играет роль внешнего поля. Теперь можно вычислить дисперсию  $Q$ :

$$\langle(\Delta Q)^2\rangle = \operatorname{Tr} \rho q^2 - (\operatorname{Tr} \rho q)^2 = T \chi_Q(\varphi), \quad \chi_Q(\varphi) = \left( \frac{\partial Q}{\partial \varphi} \right)_{T,V}. \quad (1.28)$$

Величина  $\chi_Q$  называется статической восприимчивостью для физической величины  $Q$ . Отметим, что корректность уравнения (1.28) для произвольного значения  $\varphi$  обусловлена линейной зависимостью гамильтониана  $H$  от  $\varphi$ . Следует подчеркнуть, что уравнение (1.28) имеет важное следствие для дисперсии  $Q$  при отсутствии внешнего поля. Дисперсия  $Q$  при  $\varphi = 0$  определяется статической восприимчивостью  $\chi_Q(0)$ . Вычисление  $\chi_Q(0)$  требует знания только линейной связи между системой и внешним полем. Такая ситуация называется *линейным откликом*.

Теперь разработаем схему, которая позволит вычислить дисперсию  $Q$  без явного знания гиббсовского распределения. Введём термодинамиче-

ский потенциал, связанный с  $F(\varphi)$  посредством преобразования Лежандра:

$$\tilde{F}(Q) = F(\varphi) + Q\varphi, \quad \varphi = \left( \frac{\partial \tilde{F}}{\partial Q} \right)_{T,V}. \quad (1.29)$$

Мы можем рассматривать  $\tilde{F}$  как формальную функцию от мгновенного значения  $Q$ . Тогда вводится величина, называемая *минимальной работой* флуктуаций термодинамической переменной  $Q$  согласно

$$U_{\min} = \tilde{F}(Q + \Delta Q) - \tilde{F}(Q) - \varphi(Q)\Delta Q. \quad (1.30)$$

Отметим, что здесь  $\varphi$  является функцией от  $Q$ , как предписано уравнением (1.29). Минимальная работа  $U_{\min}$  является функцией от  $T$ ,  $V$ ,  $Q$  и  $\Delta Q$ . Она обладает следующим важным свойством: её разложение по  $\Delta Q$  начинается с квадратичного члена:

$$U_{\min}(\Delta Q) = \frac{1}{2\chi_Q}(\Delta Q)^2 + O((\Delta Q)^3). \quad (1.31)$$

Теперь, чтобы восстановить результат (1.28), можно постулировать, что функция распределения, определяющая вероятность изменения величины  $Q$  с  $Q$  до  $Q + \Delta Q$  вследствие тепловых флуктуаций, задаётся нормальным распределением:

$$\mathcal{P}_Q(\Delta Q) = \frac{\sqrt{T}}{\sqrt{2\pi\chi_Q}} e^{-U_{\min}(\Delta Q)/T}. \quad (1.32)$$

Тогда получаем

$$\langle (\Delta Q)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dX X^2 \mathcal{P}_Q(X) = T\chi_Q. \quad (1.33)$$

Отметим, что статистика флуктуаций  $Q$  в общем случае не является гауссовой. Таким образом, нормальное распределение (1.32) является, по существу, приближением.

### 1.2.3 Подход Эйнштейна к термодинамическим флуктуациям

Как мы увидели выше, термодинамические флуктуации физических величин, связанных с внешними полями, определяются статическими восприимчивостями. Последние можно вычислить с использованием гиббсовской статистической механики. Теперь сформулируем аналогичный

подход для вычисления термодинамических флуктуаций основных физических параметров  $T$ ,  $P$ ,  $V$  и  $S$ , которые определяют термодинамическое состояние системы. Рассмотрим случай системы, присоединённой к термостату, который поддерживает постоянными температуру и давление в системе. Тогда энтропия и объём системы могут флуктуировать. В полной аналогии с уравнением (1.30) вводится минимальная работа в виде

$$U_{\min} = E(S + \Delta S, V + \Delta V) - E(S, V) - T\Delta S + P\Delta V. \quad (1.34)$$

Разложив  $U_{\min}$  до второго порядка по  $\Delta S$  и  $\Delta V$ , получаем

$$\begin{aligned} U_{\min}(\Delta S, \Delta V) = & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 E}{\partial S^2} \right)_V (\Delta S)^2 + \left( \frac{\partial^2 E}{\partial S \partial V} \right) \Delta S \Delta V \\ & + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \right)_S (\Delta V)^2 + \dots \end{aligned} \quad (1.35)$$

Так же, как мы сделали в уравнении (1.32), мы постулируем, что совместное распределение вероятностей, которое описывает флуктуации  $\Delta S$  и  $\Delta V$ , пропорционально  $\exp(-U_{\min}(\Delta S, \Delta V)/T)$ . (При этом необходимо учесть нормировочный множитель.) Отметим, что для нормализуемости распределения минимальная работа  $U_{\min}$  должна быть положительной как функция от её аргументов  $\Delta S$  и  $\Delta V$ . Это требование приводит к ряду соотношений между производными термодинамических величин, совпадающих с так называемыми термодинамическими неравенствами. Одним из примеров является соотношение  $C_V > 0$ .

Уравнение (1.35) подразумевает, что флуктуации энтропии при фиксированном объёме выражаются следующим образом:

$$\langle (\Delta S)^2 \rangle_V = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = C_V. \quad (1.36)$$

Отметим, что этот результат совпадает с тем, что было получено выше непосредственно из гиббсовского распределения.

Для вычисления тепловых флуктуаций других наблюдаемых величин удобно представить выражение для минимальной работы (1.35) в следующей симметричной форме:

$$U_{\min} = (\Delta S \Delta T - \Delta P \Delta V)/2. \quad (1.37)$$

Хотя мы вывели это выражение для флуктуаций энтропии и объёма при фиксированных температуре и давлении, уравнение (1.37) можно

использовать для вычисления флуктуаций любой пары термодинамических переменных. Например, разложив  $\Delta T$  и  $\Delta V$  в уравнении (1.37) в первом порядке по  $\Delta P$  и  $\Delta S$ , получаем

$$\langle(\Delta P)^2\rangle = -T \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_S. \quad (1.38)$$

Стоит отметить, что результат (1.26) гиббсовского подхода к флуктуациям давления отличается от результата (1.38), полученного по Эйнштейну.

Теперь поясним происхождение термина «*минимальная работа*» для  $U_{\min}$ . Рассмотрим изолированную систему, состоящую из термостата и подсистемы. Подсистема может совершать работу над телом, изолированным от подсистемы и термостата. Предположим, что термостат имеет температуру  $T_0$  и давление  $P_0$ , которые остаются фиксированными, поскольку влияние подсистемы на термостат пренебрежимо мало. Подсистема имеет температуру  $T$  и давление  $P$ , которые могут отличаться от  $T_0$  и  $P_0$ . В отсутствие термостата работа  $U$ , совершаемая телом над подсистемой в некотором процессе, равна разности энергии  $\Delta E$  подсистемы в этом процессе. При наличии термостата необходимо учесть работу  $P_0\Delta V_0$ , выполненную термостатом, и тепло  $-T_0\Delta S_0$ , переданное от термостата к подсистеме. В итоге получаем  $\Delta E = U - T_0\Delta S_0 + P_0\Delta V_0$ . Предполагая сохранение объёма системы, т.е. используя соотношение  $\Delta V_0 = -\Delta V$ , получаем  $U = \Delta E + T_0\Delta S_0 + P_0\Delta V$ . Согласно второму началу термодинамики изменение энтропии изолированной системы не может быть отрицательным,  $\Delta S_0 + \Delta S \geq 0$ . Следовательно, минимальное значение работы определяется как  $U_{\min} = \Delta E - T_0\Delta S + P_0\Delta V$ . При спонтанных термодинамических флуктуациях термостат является большей частью той же системы, имеющей ту же температуру и давление, что и малая подсистема, т.е.  $T_0 = T$  и  $P_0 = P$ . Тогда  $U_{\min}$  определяется уравнением (1.34).

#### 1.2.4 Термодинамические флуктуации в гранканоническом ансамбле

В гранканоническом ансамбле число частиц может флуктуировать. Используя в данном случае гиббсовское распределение (1.17), получаем

$$\langle(\Delta N)^2\rangle_{T,V,\mu} = \text{Tr } \rho n^2 - (\text{Tr } \rho n)^2 = T \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V}. \quad (1.39)$$

Отметим сходство этого результата с общим результатом (1.28). Химический потенциал играет роль внешнего поля, сопряжённого с числом частиц.



В подходе Эйнштейна к термодинамическим флуктуациям случай изменения числа частиц не требует специального рассмотрения. Можно учесть экстенсивность объёма и преобразовать флуктуации объёма  $\langle(\Delta V)^2\rangle_T = -T(\partial V/\partial P)_T$  в флуктуации числа частиц. Таким образом можно восстановить выражение (1.39).

Отметим, что подход Эйнштейна к термодинамическим флуктуациям ограничивается гауссовским приближением. Более высокие кумулянты термодинамических флуктуаций необходимо вычислять, исходя из гиббсовского распределения. Например, третий кумулянт числа частиц,  $C_N^{(3)} = \langle N^3 \rangle - 3\langle N^2 \rangle \langle N \rangle + 2\langle N \rangle^3$ , равен  $C_N^{(3)} = T^2(\partial^2 N/\partial \mu^2)_{T,V}$ . Иными словами, термодинамический потенциал  $\Omega(\mu)$  является функцией, порождающей кумулянты для числа частиц.

*Задача на семинар 4:* Для системы из  $N$  независимых спинов  $s = 1/2$  в магнитном поле вычислите термодинамические флуктуации энергии и сравните их с флуктуациями, определяемыми теплоёмкостью.

*Задача на семинар 5:* Для системы из  $N$  независимых спинов  $s = 1/2$  в магнитном поле вычислите спиновую восприимчивость и термодинамические флуктуации намагниченности. Проверьте справедливость уравнения (1.28).

*Задача на семинар 6:* Выведите выражение для  $U_{\min}$  в виде функции от  $\Delta V$  и  $\Delta T$ . Представьте через  $T$  и  $V$  в качестве независимых термодинамических переменных следующие средние значения:  $\langle(\Delta T)^2\rangle$ ,  $\langle(\Delta V)^2\rangle$ ,  $\langle\Delta T \Delta V\rangle$ ,  $\langle(\Delta P)^2\rangle$ ,  $\langle(\Delta S)^2\rangle$ ,  $\langle\Delta T \Delta P\rangle$ ,  $\langle\Delta T \Delta S\rangle$ ,  $\langle\Delta V \Delta P\rangle$ ,  $\langle\Delta S \Delta P\rangle$  и  $\langle\Delta V \Delta S\rangle$ .

*Упражнение 5:* Используя определение энтропии фон Неймана, докажите, что дисперсия энтропии  $S$  равна теплоёмкости при постоянном объёме,  $\langle(\Delta S)^2\rangle_V = C_V$ .

*Упражнение 6:* Для системы из  $N$  независимых спинов  $s = 1$  в магнитном поле вычислите термодинамические флуктуации энергии и намагниченности. Сравните полученные результаты с выражениями для теплоёмкости и спиновой восприимчивости соответственно.

*Упражнение 7:* Выведите выражение для  $U_{\min}$  в виде функции от  $\Delta S$  и  $\Delta P$ . Представьте через  $P$  и  $S$  в качестве независимых термодинамических переменных следующие средние значения:  $\langle(\Delta T)^2\rangle$ ,  $\langle(\Delta V)^2\rangle$ ,  $\langle\Delta T \Delta V\rangle$ ,  $\langle(\Delta P)^2\rangle$ ,  $\langle(\Delta S)^2\rangle$ ,  $\langle\Delta T \Delta P\rangle$ ,  $\langle\Delta T \Delta S\rangle$ ,  $\langle\Delta V \Delta P\rangle$ ,  $\langle\Delta S \Delta P\rangle$  и  $\langle\Delta V \Delta S\rangle$ .

*Упражнение 8:* Определите, что давление можно задать как след тензора напряжений,  $P = \langle T_{jj} \rangle / (dV)$ , где  $V$  — объём, а  $d$  — размерность пространства. Оператор тензора напряжений для невзаимодействующей системы определяется как  $T_{jk} = m(\hat{v}_j \hat{v}_k + \hat{v}_k \hat{v}_j)/2$ , где  $\hat{v}_j$  обозначает оператор скорости. Для невзаимодействующей системы выразите флуктуации давления  $\langle(\Delta P)^2\rangle$  через флуктуации энергии  $\langle(\Delta E)^2\rangle$ .

## 1.3 Термодинамика идеального ферми-газа

### Введение

В этой лекции мы обсуждаем термодинамику самой простой квантовой системы — идеального ферми-газа. Чтобы конечные выражения были более наглядными, рассмотрим ферми-газ в двух пространственных измерениях. Отметим, что такая ситуация экспериментально реализуется в полупроводниковых гетероструктурах и квантовых ямах.

#### 1.3.1 Распределение Ферми-Дирака

Рассмотрим идеальный ферми-газ в гранканоническом ансамбле, т.е. при заданной температуре и химическом потенциале. Наша цель — вывести общее выражение для термодинамического потенциала и среднего числа фермионов. Для упрощения вывода на мгновение отложим учет спина фермионов. С физической точки зрения мы рассматриваем полностью спин-поляризованный ферми-газ.

Начнём с самой простой ситуации, когда имеется один энергетический уровень  $\varepsilon_1$ , который может быть занят фермионами. Из-за принципа исключения Паули этот уровень может быть либо пуст, либо занят. Следовательно, гранканоническая статистическая сумма имеет следующий вид:  $\mathcal{Z}^{(1)} = 1 + e^{-\beta\varepsilon_1 + \beta\mu}$ . Теперь добавим ещё один уровень  $\varepsilon_2$ . Опять же, благодаря принципу исключения Паули, могут возникнуть четыре различные ситуации (см. рис. 1.1):

- (i) оба уровня пусты,
- (ii) уровень  $\varepsilon_1$  занят, а уровень  $\varepsilon_2$  пуст,
- (iii) уровень  $\varepsilon_1$  пуст, а уровень  $\varepsilon_2$  занят,
- (iv) оба уровня заняты.

Гранканоническая статистическая сумма принимает вид

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}^{(2)} &= 1 + e^{-\beta\varepsilon_1 + \beta\mu} + e^{-\beta\varepsilon_2 + \beta\mu} + e^{-\beta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + 2\beta\mu} \\ &= (1 + e^{-\beta\varepsilon_1 + \beta\mu}) (1 + e^{-\beta\varepsilon_2 + \beta\mu}).\end{aligned}\quad (1.40)$$

Как видно, гранканоническая статистическая сумма  $\mathcal{Z}$  факторизуется в произведение независимых факторов для каждого энергетического уровня. Обобщение на произвольное число уровней очевидно:

$$\mathcal{Z} = e^{-\beta\Omega} = \prod_{a,\sigma} (1 + e^{-\beta\varepsilon_{a,\sigma} + \beta\mu}).\quad (1.41)$$

Здесь  $a$  нумерует орбитальные степени свободы, а  $\sigma$  обозначает  $z$ -проекцию спина фермиона. Число частиц можно извлечь из уравнения (1.41) как

$$N = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \sum_{a,\sigma} f_F(\varepsilon_{a,\sigma}), \quad f_F(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}. \quad (1.42)$$

Функция  $f_F(\varepsilon)$  называется *распределением Ферми-Дирака*.

Распределение Ферми-Дирака можно рассматривать и с другой точки зрения. Из-за принципа исключения Паули данное одночастичное состояние может быть либо пустым, либо занятым фермионом. Поэтому для описания одного фермиона требуется матрица плотности размером  $2 \times 2$ . Результат (1.41) показывает, что матрицу плотности для фермионной системы можно записать как тензорное произведение  $2 \times 2$  матриц плотности:  $\rho = \prod_{a,\sigma} \otimes \rho_{a,\sigma}$ , где  $\text{Tr } \rho_{a,\sigma} = 1$ . Обозначим собственные значения  $\rho_{a,\sigma}$  как  $n_{a,\sigma}$  и  $1 - n_{a,\sigma}$ . Тогда энтропия записывается следующим образом:

$$S = - \sum_{a,\sigma} [n_{a,\sigma} \ln n_{a,\sigma} + (1 - n_{a,\sigma}) \ln(1 - n_{a,\sigma})]. \quad (1.43)$$

Величина  $n_{a,\sigma}$  называется числом занятости для энергетического уровня  $\varepsilon_{a,\sigma}$  и имеет смысл вероятности того, что данный уровень занят. Тогда число частиц и энергия выражаются как

$$N = \sum_{a,\sigma} n_{a,\sigma}, \quad E = \sum_{a,\sigma} \varepsilon_{a,\sigma} n_{a,\sigma}. \quad (1.44)$$

Теперь можно применить принцип максимальной энтропии: максимизировать  $S$  по  $n_{a,\sigma}$  при условии сохранения  $N$  и  $E$  фиксированными. Вариационная процедура для функционала  $S + \beta\mu N - \beta E$  по  $n_{a,\sigma}$  приводит к оптимальному значению числа занятости, заданному распределением Ферми-Дирака, т.е.  $n_{a,\sigma} = f_F(\varepsilon_{a,\sigma})$  реализует принцип максимальной энтропии.

### 1.3.2 Каноническая статистическая сумма

Иногда удобно работать при фиксированном числе частиц, а не при фиксированном химическом потенциале. Чтобы вывести выражение для канонической статистической суммы, рассмотрим сначала случай двух энергетических уровней  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  (см. рис. 1.1). Тогда из первой строки уравнения (1.40) канонические статистические суммы можно записать как

$$Z_{N=0} = 1, \quad Z_{N=1} = e^{-\beta\varepsilon_1} + e^{-\beta\varepsilon_2}, \quad Z_{N=2} = e^{-\beta(\varepsilon_1+\varepsilon_2)}, \quad Z_{N>2} = 0. \quad (1.45)$$



Рис. 1.1: Четыре возможных состояния для спин-поляризованных фермионов, занимающих два энергетических уровня.

В общем случае можно записать *интеграл Дарвина-Фаулера* для канонической статистической суммы

$$Z_N = e^{-\beta F} = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i\theta N} \prod_{a,\sigma} (1 + e^{-\beta \varepsilon_{a,\sigma} + i\theta}) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i\theta N - \beta \Omega(iT\theta)}. \quad (1.46)$$

При большом числе частиц интеграл по углу  $\theta$  можно выполнить методом седловой точки. Тогда, если обозначить седловое значение угла  $\theta$  как  $\theta_s = -i\mu$ , оно удовлетворяет стандартному соотношению между числом частиц и химическим потенциалом:  $N = -\partial \Omega(\mu) / \partial \mu$ . Свободная энергия также будет определяться стандартным преобразованием Лежандра:  $F = \Omega(\mu) + \mu N$ . Ниже мы обычно используем условие фиксированного химического потенциала вместо фиксированного числа частиц.

В дополнение к  $Z_N$  удобно ввести следующую величину

$$Z_N(\varepsilon_{a,\sigma}) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i\theta N} (1 + e^{-\beta \varepsilon_{a,\sigma} + i\theta})^{-1} \prod_{b,\sigma'} (1 + e^{-\beta \varepsilon_{b,\sigma'} + i\theta}). \quad (1.47)$$

Она имеет смысл статистической суммы для  $N$  фермионов, занимающих все энергетические уровни, кроме уровня  $\varepsilon_{a,\sigma}$ . Используя  $Z_N(\varepsilon_{a,\sigma})$ , можно определить вероятность того, что энергетический уровень  $\varepsilon_{a,\sigma}$  занят,

$$f_F^{(N)}(\varepsilon_{a,\sigma}) = 1 - \frac{Z_N(\varepsilon_{a,\sigma})}{Z_N}. \quad (1.48)$$

Можно показать, что  $f_F^{(N)}(\varepsilon)$  переходит в  $f_F(\varepsilon)$  при  $N \rightarrow \infty$  (см. рис. 1.2 и задачи ниже).

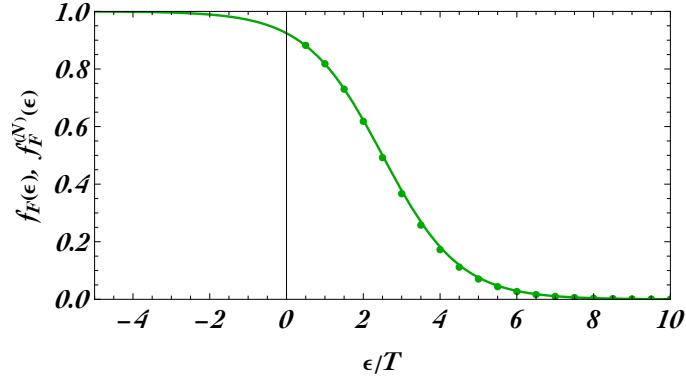


Рис. 1.2: Сравнение  $f_F(\varepsilon)$  и  $f_F^{(N)}(\varepsilon)$  для свободных фермионов с равноудалённым спектром  $\varepsilon_n = \delta n$ ,  $n = 1, 2, \dots$ , для  $N = 25$  и  $T/\delta = 10$ . Отметим, что  $\mu/T \simeq N\delta/T = 2.5$ .

### 1.3.3 Плотность состояний

Для вычисления термодинамических величин различных фермионных систем удобно ввести понятие *плотности состояний*:

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_{a,\sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{a,\sigma}). \quad (1.49)$$

Тогда термодинамический потенциал и число частиц можно записать следующим образом:

$$\Omega = -TV \int d\varepsilon g(\varepsilon) \ln(1 + e^{-\beta\varepsilon + \beta\mu}), \quad N = V \int d\varepsilon g(\varepsilon) f_F(\varepsilon). \quad (1.50)$$

Используя термодинамическое соотношение  $E = \Omega + TS + \mu N$ , получаем выражение для энергии, согласующееся с уравнением (1.44):

$$E = V \int d\varepsilon g(\varepsilon) \varepsilon f_F(\varepsilon). \quad (1.51)$$

Это выражение для энергии позволяет записать результат для теплоёмкости:

$$C = V \int d\varepsilon g(\varepsilon) \varepsilon \frac{\partial f_F(\varepsilon)}{\partial T} \quad (1.52)$$

где производная по температуре берётся при фиксированном химическом потенциале. Плотность состояний определяется спектром энергии одночастичного уравнения. Рассмотрим частицу в одномерном квантовом колоде длины  $L$  с бесконечными стенками. Тогда собственные энергии

имеют вид  $\varepsilon_n = \hbar^2 \pi^2 n^2 / (2mL^2)$ , где  $m$  — масса частицы, а  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Полезно вычислить плотность состояний в термодинамическом пределе  $L \rightarrow \infty$ :

$$g(\varepsilon) = \frac{g_s}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) \approx \frac{g_s}{L} \int_0^{\infty} dn \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) = \frac{g_s \sqrt{m}}{\pi \hbar \sqrt{2\varepsilon}} \Theta(\varepsilon). \quad (1.53)$$

Здесь  $\Theta(\varepsilon)$  обозначает функцию Хевисайда, а  $g_s = 2s + 1$  — число проекций для фермионов со спином  $s$ . Заметим, что в пределе  $L \rightarrow \infty$  плотность состояний не зависит от размера  $L$ .

Результат (1.53) можно вывести и другим способом. Рассмотрим свободную частицу с импульсом  $p$  в одном пространственном измерении. Тогда, если записать плотность состояний следующим образом:

$$g(\varepsilon) = g_s \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \delta\left(\varepsilon - \frac{p^2}{2m}\right), \quad (1.54)$$

мы получим точно такой же результат, как в уравнении (1.53). Обобщение уравнения (1.54) для свободного движения квантовой частицы в произвольном пространственном измерении  $d$  имеет вид

$$g(\varepsilon) = g_s \int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^d} \delta\left(\varepsilon - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right). \quad (1.55)$$

### 1.3.4 Химический потенциал и энергия Ферми

В качестве наглядного примера, простого в математическом плане, рассмотрим термодинамические свойства двумерного идеального ферми-газа. Используя уравнения (1.50) и (1.55), получаем число частиц:

$$N = \frac{g_s V m}{2\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon - \beta\mu} + 1} = \frac{g_s m V T}{2\pi\hbar^2} \ln(1 + e^{\beta\mu}). \quad (1.56)$$

Решая это уравнение относительно  $\mu$ , получаем

$$\mu(T) = T \ln(e^{E_F/T} - 1), \quad E_F = \frac{2\pi\hbar^2 N}{g_s m V}. \quad (1.57)$$

Единственная характерная энергетическая шкала  $E_F = \mu(T = 0)$  называется *энергией Ферми*. Важность энергии Ферми обусловлена следующим наблюдением: при  $T = 0$  фермионное заполнение,  $f_F(\varepsilon)$ , для

состояния с энергией  $\varepsilon$  равно 1, если  $\varepsilon \leq E_F$ , и 0 в противном случае. Другими словами, все состояния ниже энергии Ферми заполнены в идеальном ферми-газе. Далее мы обсудим, как это утверждение изменяется при взаимодействии между фермионами. Удобно ввести понятие *импульса Ферми*  $p_F = \sqrt{2mE_F}$ . Тогда при нулевой температуре состояния идеального ферми-газа с импульсом  $p \leq p_F$  заполнены, а состояния с  $p > p_F$  пусты.

Зависимость  $\mu(T)$  показана на рис. 1.3а. Химический потенциал является монотонно убывающей функцией температуры. Это не является общим свойством: для  $d < 2$  химический потенциал  $\mu(T)$  является немонотонной функцией температуры. В вырожденном режиме,  $T \ll E_F$ , химический потенциал можно записать как

$$\mu(T) = E_F - T e^{-E_F/T} + \dots \quad (1.58)$$

Отметим, что температурные поправки к величине химического потенциала при нулевой температуре экспоненциально малы. Это характерная особенность для пространственных измерений  $d = 2$ .

При температуре  $T_0 = E_F / \ln 2$  химический потенциал обращается в ноль,  $\mu(T_0) = 0$ . В высокотемпературном режиме,  $T \gg E_F$ , химический потенциал отрицателен и может быть аппроксимирован выражением

$$\mu(T) = -T \ln \frac{T}{E_F}. \quad (1.59)$$

### 1.3.5 Уравнение состояния при $d = 2$

Чтобы найти уравнение состояния для идеального ферми-газа, необходимо вычислить термодинамический потенциал, см. уравнение (1.50). Снова рассмотрим случай пространственных измерений  $d = 2$ . Тогда получаем

$$P = \frac{g_s m T}{2\pi \hbar^2} \int_0^\infty d\varepsilon \ln(1 + e^{\beta\mu - \beta\varepsilon}) = -\frac{g_s m T^2}{2\pi \hbar^2} \text{Li}_2(-e^{\beta\mu}). \quad (1.60)$$

Здесь мы вводим специальную функцию  $\text{Li}_k(z) = \sum_{j=1}^\infty \frac{z^j}{j^k}$ , известную как *полилогарифм*. Используя уравнение (1.57), получаем уравнение состояния для идеального ферми-газа в пространстве  $d = 2$ :

$$\frac{PV}{NT} = -\frac{T}{E_F} \text{Li}_2(1 - e^{E_F/T}). \quad (1.61)$$



Используя асимптотическое выражение  $\text{Li}_2(-z) = -\frac{(\ln z)^2}{2} - \frac{\pi^2}{6}$  при  $z \gg 1$ , получаем давление идеального вырожденного ферми-газа при  $T \ll E_F$ :

$$P = \frac{NE_F}{2V} \left( 1 + \frac{\pi^2}{3} \frac{T^2}{E_F^2} \right). \quad (1.62)$$

В противоположном случае высоких температур,  $T \gg E_F$ , можно использовать асимптотическое разложение полилогарифма при  $z \ll 1$ :  $\text{Li}_2(z) = z + \frac{z^2}{4}$ . Тогда получаем следующее уравнение состояния при  $T \gg E_F$ :

$$PV = NT \left( 1 + \frac{E_F}{4T} \right). \quad (1.63)$$

Как видно, оно напоминает уравнение состояния идеального бозе-газа по Больцману с поправкой, соответствующей дополнительному давлению при заданной температуре. Эта поправка является следствием статистики Ферми-Дирака из-за квантовомеханических эффектов обмена (в сущности, принципа исключения Паули). Сходство уравнения состояния при  $T \gg E_F$  с уравнением для идеального бозе-газа по Больцману не случайно. При  $T \gg E_F$  функция распределения Ферми-Дирака может быть аппроксимирована как  $f_F(\varepsilon) \approx \exp(\beta\mu - \beta\varepsilon)$ , то есть переходит в распределение Больцмана. Общее поведение давления при изменении температуры показано на рис. 1.3b. Это поведение не является специфичным только для  $d = 2$ ; в любом измерении давление идеального ферми-газа при заданной температуре больше, чем у идеального бозе-газа по Больцману.

### 1.3.6 Теплоёмкость

Чтобы определить теплоёмкость при постоянном объёме, начнём с вычисления свободной энергии через соотношение  $F = -PV + \mu N$ . В пространственных измерениях  $d = 2$  явное выражение для свободной энергии имеет вид:

$$F = \frac{NT^2}{E_F} \text{Li}_2(1 - e^{E_F/T}) + NT \ln(e^{E_F/T} - 1). \quad (1.64)$$

Как и ожидалось, свободная энергия пропорциональна числу частиц и зависит от единственного параметра  $T/E_F$ . Используя результаты для химического потенциала и давления в вырожденном режиме, получаем свободную энергию при  $T \ll E_F$ :

$$F = \frac{NE_F}{2} - \frac{\pi^2}{6} \frac{NT^2}{E_F}. \quad (1.65)$$

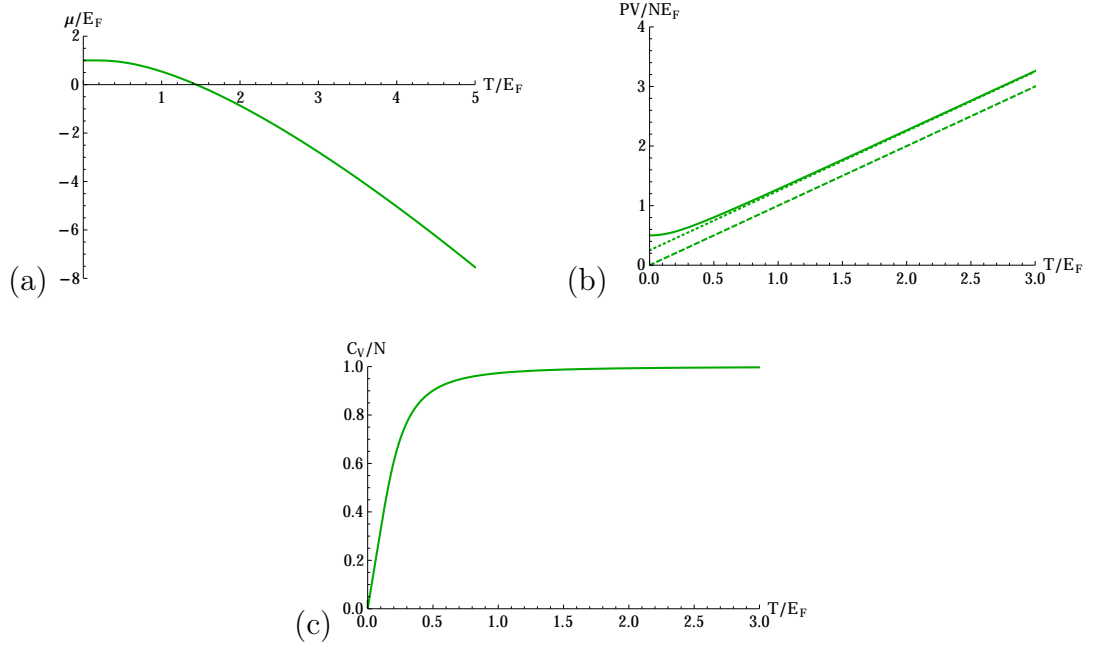


Рис. 1.3: Температурное поведение термодинамических величин в двумерном идеальном ферми-газе: (а) химический потенциал, (б) давление и (с) теплоёмкость.

Следовательно, теплоёмкость при  $T \ll E_F$  в пространстве  $d = 2$  равна

$$C_V = -T \left( \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V = \frac{\pi^2}{3} \frac{NT}{E_F}. \quad (1.66)$$

Отметим, что теплоёмкость пропорциональна температуре. Этот факт является прямым следствием существования ферми-области. При низких температурах только малая часть фермионов, находящихся в окрестности энергии Ферми с энергиями  $|\varepsilon - E_F| \lesssim T$ , может участвовать в переносе тепла.

В области Больцмана,  $T \gg E_F$ , используя уравнения (1.59) и (1.63), восстанавливается результат для теплоёмкости идеального бозе-газа по Больцману:  $C_V = N$ . Температурное поведение теплоёмкости показано на рис. 1.3с.

### 1.3.7 От идеального ферми-газа к бозе-газу по Больцману

Как мы увидели выше, термодинамические величины идеального ферми-газа переходят в величины идеального бозе-газа по Больцману. Поэтому полезно непосредственно вывести каноническую статистическую сумму идеального бозе-газа по Больцману, начиная с уравнения (1.46). Перепишем  $Z_N$  следующим образом (здесь предполагается, что энергетический спектр не зависит от спиновых степеней свободы):

$$Z_N = e^{-\beta\mu N} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i\theta N} \exp \left[ g_s \sum_a \ln (1 + e^{-\beta\varepsilon_a + \beta\mu + i\theta}) \right]. \quad (1.67)$$

Теперь, используя условие  $\beta|\mu| \gg 1$ , в термодинамическом пределе можно разложить логарифм до первого порядка по его аргументу. Тогда получаем

$$\begin{aligned} Z_N &\approx e^{-\beta\mu N} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i\theta N} \exp \left( g_s \sum_a e^{-\beta\varepsilon_a + \beta\mu + i\theta} \right) = e^{-\beta\mu N} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i\theta N} \\ &\times \sum_{k=0}^{\infty} \left( g_s \sum_a e^{-\beta\varepsilon_a + \beta\mu} \right)^k \frac{e^{i\theta k}}{k!} = \frac{1}{N!} \left( \int d\varepsilon g(\varepsilon) e^{-\beta\varepsilon} \right)^N. \end{aligned} \quad (1.68)$$

Отметим появление множителя  $1/N!$  в полученном выражении для  $Z_N$ . Физический смысл этого множителя заключается в том, что он учитывает тождественность частиц. Следует подчеркнуть, что этот множитель появляется в формализме Фаулера-Дарвина сам по себе.

*Задача на семинар 7:* Вычислите плотность состояний для свободной квантовой частицы в произвольном пространственном измерении  $d$ , см. уравнение (1.55).

*Задача на семинар 8:* Вычислите плотность состояний идеального электронного газа в пространстве  $d = 2$  в присутствии перпендикулярного магнитного поля.

*Задача на семинар 9:* Вычислите температурную поправку к химическому потенциалу при  $T \ll E_F$  для идеального ферми-газа в пространственных измерениях  $d \neq 2$ .

*Задача на семинар 10:* Вычислите теплоёмкость идеального вырожденного ферми-газа в произвольном пространственном измерении.

*Задача на семинар 11:* Вычислите спиновую восприимчивость идеального электронного газа при нулевом магнитном поле в пространстве  $d = 2$ .

*Задача на семинар 12:* Вычислите намагниченность идеального электронного газа в пространстве  $d = 2$  в присутствии относительно сильного перпендикулярного магнитного поля, при условии  $T \ll \mu_B B \ll E_F$ .

*Упражнение 9:* Вычислите плотность состояний для квантовой частицы в трёхмерном ящике размера  $L_x \times L_y \times L_z$  с бесконечными стенками в термодинамическом пределе  $L_x, L_y, L_z \rightarrow \infty$ .

*Упражнение 10:* Докажите тождество  $Z_N = Z_N(\varepsilon_{a,\sigma}) + e^{-\beta\varepsilon_{a,\sigma}} Z_{N-1}(\varepsilon_{a,\sigma})$ . Используя это тождество, докажите, что (i)  $\sum_{a,\sigma} f_F^{(N)}(\varepsilon_{a,\sigma}) = N$  и (ii)  $f_F^{(N)}(\varepsilon_{a,\sigma})$  переходит в  $f_F(\varepsilon_{a,\sigma})$  при  $N \rightarrow \infty$ .

*Упражнение 11:* Докажите тождество

$$Z_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (-1)^{k+1} Z_{N-k} \sum_a e^{-\beta k \varepsilon_a}. \quad (1.69)$$

*Упражнение 12:* Найдите изменение энергии Ферми идеального газа атомов  ${}^3\text{He}$  после полной спин-поляризации его магнитным полем.

*Упражнение 13:* Выразите дисперсию термодинамических флуктуаций числа частиц в идеальном вырожденном ферми-газе через плотность состояний при энергии Ферми,  $g(E_F)$ .

*Упражнение 14:* Найдите температуру, при которой химический потенциал идеального электронного газа в пространстве  $d = 2$  обращается в ноль в присутствии параллельного магнитного поля, при условии  $\mu_B B \ll E_F$ . (Учтите только зеемановский эффект магнитного поля.)

*Упражнение 15:* Вычислите отношение  $(C_P - C_V)/C_V$  для идеального вырожденного ферми-газа в пространстве  $d = 2$ .

*Упражнение 16:* Вычислите  $f_F^{(N)}(\varepsilon)$  для бозе-газа по Больцману при условии  $\beta|\mu| \gg 1$ .

## 1.4 Термодинамика идеального бозе-газа

### Введение

В этой лекции мы обсуждаем термодинамику идеального бозе-газа. Мы сравниваем его термодинамику с термодинамикой ферми-газа. Благодаря квантовой статистике идеальный бозе-газ претерпевает переход, известный как конденсация Бозе-Эйнштейна. В последнее время этот переход был измерен в системах холодных атомов.

#### 1.4.1 Распределение Бозе-Эйнштейна

Рассмотрим идеальный бозе-газ в гранканоническом ансамбле, т.е. при заданной температуре и химическом потенциале. Наша цель — вывести общее выражение для термодинамического потенциала и среднего числа бозеонов. Для упрощения вывода рассмотрим бозеоны со спином равным нулю.

Начнём с самой простой ситуации, когда имеется один энергетический уровень  $\varepsilon_1$ , который может быть занят бозеонами. Благодаря отсутствию принципа исключения Паули для бозеонов этот уровень может быть пустым, занятым одним бозеоном, двумя бозеонами и т.д. Следовательно, гранканоническая статистическая сумма принимает следующий вид:  $\mathcal{Z}^{(1)} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_1 n + \beta\mu n} = (1 - e^{\beta\mu - \beta\varepsilon_1})^{-1}$ . Теперь добавим еще один уровень  $\varepsilon_2$ . Снова, благодаря отсутствию принципа исключения Паули, может возникнуть следующая ситуация: уровень  $\varepsilon_1$  занят  $n_1$  бозеонами, а уровень  $\varepsilon_2$  —  $n_2$  бозеонами, где  $n_{1,2} = 0, 1, 2, \dots$ . Тогда гранканоническая статистическая сумма принимает вид

$$\mathcal{Z}^{(2)} = \sum_{n_{1,2}=0}^{\infty} e^{\beta\mu(n_1+n_2) - \beta(\varepsilon_1 n_1 + \varepsilon_2 n_2)} = (1 - e^{\beta\mu - \beta\varepsilon_1})^{-1} (1 - e^{\beta\mu - \beta\varepsilon_2})^{-1}. \quad (1.70)$$

Как видно, функция  $\mathcal{Z}$  факторизуется в произведение множителей для каждого энергетического уровня. Обобщение на произвольное число уровней очевидно:

$$\mathcal{Z} = e^{-\beta\Omega} = \prod_{a,\sigma} (1 - e^{-\beta\varepsilon_{a,\sigma} + \beta\mu})^{-1}. \quad (1.71)$$

Здесь  $a$  нумерует орбитальные степени свободы, а  $\sigma$  обозначает  $z$ -проекцию спина бозеона. Число частиц можно извлечь из уравнения

(1.71) следующим образом:

$$N = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \sum_{a,\sigma} f_B(\varepsilon_{a,\sigma}), \quad f_B(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}. \quad (1.72)$$

Функция  $f_B(\varepsilon)$  называется *распределением Бозе-Эйнштейна*.

Полезно сформулировать вывод распределения Бозе-Эйнштейна в рамках принципа максимальной энтропии. Используя выражение для гранканонической статистической суммы (1.71), можно вычислить энтропию как  $-(\partial \Omega / \partial T)_{V,\mu}$ . Полученный результат можно выразить через распределение Бозе-Эйнштейна:

$$S = \sum_{a,\sigma} [(1 + f_B(\varepsilon_{a,\sigma})) \ln(1 + f_B(\varepsilon_{a,\sigma})) - f_B(\varepsilon_{a,\sigma}) \ln f_B(\varepsilon_{a,\sigma})]. \quad (1.73)$$

Исходя из этого, энтропию бозеонов можно записать через число занятости  $n_{a,\sigma}$  для энергетического уровня  $\varepsilon_{a,\sigma}$ :

$$S = - \sum_{a,\sigma} [n_{a,\sigma} \ln n_{a,\sigma} - (1 + n_{a,\sigma}) \ln(1 + n_{a,\sigma})]. \quad (1.74)$$

Максимизация энтропии  $S$  по  $n_{a,\sigma}$  при условии фиксированных  $N$  и  $E$  (см. (1.44)) приводит к распределению Бозе-Эйнштейна.

Введя плотность состояний  $g(\varepsilon)$ , можно записать термодинамический потенциал и число частиц для идеального бозе-газа следующим образом:

$$\Omega = TV \int d\varepsilon g(\varepsilon) \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon + \beta\mu}), \quad N = V \int d\varepsilon g(\varepsilon) f_B(\varepsilon). \quad (1.75)$$

Используя термодинамическое соотношение  $E = \Omega + TS + \mu N$ , получаем выражение для энергии:

$$E = V \int d\varepsilon g(\varepsilon) \varepsilon f_B(\varepsilon). \quad (1.76)$$

Это выражение для энергии позволяет записать следующий результат для теплоёмкости:

$$C = V \int d\varepsilon g(\varepsilon) \varepsilon \frac{\partial f_B(\varepsilon)}{\partial T} \quad (1.77)$$

где производная по температуре берётся при фиксированном химическом потенциале.

### 1.4.2 Canonical partition function

The canonical partition function for  $N$  bosons occupying the energy levels  $\varepsilon_a$  can be written in the obvious way:

$$Z_N = \sum_{\sum_{\alpha} n_{\alpha} = N} \prod_{\alpha} e^{-\beta \varepsilon_{\alpha} n_{\alpha}}. \quad (1.78)$$

As in the case of the Fermi gas, the canonical partition function can be related with the grand canonical partition function via the Darwin-Fowler integral:

$$Z_N = e^{-\beta F} = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i\theta N} \prod_{a,\sigma} (1 - e^{-\beta \varepsilon_{a,\sigma} + i\theta})^{-1} = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i\theta N - \beta \Omega(iT\theta)}. \quad (1.79)$$

For the large number of particles  $N \gg 1$ , the saddle point method applied to the integral over the angle  $\theta$  provides us the standard relation  $F = \Omega(\mu) + \mu N$  where  $N = -\partial \Omega(\mu) / \partial \mu$ .

### 1.4.3 Chemical potential in $d = 2$

Let us now compute the chemical potential dependence of two-dimensional ideal Bose gas as a function of temperature, particle number, and volume. Using Eqs. (1.75), we obtain the following result for the number of particles:

$$N = \frac{g_s V m}{2\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon}{e^{\beta \varepsilon - \beta \mu} - 1} = -\frac{g_s m V T}{2\pi \hbar^2} \ln(1 - e^{\beta \mu}). \quad (1.80)$$

Here  $g_s$  involves the number of spin degenerate states of a boson. We emphasize that the number of particles is finite provided that chemical potential is *negative*,  $\mu < 0$ . Solving the above equation for  $\mu$ , we obtain

$$\mu(T) = T \ln(1 - e^{-E_0/T}), \quad E_0 = \frac{2\pi \hbar^2 N}{g_s m V}. \quad (1.81)$$

We note that the chemical potential of an ideal Bose gas in  $d = 2$  vanishes at  $T = 0$ . Although the characteristic energy scale  $E_0$  has exactly the same expression as the Fermi energy, it has no such physical meaning. The chemical potential is the monotonously decreasing function of temperature (see Fig. 1.4a). In the degenerate region,  $T \ll E_0$ , the chemical potential can be written as

$$\mu(T) = -T e^{-E_0/T} + \dots \quad (1.82)$$

In the Boltzmann regime,  $T \gg E_0$ , the chemical potential is negative and can be approximated by

$$\mu(T) = -T \ln T / E_0. \quad (1.83)$$



### 1.4.4 Equation of state in $d = 2$

In order to find the equation of state for an ideal Bose gas, we should calculate the thermodynamic potential, cf. Eq. (1.75). Again, we consider the case of the spatial  $d = 2$  dimensions. Then, we obtain

$$P = -\frac{g_s m T}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty d\varepsilon \ln(1 - e^{\beta\mu - \beta\varepsilon}) = \frac{g_s m T^2}{2\pi\hbar^2} \text{li}_2(e^{\beta\mu}). \quad (1.84)$$

Using (1.81), we find the equation of state for the ideal Bose gas in the spatial  $d = 2$  dimensions:

$$\frac{PV}{NT} = \frac{T}{E_0} \text{li}_2(1 - e^{-E_0/T}). \quad (1.85)$$

We note that, contrary to the case of the ideal Fermi gas, the argument of the polylogarithm is positive and smaller than unity. Expanding the argument of the polylogarithm in  $\exp(-E_0/T)$ , we find the pressure of an ideal degenerate Bose gas,  $T \ll E_0$ :

$$P = \frac{\pi^2}{6} \frac{NT^2}{VE_0}. \quad (1.86)$$

In the opposite case of high temperatures,  $T \gg E_0$ , we can use the asymptotic expansion of the polylogarithm at  $z \ll 1$ :  $\text{li}_2(z) = z + z^2/4$ . Then, we obtain the following equation of state at  $T \gg E_0$ :

$$PV = NT \left(1 - \frac{E_0}{4T}\right). \quad (1.87)$$

As one can see, it resembles the equation of state for the ideal Boltzmann gas with the correction describing the pressure drop at the given temperature. This correction can be interpreted as a consequence of the effective attraction between bosons. The overall behavior of the pressure with varying the temperature is shown in Fig. 1.4b. This behavior is specific to the spatial  $d = 2$  dimensions.

### 1.4.5 Specific heat

In order to find the specific heat at a fixed volume, we can compute the free energy via the relation  $F = -PV + \mu N$ . In the spatial  $d = 2$  dimensions the explicit expression for the free energy of ideal Bose gas reads:

$$F = -\frac{NT^2}{E_0} \text{li}_2(1 - e^{-E_0/T}) + NT \ln(1 - e^{-E_0/T}). \quad (1.88)$$

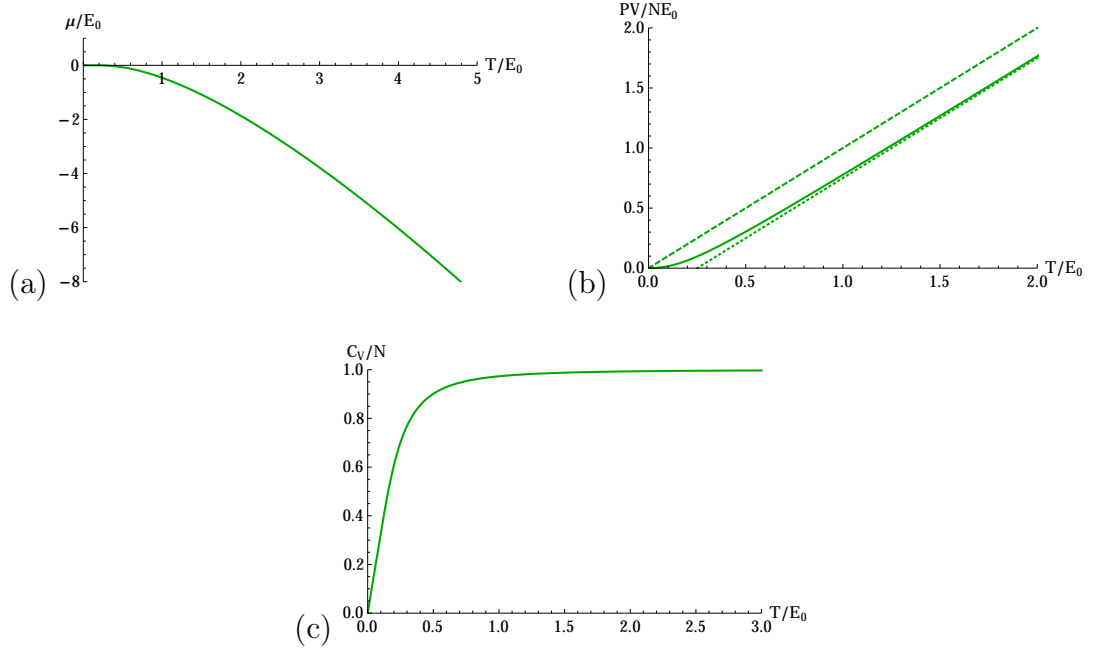


Рис. 1.4: The temperature behavior of thermodynamic quantities in the ideal Bose gas: (a) chemical potential, (b) pressure, and (c) specific heat.

Like the case of fermions, the free energy of ideal Bose gas is proportional to the number of particles and depends on a single parameter  $T/E_0$ . Using the results for the chemical potential and pressure in the degenerate regime, we find the free energy at  $T \ll E_0$ :

$$F = -\frac{\pi^2}{6} \frac{NT^2}{E_0}. \quad (1.89)$$

So, the specific heat of ideal Bose gas at  $T \ll E_0$  in the spatial  $d = 2$  dimensions becomes

$$C_V = -T \left( \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V = \frac{\pi^2}{3} \frac{NT}{E_0}. \quad (1.90)$$

We note that this expression coincides with that for the Fermi gas. However, contrary to the Fermi gas, the linear temperature dependence for the specific heat in the ideal Bose gas takes place in the single  $d = 2$  dimension.

In the Boltzmann regime,  $T \gg E_0$ , we reproduce the same result for the specific heat of ideal Boltzmann gas:  $C_V = N$ . The temperature dependence of the specific heat is shown in Fig. 1.4c.

### 1.4.6 The Bose-Einstein condensation in $d = 3$

The ideal Bose gas in the spatial  $d = 3$  dimensions has an interesting physical phenomenon called *Bose-Einstein condensation*. Let us write the number of particles down:

$$N = \frac{g_s V (mT)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{dz \sqrt{z}}{e^{z-\beta\mu} - 1}. \quad (1.91)$$

Here we use the density of states of free particles  $g(\varepsilon) = g_s m^{3/2} \varepsilon^{1/2} / (\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3)$  in  $d = 3$ . This integral has an interesting property. At  $\mu = 0$  the right hand side of Eq. (1.91) becomes smaller with decreasing the temperature  $T$  whereas the left hand side, i.e., number of particles, remains unvaried. The chemical potential of ideal Bose gas in  $d = 3$  vanishes for  $T < T_{\text{BEC}}$ . The Bose-Einstein condensation temperature,  $T_{\text{BEC}}$ , is determined from the integral in Eq. (1.91) at  $\mu = 0$ :

$$T_{\text{BEC}} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left( \frac{N}{\zeta(3/2)g_s V} \right)^{2/3}. \quad (1.92)$$

Here  $\zeta(z) = \sum_{k=1}^\infty k^{-z}$  denotes the Riemann zeta function. At  $T < T_{\text{BEC}}$  the finite fraction of bosons occupy the ground state. We say that these bosons are condensed or settled in the condensate. The number of bosons in the condensate is given as

$$N_0 = N [1 - (T/T_{\text{BEC}})^{3/2}]. \quad (1.93)$$

Evaluating the thermodynamic potential at  $\mu = 0$ , we obtain the following result for the pressure at  $T < T_{\text{BEC}}$ :

$$\frac{PV}{NT} = \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} \left( \frac{T}{T_{\text{BEC}}} \right)^{3/2}. \quad (1.94)$$

The pressure behavior as a function of temperature in the  $d = 3$  case is similar that in the  $d = 2$  case. In particular, the pressure is a continuous function of temperature and has no singularity at  $T = T_{\text{BEC}}$ . We mention that the pressure is volume-independent at  $T < T_{\text{BEC}}$ . This indicates that the specific heat at the fixed pressure is infinite for  $T < T_{\text{BEC}}$ .

The dependence of the specific heat of the three dimensional ideal Bose gas on temperature is shown in Fig. 1.5. As one can see,  $C_V$  has a cusp at  $T = T_{\text{BEC}}$ .

*Задача на семинар 13:* Find the dependence of the chemical potential on the temperatures near the Bose-Einstein condensation temperature  $T_{\text{BEC}}$  in the spatial  $d = 3$  dimensions.

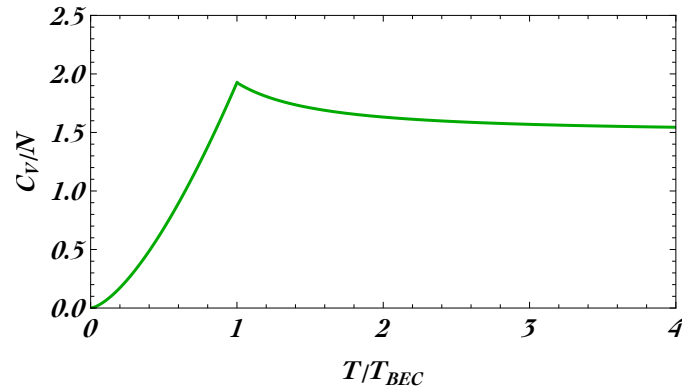


Рис. 1.5: The temperature dependence of the specific heat of the three dimensional ideal Bose gas.

*Упражнение 17:* Compute the variance of the thermodynamic fluctuations for the number of particles in the ideal degenerate Bose gas in the two-dimensional case.

*Упражнение 18:* Calculate the inverse compressibility  $(\partial P/\partial V)_T$  of ideal degenerate Bose gas in  $d = 2$ .

*Упражнение 19:* Compute the specific heat at constant pressure of ideal Bose gas in the spatial  $d = 2$  dimensions.

*Упражнение 20:* Compute the specific heat of ideal Bose gas at  $T < T_{BEC}$  in the spatial  $d = 3$  dimensions.

*Упражнение 21:* Compute the specific heat of ideal Bose gas at  $T > T_{BEC}$  in the spatial  $d = 3$  dimensions.

*Упражнение 22:* Calculate the variance of the thermodynamic fluctuations for the number of particles in the ideal Bose gas near the Bose-Einstein condensation temperature  $T_{\text{BEC}}$  in the spatial  $d = 3$  dimensions.



## Глава 2

# Thermodynamics of quantum fluids

### Introduction

In this chapter we apply general idea of the Gibbs method to the thermodynamics of non-ideal quantum Fermi and Bose systems. In order to compute thermodynamic quantities we will extensively use the second quantization. In view of time limitations we consider traditional examples of quantum fluids only. For the additional aspects of this chapter, we recommend the textbook [\[4\]](#).

## 2.1 Weakly non-ideal Fermi gas

### Introduction

In this lecture we consider the simplest model of interacting fermions. We compute the thermodynamic quantities to first order in the interaction strength. The weakly interacting fermions are tested for the ideas of Fermi liquid which will be discussed in next lecture.

#### 2.1.1 Hamiltonian

We consider the interacting fermion system in the spatial  $d = 3$  dimensions. We assume that fermions have spin  $s = 1/2$  and interact via point-like interaction  $U > 0$ . The many-body Hamiltonian has the following form,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}$ , where

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}\sigma}, \quad \mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{U}{V} \sum_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4} a_{\mathbf{p}_1\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{p}_2\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{p}_3\downarrow} a_{\mathbf{p}_4\uparrow}. \quad (2.1)$$

Here  $\varepsilon^{(0)}(\mathbf{p})$  denotes the bare spectrum which, we assume, to be quadratic,  $\varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) = p^2/2m$ . The operator  $a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger$  creates a fermion in a single particle state with momentum  $\mathbf{p}$  and spin projection  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . The operator  $a_{\mathbf{p}\sigma}$  annihilates a fermion from a single particle state with momentum  $\mathbf{p}$  and spin projection  $\sigma$ . We remind that the creation and annihilation operators satisfy the following anti-commutation relation:

$$a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}'\sigma'} + a_{\mathbf{p}'\sigma'} a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (2.2)$$

Also the following identity holds for:

$$\text{Tr} a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}'\sigma'} e^{-\beta \mathcal{H}_0 + \beta \mu \mathcal{N}} / \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_0 + \beta \mu \mathcal{N}} = f_F(\varepsilon^{(0)}(\mathbf{p})) \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (2.3)$$

where  $\mathcal{N}$  stands for the operator of the particle number:  $\mathcal{N} = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}\sigma}$ .

#### 2.1.2 Thermodynamic potential

Our aim is to calculate first order interaction correction to the thermodynamic potential. We start from expanding the Gibbs weight  $\mathcal{S} = \exp(-\beta \mathcal{H} + \beta \mu \mathcal{N})$  in powers of interaction constant  $U$ . Let us differentiate  $\mathcal{S}$  with respect to  $\beta$ . Then we will find that it satisfies the following equation:

$$\frac{d\mathcal{S}}{d\beta} = -(\mathcal{H} - \mu \mathcal{N}) \mathcal{S}. \quad (2.4)$$



Now we seek for the solution of this equation as a power series in interaction part  $\mathcal{H}_{\text{int}}$ ,  $\mathcal{S} = \mathcal{S}_0 + \mathcal{S}_1 + \dots$ . Obviously,  $\mathcal{S}_0 = \exp(-\beta\mathcal{H}_0 + \beta\mu\mathcal{N})$  whereas  $\mathcal{S}_1$  satisfies the following equation:

$$\frac{d\mathcal{S}_1}{d\beta} = -(\mathcal{H}_0 - \mu\mathcal{N})\mathcal{S}_1 - \mathcal{H}_{\text{int}}\mathcal{S}_0. \quad (2.5)$$

Its solution is given as

$$\mathcal{S}_1 = -e^{-\beta\mathcal{H}_0 + \beta\mu\mathcal{N}} \int_0^\beta d\tau e^{\tau(\mathcal{H}_0 - \mu\mathcal{N})} \mathcal{H}_{\text{int}} e^{-\tau(\mathcal{H}_0 - \mu\mathcal{N})}. \quad (2.6)$$

The combination under the integral sign on the right hand side of Eq. (2.6) is very frequently used in the perturbation theory for the many-body Hamiltonians and is called the *interaction representation*.

Therefore, we obtain

$$e^{-\beta\Omega} = e^{-\beta\Omega_0} - \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}_0 + \beta\mu\mathcal{N}} \int_0^\beta d\tau e^{\tau(\mathcal{H}_0 - \mu\mathcal{N})} \mathcal{H}_{\text{int}} e^{-\tau(\mathcal{H}_0 - \mu\mathcal{N})} + \dots \quad (2.7)$$

Here  $\Omega_0$  is the thermodynamic potential of the noninteracting system. Using the cyclic properties of trace operation, we find that

$$\Omega = \Omega_0 + \langle \mathcal{H}_{\text{int}} \rangle + \dots, \quad (2.8)$$

where the average is taken with the Gibbs density matrix corresponding to the noninteracting Hamiltonian  $\mathcal{H}_0$ . Using Eq. (2.3), we find

$$\Omega(\mu) = \Omega_0(\mu) + \frac{U}{V} \left[ \sum_p f_F(\varepsilon^{(0)}(p)) \right]^2 = \Omega_0(\mu) + \frac{UN_0^2(\mu)}{4V} \quad (2.9)$$

where  $N_0(\mu) = -(\partial\Omega_0(\mu)/\partial\mu)_{T,V}$  stands for the number of particles as a function of the chemical potential in the absence of interaction. In order to find the total energy, we should express the chemical potential in terms of the number of particles. Taking derivative with respect to  $\mu$  for the both sides of Eq. (2.9) at fixed  $T$  and  $V$ , we find

$$\begin{aligned} N = N_0(\mu) - \frac{UN_0(\mu)}{2V} \frac{\partial N_0(\mu)}{\partial\mu} &\approx N_0(\mu_0) + \frac{\partial N_0(\mu_0)}{\partial\mu_0} (\mu - \mu_0) \\ &\quad - \frac{UN_0(\mu_0)}{2V} \frac{\partial N_0(\mu_0)}{\partial\mu_0} + \dots \end{aligned} \quad (2.10)$$

Here  $\mu_0$  is the chemical potential in the absence of interaction, corresponding to the given number of particles:  $N = N_0(\mu_0)$ . Therefore, we find that the interaction shifts the chemical potential already in first order of perturbation theory:

$$\mu = \mu_0(N) + \frac{UN}{2V} + \dots \quad (2.11)$$

Using the relation between the energy and the chemical potential,  $\mu = (\partial E / \partial N)_{S,V}$ , we obtain the total energy:

$$E = E_0(N) + \frac{UN^2}{4V} + \dots \quad (2.12)$$

We note that the first-order correction to the energy is temperature-independent. Therefore, in first order in the interaction  $U$  the result for the specific heat remains the same as for an ideal Fermi gas.

It is instructive to introduce the scattering length  $a$  instead of the interaction potential  $U$ . To lowest order in the interaction  $U$ , i.e., in the Born approximation, the scattering length is given as  $a = mU/(4\pi\hbar^2)$ . Then using Eq. (2.12), we can write the ground state energy as

$$E(T=0) = \frac{3p_F^2 N}{10m} \left[ 1 + \frac{10}{9\pi} \frac{p_F a}{\hbar} + \dots \right]. \quad (2.13)$$

This result indicates that the expansion of the thermodynamic quantities in powers of interaction potential is justified while  $p_F a / \hbar \ll 1$ . For the further details on weakly non-ideal Fermi gas, one can read the book [4].

*Задача на семинар 14:* Найдите паулиевскую спиновую восприимчивость ферми-системы в первом порядке по потенциалу взаимодействия  $U$ . Выразите результат через длину рассеяния.

*Упражнение 23:* Найдите  $\text{Tr} [a_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger e^{\beta\varepsilon(p)} a_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{p}\uparrow} a_{\mathbf{p}\uparrow} e^{-\beta\varepsilon(p)} a_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{p}\uparrow}]$ .

*Упражнение 24:* Найдите выражение для  $\mathcal{S}_2$ .

*Упражнение 25:* Выразите обратимую сжимаемость при нулевой температуре  $\partial P / \partial V$  через производную  $\partial \mu / \partial N$ .

*Упражнение 26:* Найдите давление ферми-системы при нулевой температуре в первом порядке по потенциалу взаимодействия  $U$ . Выразите результат через длину рассеяния.

## 2.2 Normal Fermi liquid

### Introduction

In the previous lecture we demonstrated that the system with the weak fermion-fermion repulsive interaction is very similar to the ideal Fermi gas. Therefore, it is natural to formulate the theory of the interacting fermions in the way analogous to the ideal degenerate Fermi gas. Such theory, termed as the *Fermi liquid theory*, is developed by Lev Landau [5]. Although initially the Fermi liquid theory was developed as phenomenological, it was later confirmed by the microscopic theory for the spatial  $d > 1$  dimension. We note that there are some subtleties in the spatial  $d = 2$  dimension. In this lecture we consider the Fermi liquid for the spin  $s = 1/2$  fermions in the spatial  $d = 3$  dimension.

#### 2.2.1 Main assumptions

The Fermi liquid theory is based on the Hohenberg–Kohn theorem [6] which states that the ground state energy can unambiguously be described by some functional depending on the distribution function alone. The Fermi liquid theory is the method to compute corrections of lowest order in temperature.

The Fermi liquid phenomenology is based on several assumptions:

- (i) The theory is specified in terms of *quasiparticles* replacing the real particles.
- (ii) The quasiparticle distribution function is a matrix in the spin space:  $\hat{n}(\mathbf{p})$  which is normalized by the condition:

$$\int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \text{tr} \hat{n}(\mathbf{p}) = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} n_{\sigma\sigma}(\mathbf{p}) = \frac{N}{V}. \quad (2.14)$$

Here symbol  $\text{tr}$  stands for the trace in the spin space and the symbol  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  denotes the  $z$ -projection of the quasiparticle spin. We emphasize that  $N$  is the number of real fermions. The latter statement is an essence of the Luttinger theorem.

- (iii) The ground state of the Fermi liquid can be represented with the physical picture similar to that of ideal Fermi gas. In the momentum space the quasiparticles occupy the states inside the Fermi sphere of radius  $p_F$ . The states outside the Fermi sphere with  $p > p_F$  are unoccupied. The Fermi momentum has the same magnitude as for the

ideal gas of the same number of real particles. In other words, the quasiparticle distribution function for the ground state has the step-like behavior analogous that in the ideal gas,

$$n_{\sigma\sigma'}^{(0)}(\mathbf{p}) = \Theta(p_F - p)\delta_{\sigma\sigma'}. \quad (2.15)$$

In accordance with Eq. (2.14), the Fermi momentum is given by the relation of ideal Fermi gas:

$$p_F = (3\pi^2\hbar^3 N/V)^{1/3}. \quad (2.16)$$

Here  $N/V$  is the density of the Fermi liquid.

- (iv) Due to external perturbations the Fermi liquid can be driven from its ground state. Nevertheless, at zero temperature,  $T = 0$ , the energy  $E$  of such Fermi liquid remains some functional of distribution function  $\hat{n}(\mathbf{p})$  as well. This is the statement of the *Kohn-Sham theorem*.

### 2.2.2 Эффективная масса

Чтобы проследить сходство между ферми-жидкостью и идеальным ферми-газом, удобно ввести *энергию возбуждения квазичастицы*. Эта величина определяется как вариация полной энергии ферми-жидкости при добавлении еще одной квазичастицы:

$$\varepsilon_{\sigma\sigma'}[n_{\sigma'\sigma}(\mathbf{p})] = \frac{1}{V} \frac{\delta E}{\delta n_{\sigma'\sigma}(\mathbf{p})}. \quad (2.17)$$

Как указано в пункте (iv), энергия возбуждения квазичастиц является функционалом от функции распределения квазичастиц  $n_{\sigma'\sigma}(\mathbf{p})$ . Поскольку, согласно предположению (iii), функция распределения квазичастиц в основном состоянии однозначно определяется импульсом, энергия возбуждения квазичастиц в основном состоянии,  $\varepsilon_{\sigma\sigma'}^{(0)}$ , является функцией только от импульса. Разложив эту функцию в окрестности  $p = p_F$ , получаем

$$\varepsilon_{\sigma\sigma'}^{(0)}(\mathbf{p}) = \varepsilon^{(0)}(p)\delta_{\sigma\sigma'}, \quad \varepsilon^{(0)}(p) = [\varepsilon_F + v_F(p - p_F)] + \dots \quad (2.18)$$

Здесь  $\varepsilon_F$  обозначает энергию квазичастицы на уровне Ферми, то есть  $\varepsilon_F = \varepsilon^{(0)}(p_F)$ . Аналогично идеальному ферми-газу, коэффициент  $v_F$  определяет скорость квазичастиц на уровне Ферми (ферми-скорость). Также удобно ввести эффективную массу  $m_*$  по соотношению  $m_* = p_F/v_F$ . Значение эффективной массы отличается от массы реальных фермионов и зависит от взаимодействия между частицами в жидкости. Как мы увидим ниже, ферми-жидкость во многих отношениях можно рассматривать как ферми-газ с энергетическим спектром  $p^2/2m_*$ .

### 2.2.3 The Landau $f$ -function

In order to describe various physical effects in the Fermi liquid state perturbed from the ground state, we expand the total energy to second order in deviation of the quasiparticle distribution function from the nonperturbed step-like one,  $\delta n_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{p}) = n_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{p}) - n_{\sigma_1\sigma_2}^{(0)}(\mathbf{p})$ ,

$$E = E_0 + V \sum_{\sigma} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} [\varepsilon^{(0)}(p) - \varepsilon_F] \delta n_{\sigma\sigma}(\mathbf{p}) + \frac{V}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \times \int \frac{d^3\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} f_{\sigma_1\sigma_4, \sigma_2\sigma_3}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n_{\sigma_2\sigma_1}(\mathbf{p}) \delta n_{\sigma_3\sigma_4}(\mathbf{p}') + \dots, \quad (2.19)$$

where  $E_0$  means the total ground state energy. Here the function  $f_{\sigma_1\sigma_4, \sigma_2\sigma_3}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ , called the *Landau  $f$ -function*, is the second variational derivative of the total energy at  $\hat{n} = \hat{n}^{(0)}$ :

$$f_{\sigma_1\sigma_4, \sigma_2\sigma_3}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{1}{V} \frac{\delta^2 E}{\delta n_{\sigma_2\sigma_1}(\mathbf{p}) \delta n_{\sigma_3\sigma_4}(\mathbf{p}')} = \frac{\delta \varepsilon_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{p})}{\delta n_{\sigma_3\sigma_4}(\mathbf{p}')} \quad (2.20)$$

Since the Landau  $f$ -function is the second variational derivative of the total energy, it has the symmetric property:  $f_{\sigma_1\sigma_4, \sigma_2\sigma_3}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_{\sigma_4\sigma_1, \sigma_3\sigma_2}(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ .

Equation (2.20) implies that the energy of quasiparticle depends on its momentum as

$$\varepsilon_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{p}) \approx [\varepsilon_F + v_F(p - p_F)] \delta_{\sigma_1\sigma_2} + \int \frac{d^3\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} f_{\sigma_1\sigma_4, \sigma_2\sigma_3}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n_{\sigma_3\sigma_4}(\mathbf{p}') + \dots \quad (2.21)$$

In what follows, we deal only with the small perturbations  $\delta\hat{n}$  of distribution function. For this reason, the absolute magnitudes of momenta  $\mathbf{p}$  and  $\mathbf{p}'$  can be put equal to the Fermi momentum, i.e.  $p = p' = p_F$ . Thus, only the dependence on the angle  $\theta = \angle(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$  between the vectors  $\mathbf{p}$  and  $\mathbf{p}'$  proves to be essential. It is convenient to introduce the following parametrization,

$$g(\varepsilon_F) f_{\sigma_1\sigma_4, \sigma_2\sigma_3}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = F^{(0)}(\theta) \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_3, \sigma_4} + F^{(\sigma)}(\theta) \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_3, \sigma_4}, \quad (2.22)$$

where  $g(\varepsilon_F) = p_F m_*/(\pi^2 \hbar^3)$  denotes the density of states at the Fermi energy  $\varepsilon_F$  and  $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$  denotes the vector of the Pauli matrices.

### 2.2.4 Relation between $m_*$ and $m$

Surprisingly, the above assumptions and formulations are sufficient to derive the first non-trivial result. We will express the effective mass  $m^*$  of quasiparticles via genuine mass  $m$  of particles and the *Landau parameter*  $F_1$ .

Let us consider total quasiparticle momentum. We recall the following two points. First, the momentum of unit liquid volume equals the mass density flow. Second, the number of quasiparticles equals the number of genuine particles. The total momentum of the liquid reads

$$\mathbf{P} = V \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\sigma} \mathbf{p} n_{\sigma\sigma}(\mathbf{p}). \quad (2.23)$$

Now we compute the total quasiparticle current

$$\mathbf{J} = V \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\sigma,\sigma'} \frac{\partial \varepsilon_{\sigma\sigma'}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} n_{\sigma'\sigma}(\mathbf{p}). \quad (2.24)$$

Since the total number of quasiparticles is exactly the same as the total number of particles  $N$  and due to the continuity equation, the total quasiparticle current coincides with the total particle flow. Then we use the Galilean invariance relating the total particle momentum and the total particle current as  $\mathbf{P} = m\mathbf{J}$ . This relation yields the following identity:

$$V \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\sigma} \mathbf{p} n_{\sigma\sigma}(\mathbf{p}) = mV \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\sigma,\sigma'} \frac{\partial \varepsilon_{\sigma\sigma'}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} n_{\sigma'\sigma}(\mathbf{p}). \quad (2.25)$$

We note that, for an ideal Fermi gas with the quadratic spectrum, this identity is trivial. However, for the Fermi liquid this will result in non-trivial relation between  $m_*$  and  $m$ . Varying both sides of Eq. (2.25) with respect to  $\delta n_{\sigma\sigma'}(\mathbf{p})$ , we obtain

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\sigma} \mathbf{p} \delta n_{\sigma\sigma}(\mathbf{p}) &= m \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\sigma,\sigma'} \frac{\partial \varepsilon_{\sigma\sigma'}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \delta n_{\sigma'\sigma}(\mathbf{p}) + m \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \\ &\times \sum_{\sigma,\sigma',\sigma_1,\sigma_2} n_{\sigma'\sigma}(\mathbf{p}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \int \frac{d^3\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} f_{\sigma\sigma_1,\sigma'\sigma_2}(\mathbf{p},\mathbf{p}') \delta n_{\sigma_2\sigma_1}(\mathbf{p}'). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Since the above relation should hold for an arbitrary variation of the distribution function  $\delta n_{\sigma\sigma'}(\mathbf{p})$ , we find using the symmetry properties of the Landau  $f$ -function,

$$\frac{\mathbf{p}}{m} \delta_{\sigma_1\sigma_2} = \frac{\partial \varepsilon_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} - \int \frac{d^3\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\sigma,\sigma'} f_{\sigma_1\sigma,\sigma_2\sigma'}(\mathbf{p},\mathbf{p}') \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} n_{\sigma'\sigma}(\mathbf{p}') \quad (2.27)$$

In the ground state we can use the relation  $\partial n_{\sigma'\sigma}(\mathbf{p}')/\partial \mathbf{p}' = -\mathbf{p}'\delta(p' - p_F)\delta_{\sigma'\sigma}/p'$ . Projecting Eq. (2.27) on the direction of  $\mathbf{p}$  and choosing  $p = p_F$ ,

we obtain

$$\frac{m_*}{m} = 1 + \int_0^\pi \frac{d\theta \sin \theta}{2} \cos \theta F^{(0)}(\theta). \quad (2.28)$$

It is convenient to expand  $F^{(0/\sigma)}(\theta)$  in a series in the Legendre polynomials:

$$F^{(0/\sigma)}(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) F_l^{(0/\sigma)} P_l(\cos \theta). \quad (2.29)$$

Then we find

$$\frac{m_*}{m} = 1 + F_1^{(0)}. \quad (2.30)$$

The thermodynamic stability implies that  $1 + F_l^{(0)} > 0$  [4], i.e.,  $m_* > 0$ . In bulk  $^3\text{He}$  the magnitudes of the Fermi-liquid parameters are known to be equal  $F_0^{(\sigma)} \simeq -0.7$ ,  $F_0^{(0)} \simeq 10.8$ , and  $F_1^{(0)} \simeq 2.08$ .

### 2.2.5 Specific heat

As usual, the specific heat is related with changing the total energy in the physical system as the temperature varies. The temperature variation results in changing the distribution function. Thus, the corresponding change in the total energy is determined by the quasiparticle energy, cf. Eq. (2.17). Therefore, at  $T \rightarrow 0$  the specific heat of the Fermi liquid is given by the following expression, see Eq. (2.19),

$$C_V = V \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} [\varepsilon_{\sigma_1 \sigma_2}^{(0)}(\mathbf{p}) - \varepsilon_F \delta_{\sigma_1 \sigma_2}] \frac{\partial}{\partial T} \delta n_{\sigma_2 \sigma_1}(\mathbf{p}). \quad (2.31)$$

We mention that Eq. (2.31) can be derived from the expression of the entropy of the Fermi gas. Using Eq. (1.43), we find

$$C_V = V \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \text{tr} \left[ T \frac{\partial \delta \hat{n}}{\partial T} \ln \frac{1 - \hat{n}(p)}{\hat{n}(p)} \right]. \quad (2.32)$$

Substituting distribution function  $\hat{n}(p)$  in the Gibbs form, we obtain Eq. (2.31) again.

Due to term  $\varepsilon_{\sigma_1 \sigma_2}^{(0)}(\mathbf{p}) - \varepsilon_F \delta_{\sigma_1 \sigma_2}$ , the integral over momentum in Eq. (2.31) is restricted with the close vicinity to the Fermi momentum. It is natural to assume that the change of the distribution function due to temperature



is similar to the ideal Fermi gas, i.e., can be described by the Fermi-Dirac distribution with some chemical potential variation  $\Delta\mu$  and temperature  $T$ . We note that the chemical potential correction  $\Delta\mu$  appears as a result of keeping the number of particles fixed (statement (ii)). Then, we can write

$$\delta n_{\sigma_2\sigma_1}(\mathbf{p}) = \delta_{\sigma_2\sigma_1} \left[ \Delta\mu \delta(\varepsilon^{(0)}(p) - \varepsilon_F) - \frac{\pi^2 T^2}{6} \delta'(\varepsilon^{(0)}(p) - \varepsilon_F) \right]. \quad (2.33)$$

Here the dash denotes the derivative of the Dirac delta-function. We note that the conservation of the number of particles implies that  $\Delta\mu = 0$ . Substituting Eq. (2.33) into Eq. (2.31), we find  $[\xi = \varepsilon^{(0)}(p) - \varepsilon_F]$

$$C_V = -\frac{\pi^2}{3} V g(\varepsilon_F) \int d\xi \xi \frac{\partial}{\partial \xi} \delta(\xi) = \frac{\pi^2}{3} V g(\varepsilon_F) T = \frac{V p_F m_*}{3\hbar^3} T \quad (2.34)$$

where  $g(\varepsilon_F)$  stands for the density of states at the Fermi momentum. We emphasize that result (2.34) is exactly the same as for the ideal Fermi gas on substituting  $m \rightarrow m_*$ .

*Задача на семинар 15:* Выразите  $\partial\mu/\partial N$  при нулевой температуре через функцию  $F^{(0)}(\theta)$ .

*Задача на семинар 16:* Выразите паулиевскую спиновую восприимчивость ферми-жидкости через функцию  $F^{(\sigma)}(\theta)$ .

*Упражнение 27:* Используя результаты лекции о слабо неидеальном ферми-газе, определите функции  $F^{(0)}(\theta)$  и  $F^{(\sigma)}(\theta)$  в первом порядке по силе взаимодействия.

*Упражнение 28:* Используя выражение для функции  $f$  Ландау, определите  $\partial P/\partial V$  в первом порядке по взаимодействию.

*Упражнение 29:* Используя выражение для функции  $f$  Ландау, определите дисперсию термодинамических флуктуаций числа частиц,  $\langle(\Delta N)^2\rangle$ , в первом порядке по взаимодействию при низких температурах.

*Упражнение 30:* Используя следующее выражение для энергии электронной системы в магнитном поле при  $T = 0$ ,

$$E = \frac{1}{2}E_0(N_\uparrow) + \frac{1}{2}E_0(N_\downarrow) + \frac{\mu_B B}{2}(N_\uparrow - N_\downarrow) + \frac{U}{V}N_\uparrow N_\downarrow,$$

найдите спиновую восприимчивость  $\partial M / \partial B$ , где  $M = \mu_B(N_\uparrow - N_\downarrow)/2$  и  $E_0(N)$  — энергия идеального ферми-газа.

## 2.3 Weakly non-ideal Bose gas

### Introduction

In this lecture we consider simplest model of interacting bosons. The main question of interest is how the repulsive interaction between bosons affects the Bose-Einstein condensation.

#### 2.3.1 Hamiltonian

We consider the three-dimensional spinless bosons interacting via the repulsive contact interaction  $U > 0$ . The many-body Hamiltonian has the following form:  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}$ , where

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}}, \quad \mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{U}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4} b_{\mathbf{p}_1}^\dagger b_{\mathbf{p}_2}^\dagger b_{\mathbf{p}_3} b_{\mathbf{p}_4}. \quad (2.35)$$

Here  $\varepsilon^{(0)}(\mathbf{p})$  denotes the bare spectrum assumed to be quadratic,  $\varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) = p^2/2m$ . The operator  $b_{\mathbf{p}}^\dagger$  creates a boson in the single particle state with momentum  $\mathbf{p}$ . The operator  $b_{\mathbf{p}\sigma}$  annihilates a boson from single particle state with momentum  $\mathbf{p}$ . We remind that the creation and annihilation operators satisfy the following commutation relation,

$$b_{\mathbf{p}'} b_{\mathbf{p}}^\dagger - b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}'} = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (2.36)$$

Also the following identity holds for,

$$\langle b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}'} \rangle = \text{Tr } b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}'} e^{-\beta \mathcal{H}_0} / \text{Tr } e^{-\beta \mathcal{H}_0} = f_B(\varepsilon^{(0)}(\mathbf{p})) \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}. \quad (2.37)$$

Hereafter we deal with the canonical ensemble keeping the constant number of particles  $N$  in mind.

#### 2.3.2 Condensate

As we know, there is a phenomenon of Bose-Einstein condensation in the three-dimensional ideal Bose gas. Before diagonalizing the Hamiltonian  $\mathcal{H}$ , we should take an existence of condensate into account. This means that the occupation number of the zero-momentum many-body state,  $p = 0$ , is macroscopically large, i.e.,  $\langle b_0^\dagger b_0 \rangle = N_0 \sim N$ . The convenient way to take this fact into account is to treat the creation and annihilation operators  $b_0^\dagger$  and  $b_0$  as real numbers but operators. They satisfy the relation

$$b_0^2 + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}} = N. \quad (2.38)$$

Also we assume that the number of particles in the states with  $p > 0$  is small. Then, we can simplify the interaction Hamiltonian in the following way,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} \rightarrow \mathcal{H}_{\text{int}}^{(2)} &= \frac{U}{2V} b_0^4 + \frac{U}{2V} b_0^2 \sum_{\mathbf{p} \neq 0} [b_{\mathbf{p}} b_{-\mathbf{p}} + b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{-\mathbf{p}}^\dagger + 4b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}}] + \dots = \frac{UN^2}{2V} \\ &+ \frac{UN}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} [b_{\mathbf{p}} b_{-\mathbf{p}} + b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{-\mathbf{p}}^\dagger + 2b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}}] + \dots \end{aligned} \quad (2.39)$$

Here we neglect the terms that contain either one or zero  $b_0$ . Also we have expressed  $b_0^2$  in terms of particle number  $N$  using the relation (2.38). Now the total Hamiltonian  $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}^{(2)}$  is quadratic in the creation and annihilation operators. However,  $\mathcal{H}_{\text{int}}^{(2)}$  contains the terms which do not conserve the number of bosons. This implies that  $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}^{(2)}$  is not diagonal in the initial single particle basis.

### 2.3.3 Unitary transformation of the Hamiltonian

In order to diagonalize quadratic Hamiltonian  $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}^{(2)}$ , it is convenient to perform the unitary canonical transformation called the *Bogolubov transformation*. Let us introduce new creation and annihilation boson operators  $\beta_{\mathbf{p}}^\dagger$  and  $\beta_{\mathbf{p}}$  satisfying the commutation relation (2.36). Now we express the original boson creation and annihilation operators via the linear combinations of new ones

$$b_{\mathbf{p}} = u_p \beta_{\mathbf{p}} + v_p \beta_{-\mathbf{p}}^\dagger, \quad b_{\mathbf{p}}^\dagger = u_p \beta_{\mathbf{p}}^\dagger + v_p \beta_{-\mathbf{p}}. \quad (2.40)$$

Here  $u_p$  and  $v_p$  are real functions of the momentum. To fix them, we impose two conditions:

- (i) operators  $b_{\mathbf{p}}^\dagger$  and  $b_{\mathbf{p}}$  satisfy the relation (2.36);
- (ii) Hamiltonian  $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}^{(2)}$  expressed in terms of operators  $\beta_{\mathbf{p}}^\dagger$  and  $\beta_{\mathbf{p}}$  does not contain terms like  $\beta_{\mathbf{p}}^\dagger \beta_{-\mathbf{p}}^\dagger$  and  $\beta_{\mathbf{p}} \beta_{-\mathbf{p}}$ .

The requirement (i) results in the constraint:  $u_p^2 - v_p^2 = 1$ . This can be satisfied by an auxiliary function  $\theta_p$  such that  $u_p = \cosh \theta_p$  and  $v_p = \sinh \theta_p$ . The second requirement determines the function  $\theta_p$  as

$$\sinh 2\theta_p = -\frac{UN}{V\varepsilon(p)}, \quad \varepsilon(p) = \sqrt{(\varepsilon^{(0)}(p) + UN/V)^2 - (UN/V)^2}. \quad (2.41)$$

The quadratic Hamiltonian becomes

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}^{(2)} &= E_0 + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \varepsilon(\mathbf{p}) \beta_{\mathbf{p}}^\dagger \beta_{\mathbf{p}}, \\ E_0 &= \frac{UN^2}{2V} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \left[ \varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) - \frac{UN}{V} \right].\end{aligned}\quad (2.42)$$

The form (2.42) of the quadratic Hamiltonian suggests that operators  $\beta_{\mathbf{p}}^\dagger$  creates and operator  $\beta_{\mathbf{p}}$  annihilates the quasiparticles with the energy  $\varepsilon(\mathbf{p})$ . The ground state energy is given by  $E_0$ . For the quadratic bare spectrum,  $\varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) = p^2/2m$ , the quasiparticle energy has the following dependence on the momentum,

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{u^2 p^2 + \left(\frac{p^2}{2m}\right)^2} = \begin{cases} up, & p \ll \sqrt{aN/V} \\ p^2/(2m), & \sqrt{aN/V} \ll p. \end{cases} \quad (2.43)$$

Here we introduce the scattering length  $a = mU/(4\pi\hbar^2)$ . Therefore, the quasiparticle spectrum at small momentum has acoustic phonon dispersion with the sound velocity  $u = \sqrt{4\pi aN/(m^2V)}$ . At large momentum the quasiparticle spectrum is almost the same as the bare one.

The ground state energy (2.42) can be expressed via the scattering length as [4]

$$E_0 = \frac{2\pi\hbar^2 a N^2}{mV} \left[ 1 + \frac{128}{15} \left( \frac{a^3 N}{\pi V} \right)^{1/2} \right]. \quad (2.44)$$

As one can see, the expansion in interaction is governed by the small parameter  $a^3 N/V \ll 1$ . Differentiating the ground state energy  $E_0$  with respect to the number of particles, we find the chemical potential at zero temperature:

$$\mu(T=0) = \frac{4\pi\hbar^2 a N}{mV} \left[ 1 + \frac{32}{3} \left( \frac{a^3 N}{\pi V} \right)^{1/2} \right]. \quad (2.45)$$

We emphasize that the chemical potential of non-ideal Bose at zero temperature is *positive*. As we will see below, this implies that not all the particles are in the condensate at zero temperature. Also we note that the small parameter of the theory can be written as a ratio  $\mu(T=0)/T_{\text{BEC}} \sim a(N/V)^{1/3} \ll 1$  (see Eq. (1.92)).

### 2.3.4 Specific heat

Using Eq. (2.42), we can write the total energy in the following form,

$$E = E_0 + V \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\varepsilon(p)}{e^{\beta\varepsilon(p)} - 1}. \quad (2.46)$$

Approximating the quasiparticle spectrum by its small momentum asymptote, we find the total energy,

$$E = E_0 + \frac{\pi^2}{30} \frac{VT^4}{u^3}. \quad (2.47)$$

The evaluation of the integral in such approximation requires the characteristic thermal momentum  $T/u$  to be smaller than  $\mu$ . This limits the applicability of Eq. (2.47) with low temperatures,  $T \ll \mu$  ( $T = 0$ ). The specific heat can be written as

$$C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{2\pi^2}{15} \frac{VT^3}{u^3}. \quad (2.48)$$

### 2.3.5 The number of particles in the condensate

Using the relation (2.38), we can express the average number of particles in the condensate via the quasiparticle distribution function:

$$N_0 = b_0^2 = N - V \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^2} \left[ u_p^2 f_B(\varepsilon(p)) + v_p^2 (f_B(\varepsilon(p)) + 1) \right]. \quad (2.49)$$

Replacing the distribution function  $f_B$  with its zero magnitude at temperature  $T = 0$ , we obtain the number of particles in the condensate at zero temperature,

$$\begin{aligned} N_0(T = 0) &= N - V \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{m^2 u^2}{2\varepsilon(p) [\varepsilon(p) + p^2/(2m) + mu^2]} \\ &= N \left[ 1 - \frac{8}{3} \left( \frac{a^3 N}{\pi V} \right)^{1/2} \right]. \end{aligned} \quad (2.50)$$

As we have mentioned above, due to interparticle interaction the number of particles in the condensate at zero temperature is smaller than the total number of particles  $N$ . This effect is called the *depletion of condensate*.

### 2.3.6 The Gross–Pitaevskii equation

In the absence of the translation invariance it is convenient to develop another formulation of the theory of weakly non-ideal Bose gas at zero temperature. Let us introduce the operator  $\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} / \sqrt{V}$ . In the Heisenberg representation the operator  $b_{\mathbf{p}}$  becomes time-dependent and satisfies the following equation:

$$\frac{db_{\mathbf{p}}}{dt} = i[\mathcal{H} - \mu\mathcal{N}, b_{\mathbf{p}}]. \quad (2.51)$$

Using the commutation relation (2.36), we find

$$i\frac{db_{\mathbf{p}}}{dt} = (\varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) - \mu)b_{\mathbf{p}} + \frac{U}{V} \sum_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_2=\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4} b_{\mathbf{p}_2}^\dagger b_{\mathbf{p}_3} b_{\mathbf{p}_4}. \quad (2.52)$$

This equation can be rewritten as the following equation for the operator  $\Psi(\mathbf{r})$ :

$$i\frac{d\Psi(\mathbf{r})}{dt} = \left( -\frac{\nabla^2}{2m} - \mu + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) + U\Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi^2(\mathbf{r}). \quad (2.53)$$

Here we have used the quadratic bare spectrum and added the external confining potential  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ . At low temperatures the operator  $\Psi(\mathbf{r})$  is dominated by its condensate part which can approximately be treated as a usual numerical variable  $\Psi_0(\mathbf{r})$ . The accurate consideration demonstrates that the interaction potential  $U$  should be substituted by the scattering length. Then, we arrive at the *Gross-Pitaevskii* equation for the *condensate wave function*

$$i\frac{d\Psi_0(\mathbf{r})}{dt} = \left( -\frac{\nabla^2}{2m} - \mu + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right) \Psi_0(\mathbf{r}) + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\Psi_0(\mathbf{r})|^2 \Psi_0(\mathbf{r}). \quad (2.54)$$

In the absence of the external potential, the homogeneous solution  $\Psi_0$  exists provided that the chemical potential equals  $4\pi\hbar^2 a |\Psi_0|^2 / m$ . Comparing this expression with Eq. (2.45), we find that  $|\Psi_0|^2$  is equal to the condensate density  $N_0/V$ .

Let us consider the inhomogeneous solution of Eq. (2.54) in the form  $\Psi = \sqrt{N_0/V} + A \exp(-i\omega t + i\mathbf{p}\mathbf{r}) + B^* \exp(i\omega t - i\mathbf{p}\mathbf{r})$ . Substituting this solution into Eq. (2.54) and expanding to the first order in  $A$  and  $B^*$ , we find the following system of equations:

$$\begin{pmatrix} \omega - \frac{p^2}{2m} - \mu & -\mu \\ -\mu & -\omega - \frac{p^2}{2m} - \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0. \quad (2.55)$$

This system of equations has nonzero solution for  $a$  provided the determinant of the matrix vanishes. Hence we find the following condition for the frequency

$$\omega^2 = \frac{p^2}{2m} \left( \frac{p^2}{2m} + 2\mu \right) \equiv \varepsilon^2(p). \quad (2.56)$$

Therefore, the quasiparticles obtained after the Bogolyubov transformation are quanta of the weak modulation of the condensate described by the Gross-Pitaevskii equation.

*Задача на семинар 17:* Compute the ground state energy  $E_0$  given by Eq. (2.42).

*Задача на семинар 18:* Compute the temperature dependence of the number of particles in condensate at  $\mu(0) \ll T \ll T_{\text{BEC}}(an^{1/3})^{1/4}$ .

*Задача на семинар 19:* Using the Gross-Pitaevskii equation, find the solution for a vortex and determine its energy.

*Упражнение 31:* Compute  $\text{Tr}[b_{\mathbf{p}}^\dagger e^{-\beta\varepsilon(\mathbf{p})} b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}}/2 b_{\mathbf{p}} e^{-\beta\varepsilon(\mathbf{p})} b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}}/2] / \text{Tr}[e^{-\beta\varepsilon(\mathbf{p})} b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}}]$ .

*Упражнение 32:* Determine the pressure of non-ideal Bose gas at zero temperature.

*Упражнение 33:* Compute the zero-temperature sound velocity  $c_s = \sqrt{-(V^2/(mN))\partial P/\partial V}$  in non-ideal Bose gas. To find its deviation from the velocity  $u$ .

*Упражнение 34:* Find the dependence of the chemical potential on  $T$  at low temperatures,  $T \ll \mu(T=0)$ .



*Упражнение 35:* Determine the dependence of the number of particles in the condensate at low temperatures. To compare with the result for an ideal Bose gas.

*Упражнение 36:* Using the Gross-Pitaevskii equation, determine the spectrum of weak modulation of the condensate wave function.

## 2.4 Сверхтекучесть

### Введение

В этой лекции мы рассматриваем явление сверхтекучести. Это явление может наблюдаться как в бозонных, так и в ферми-системах. Примером первого является сверхтекучесть в  $^4\text{He}$ , а примером второго — сверхтекучесть в  $^3\text{He}$ . Мы обсудим теорию сверхтекучести как феноменологическую. Более подробное изложение теории сверхтекучести можно найти в книге [7].

#### 2.4.1 Критерий сверхтекучести

Форма спектра квазичастиц в жидком гелии была предложена Львом Ландау (см. рис. 2.1). При малых значениях импульса спектр имеет фононный характер и подобен спектру неидеального бозе-газа, т.е.  $\varepsilon_{\text{ph}}(p) = up$ . В отличие от неидеального бозе-газа, спектр на рис. 2.1 имеет минимум при ненулевом импульсе  $p_0$ . Вблизи минимума спектр квазичастиц можно аппроксимировать как  $\varepsilon_{\text{rot}}(p) = \Delta + (p - p_0)^2/(2m_{\text{r}})$ . Соответствующий участок спектра называется *ротонным* спектром. Для жидкого гелия параметры фононного и ротонного спектров известны и имеют следующие значения:  $u \approx 240$  м/с,  $\Delta \approx 8.6$  К,  $m_{\text{r}} \approx 0.14 m_{^4\text{He}}$ , и  $p_0/\hbar \approx 1.9 \cdot 10^8$  см $^{-1}$ .

Рассмотрим жидкий гелий, текущий с некоторой скоростью в капилляре при нулевой температуре. Энергия  $E$  и импульс  $\mathbf{P}$  связаны с энергией  $E_0$  и импульсом  $\mathbf{P}_0$  в системе отсчёта, где жидкий гелий находится в покое, следующим образом:

$$E = E_0 + \mathbf{P}_0 \mathbf{v} + Mv^2/2, \quad \mathbf{P} = \mathbf{P}_0 + M\mathbf{v}. \quad (2.57)$$

Здесь  $M$  обозначает общую массу жидкого гелия. Представим, что в системе, где жидкость находится в покое, создаётся квазичастица с импульсом  $p$ . Тогда энергия и импульс жидкости равны  $E_0 = \varepsilon(p)$  и  $P_0 = p$ . Соответственно, энергия жидкости, текущей со скоростью  $\mathbf{v}$  в присутствии единственной квазичастицы, определяется как  $E = \varepsilon(p) + \mathbf{p}\mathbf{v} + Mv^2/2$ . Отсюда можно сделать вывод, что энергия квазичастицы в жидкости, текущей со скоростью  $\mathbf{v}$ , становится равной  $\varepsilon(p) + \mathbf{p}\mathbf{v}$ . Если это значение положительно, создание квазичастиц энергетически невыгодно. Следовательно, квазичастица в текущей жидкости может быть создана, если скорость жидкости  $v$  превосходит  $\varepsilon(p)/p$  хотя бы при некотором ненулевом значении импульса  $p$ . Поэтому при скоростях жидкости, меньших

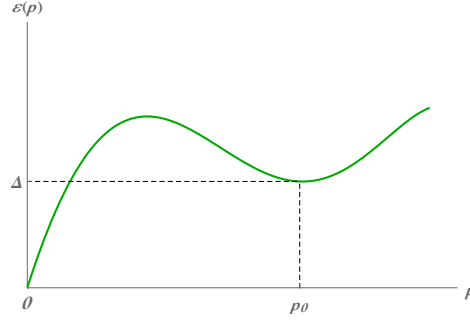


Рис. 2.1: Схематичное изображение спектра квазичастиц в жидком гелии. Линейная часть при  $p \rightarrow 0$  соответствует фоновой ветви. Окрестность импульса  $p_0$  описывает роторную ветвь.

критической скорости, создание квазичастиц не происходит:

$$v < v_{\text{cr}} = \min_p [\varepsilon(p)/p]. \quad (2.58)$$

Отсутствие квазичастиц при нулевой температуре позволяет жидкости демонстрировать безтрениенное течение, что и является проявлением явления *сверхтекучести*.

### 2.4.2 Плотность нормальной компоненты

При ненулевой температуре в жидкости присутствует конечное число возбуждений. Однако если выполняется условие (2.58), дополнительных возбуждений, которые можно создать, не возникает. Пусть жидкость в целом течёт со скоростью  $\mathbf{v}_s$ , а газ квазичастиц движется со скоростью  $\mathbf{v}_n$ . В системе отсчёта, в которой жидкость находится в покое, квазичастицы движутся со скоростью  $\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s$ . Квазичастица с энергией  $\varepsilon(p)$  в системе, где жидкость покоится, может быть создана с вероятностью  $f_B(\varepsilon(p) - \mathbf{p}(\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s))$ , так как для квазичастиц в покое вероятность равна  $f_B(\varepsilon)$ . Поэтому суммарный импульс квазичастиц на единицу объёма равен

$$\mathbf{P} = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} f_B(\varepsilon(p) - \mathbf{p}(\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s)). \quad (2.59)$$

С другой стороны, суммарный импульс можно записать как импульс на единицу объёма в системе отсчёта, где жидкость находится в покое:  $\mathbf{P} = \mathbf{j} - \rho \mathbf{v}_s$ . Здесь  $\rho$  обозначает полную плотность жидкости, а  $\mathbf{j}$  — импульс в лабораторной системе отсчёта, так называемый *массовый поток*.

При построении выражения для  $\mathbf{j}$  следует учесть следующие физические ограничения:

- (i) импульс  $\mathbf{P}$  зависит от разности  $\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s$ ;
- (ii) массовый поток  $\mathbf{j}$  является вектором и должен быть функцией двух векторов  $\mathbf{v}_n$  и  $\mathbf{v}_s$ .

Единственный вариант — это задать  $\mathbf{j} = \rho_n \mathbf{v}_n + \rho_s \mathbf{v}_s$ , где  $\rho = \rho_n + \rho_s$ ;  $\rho_n$  и  $\rho_s$  называются *плотностью нормальной компоненты* и *сверхтекучей плотностью* соответственно. Отметим, что в общем случае плотности  $\rho_n$  и  $\rho_s$  являются некоторыми скалярными функциями относительной или встречной скорости  $\mathbf{w} = \mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s$ . Разложив правую часть уравнения (2.59) в пределе  $w \rightarrow 0$ , получаем

$$\rho_n = \frac{1}{3} \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} p^2 \left( -\frac{\partial f_B(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon(p)}. \quad (2.60)$$

Фазовый переход от нормального состояния к сверхтекучему происходит при так называемой  $\lambda$ -точке, при которой  $\rho_s = \rho - \rho_n$  обращается в ноль. Температура нормального-сверхтекучего перехода для жидкого гелия составляет 2.17 К при нулевом давлении. В сверхтекучей фазе  $\rho_s > 0$  и  $\rho_s = \rho$  при  $T = 0$ .

### 2.4.3 Теплоёмкость

Термодинамика сверхтекучей жидкости определяется квазичастичными возбуждениями. Их свободную энергию можно записать как

$$F_{qp} = TV \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \ln [1 - e^{-\beta(\varepsilon(p) - \mathbf{p}\mathbf{w})}]. \quad (2.61)$$

Следует отметить следующее. Правая часть выражения для  $F_{qp}$  напоминает термодинамический потенциал бозе-газа с нулевым химическим потенциалом. Это не случайно. Число квазичастиц определяется экстремумом их энергии, т.е. химический потенциал квазичастиц в термодинамическом равновесии равен нулю,  $\mu_{qp} = \partial E_{qp} / \partial N_{qp} = 0$ . В случае слабо неидеального бозе-газа это было проверено посредством прямого вычисления энергии. При нулевом химическом потенциале термодинамический потенциал и свободная энергия совпадают. Энергию квазичастиц можно записать следующим образом:

$$E_{qp} = V \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\varepsilon(p) - \mathbf{p}\mathbf{w}}{e^{\beta(\varepsilon(p) - \mathbf{p}\mathbf{w})} - 1}. \quad (2.62)$$

При нулевой относительной скорости,  $w = 0$ , фононный вклад в энергию такой же, как и в неидеальном бозе-газе, см. уравнение (2.47).

*Задача на семинар 20:* Докажите, что критическая скорость для создания двух возбуждений в сверхтекучей жидкости превышает критическую скорость для создания одного возбуждения.

*Задача на семинар 21:* Найдите вклады в плотность нормальной компоненты  $\rho_n$  от фононной и роторной частей спектра.

*Задача на семинар 22:* Вычислите вклад роторных возбуждений в теплоёмкость при нулевой относительной скорости.

*Упражнение 37:* Докажите, что критическая скорость меньше, чем  $\Delta/p_0$ . Используйте условие  $\Delta \ll p_0^2/m$ .

*Упражнение 38:* Найдите критическую скорость для неидеального бозе-газа.

*Упражнение 39:* Определите, как зависит плотность нормальной компоненты от относительной скорости  $w$ , возникающей из фононной части спектра возбуждений.

*Упражнение 40:* Определите, как зависит плотность нормальной компоненты от относительной скорости  $w$ , возникающей из роторной части спектра возбуждений.

*Упражнение 41:* Вычислите вклад фононных возбуждений в теплоёмкость в зависимости от относительной скорости.

## 2.5 Сверхпроводимость

### Введение

В этой лекции мы обсуждаем модель Бардена–Купера–Шриффера (BCS) и термодинамические аспекты явления сверхпроводимости. Это явление возникает в слабо взаимодействующем ферми-газе благодаря аттрактивной природе взаимодействия. Сверхпроводимость является примером нарушения предположений теории ферми-жидкости. Более подробное описание сверхпроводящих свойств материалов можно найти в книге [8].

#### 2.5.1 Куперовская неустойчивость

Рассмотрим два электрона с противоположными спинами и с аттракцией между ними в окрестности поверхности Ферми. Двучастичное уравнение Шрёдингера имеет вид

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left( \delta\epsilon + \frac{p_F^2}{m} \right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2.63)$$

Предполагается, что электроны имеют противоположные импульсы  $\mathbf{p}$  и  $-\mathbf{p}$ , так что пара электронов в целом находится в состоянии покоя. Пусть оба электрона находятся выше поверхности Ферми, т.е. импульс, соответствующий их относительному движению, удовлетворяет неравенству  $p > p_F$ . Также предполагаем, что потенциал аттракции постоянен,  $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -\lambda\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  с  $\lambda > 0$ . Удобно ввести координату центра масс  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$  и относительную координату  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ . Тогда уравнение Шрёдингера для преобразования Фурье волновой функции,  $\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r})$ , описывающей относительное движение, можно записать следующим образом,

$$\frac{p^2}{m} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) - \frac{\lambda}{V} \sum_{\mathbf{p}'} \tilde{\psi}(\mathbf{p}') = \left( \delta\epsilon + \frac{p_F^2}{m} \right) \tilde{\psi}(\mathbf{p}). \quad (2.64)$$

Чтобы уравнение имело нетривиальное решение, должно выполняться следующее соотношение

$$1 = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\lambda/V}{p^2/m - p_F^2/m - \delta\epsilon} = \frac{\lambda g(E_F)}{4} \int_0^{\epsilon_\Lambda} \frac{d\epsilon}{\epsilon - \delta\epsilon/2} = \frac{\lambda g(E_F)}{4} \ln \frac{\epsilon_\Lambda}{-\delta\epsilon/2}. \quad (2.65)$$

Здесь  $g(E_F) = p_F m / (\pi^2 \hbar^3)$  обозначает плотность состояний при энергии Ферми. Мы ввели верхний энергетический срез  $\varepsilon_\Lambda$  для регуляризации интеграла по энергиям. В итоге получаем, что пара электронов с аттрактивным взаимодействием имеет отрицательную энергию связи  $\delta\varepsilon = -2\varepsilon_\Lambda \exp(-4/[\lambda g(\varepsilon_F)])$ . Это означает, что произвольное слабое притяжение способствует образованию пар электронов с импульсами  $\mathbf{p}$  и  $-\mathbf{p}$  в окрестности поверхности Ферми. Это явление называется *куперовской неустойчивостью* и аналогично образованию связанного состояния в произвольном слабом одномерном потенциале.

### 2.5.2 Среднезаполнительное решение BCS-гамильтониана

Мотивированные явлением куперовской неустойчивости, мы упрощаем гамильтониан (2.1) и рассматриваем следующий многочастичный гамильтониан (он известен как гамильтониан Бардена–Купера–Шриффера):  $\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}$ , где

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}\sigma}, \quad \mathcal{H}_{\text{int}} = -\frac{\lambda}{V} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_1\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{p}_1\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{p}_2\downarrow} a_{-\mathbf{p}_2\uparrow}. \quad (2.66)$$

Здесь  $\varepsilon^{(0)}(\mathbf{p})$  обозначает "сырой" спектр электронов, который предполагается квадратичным,  $\varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) = p^2/2m$ . Оператор  $a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger$  создаёт фермион в одночастичном состоянии с импульсом  $\mathbf{p}$  и проекцией спина  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . Оператор  $a_{\mathbf{p}\sigma}$  уничтожает фермион из одночастичного состояния с импульсом  $\mathbf{p}$  и проекцией спина  $\sigma$ . Положительная константа  $\lambda = 4\pi\hbar^2|a|/m$  определяет величину аттракции между фермионами, при этом  $a$  обозначает отрицательную длину рассеяния.

Выполним каноническое преобразование операторов уничтожения фермионов:

$$a_{\mathbf{p},\uparrow} = u_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p},\uparrow} + v_{\mathbf{p}} \alpha_{-\mathbf{p},\downarrow}^\dagger, \quad a_{\mathbf{p},\downarrow} = u_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p},\downarrow} - v_{\mathbf{p}} \alpha_{-\mathbf{p},\uparrow}^\dagger. \quad (2.67)$$

Операторы создания преобразуются соответствующим образом. Новые операторы  $\alpha_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger$  и  $\alpha_{\mathbf{p},\sigma}$  удовлетворяют необходимым антикоммутативным соотношениям, если выполнено следующее условие для

$$u_{\mathbf{p}}^2 + v_{\mathbf{p}}^2 = 1. \quad (2.68)$$

Чтобы удовлетворить это ограничение, можно использовать параметри-

зацию:  $u_p = \cos \theta_p$  и  $v_p = \sin \theta_p$ . Тогда получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{H} - \mu \mathcal{N} = & 2 \sum_p \xi_p v_p^2 + \sum_{p,\sigma} \xi_p (u_p^2 - v_p^2) \alpha_{p,\sigma}^\dagger \alpha_{p,\sigma} + 2 \sum_p \xi_p u_p v_p (\alpha_{p,\uparrow}^\dagger \alpha_{-p,\downarrow}^\dagger \\ & + \alpha_{-p,\downarrow} \alpha_{p,\uparrow}) - \frac{\lambda}{V} \sum_{p_1, p_2} \mathcal{A}_{p_1}^\dagger \mathcal{A}_{p_2}, \end{aligned} \quad (2.69)$$

где  $\xi_p = \varepsilon^{(0)}(p) - \mu$  и

$$\mathcal{A}_p = u_p^2 \alpha_{-p,\downarrow} \alpha_{p,\uparrow} - v_p^2 \alpha_{p,\uparrow}^\dagger \alpha_{-p,\downarrow}^\dagger + u_p v_p (\alpha_{-p,\downarrow} \alpha_{-p,\downarrow}^\dagger - \alpha_{p,\uparrow}^\dagger \alpha_{p,\uparrow}). \quad (2.70)$$

Теперь предполагаем, что новые операторы  $\alpha_{p,\sigma}^\dagger$  и  $\alpha_{p,\sigma}$  описывают уничтожение и создание невзаимодействующих квазичастиц с некоторыми энергиями  $\varepsilon_\sigma(p)$ , т.е.  $\langle \alpha_{p_1,\sigma_1}^\dagger \alpha_{p_2,\sigma_2} \rangle = n_{\sigma_1}(p_1) \delta_{p_1,p_2} \delta_{\sigma_1,\sigma_2}$ . Тогда получаем следующее среднее значение

$$\langle \mathcal{H} - \mu \mathcal{N} \rangle = 2 \sum_p \xi_p v_p^2 + \sum_{p,\sigma} \xi_p (u_p^2 - v_p^2) n_\sigma(p) - \Delta^2 V / \lambda, \quad (2.71)$$

где

$$\Delta = \frac{\lambda}{V} \sum_p u_p v_p (1 - n_\uparrow(p) - n_\downarrow(p)). \quad (2.72)$$

Здесь мы используем, что  $\sum_{p_1, p_2} \langle \mathcal{A}_{p_1}^\dagger \mathcal{A}_{p_2} \rangle$  можно в термодинамическом пределе  $V \rightarrow \infty$  аппроксимировать как  $\sum_{p_1, p_2} \langle \mathcal{A}_{p_1}^\dagger \rangle \langle \mathcal{A}_{p_2} \rangle$ . Далее мы минимизируем  $\langle \mathcal{H} - \mu \mathcal{N} \rangle$  по  $\theta_p$  при фиксированных значениях  $n_\sigma(p)$  (то есть при постоянной энтропии),

$$\delta_{\theta_p} \langle \mathcal{H} - \mu \mathcal{N} \rangle = 2 \sum_p (\xi_p \sin 2\theta_p - \Delta \cos 2\theta_p) (1 - n_\uparrow(p) - n_\downarrow(p)) \delta\theta_p. \quad (2.73)$$

Таким образом, минимум  $\langle \mathcal{H} - \mu \mathcal{N} \rangle$  достигается при условии  $\tan 2\theta_p = \Delta / \xi_p$ , то есть при следующих значениях  $u_p$  и  $v_p$ :

$$u_p^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_p}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}} \right), \quad v_p^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_p}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}} \right). \quad (2.74)$$

Для этих значений  $u_p$  и  $v_p$  гамильтониан (2.69) принимает вид

$$\mathcal{H} - \mu \mathcal{N} = E_0 + \mathcal{H}_{\text{qp}}^{(0)} + \mathcal{H}_{\text{qp}}^{(\text{int})}, \quad (2.75)$$



где

$$\mathcal{H}_{\text{qp}}^{(0)} = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2} \alpha_{\mathbf{p}, \sigma}^\dagger \alpha_{\mathbf{p}, \sigma},$$

$$E_0 = \sum_{\mathbf{p}} (\xi_p - \sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}) + \sum_{\mathbf{p}} \frac{\Delta^2}{2\sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}} (1 - n_\uparrow(p) - n_\downarrow(p)). \quad (2.76)$$

Квадратичный гамильтониан  $\mathcal{H}_{\text{qp}}^{(0)}$  предполагает, что функции распределения квазичастиц задаются как  $n_\uparrow(p) = n_\downarrow(p) = f_F(\varepsilon(p))$ , где спектр квазичастиц равен  $\varepsilon(p) = \sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}$ . Гамильтониан

$$\mathcal{H}_{\text{qp}}^{(\text{int})} = -\frac{\lambda}{V} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} (\mathcal{A}_{\mathbf{p}_1}^\dagger - \langle \mathcal{A}_{\mathbf{p}_1}^\dagger \rangle) (\mathcal{A}_{\mathbf{p}_2} - \langle \mathcal{A}_{\mathbf{p}_2} \rangle)$$

описывает взаимодействие квазичастиц и может быть безопасно пренебрежено в термодинамическом пределе  $V \rightarrow \infty$ .

Параметр  $\Delta$  определяет зазор в спектре квазичастиц (см. рис. 2.2) и удовлетворяет самосогласованному уравнению (см. уравнение (2.72)):

$$\Delta = \frac{\lambda}{V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\Delta}{2\varepsilon(p)} \tanh \frac{\varepsilon(p)}{2T}, \quad \varepsilon(p) = \sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}. \quad (2.77)$$

Уравнения (2.76) и (2.77) составляют среднезаполнительное решение BCS-гамильтониана. Отметим, что BCS-гамильтониан формально можно решить точно с помощью метода Бете-анзата [9]. Также следует отметить, что самосогласованное уравнение можно записать в виде  $\Delta = -(\lambda/V) \sum_{\mathbf{p}} \langle a_{\mathbf{p}\uparrow} a_{-\mathbf{p}\downarrow} \rangle$ . Среднее  $\langle a_{\mathbf{p}\uparrow} a_{-\mathbf{p}\downarrow} \rangle$  называется *аномальным средним*.

### 2.5.3 Основное состояние

Самосогласованное уравнение для зазора, уравнение (2.77), имеет очевидное тривиальное решение  $\Delta = 0$ . Однако оно имеет и нетривиальное решение. Найдём нетривиальное решение при  $T = 0$ . Тогда уравнение для зазора принимает вид

$$1 = \frac{\lambda}{2} \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}}. \quad (2.78)$$

Линеаризуя "сырой" спектр в окрестности энергии Ферми, можно использовать приближение  $\xi_p = v_F(p - p_F)$ . Введя верхний энергетический

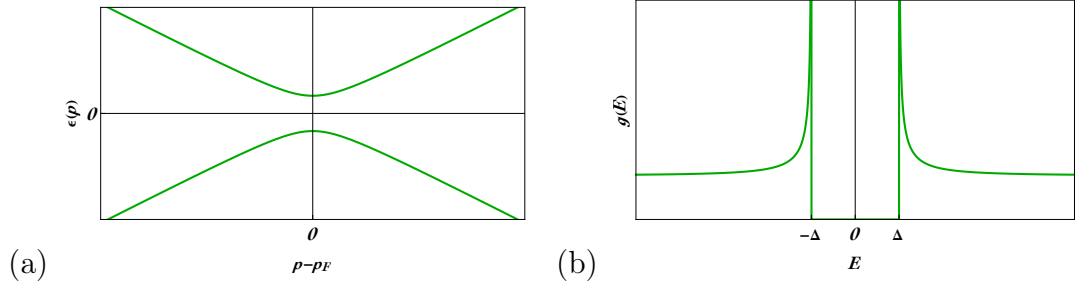


Рис. 2.2: (а) Схематичное изображение спектра квазичастиц в сверхпроводнике. (б) Схематичное изображение плотности состояний квазичастиц в сверхпроводнике.

срез  $\varepsilon_\Lambda \gg \Delta$  для интеграла по импульсу, получаем

$$1 = \frac{\lambda g(E_F)}{2} \int_0^{\varepsilon_\Lambda} \frac{d\xi_p}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}} = \frac{\lambda g(E_F)}{2} \ln \left[ \frac{\varepsilon_\Lambda}{\Delta} + \sqrt{1 + \frac{\varepsilon_\Lambda^2}{\Delta^2}} \right] \\ \rightarrow \Delta(T=0) = \Delta_0 \simeq 2\varepsilon_\Lambda e^{-2/[\lambda g(E_F)]}. \quad (2.79)$$

Чтобы определить, какое решение реализуется,  $\Delta = 0$  или  $\Delta = \Delta_0$ , необходимо найти разницу в энергии основного состояния для этих решений. Эта разница называется *энергией конденсации*. Последняя определяется как

$$E_{\text{cond}} = E_0[\Delta_0] - E_0[0] = \sum_p \left( \frac{\Delta_0^2}{2\varepsilon(p)} - \frac{\Delta_0^2}{\varepsilon(p) + |\xi_p|} \right) = -\frac{Vg(E_F)\Delta_0^2}{2} \\ \times \int_0^\infty \frac{dx(\sqrt{x^2+1}-x)}{\sqrt{x^2+1}(\sqrt{x^2+1}+x)} = -\frac{Vg(E_F)\Delta_0^2}{4}. \quad (2.80)$$

Таким образом, видно, что при  $T = 0$  энергетически выгоднее открыть зазор  $\Delta_0$  в спектре квазичастиц в окрестности энергии Ферми. Можно также показать, что энергия конденсации уменьшается с ростом температуры и обращается в ноль при критической температуре  $T_c$ . Отметим, что спектр квазичастиц  $\varepsilon(p) = \sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}$  имеет ненулевую критическую скорость. Следовательно, сверхтекучесть возможна в ферми-газе с аттракцией. Из-за заряда электрона сверхтекучие свойства влияют на температурное поведение электрического сопротивления. Ниже критической температуры  $T_c$  сопротивление обращается в ноль. Это явление называется *сверхпроводимостью*.

### 2.5.4 Теплоёмкость

Используя уравнение (2.76), полная энергия может быть записана как

$$E = E_0 + 2 \sum_p \varepsilon(p) f_F(\varepsilon(p)). \quad (2.81)$$

Теплоёмкость получается следующим образом

$$C_V = 2 \sum_p \varepsilon(p) \frac{\partial f_F(\varepsilon(p))}{\partial T}. \quad (2.82)$$

При низких температурах,  $T \ll \Delta_0$ , можно аппроксимировать спектр квазичастиц как  $\varepsilon(p) \approx \Delta_0 + \xi_p^2/(2\Delta_0)$  и заменить функцию распределения Ферми-Дирака на распределение Больцмана. Тогда получаем

$$C_V = V g(E_F) \Delta_0 \frac{\partial}{\partial T} \int_0^\infty d\xi_p e^{-\Delta_0/T - \xi_p^2/(2\Delta_0 T)} = V g(E_F) \sqrt{\frac{2\pi^3 \Delta_0^5}{T^3}} e^{-\Delta_0/T}. \quad (2.83)$$

*Задача на семинар 23:* Найдите температурное поведение зазора и конденсационной свободной энергии вблизи  $T_c$ .

*Задача на семинар 24:* Найдите величину скачка в теплоёмкости при температуре перехода.

*Упражнение 42:* Найдите плотность состояний квазичастиц со спектром  $\sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}$ .

*Упражнение 43:* Найдите температурное поведение зазора при низких температурах,  $T \ll \Delta_0$ .

*Упражнение 44:* Докажите, что уравнение (2.82) вытекает из  $\partial E / \partial T$  как следствие самосогласованного уравнения.

*Упражнение 45:* Найдите критическую скорость для спектра  $\varepsilon(p) = \sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}$ .

*Упражнение 46:* Выразите плотность нормальной компоненты через зазор. Определите поведение плотности нормальной компоненты при  $T \rightarrow 0$  и  $T \rightarrow T_c$ .

## 2.6 The Luttinger liquid

### Introduction

In this lecture we discuss the model of strongly interacting one-dimensional fermions which can be rewritten in the boson representation and, then, can exactly be solved. The additional details can be found in Refs. [10, 11].

#### 2.6.1 Bosonization of non-interacting spinless 1D fermions

In the spatial  $d = 1$  dimension the Fermi surface reduces to the two points  $p = \pm p_F$  alone. One can describe the fermions near the Fermi point  $p = p_F$  ( $p = -p_F$ ) as the particles moving to the ‘right’ (‘left’). The corresponding Hamiltonian for spinless fermions (for the spin effects, see Refs. [10, 11]) can be written as

$$\mathcal{H} - \mu\mathcal{N} = v_F \sum_{p, \eta=\pm} (\eta p - p_F) a_{\eta, p}^\dagger a_{\eta, p}. \quad (2.84)$$

Here the operators  $a_{+, p}^\dagger$  and  $a_{-, p}^\dagger$  create the right and left movers with momentum  $p$ , respectively. We emphasize that the Hamiltonian (2.84) is unbounded: there are states with arbitrary large negative energy. This unphysical assumption makes the model solvable by means of *bosonisation*. However, the unboundness of the spectrum can lead to divergences in some intermediate results. In order to treat them, we assume the cutoff momentum  $p_\Lambda^{(+)} < p_F$  for the right movers such that all fermionic states with  $p < p_\Lambda^{(+)}$  are occupied and  $p_\Lambda^{(-)} > -p_F$  for the left movers such that all fermionic states with  $p > p_\Lambda^{(-)}$  are occupied (see Fig. 2.3). At the end of all calculations the momentum  $p_\Lambda^{(\eta)}$  should be put equal to  $-\eta\infty$ .

Let us now consider the density operator  $\rho_\eta(q) = \sum_p a_{\eta, p+q}^\dagger a_{\eta, p}$ . Its commutation relations can straightforwardly be calculated as

$$\begin{aligned} [\rho_{\eta_1}(q_1), \rho_{\eta_2}(q_2)] &= \delta_{\eta_1, \eta_2} \sum_{p_1, p_2} \left[ \delta_{p_1, p_2+q_2} a_{\eta_1, p_1+q_1}^\dagger a_{\eta_1, p_2} - \delta_{p_2, p_1+q_1} a_{\eta_1, p_2+q_2}^\dagger a_{\eta_1, p_1} \right] \\ &= \delta_{\eta_1, \eta_2} \left[ \sum_{p_2} a_{\eta_1, p_2+q_1+q_2}^\dagger a_{\eta_1, p_2} - \sum_{p_1} a_{\eta_1, p_1+q_1+q_2}^\dagger a_{\eta_1, p_1} \right] = 0. \end{aligned} \quad (2.85)$$

This result that two density operators commute is obtained as a subtraction of two quantities. In the case  $q_1 = -q_2$  the expectation value of each of two quantities is formally infinite. Therefore, special care to treat this case is

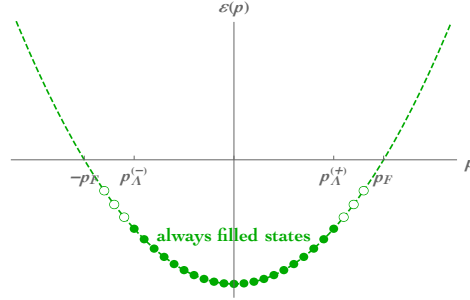


Рис. 2.3: Sketch of the 1D fermion spectrum. The states between  $p_{\Lambda}^{(-)} < p < p_{\Lambda}^{(+)}$  are always occupied by fermions.

necessary. We find (for  $q > 0$ )

$$\begin{aligned} [\rho_+(-q), \rho_+(q)] &= \sum_{p_1, p_2} \left( a_{+, p_1-q}^\dagger a_{+, p_1} a_{+, p_2+q}^\dagger a_{+, p_2} - a_{+, p_2+q}^\dagger a_{+, p_2} a_{+, p_1-q}^\dagger a_{+, p_1} \right) \\ &= \sum_{p_1, p_2} \delta_{p_2, p_1-q} \left( a_{+, p_1-q}^\dagger a_{+, p_2} - a_{+, p_2+q}^\dagger a_{+, p_1} \right) = \sum_{p_1} \left( \mathbf{n}_{+, p_1-q} - \mathbf{n}_{+, p_1} \right), \quad (2.86) \end{aligned}$$

where  $\mathbf{n}_{\eta, p} = a_{\eta, p}^\dagger a_{\eta, p}$ . To proceed further, let us consider how the operator  $\sum_{p_1} \left( \mathbf{n}_{+, p_1-q} - \mathbf{n}_{+, p_1} \right)$  acts on the vacuum state  $|\text{vac}\rangle$ ,

$$\sum_{p_1} \left( \mathbf{n}_{+, p_1-q} - \mathbf{n}_{+, p_1} \right) |\text{vac}\rangle = \sum_{p_{\Lambda}^{(+)} \leq p < p_{\Lambda}^{(+)} + q} 1 |\text{vac}\rangle = \frac{qL}{2\pi\hbar} |\text{vac}\rangle, \quad (2.87)$$

where  $L$  denotes the length of the system. As one can check, the same result holds for the state with an arbitrary number of quasiparticles. Therefore, we derive the following commutation relation,

$$[\rho_+(-q), \rho_+(q)] = \frac{qL}{2\pi\hbar}. \quad (2.88)$$

In the similar way, one can compute the commutation relation for the left moving fermions. Finally, we can summarize the commutation relations as (for  $q_2 > 0$ ),

$$[\rho_{\eta_1}(q_1), \rho_{\eta_2}(q_2)] = \delta_{\eta_1, \eta_2} \delta_{-q_1, q_2} \frac{\eta_2 q_2 L}{2\pi\hbar}. \quad (2.89)$$

We note that  $\rho_{\eta}(-q) = [\rho_{\eta}(q)]^\dagger$ . Similarly, we can find (for  $q > 0$ ),

$$[\mathcal{H}, \rho_{\eta}(q)] = \eta v_F q \rho_{\eta}(q), \quad [\mathcal{H}, \rho_{\eta}(-q)] = -\eta v_F q \rho_{\eta}(-q). \quad (2.90)$$

The commutation relations (2.88) and (2.90) suggest that the density operators can be viewed as bosonic creation and annihilation operators (for  $q > 0$ ):

$$\begin{aligned}\rho_+(q) &= \sqrt{\frac{qL}{2\pi}} b_{+,q}^\dagger, & \rho_+(-q) &= \sqrt{\frac{qL}{2\pi}} b_{+,q}, \\ \rho_-(-q) &= \sqrt{\frac{qL}{2\pi}} b_{-,q}^\dagger, & \rho_-(q) &= \sqrt{\frac{qL}{2\pi}} b_{-,q},\end{aligned}\quad (2.91)$$

with the proper bosonic commutation relation  $[b_{\eta,q}^\dagger, b_{\eta',q'}] = \delta_{\eta\eta'} \delta_{q,q'}$ . Hamiltonian can be expressed as

$$\mathcal{H} - \mu\mathcal{N} = \sum_{\eta,q>0} v_F q b_{\eta,q}^\dagger b_{\eta,q}. \quad (2.92)$$

### 2.6.2 The interacting fermions: g-ology

Let us consider now the interaction between fermions. It has the standard form,

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \int dx_1 dx_2 U(x_1 - x_2) \psi^\dagger(x_1) \psi(x_1) \psi^\dagger(x_2) \psi(x_2). \quad (2.93)$$

Here the real-space fermion creation and annihilation operators can be expressed in terms of  $a_{\eta,p}^\dagger$  and  $a_{\eta,p}$ :

$$\psi^\dagger(x) = \sum_{\eta,p} e^{i(\eta p_F + p)x/\hbar} a_{\eta,p}^\dagger, \quad \psi(x) = \sum_{\eta,p} e^{-i(\eta p_F + p)x/\hbar} a_{\eta,p}. \quad (2.94)$$

Then we find that the operator corresponding to the electron density reads

$$\psi^\dagger(x) \psi(x) \approx \sum_{\eta,q} e^{iqx/\hbar} \rho_\eta(q). \quad (2.95)$$

Therefore the Hamiltonian  $\mathcal{H}_{\text{int}}$  can be rewritten in terms of the density operators. We make the further simplification and consider the following interaction Hamiltonian,

$$\mathcal{H}_{\text{int}}^{(g)} = \frac{\pi g_2}{L} \sum_{\eta,q>0} \rho_\eta(q) \rho_{-\eta}(-q) + \frac{\pi g_4}{L} \sum_{\eta,q>0} \rho_\eta(q) \rho_\eta(-q), \quad (2.96)$$

where we assume  $g_2$  and  $g_4$  to be independent of transferred momentum. Finally, the Hamiltonian for the Luttinger liquid model written in terms of boson operators acquires the following form,

$$\mathcal{H}_{\text{LL}} = \sum_{\eta,q>0} (v_F + g_4) q b_{\eta,q}^\dagger b_{\eta,q} + \frac{g_2}{2} \sum_{\eta,q>0} q (b_{\eta,q}^\dagger b_{-\eta,q}^\dagger + b_{\eta,q} b_{-\eta,q}). \quad (2.97)$$

This quadratic bosonic Hamiltonian can be diagonalized using the canonical transformation,

$$b_{\eta,q}^\dagger = \cosh \theta_q \beta_{\eta,q}^\dagger + \sinh \theta_q \beta_{-\eta,q}, \quad b_{\eta,q} = \cosh \theta_q \beta_{\eta,q} + \sinh \theta_q \beta_{-\eta,q}^\dagger. \quad (2.98)$$

Expressing the Hamiltonian  $\mathcal{H}_{\text{LL}}$  in terms of new bosonic operators  $\beta_{\eta,q}^\dagger$  and  $\beta_{\eta,q}$ , we can find  $\theta_q$  from the condition that the non-diagonal terms  $\beta_{\eta,q}^\dagger \beta_{-\eta,q}^\dagger$  and  $\beta_{\eta,q} \beta_{-\eta,q}$  are canceled. The value of such  $\theta_q$  is given as follows,

$$\cosh 2\theta_q = \frac{v_F + g_4}{u}, \quad \sinh 2\theta_q = -\frac{g_2}{u}, \quad u = \sqrt{(v_F + g_4)^2 - g_2^2}. \quad (2.99)$$

In terms of the new operators, the Hamiltonian reads

$$\mathcal{H}_{\text{LL}} = E_G + \sum_{\eta,q>0} uq \beta_{\eta,q}^\dagger \beta_{\eta,q}, \quad E_G = \frac{1}{2} \sum_{q>0} (u - v_F - g_4)q. \quad (2.100)$$

Therefore, the interacting 1D fermions transform into the non-interacting bosonic quasiparticles moving at the renormalized velocity due to interaction.

In the Luttinger liquid theory the important parameter, termed as the *Luttinger liquid parameter*, is usually introduced. It is related with the parameter  $\theta_q$  as follows

$$K = e^{2\theta_q} = \sqrt{\frac{v_F + g_4 - g_2}{v_F + g_4 + g_2}}. \quad (2.101)$$

The case  $K = 1$  corresponds to the noninteracting fermions.

*Задача на семинар 25:* Prove the following identity for non-interacting bosons with spectrum  $\omega_q$ :

$$\langle e^{\sum_{q>0} (\alpha_q b_q + \beta_q b_q^\dagger)} \rangle = e^{\sum_{q>0} \langle (\alpha_q b_q + \beta_q b_q^\dagger)^2 \rangle / 2} = \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{q>0} \alpha_q \beta_q \coth \frac{\hbar \omega_q}{2T} \right).$$

*Задача на семинар 26:* Demonstrate that the annihilation operator for a right-side moving electron at a spatial point  $x$  can be written as  $\psi_R(x) \sim e^{i\phi_R(x)}$ , where

$$\phi_R(x) = \phi_{R,0} + \frac{\mathcal{N}_R x}{L} + i \sum_{q>0} \sqrt{\frac{2\pi}{qL}} (e^{-iqx} b_{+,q}^\dagger - e^{iqx} b_{+,q}).$$

To determine the commutation relation between  $\phi_{R,0}$  and  $\mathcal{N}_R$ .



*Задача на семинар 27:* Diagonalize the Luttinger liquid Hamiltonian (2.97) in which the boson field has a spin  $s = 1/2$  projection index:

$$\mathcal{H}_{\text{LL}} = \sum_{\eta, \sigma, \sigma' q > 0} \left[ (\delta_{\sigma, \sigma'} v_F + g_4) q b_{\eta\sigma, q}^\dagger b_{\eta\sigma', q} + \frac{g_2}{2} q (b_{\eta\sigma, q}^\dagger b_{-\eta\sigma', q}^\dagger + b_{\eta\sigma, q} b_{-\eta\sigma', q}) \right].$$

*Упражнение 47:* Compute the commutation relation  $[\mathcal{H}, \rho_\eta(q)]$  where  $\rho_\eta(q) = \sum_p a_{\eta, p+q}^\dagger a_{\eta, p}$  and  $\mathcal{H} = v_F \sum_{p, \eta=\pm} \eta p a_{\eta, p}^\dagger a_{\eta, p}$ .

*Упражнение 48:* Compute the specific heat of one-dimensional bosons with the Hamiltonian  $\mathcal{H} = \sum_{q>0, \eta=\pm} v_F q b_{\eta, q}^\dagger b_{\eta, q}$  and compare it with the specific heat of ideal one-dimensional Fermi gas at  $T \ll E_F$ .

*Упражнение 49:* Demonstrate that the spatial representation of the density operator of electrons moving to the right side has the following form:

$$\rho_R(x) = \sum_{q>0} \sqrt{\frac{qL}{2\pi}} \left[ e^{iqx} b_{+, q}^\dagger + e^{-iqx} b_{+, q} \right] + \frac{\mathcal{N}_R}{L}.$$

where  $\mathcal{N}_R$  is the operator of the total number of right movers.

*Упражнение 50:* Compute the specific heat for the Luttinger liquid described by the Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{LL}} = \sum_{\eta, \sigma, \sigma' q > 0} \left[ (\delta_{\sigma, \sigma'} v_F + g_4) q b_{\eta\sigma, q}^\dagger b_{\eta\sigma', q} + \frac{g_2}{2} q (b_{\eta\sigma, q}^\dagger b_{-\eta\sigma', q}^\dagger + b_{\eta\sigma, q} b_{-\eta\sigma', q}) \right].$$



## Глава 3

# Фазовые переходы и критические явления

### Введение

В этой главе мы даём краткое введение в методы статистической механики, используемые для описания критических явлений при фазовых переходах. В основном мы рассмотрим фазовые переходы второго порядка, которые подпадают под парадигму Ландау о спонтанном нарушении симметрии и наличии параметра упорядоченности. В качестве примера фазового перехода, выходящего за рамки парадигмы Ландау, мы обсудим переход Березинского–Костерлита–Туйтса. Для дополнительных аспектов этой главы рекомендуем учебники [4, 12, 13] и оригинальные статьи [14, 15, 16].

## 3.1 Одномерная модель Изинга

### Введение

В этой лекции мы рассматриваем одномерную *модель Изинга* как самый простой пример аналитически решаемой модели. Более подробное описание аналитически решаемых моделей можно найти в книге Р. Бакстера [12].

#### 3.1.1 Гамильтониан

Рассмотрим цепочку из  $N$  взаимодействующих спинов  $s = 1/2$  в магнитном поле. Предполагается, что парное взаимодействие спинов включает проекцию спина вдоль магнитного поля. Тогда гамильтониан можно записать в виде

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^{N-1} \left( J \sigma_i \sigma_{i+1} + h \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2} \right) \quad (3.1)$$

где  $(1/2)\sigma_i$  — это  $z$ -компонента  $i$ -го спина. Поскольку гамильтониан  $\mathcal{H}$  включает  $z$ -компоненты операторов спина, можно рассматривать  $\sigma_i$  как числа, которые могут принимать значения  $\pm 1$ . Константы  $J > 0$  и  $h$  играют роль ферромагнитного обменного взаимодействия и магнитного поля соответственно.

Перед вычислением статистической суммы первым вопросом является выбор *граничных условий*. Первый тип граничных условий — так называемые *периодические граничные условия*:

$$\sigma_N = \sigma_1. \quad (3.2)$$

Периодические граничные условия соответствуют системе, расположенной на окружности.

Для системы, определённой на отрезке, используется другой тип граничных условий — так называемые *свободные граничные условия*. Эти условия подразумевают, что спины  $\sigma_1$  и  $\sigma_N$  могут принимать все возможные значения  $\pm 1$ .

Иногда также удобно использовать так называемые *скрученные граничные условия*.

$$\sigma_N = e^{i\alpha} \sigma_1, \quad (3.3)$$

где  $\alpha$  — произвольный параметр.

В общем случае свойства системы не должны зависеть от граничных условий в термодинамическом пределе  $N \rightarrow \infty$ , за исключением систем с бесконечной корреляционной длиной (см. ниже).

### 3.1.2 Метод передаточной матрицы

Статистическую сумму модели можно записать как сумму гиббсовских весов по всем возможным конфигурациям спинов  $\{\sigma_i\}$ :  $Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}}$ . Число таких конфигураций равно  $2^N$ . Пусть зафиксируем два соседних спина на сайтах  $i$  и  $i+1$ :  $\sigma_i = \sigma$  и  $\sigma_{i+1} = \sigma'$ . Тогда они входят в выражение для статистической суммы следующим образом

$$Z = \sum_{\sigma \sigma' = \pm 1} \sum_{\{\sigma_z\}'} e^{\beta J \sigma_1 \sigma_2 + \frac{\beta h}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)} \dots e^{\beta J \sigma_{i-1} \sigma + \frac{\beta h}{2}(\sigma_{i-1} + \sigma)} \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta h} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta h} \end{pmatrix}_{\sigma \sigma'} \times e^{\beta J \sigma' \sigma_{i+2} + \frac{\beta h}{2}(\sigma' + \sigma_{i+2})} \dots e^{\beta J \sigma_{N-1} \sigma_N + \frac{\beta h}{2}(\sigma_{N-1} + \sigma_N)}. \quad (3.4)$$

Здесь штрих в сумме означает, что сайты  $i$  и  $i+1$  исключаются. Теперь, повторяя эту процедуру, получаем следующее представление статистической суммы:

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_N} (\mathcal{T}^L)_{\sigma_1 \sigma_N}. \quad (3.5)$$

Здесь  $L = N - 1$  — безразмерная длина системы, а матрица

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta h} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta h} \end{pmatrix} = e^{\beta J} (\cosh \beta h + \tau_z \sinh \beta h + \tau_x e^{-2\beta J}) \quad (3.6)$$

называется *передаточной матрицей*. Здесь  $\tau_j$  — матрицы Паули. Отметим, что суммирование по  $\sigma_1$  и  $\sigma_N$  в уравнении (3.5) зависит от выбранных граничных условий.

Представление (3.5) статистической суммы через передаточную матрицу  $\mathcal{T}$  значительно упрощает задачу. Для вычисления матричного произведения  $\mathcal{T}^N$  удобно привести передаточную матрицу  $\mathcal{T}$  к диагональному виду. Это можно сделать с помощью ортогонального поворота.

$$\mathcal{U} = e^{i\phi\tau_y}, \quad \phi = \frac{1}{2} \arcsin \frac{e^{-2\beta J}}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \quad (3.7)$$

таким образом, что

$$\mathcal{T} = \mathcal{U}^{-1} \Lambda \mathcal{U}, \quad \Lambda = \text{diag} \{\lambda_+, \lambda_-\}. \quad (3.8)$$

Собственные значения передаточной матрицы имеют вид

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \left( \cosh(\beta h) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}} \right). \quad (3.9)$$

Отметим, что  $\lambda_+ \geq \lambda_-$ .

### 3.1.3 Периодические граничные условия

Начнём с периодических граничных условий (3.2). Тогда статистическая сумма задаётся выражением

$$Z_{\text{per}} = \text{tr } \mathcal{T}^L = \lambda_+^L + \lambda_-^L. \quad (3.10)$$

Свободная энергия  $F_{\text{per}} = -T \ln Z_{\text{per}}$  в термодинамическом пределе  $N \rightarrow \infty$  принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{F_{\text{per}}}{L} = -T \left[ \ln \lambda_+ + \frac{1}{L} \ln(1 + (\lambda_-/\lambda_+)^L) \right] \xrightarrow{L \rightarrow \infty} f = -J \\ -T \ln \left( \cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}} \right). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Теперь можно найти намагниченность на один сайт

$$m = \frac{M}{L} = -\frac{1}{L} \frac{\partial F_{\text{per}}}{\partial h} = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}}. \quad (3.12)$$

Намагниченность имеет неаналитическую зависимость при нулевом магнитном поле  $h = 0$  и нулевой температуре:

$$M(h \rightarrow 0^+)/L = \begin{cases} 0 & T > 0, \\ 1 & T = 0. \end{cases} \quad (3.13)$$

Этот результат указывает, что одномерная модель Изинга при нулевом магнитном поле находится в *парамагнитном состоянии* при  $T > 0$ . При  $T = 0$  система переходит в *ферромагнитное состояние*. Это частный пример теоремы Мермина—Вангера.

При  $T = 0$  свободная энергия задаётся как

$$F_{\text{per}}(T = 0) = -L(J + |h|). \quad (3.14)$$

При  $h = 0$  свободная энергия как функция от  $h$  имеет излом, что означает фазовый переход первого порядка между фазами с  $M > 0$  и  $M < 0$ . Фазовая диаграмма одномерной модели Изинга показана на рис. 3.1.

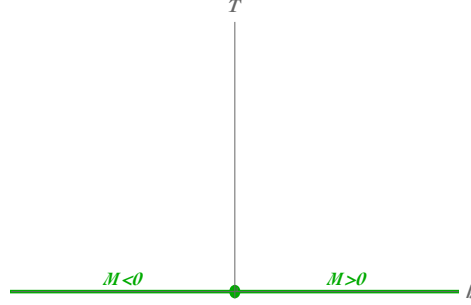


Рис. 3.1: Схематичное изображение фазовой диаграммы одномерной модели Изинга. Упорядоченная фаза существует только при  $T = 0$ .

Для системы конечного размера поправку к свободной энергии в термодинамическом пределе можно найти, разложив логарифм в уравнении (3.11) при условии  $\lambda_- < \lambda_+$ . Тогда получаем

$$F_{\text{per}} = fL - Te^{-L/\xi}, \quad \xi = \frac{1}{\ln(\lambda_+/\lambda_-)}. \quad (3.15)$$

Шкала длины  $\xi$  может быть отождествлена с корреляционной длиной. При  $h = 0$  она стремится к бесконечности в пределе  $T \rightarrow 0$ :  $\xi = \exp(2\beta J)/2$ .

### 3.1.4 Скрученные граничные условия

Теперь вычислим статистическую сумму одномерной модели Изинга со скрученными граничными условиями (3.3) при  $\alpha = \pi$ :

$$Z_{\text{twist}} = \text{tr } \mathcal{T}^L \tau_x. \quad (3.16)$$

Используя соотношение  $\mathcal{U} \tau_x \mathcal{U}^{-1} = \sin 2\phi \tau_z + \cos 2\phi \tau_x$ , получаем

$$Z_{\text{twist}} = \sin 2\phi (\lambda_+^L - \lambda_-^L). \quad (3.17)$$

Отметим, что при нулевом магнитном поле и при  $T \rightarrow 0$  для конечного  $L$  статистическая сумма равна  $Z_{\text{twist}} = 0$  (так как  $\lambda_+ = \lambda_-$ ).

Свободная энергия при скрученных граничных условиях имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{F_{\text{twist}}}{L} &= -T \ln \lambda_+ - \frac{T}{L} \ln [\sin 2\phi (1 - (\lambda_-/\lambda_+)^L)] \xrightarrow{L \rightarrow \infty} f \\ &\quad - \frac{T}{L} \ln \sin 2\phi + \frac{T}{L} e^{-L/\xi}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

В случае скрученных граничных условий, в отличие от периодических, поправки к свободной энергии конечной системы не являются экспоненциально малыми.

Наконец, отметим, что переход между парамагнитной и ферромагнитной фазами в двумерной и трёхмерной моделях Изинга происходит при конечной температуре. При этом двумерную модель Изинга можно решить аналитически.

*Задача на семинар 28:* Вычислите плотность доменных стен. Обсудите результат при  $h = 0$ .

*Задача на семинар 29:* Найдите корреляционную функцию  $\langle \sigma_j \sigma_{j+n} \rangle = \frac{\text{Tr}[\sigma_j \sigma_{j+n} e^{-\beta \mathcal{H}}]}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}}$  в термодинамическом пределе.

*Упражнение 51:* Вычислите спиновую восприимчивость в термодинамическом пределе.

*Упражнение 52:* Найдите энтропию и теплоёмкость при  $h = 0$  в термодинамическом пределе.

*Упражнение 53:* Вычислите дисперсию термодинамических флуктуаций намагниченности.

*Упражнение 54:* Вычислите свободную энергию  $\tilde{F}$  как функцию от намагниченности на один спин  $m = M/L$ , которая связана со свободной энергией  $F$  посредством преобразования Лежандра.



## 3.2 The Landau theory of phase transitions

### Introduction

In this lecture we discuss the mean field approach to description of the phase transitions. This method has been suggested by Lev Landau and now is known as the Landau theory of phase transitions. Although being approximate it provides qualitative understanding of physics near a phase transition of the second order.

#### 3.2.1 The mean-field approximation

Let us now consider the Ising model on the square lattice in the  $d$  dimensions. In order to treat the problem, we will use the mean-field approximation assuming the weak fluctuation limit. In particular, let us suppose that the average magnetic moment per spin is  $m = \langle \sigma_i \rangle$ . Then, we can rewrite the interaction term in the Hamiltonian as

$$\begin{aligned} \frac{J}{2} \sum_i \sum_{k=1}^{2d} \sigma_i \sigma_{i+k} &= -\frac{J}{2} \sum_i \sum_{k=1}^{2d} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_{i+k} \rangle + \frac{J}{2} \sum_i \sum_{k=1}^{2d} \left( \sigma_i \langle \sigma_{i+k} \rangle + \langle \sigma_i \rangle \sigma_{i+k} \right) \\ &+ \frac{J}{2} \sum_i \sum_{k=1}^{2d} (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle) (\sigma_{i+k} - \langle \sigma_{i+k} \rangle) \approx -dN J m^2 + 2dJm \sum_i \sigma_i. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Here in the last line we neglect the fluctuations of spin  $\sigma_i$  from its average value  $\langle \sigma_i \rangle$ . Then the Hamiltonian of the Ising model is reduced to the spin Hamiltonian in some effective magnetic field

$$\mathcal{H}_{\text{MF}} = dN J m^2 - \sum_i (2dJm + h) \sigma_i. \quad (3.20)$$

The partition function and, consequently, the free energy can readily be computed as

$$F_{\text{MF}} = dN J m^2 - NT \ln \left[ 2 \cosh \beta (2dJm + h) \right]. \quad (3.21)$$

Using the above expression for  $F_{\text{MF}}$ , we can calculate the magnetization per spin,

$$m = \langle \sigma_i \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial F_{\text{MF}}}{\partial h} = \tanh \left[ \beta (2dJm + h) \right]. \quad (3.22)$$

We note that exactly the same equation can be obtained from the condition of extremum of  $F_{\text{MF}}$  as a function of  $m$ . At zero magnetic field,  $h = 0$ , the

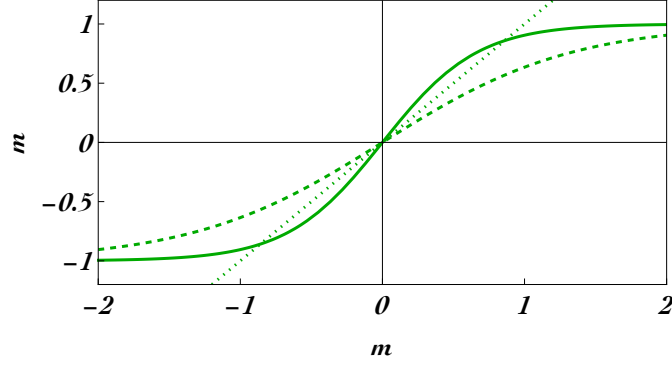


Рис. 3.2: The graphical solution of Eq. (3.22) at  $h = 0$ . The solid (dashed) curve corresponds to the right hand side of Eq. (3.22) for  $T < T_c$  ( $T > T_c$ ).

solution of the self-consistent equation is temperature-dependent. There is the only solution  $m = 0$  for  $T > T_c = 2dJ$ . For  $T < T_c$ , the other non-zero solutions exist (see Fig. 3.2). The non-zero solution  $m = \pm m_0$  is more energetically favorable than the trivial solution with  $m = 0$ . At  $T \rightarrow 0$  the non-trivial solution tends to unity,  $m_0 \rightarrow 1$ . At  $T$  close to  $T_c$  we can expand the right hand side of Eq. (3.22) in powers of  $m$ :

$$m = \frac{T_c m}{T} - \frac{1}{3} \left( \frac{T_c m}{T} \right)^3 + \dots \Rightarrow m = \pm m_0, \quad m_0 = \sqrt{3} (1 - T/T_c)^{1/2}. \quad (3.23)$$

Therefore, we have a second-order phase transition at the *Curie temperature*  $T_c$  between the paramagnetic phase at  $T > T_c$  and the ferromagnetic phase at  $T < T_c$ .

In the presence of magnetic field, just at the transition point  $T = T_c$ , the magnetization has a non-analytic behavior with  $h$ :

$$m_0(T = T_c) = (3h/T_c)^{1/3}. \quad (3.24)$$

### 3.2.2 The Landau expansion

Let us consider a ferromagnet near the Curie temperature where the second-order phase transition to paramagnetic state occurs. The ferromagnetic state is characterized by the finite magnetization  $\mathbf{M}$  whereas in the paramagnetic state it vanishes. In the thermodynamic equilibrium the magnitude of magnetization  $M$  (we consider isotropic ferromagnet) is determined by the

minimum of the Gibbs free energy  $\Phi(T, P, M)$ . In addition to magnetization  $M$  we characterize the ferromagnetic phase by temperature and pressure. Taking into account that magnetization  $M$  changes continuously across the transition, we expand  $\Phi(T, P, M)$  in a power series in  $M$ :

$$\Phi(T, P, M) = \Phi_0(T, P) + \frac{1}{2}A(T, P)M^2 + \frac{1}{4}B(T, P)M^4 + \dots \quad (3.25)$$

There are no terms of odd powers in  $M$  due to the time reversal symmetry. We assume that the coefficient  $B$  is always positive. If it is negative, one should perform expansion to the next order, i.e., to take the term  $M^6$  into account.

The magnitude of magnetization  $M$  can be found from the extremum condition for  $\Phi(T, P, M)$ :

$$\frac{\partial \Phi(T, P, M)}{\partial M} = A(T, P)M + B(T, P)M^3 = 0. \quad (3.26)$$

This equation has a trivial solution  $M = 0$ . In the case  $A > 0$  this is the only minimum, i.e., the paramagnetic phase alone is realized. In the case  $A < 0$  the other minimum is possible with  $M = \pm M_0$ , where  $M_0 = \sqrt{|A|/B}$ . The thermodynamic potential at this minimum is negative,  $\Phi(T, P, M) - \Phi_0(T, P) = -A^2/(4B)$ . Therefore, for  $A < 0$  the ferromagnetic phase is more energetically favorable. The simplest conjecture, which one can make, is that coefficient  $A(T, P)$  is a regular function of  $T - T_c$  where the Curie temperature  $T_c$  is determined by the condition  $A(T_c, P) = 0$ , i.e., we can write

$$A(T, P) = a(P)(T - T_c), \quad a > 0. \quad (3.27)$$

At the same time we can approximate the function  $B(T, P)$  by its value at the transition point:  $B(T, P) \approx B(T_c, P) \equiv B(P)$ . Then the temperature dependence of the magnetization in the ferromagnet is given as

$$M_0 = \begin{cases} \sqrt{a/B} \sqrt{T_c - T}, & T < T_c, \\ 0, & T \geq T_c. \end{cases} \quad (3.28)$$

We emphasize that the  $M_0(T)$  dependence reproduces that found in the mean field treatment of the Ising model.

Let us consider the magnetization in the magnetic field  $h$ . For definiteness, the ferromagnet is an infinite cylinder placed in the magnetic field parallel to the cylindrical axis. The free energy in the presence of an external magnetic field is given as:

$$F(T, P, M, h) = \Phi(T, P, M) - Mh - \frac{h^2}{8\pi}. \quad (3.29)$$

Now the equilibrium magnetization  $M$  is determined by the extremum of  $F(T, P, M, h)$ ,

$$\frac{\partial \Phi(T, P, M)}{\partial M} = h. \quad (3.30)$$

It is worthwhile to mention that the free energy  $F(T, P, M, h)$  satisfies the relation  $(\partial F / \partial h)_M = -b / (4\pi)$  where  $b = h + 4\pi M$  is the magnetic induction.

We note that the magnetization in the magnetic field  $h$  becomes non-zero at  $T > T_c$ . It can be found from the equation

$$a(T - T_c)M + BM^3 - h = 0. \quad (3.31)$$

At  $T < T_c$  the  $M(h)$  dependence has a hysteresis. For  $T = T_c$ , we find

$$M = (h/B)^{1/3}. \quad (3.32)$$

Again, we emphasize that this dependence is the same one obtained in the mean-field analysis of the Ising model. Comparing Eq. (3.32) with the expression for  $M_0$ , we find the characteristic magnetic field  $h \sim B[a(T_c - T)/B]^{3/2}$ .

### 3.2.3 Microscopic derivation of the Ginzburg-Landau theory

Let us consider the Ising model in the  $d$  dimensions on the crystalline lattice with coordination number  $z$ . (In the case of square lattice one finds  $z = 2d$ .) The Hamiltonian is given as

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (3.33)$$

where the symmetric matrix  $J_{ij}$  describes the exchange interaction between spins  $\sigma_i = \pm 1$ . Let us use the identity

$$\begin{aligned} & \left( \prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_i \right) \exp \left[ -\frac{1}{4} \sum_{ij} x_i (K^{-1})_{ij} x_j + \sum_i x_i a_i \right] \\ &= (2\sqrt{\pi})^N \sqrt{\det K} \exp \left( \sum_{ij} a_i K_{ij} a_j \right). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Choosing  $K_{ij} = \beta J_{ij}/2$ , we can express the partition function of the Ising model as follows

$$Z = \frac{(4\pi)^{-N/2}}{\sqrt{\det K}} \left( \prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_i \right) \exp \left[ -\frac{1}{4} \sum_{ij} x_i (K^{-1})_{ij} x_j + \sum_i \ln(2 \cosh x_i) \right]. \quad (3.35)$$

We can interpret  $x_j$  as the local magnetic field conjugated to the local magnetization  $\sigma_j$ . We note that being local variable, generically,  $x_j$  fluctuates strongly. Let us introduce new variable  $\phi_i = \sum_j (K^{-1})_{ij} x_j/2$  which is a weighted sum of many local fields. One might expect that  $\phi_i$  is weakly fluctuating. Now we expand the term  $\ln(2 \cosh x_i)$  in powers of  $\phi_i$ . Then we obtain the approximate expression for the partition function

$$Z \approx 2^{N/2} \sqrt{\det K} \int D[\phi] e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{eff}}[\phi]}, \quad \int D[\phi] \equiv \prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\phi_i}{\sqrt{\pi}} \quad (3.36)$$

where the effective Hamiltonian reads

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\phi] = \frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_i [J_{ij} - \beta(J^2)_{ij}] \phi_j + \frac{\beta^3}{12} \sum_{ijklm} J_{ij} J_{ik} J_{il} J_{im} \phi_j \phi_k \phi_l \phi_m + \dots \quad (3.37)$$

For the sake of definiteness, we consider now a square lattice in the  $d$  dimensions and assume that the exchange interaction is non-zero for the neighboring spins alone. Then the Fourier transform of  $J_{ij}$  becomes

$$J_{\mathbf{q}} = \sum_j J_{jk} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)} = 2J \sum_{\alpha=1}^d \cos(q_\alpha a) \approx J(2d - q^2 a^2) + \dots \quad (3.38)$$

Here  $\mathbf{r}_j$  is the vector from the origin to the position of the  $j$ -th spin and  $a$  is the lattice spacing. Introducing the Fourier transform for the variable  $\phi_j$ :

$$\phi_j = \sum_{\mathbf{q}} \phi_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}, \quad (3.39)$$

we rewrite the effective Hamiltonian in the following form:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} (J_{\mathbf{q}} - \beta J_{\mathbf{q}}^2) |\phi_{\mathbf{q}}|^2 + \frac{\beta^3}{12} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} J_{\mathbf{q}_1} J_{\mathbf{q}_2} J_{\mathbf{q}_3} J_{-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_3} \phi_{\mathbf{q}_1} \phi_{\mathbf{q}_2} \\ \times \phi_{\mathbf{q}_3} \phi_{-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_3}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Here we use the relation  $\phi_{-\mathbf{q}} = \phi_{\mathbf{q}}^*$ . Using the expansion of  $J_{\mathbf{q}}$  at small momenta, cf. Eq. (3.38), we obtain the effective Hamiltonian near  $T = T_c = 2dJ$ :

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} (T - T_c + Jq^2 a^2) |\phi_{\mathbf{q}}|^2 + \frac{2dJ}{12} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} \phi_{\mathbf{q}_1} \phi_{\mathbf{q}_2} \phi_{\mathbf{q}_3} \phi_{-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_3}. \quad (3.41)$$

Transforming into the real space representation, we write the effective Hamiltonian in terms of the continuous variable  $\varphi(\mathbf{r}) = a^{-d/2} \sum_{\mathbf{q}} \phi_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})$ :

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} \left[ (T - T_c) \varphi^2(\mathbf{r}) + b (\nabla \varphi)^2 + \frac{\lambda}{2} \varphi^4(\mathbf{r}) \right], \quad (3.42)$$

where  $b = Ja^2$  and  $\lambda = dJa^d/3$ . Now in order to compute the partition function for the Ising model, one should integrate over all possible configurations of the field  $\varphi(\mathbf{r})$ , i.e., to compute the *functional integral*,

$$Z = \int D[\varphi] e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}/T}. \quad (3.43)$$

Integrating the spatially independent configurations  $\varphi$ , we find that  $\ln Z \approx -\Phi(T, P, M)/T$  where  $\Phi(T, P, M)$  is given by the Landau expansion (3.25).

### 3.2.4 The Ginzburg-Landau theory and the Ginzburg-Levanyuk criterion

Contrary to the Landau theory, the partition function is determined as a sum over all configurations  $\varphi(\mathbf{r})$ , cf. Eq. (3.43). This description is valid in vicinity of the transition temperature,  $|T - T_c| \ll T_c$ . Approximating the *functional integral* by its saddle point value, we obtain that the partition function is determined by the thermodynamic potential  $\Phi$  coinciding formally with  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ . In the external magnetic field  $h(\mathbf{r})$  the minimum of  $\Phi$  is given by the solution of the corresponding Euler-Lagrange equation:

$$(T - T_c)\varphi - b \nabla^2 \varphi + \lambda \varphi^3 = h. \quad (3.44)$$

The comparison of the first and second terms in the left hand side of this equation implies an existence of the length scale  $\xi \propto \sqrt{b/|T - T_c|}$  called the *correlation length*. The correlation length diverges at the transition point.

At  $T > T_c$  we can neglect the third-order term in Eq. (3.44). Then, we find the linear relation between the magnetization and the magnetic field

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int d^d \mathbf{r}' G_\chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') h(\mathbf{r}') \quad (3.45)$$

where the spin-spin correlation function is given as

$$G_\chi(\mathbf{r}) = \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} G_\chi(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad G_\chi(\mathbf{k}) = \frac{1}{T - T_c + bk^2}. \quad (3.46)$$

We note that the spin susceptibility, discussed above, corresponds to  $\chi = G_\chi(\mathbf{k} = 0)$ . Evaluating the integral over  $\mathbf{k}$ , one finds that the spin susceptibility can be written as  $G_\chi(\mathbf{r}) = b^{-1} \xi^{2-d} \mathcal{X}(r/\xi)$  where  $\xi = \sqrt{b/(T - T_c)}$  and  $\mathcal{X}(z) \propto \exp(-z)$  at  $z \gg 1$ .

Let us estimate the contribution to thermodynamic potential  $\Phi$  from an inhomogeneous fluctuation of size  $\varphi_0 \sim \sqrt{|T_c - T|/\lambda}$  and of spatial extent of the order of the correlation length  $\xi$ :  $\Phi_{\text{inhom}} \sim b \xi^d \varphi_0^2 / \xi^2 \sim b^2 \xi^{d-4} / \lambda$ . This energy scale should be larger than the temperature in order to have the functional integral for the partition function governed by the saddle-point approximation. We note that at  $d > 4$  this energy scale  $\Phi_{\text{inhom}}$  increases as we approach the transition temperature since  $\xi$  diverges. Therefore, at  $d > 4$  the Ginzburg-Landau theory is the ultimate theory of the second-order phase transition. The latter has the mean-field character. The dimension  $d = 4$  is termed as the *upper critical dimension*. For  $d \leq 4$ , we find the so-called the Ginzburg-Levanyuk criterion for applicability of the Ginzburg-Landau theory:

$$\xi^{-1} \gg (\lambda T_c / b^2)^{1/(4-d)} \quad \Rightarrow \quad \frac{|T - T_c|}{T_c} \gg \frac{b}{T_c} \left( \frac{\lambda T_c}{b^2} \right)^{\frac{2}{4-d}} \sim \left( \frac{J}{T_c} \right)^{\frac{2-d}{4-d}}. \quad (3.47)$$

Since  $T_c = 2dJ$  for  $d = 2$  and  $d = 3$ , the Ginzburg-Landau theory has no parametric range of its applicability for the Ising model.

We note that the Ginzburg-Landau theory can be developed for describing the superconducting transition in conventional superconductors with the anomalous average playing the role of the order parameter. In this case the region of applicability is wider. The fluctuation region is controlled by the small parameter  $T_c/E_F \ll 1$ .

*Задача на семинар 30:* Find parallel spin susceptibility in zero magnetic field near the Curie temperature for the easy axis antiferromagnet.

*Задача на семинар 31:* Compute the fluctuation correction to the specific heat above the transition,  $T > T_c$ .

*Задача на семинар 32:* Find the variance for the fluctuations of the order parameter at  $T > T_c$ .

*Упражнение 55:* Find the zero-field spin susceptibility  $\chi = \lim_{h \rightarrow 0} m/h$  in the paramagnetic phase close to  $T_c$ .

*Упражнение 56:* Describe the hysteresis in  $m(h)$  at  $T < T_c$ .

*Упражнение 57:* Find the magnitude of the jump of the specific heat under constant pressure,  $C_P$ , at the transition temperature.

*Упражнение 58:* Compute the spin susceptibility  $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}$  at zero magnetic field above and below  $T_c$ .

*Упражнение 59:* Find the spin susceptibility and the correlation length at  $T < T_c$ .



### 3.3 Scaling ideas and renormalization group

#### Introduction

In this lecture we discuss the theory of phase transitions beyond the mean field approximation. It was understood that the improved theory for the phase transitions just below the upper critical dimension can be constructed. Although it has typically no practical relevance (in terms of available experimental systems), nevertheless, it improves our understanding of physics of strong critical fluctuations existing in the vicinity of a phase transition. More details on the methods discussed in this lecture can be found in the book [13].

#### 3.3.1 Critical exponents

Although the Ginzburg-Landau theory is not applicable for describing the ferromagnetic-to-paramagnetic phase transition in the Ising model at  $d < 4$  dimensions, it provides us the correct physical picture of the transition. The most important prediction is an existence of the divergent correlation length,  $\xi(T \rightarrow T_c) \rightarrow \infty$ . This fact implies the absence of any length scale at the phase transition and, as a consequence, power-law spatial behavior of correlation functions.

Let us formally define the following set of eight *critical exponents*:

- (i) the correlation length exponents  $\nu$  and  $\mu$  which control the behavior of  $\xi$  in the absence of magnetic field:  $\xi \sim |t|^{-\nu}$  where  $t = (T - T_c)/T_c$ , and at the transition point  $T = T_c$  in the magnetic field :  $\xi \sim h^{-\mu}$ ;
- (ii) the order parameter exponents  $\beta$  and  $\delta$  governing the behavior of the order parameter at  $h = 0$ :  $\varphi \sim (-t)^\beta$ , and at  $T = T_c$ :  $\varphi \sim h^{1/\delta}$ ;
- (iii) the specific heat exponents  $\alpha$  and  $\varepsilon$  which control the contribution to the specific heat due to fluctuations at  $h = 0$ :  $C_P \sim |t|^{-\alpha}$ , and at  $T = T_c$ :  $C_P \sim h^{-\varepsilon}$ ;
- (v) the spin susceptibility exponent  $\gamma$  determining the behavior of  $\chi$  at  $h = 0$ :  $\chi \sim |t|^{-\gamma}$  ;
- (vi) the exponent  $\zeta$  which controls the behavior of the spin-spin correlation function at  $T = T_c$  and  $h = 0$ :  $G_\chi(\mathbf{r}) \sim r^{2-d-\zeta}$ .

The Ginzburg-Landau theory predicts the following values of the exponents:  $\nu = 1/2$ ,  $\mu = 1/3$ ,  $\beta = 1/2$ ,  $\delta = 3$ ,  $\alpha = 0$ ,  $\varepsilon = 0$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\zeta = 0$ .

Remarkably, there is a set of general relations between the eight critical exponents. As in the Landau theory let us try to find the characteristic magnetic field which separates the regions of weak and strong magnetic field. Comparing  $\varphi \sim (-t)^\beta$  with  $\chi h \sim |t|^{-\gamma} h$ , we find that the characteristic magnetic field behaves as  $h_t \sim |t|^{\beta+\gamma}$ . The similar estimate can be done by comparison of  $\varphi \sim h^{1/\delta}$  with  $\varphi \sim (-t)^\beta$ . However, the latter estimate leads to  $h_t \sim |t|^{\delta\beta}$ . Assuming that there is only a single characteristic magnetic field in the problem, we obtain the relation between the critical exponents known as the *Widom relation*:

$$\delta\beta = \beta + \gamma. \quad (3.48)$$

Next, substituting  $h_t \sim |t|^{\beta+\gamma}$  into the field-dependent expression for the correlation length and the specific heat and comparing the results with the temperature behavior, we obtain two more relations:

$$\mu(\beta + \gamma) = \nu, \quad \varepsilon(\beta + \gamma) = \alpha. \quad (3.49)$$

Now we can estimate the specific heat as  $C_P \sim V\varphi h_t/t^2 \sim |t|^{2\beta-\gamma-2}$ . By comparing this behavior with the behavior  $C_P \sim |t|^{-\alpha}$ , we obtain the so-called *Essam-Fisher relation*:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (3.50)$$

Let us now estimate the spin susceptibility from the spin-spin correlation function:  $\chi \sim \int d^d \mathbf{r} G_\chi(r)$ . As we will see above, the function  $G_\chi(r) \sim \exp(-r/\xi)$  for  $r \gg \xi$ . Therefore, we can expect that only the region  $r < \xi$  contributes to the integral. Then, we find  $\chi \sim \xi^{2-\zeta} \sim |t|^{-\nu(2-\zeta)}$ . Hence we find the fifth relation

$$\gamma = \nu(2 - \zeta). \quad (3.51)$$

We note that the above five relations set three critical exponents unspecified. Also we mention that the critical exponents of the Ginzburg–Landau theory satisfy these five relations.

### 3.3.2 The scale invariance and scaling laws

Let us assume that the correlation length  $\xi$  is the single length scale in the fluctuation region of second-order phase transition. This assumption is termed as the *hypothesis of scale invariance* and is introduced by Kadanoff, Patashinskii, and Pokrovsky in 1966. In particular, this hypothesis implies that upon rescaling  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}/u$ , one can change the temperature  $t$  to  $tu^{\Delta_t}$ , magnetic field  $h$  to  $hu^{\Delta_h}$  and the order parameter  $\varphi$  to  $\varphi u^{\Delta_\varphi}$ . Since the

correlation length is the single length scale, it should transform in the same way as the length:  $\xi \rightarrow \xi/u$ . Since  $\xi(tu^{\Delta_t}) \sim |t|^{-\nu} u^{-\nu\Delta_t}$ , we find that the exponent  $\Delta_t = 1/\nu$ . In the similar way, one finds  $\Delta_h = 1/\mu$ . Also, the thermodynamic potential should be invariant with respect to the scale transformation. Estimating  $\Phi$  as  $V\varphi h$ , we find the relation  $\Delta_\varphi = d - \Delta_h = d - 1/\mu$ .

The scale invariance suggests the following relation for the order parameter  $\varphi(t, h) = u^{-\Delta_\varphi} \varphi(tu^{1/\nu}, hu^{1/\mu})$ . Now let us choose the specific magnitude of the scale transformation parameter,  $u = h^{-\mu}$ . Then we find

$$\varphi(t, h) = h^{\mu d - 1} \varphi(th^{-\mu/\nu}, 1). \quad (3.52)$$

Setting  $t = 0$ , we obtain new relation between critical exponents:

$$\mu d - 1 = 1/\delta \quad (3.53)$$

which can be transformed into the relation

$$\nu d = 2 - \alpha. \quad (3.54)$$

We note that this relation (contrary to the five relations derived above) is not satisfied within the Ginzburg-Landau theory due to lack of scale invariance in this theory. Next we can rewrite Eq. (3.52) in the following scaling form:

$$\varphi(t, h) = h^{1/\delta} \mathcal{F}_\varphi(t/h^{1/(\beta\delta)}). \quad (3.55)$$

In the presence of non-zero  $h$  there is no reason to expect non-analytic behavior in  $t$ . Therefore, the function  $\mathcal{F}_\varphi(X)$  is a regular function of its scaling argument. To be consistent with the behavior in weak magnetic fields, the function  $\mathcal{F}_\varphi(X)$  should have the following asymptotic behavior:

$$\mathcal{F}_\varphi(X) \sim \begin{cases} (-X)^\beta, & X \rightarrow -\infty, \\ X^{-\gamma}, & X \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (3.56)$$

For the two-dimensional Ising model, the set of critical exponents is known exactly:  $\alpha = \varepsilon = 0$ ,  $\nu = 1$ ,  $\mu = 8/15$ ,  $\gamma = 7/4$ ,  $\beta = 1/8$ ,  $\delta = 15$ , and  $\zeta = 1/4$ . As one can check, they satisfy all the six relations.

### 3.3.3 The renormalization group

The hypothesis of the scale invariance allows us to establish the scaling form of all physical quantities. However, it does not permit to determine the values

of the critical exponents. Using the property of the scale invariance, we can ask a question how the effective Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi] = \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} \left[ \tau \varphi^2(\mathbf{r}) + (\nabla \varphi)^2 + \frac{\lambda}{2} \varphi^4(\mathbf{r}) \right] \quad (3.57)$$

is transformed under the scale transformation with  $u = e^l$  where  $l \rightarrow 0$ . We note that  $\tau$  plays the role of dimensionless temperature. To answer this question, we should perform several steps. We note that we changed a definition of the variable  $\varphi$  in comparison with one used in Eq. (3.42).

Firstly, let us split the variable  $\varphi(\mathbf{r})$  into two parts:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \underline{\varphi}(\mathbf{r}) + \overline{\varphi}(\mathbf{r}) \quad (3.58)$$

where

$$\underline{\varphi}(\mathbf{r}) = \int_{0 < k < \Lambda/u} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \varphi_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \overline{\varphi}(\mathbf{r}) = \int_{\Lambda/u \leq k < \Lambda} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \varphi_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (3.59)$$

Here  $\Lambda$  is the ultra-violet cutoff of the order of inverse lattice spacing,  $\Lambda \sim 1/a$ . The contributions  $\underline{\varphi}(\mathbf{r})$  and  $\overline{\varphi}(\mathbf{r})$  are termed as *slow or long wave* component and *fast or short wave* component, respectively.

Secondly, we integrate out the fast components of the field and define new effective Hamiltonian

$$\mathcal{H}'_{\text{eff}}[\underline{\varphi}] = -T \ln \int D[\overline{\varphi}] e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi} + \overline{\varphi}]}. \quad (3.60)$$

Since the momenta in definition of  $\varphi$  are restricted within the range  $0 < k < \Lambda/u$ , we introduce the rescaled momentum  $\underline{k} = uk$  and rescaled field  $\tilde{\varphi}(\underline{k}) = u^{-\rho} \varphi(k)$ . We note that in the real space this transformation corresponds to  $\mathbf{r} \rightarrow \underline{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/u$  and  $\underline{\varphi}(\mathbf{r}) \rightarrow \tilde{\varphi}(\underline{\mathbf{r}}) = u^{d-\rho} \underline{\varphi}(\mathbf{r})$ . Then, we expect that  $\mathcal{H}'_{\text{eff}}[\underline{\varphi}]$  has exactly the same form as  $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\tilde{\varphi}]$  but with  $\tau$  and  $\lambda$  substituted by some functions  $\tau(l)$  and  $\lambda(l)$ . Repeating the procedure of integration over fast modes, one might be able to find the functions  $\tau(l)$  and  $\lambda(l)$ . Such step-by-step integration of the fast modes and reformulation of the theory is known as the *renormalization group*. This method has been used by L. Kadanoff and K. Wilson for describing the critical phenomena near the upper critical dimension.

In order to demonstrate what we can gain from this renormalization procedure, let us consider the spin susceptibility. Since the latter is the spin-spin correlation function at  $k = 0$ , we, on the one hand, can calculate it from the initial effective Hamiltonian and, on the other hand, from the effective Hamiltonian  $\mathcal{H}'_{\text{eff}}[\underline{\varphi}]$ . Then using the relation between the susceptibility and the variance for the variable  $\varphi$ , cf. Eq. (1.33),  $\langle \varphi^2 \rangle = T\chi/V$ , we find

$$\chi(\tau, \lambda) = u^{2\rho-d} \chi(\tau(l), \lambda(l)). \quad (3.61)$$

### 3.3.4 The $4 - d$ expansion

For the further progress, one should determine the functions  $\tau(l)$  and  $\lambda(l)$ . Near the upper critical dimension there is a systematic way to compute them. We write

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi} + \bar{\varphi}] &= \mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi}] + \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} \left\{ \tau[\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 + [\nabla \bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 + 3\lambda[\underline{\varphi}(\mathbf{r})]^2 \right. \\ &\quad \left. \times [\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 + 2\lambda \underline{\varphi}(\mathbf{r})[\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^3 + \frac{\lambda}{2} [\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^4 \right\}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Then we find  $\mathcal{H}'_{\text{eff}}[\underline{\varphi}]$  as a formal expansion in  $\lambda$ . We obtain to the second order in  $\lambda$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_{\text{eff}}[\underline{\varphi}] &= \mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi}] + \frac{3\lambda}{2} \int d^d \mathbf{r} [\underline{\varphi}(\mathbf{r})]^2 \langle [\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 \rangle - \frac{9\lambda^2 \beta}{8} \int d^d \mathbf{r} \int d^d \mathbf{r}' [\underline{\varphi}(\mathbf{r}) \underline{\varphi}(\mathbf{r}')]^2 \\ &\quad \times \langle \langle [\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 [\bar{\varphi}(\mathbf{r}')]^2 \rangle \rangle + \frac{\lambda^2 \beta}{2} \int d^d \mathbf{r} \underline{\varphi}(\mathbf{r}) \int d^d \mathbf{r}' \underline{\varphi}(\mathbf{r}') \langle [\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^3 [\bar{\varphi}(\mathbf{r}')]^3 \rangle \\ &\quad + \frac{3\lambda^2 \beta}{4} \int d^d \mathbf{r} [\underline{\varphi}(\mathbf{r})]^2 \int d^d \mathbf{r}' \langle \langle [\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 [\bar{\varphi}(\mathbf{r}')]^4 \rangle \rangle \end{aligned} \quad (3.63)$$

where  $\langle \langle AB \rangle \rangle = \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$ . The brackets  $\langle \dots \rangle$  mean averaging with the effective Hamiltonian at  $\lambda = 0$ :

$$\begin{aligned} \langle O[\bar{\varphi}] \rangle &= \int D[\bar{\varphi}] O[\bar{\varphi}] e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)}[\bar{\varphi}]} / \int D[\bar{\varphi}] e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)}[\bar{\varphi}]}, \\ \mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)}[\bar{\varphi}] &= \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} \left\{ \tau[\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 + [\nabla \bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Now let us perform rescaling  $\Lambda/u \rightarrow \Lambda$  by changing  $k \rightarrow \underline{k} = uk$  and  $\underline{\varphi}(k) \rightarrow \tilde{\varphi}(\underline{k}) = u^{-\rho} \underline{\varphi}(k)$ . To fix the magnitude of  $\rho$ , we impose the condition remaining the gradient term,

$$\int d^d \mathbf{r} [\nabla \bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 = u^{-d-2+2\rho} \int d^d \underline{\mathbf{r}} [\nabla \tilde{\varphi}(\underline{\mathbf{r}})]^2, \quad (3.65)$$

unvaried under such transformation, i.e.,  $\rho = (d+2)/2$ . Performing such rescaling in the other terms, we find that  $\mathcal{H}'_{\text{eff}}[\underline{\varphi}]$  acquires the form of  $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\tilde{\varphi}]$  with

$$\begin{aligned} \tau &\rightarrow \tau(l) = e^{2l} \tau + 3\lambda e^{2l} \langle [\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 \rangle, \\ \lambda &\rightarrow \lambda(l) = e^{(4-d)l} \lambda - \frac{9\lambda^2 e^{(4-d)l}}{2T} \int d^d \mathbf{r}' \langle \langle [\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 [\bar{\varphi}(\mathbf{r}')]^2 \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (3.66)$$

to lowest order in  $\lambda$ . The averages in the above equations can be calculated as follows

$$\begin{aligned} \langle [\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 \rangle &= \int_{\Lambda/u < k < \Lambda} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{T}{\tau + k^2} = \frac{S_d \Lambda^d}{(2\pi)^d} \frac{T}{\tau + \Lambda^2} l, \\ \int d^d \mathbf{r}' \langle \langle [\bar{\varphi}(\mathbf{r})]^2 [\bar{\varphi}(\mathbf{r}')]^2 \rangle \rangle &= 2 \int_{\Lambda/u < k < \Lambda} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{T^2}{(\tau + k^2)^2} = 2 \frac{S_d \Lambda^d}{(2\pi)^d} \frac{T^2}{(\tau + \Lambda^2)^2} l, \end{aligned} \quad (3.67)$$

where  $S_d$  denotes the area of the unit sphere in the  $d$ -dimensional space. It is convenient to introduce the dimensionless variables:  $\tilde{\tau} = \tau/\Lambda^2$  and  $\tilde{\lambda} = \lambda \Lambda^{d-4} S_d T / (2\pi)^d$ . Then expanding to the lowest order in  $l$ , we find the following relations:

$$\tilde{\tau}(l) = \tilde{\tau} + \left( 2\tilde{\tau} + \frac{3\tilde{\lambda}}{1 + \tilde{\tau}} \right) l, \quad \tilde{\lambda}(l) = \tilde{\lambda} + \left( (4-d)\tilde{\lambda} - \frac{9\tilde{\lambda}^2}{(1 + \tilde{\tau})^2} \right) l. \quad (3.68)$$

These results obtained in the limit  $l \rightarrow 0$  can be recast in the form of the differential equations:

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{\tau}}{dl} &= 2\tilde{\tau} + \frac{3\tilde{\lambda}}{1 + \tilde{\tau}}, \\ \frac{d\tilde{\lambda}}{dl} &= \epsilon\tilde{\lambda} - \frac{9\tilde{\lambda}^2}{(1 + \tilde{\tau})^2}, \end{aligned} \quad (3.69)$$

where  $\epsilon = 4-d$ . For  $\epsilon < 0$ , the only fixed point is at  $\tilde{\lambda} = \tilde{\tau} = 0$  which is stable in the infra-red (at  $l \rightarrow \infty$ ). This fixed point corresponds to the Ginzburg-Landau theory. For  $\epsilon > 0$ , the fixed point at  $\tilde{\lambda} = \tilde{\tau} = 0$  becomes unstable in the infra-red. There is a partially unstable fixed point at  $\tilde{\tau}_* = -\epsilon/6$  and  $\tilde{\lambda}_* = \epsilon/9$  (see Fig. 3.3(a)). The smallness of values  $\tilde{\lambda}_*$  and  $\tilde{\tau}_*$  for  $\epsilon \ll 1$  justifies the expansion in  $\lambda$  which we have performed. Expanding the right hand side of Eq. (3.69) near this fixed point, we obtain ( $\delta\tilde{\tau} = \tilde{\tau} - \tilde{\tau}_*$  and  $\delta\tilde{\lambda} = \tilde{\lambda} - \tilde{\lambda}_*$ ):

$$\frac{dt}{dl} = x_+ t, \quad \frac{d\delta\tilde{\lambda}}{dl} = x_- \delta\tilde{\lambda}, \quad (3.70)$$

where  $x_+ = 2 - \epsilon/3$ ,  $x_- = -\epsilon$ , and  $t = \delta\tilde{\tau} + (3/2 - \epsilon/2)\delta\tilde{\lambda}$ . The above equations imply that variable  $t$  corresponds to the relevant direction and measures the distance from the critical line. Then we find that Eq. (3.61) acquires the following form:  $\chi = u^2 \chi(tu^{x_+})$ . This implies that the correlation

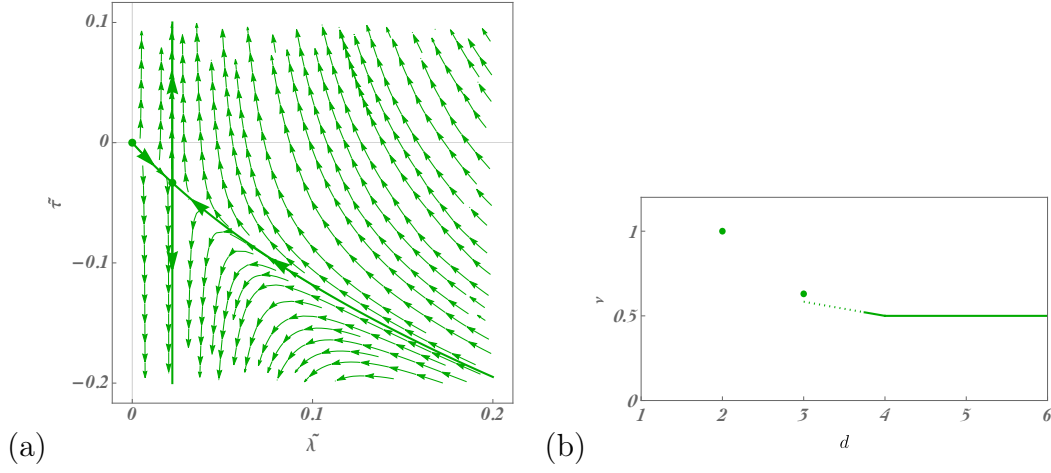


Рис. 3.3: (a) The renormalization group flow. The arrows indicates the direction towards the infra-red,  $l \rightarrow \infty$ . The fixed points are marked by green dots. We choose  $\epsilon = 0.2$ . (b) The dependence of the correlation length exponent on  $d$  for the Ising model.

length exponent is  $\nu = 1/x_+ = 1/2 + \epsilon/12$ . Choosing  $u = t^{-\nu}$ , we find  $\chi \sim t^{-2\nu}$ , i.e.  $\zeta = O(\epsilon^2)$ . Using the relations between the critical exponents, we can determine all the other exponents.

Taking into account the exact analytical value of  $\nu = 1$  for two-dimensional Ising model and the numerical result  $\nu = 0.629971(4)$  [17, 18] for three-dimensional Ising model, we can obtain the overall behavior of the correlation length exponent with  $d$  (see Fig. 3.3(b)). We note that the renormalization group prediction with  $\epsilon = 1$  yields reasonable value 0.58 for  $\nu$  at  $d = 3$ .

*Задача на семинар 33:* Derive the scaling form of the thermodynamic potential and the relations between critical exponents.

*Задача на семинар 34:* Derive RG equations for  $\tau$  and  $\lambda$  in the case of  $n$ -component field  $\varphi$ .

*Упражнение 60:* Find behavior of  $G_\chi(\mathbf{k})$  at  $k \rightarrow 0$  for  $T = T_c$  and  $h = 0$ .

*Упражнение 61:* Derive the relations  $\mu(\beta+\gamma) = \nu$  and  $\varepsilon(\beta+\gamma) = \alpha$ .

*Упражнение 62:* Derive the scaling form of the specific heat, the correlation length, and the spin-spin correlation function.

*Упражнение 63:* Using the relations between critical exponents, compute the critical exponents  $\alpha$ ,  $\varepsilon$ ,  $\mu$ ,  $\gamma$ ,  $\beta$ , and  $\delta$  to first order in  $\epsilon$ .

*Упражнение 64:* To find separatrices of the renormalization group equations, Eqs. (3.69), for  $|\tilde{\tau}| \ll 1$ .



## 3.4 One-dimensional Ising model in transverse field

### Introduction

In this lecture we consider the generalization of one-dimensional Ising model in the transverse magnetic field. This model provides an example of a *quantum phase transition*, i.e. the transition which occurs at  $T = 0$  strictly. The educational review of the solution of the transverse field Ising model can be found in Ref. [16].

#### 3.4.1 The Jordan-Wigner transformation

Let us consider the spin 1/2 chain with the Ising-type ferromagnetic interaction ( $J > 0$ ) in the transverse magnetic field  $h > 0$ :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z. \quad (3.71)$$

Here  $(1/2)\sigma_i^x$  and  $(1/2)\sigma_i^z$  are the operators for the  $x$  and  $z$  projections of the spin 1/2 at site  $i$ . There is a crucial difference between Hamiltonians (3.71) and (3.1). The spin operators  $(1/2)\sigma_i^{x,z}$  do not commute with the Hamiltonian. Therefore, we cannot apply the method of the transfer matrix for computing the partition function for Hamiltonian (3.71).

As we discuss in the case of the classical Ising model, the result for the partition function  $Z$  at finite  $N$  depends on the choice of the boundary conditions. In this lecture we employ the periodic boundary conditions:

$$\sigma_{N+1}^{x,y,z} = \sigma_1^{x,y,z}. \quad (3.72)$$

To solve the Hamiltonian (3.71), it is convenient to use the relation between the spin 1/2 operators and fermionic operators. Let us introduce fermionic operators  $a_i^\dagger$  and  $a_i$  at each site. Then, we can use the following representation (referred to as the Jordan-Wigner transformation):

$$\begin{aligned} \sigma_j^x &= K_j(a_j^\dagger + a_j), & \sigma_j^y &= iK_j(a_j^\dagger - a_j), \\ \sigma_j^z &= 1 - 2a_j^\dagger a_j = 1 - 2n_j, & K_j &= \prod_{k=1}^{j-1} (1 - 2n_k). \end{aligned} \quad (3.73)$$

We emphasize that the transformation from fermions to spins is non-local. It involves the so-called string operator  $K_j$ . The operator has the

following property:  $K_j^2 = 1$ , i.e. its eigenvalues are  $\pm 1$ . Using the fermionic commutation relations for the operators  $a_j^\dagger$  and  $a_j$ , one can show that the spin operators defined in Eq. (3.73) satisfy the proper commutation relations  $[\sigma_j^a, \sigma_k^b] = 2i\epsilon_{abc}\delta_{jk}\sigma_j^c$ .

Next we use the following exact relation (for  $1 \leq j < N$ )

$$\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x = a_j^\dagger a_{j+1} + a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger + \text{h.c.} \quad (3.74)$$

We note that the string operators drop out from the above expression. For the last term  $\sigma_N^x \sigma_{N+1}^x$ , it is not so:

$$\sigma_N^x \sigma_{N+1}^x = \sigma_N^x \sigma_1^x = K_N a_N^\dagger a_1 + K_N a_N^\dagger a_1^\dagger + \text{h.c.} \quad (3.75)$$

Therefore, we obtain the exact fermionic representation of Hamiltonian (3.71)

$$\mathcal{H} = -J \sum_{j=1}^{N-1} (a_j^\dagger a_{j+1} + a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger + \text{h.c.}) - JK_N (a_N^\dagger a_1 + a_N^\dagger a_1^\dagger + \text{h.c.}) + h \sum_{j=1}^N (2a_j^\dagger a_j - 1). \quad (3.76)$$

The Jordan-Wigner transformation helps us to formulate the transverse Ising model as a model of free fermions hopping on the one-dimensional lattice. The transverse magnetic field becomes the potential energy. There exist also superconducting correlations describing by the term  $a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger$ . We note that the fermionic model (3.76) is equivalent to the one-dimensional Kitaev model.

### 3.4.2 Fermionic parity operator

The presence of terms  $a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger$  in Hamiltonian (3.76) indicates that the number of fermions  $\mathcal{N}_F = \sum_{j=1}^N n_j$  is not conserved, i.e.  $[\mathcal{N}_F, \mathcal{H}] \neq 0$ . Let us define the fermionic parity operator as

$$\mathcal{P}_F = (-1)^{\mathcal{N}_F} = e^{i\pi \sum_{j=1}^N n_j} = \prod_{j=1}^N (1 - 2n_j) = \prod_{j=1}^N \sigma_j^z. \quad (3.77)$$

Using the obvious relations  $\mathcal{P}_F \sigma_j^{x,y} \mathcal{P}_F = -\sigma_j^{x,y}$ , it is readily to show that the fermionic parity operator commutes with the Hamiltonian,  $[\mathcal{P}_F, \mathcal{H}] = 0$ . Physically, it corresponds to changing the sign of  $\sigma^x$  operators at all sites simultaneously. Since  $\mathcal{P}_F^2 = 1$ , its eigenvalues are equal to  $\pm 1$ . Therefore, the Hamiltonian  $\mathcal{H}$  can be thought as a block diagonal matrix in the eigenbasis of  $\mathcal{P}_F$ . The symmetry is related with the operator  $\mathcal{P}_F$  is termed as  $\mathbb{Z}_2$  symmetry. As we will discuss below it can spontaneously be broken.

Using the relation  $K_N a_N^\dagger = -\mathcal{P}_F a_N^\dagger$ , the Hamiltonian (3.76) can be explicitly rewritten as

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J \sum_{j=1}^{N-1} (a_j^\dagger a_{j+1} + a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger + \text{h.c.}) + J(\mathcal{P}_F a_N^\dagger a_1 + \mathcal{P}_F a_N^\dagger a_1^\dagger + \text{h.c.}) \\ & + h \sum_{j=1}^N (2a_j^\dagger a_j - 1). \end{aligned} \quad (3.78)$$

Let us introduce projection operators onto the sectors with the even and odd number of fermions (correspondingly  $+1$  and  $-1$  eigenvalues of the parity operator  $\mathcal{P}_F$ ):

$$\mathcal{P}_{e/o} = (1 \pm \mathcal{P}_F) / 2. \quad (3.79)$$

With the help of the projection operators we define the Hamiltonians in the sectors with the even and odd number of fermions

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{e/o} = \mathcal{P}_{e/o} \mathcal{H} \mathcal{P}_{e/o} = & -J \sum_{j=1}^{N-1} (a_j^\dagger a_{j+1} + a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger + \text{h.c.}) + h \sum_{j=1}^N (2a_j^\dagger a_j - 1) \\ & + p_{e/o} J(a_N^\dagger a_1 + a_N^\dagger a_1^\dagger + \text{h.c.}), \end{aligned} \quad (3.80)$$

where  $p_{e/o} = \pm 1$ . We note that for the even number of fermions,  $\mathcal{H}_e$  corresponds to the anti-periodic boundary conditions  $a_{N+1} = -a_1$ , whereas for the odd number of fermions,  $\mathcal{H}_o$  corresponds to the periodic boundary conditions  $a_{N+1} = a_1$ . Therefore, the operator  $\mathcal{P}_F$  plays an important role in the reformulation of the periodic boundary conditions (3.72) in terms of the fermionic operators.

As is mentioned above, the original Hamiltonian can be written in the block-diagonal form

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_e & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_o \end{pmatrix}. \quad (3.81)$$

We emphasize that, for each block, the boundary conditions are different.

### 3.4.3 The spectrum of Jordan-Wigner fermions

In order to diagonalize the Hamiltonian (3.81) we rewrite it in the momentum space. Let us start from the sector with odd number of fermions,  $\mathcal{H}_o$ , and periodic boundary conditions. Let us define the fermionic operators in the

momentum space as

$$\begin{aligned} a_p &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ipj} a_j, & a_j &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p e^{ipj} a_p, \\ a_p^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{ipj} a_j^\dagger, & a_j^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p e^{-ipj} a_p^\dagger. \end{aligned} \quad (3.82)$$

Here  $p = 2\pi n/N$  with  $n = -N/2 + 1, \dots, 0, \dots, N/2$  in order to preserve the periodic boundary condition:  $\exp(ipN) = 1$ . We assume that the number of sites  $N$  is even. Here we used the normalization condition  $(1/N) \sum_{j=1}^N \exp[i(p-p')j] = \delta_{p,p'}$ . Then we obtain

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_o &= \sum_{p \neq 0, \pi} \left[ 2(h - J \cos p) a_p^\dagger a_p - J(e^{ip} a_p^\dagger a_{-p}^\dagger + e^{-ip} a_{-p} a_p) \right] \\ &\quad + 2(h - J)n_0 + 2(h + J)n_\pi - hN. \end{aligned} \quad (3.83)$$

Here we have used that  $a_{-\pi} \equiv a_\pi$ . We note that, in the first line of Eq. (3.83) for each  $p > 0$ , there is a term with  $-p$  in the sum. Let us use this symmetry explicitly,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_o &= \sum_{0 < p < \pi} \begin{pmatrix} a_p^\dagger & a_{-p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2h - 2J \cos p & -2iJ \sin p \\ 2iJ \sin p & -2h + 2J \cos p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_p \\ a_{-p}^\dagger \end{pmatrix} \\ &\quad + \sum_{0 < p < \pi} 2(h - J \cos p) + 2(h - J)n_0 + 2(h + J)n_\pi - hN. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Now in order to diagonalize Hamiltonian  $\mathcal{H}_o$  we employ the Bogoliubov transformation for fermions with  $0 < p < \pi$ :

$$a_p^\dagger = \cos \theta_p \alpha_p^\dagger + i \sin \theta_p \alpha_{-p}, \quad a_{-p} = \cos \theta_{-p} \alpha_{-p} - i \sin \theta_{-p} \alpha_p^\dagger. \quad (3.85)$$

We note that it corresponds to the rotation of the matrix in Eq. (3.84). The corresponding matrix is referred to as the Bogoliubov-de Gennes Hamiltonian. We take the angle  $\theta_p$  to satisfy the following relation:

$$\begin{aligned} \cos 2\theta_p &= \frac{2h - 2J \cos p}{E_p}, & \sin 2\theta_p &= -\frac{2J \sin p}{E_p}, \\ E_p &= 2\sqrt{(h - J \cos p)^2 + J^2 \sin^2 p}, \end{aligned} \quad (3.86)$$

and we transform the Hamiltonian (3.84) as

$$\mathcal{H}_o = E_o + \sum_{\substack{-\pi < p < \pi \\ p \neq 0}} E_p \alpha_p^\dagger \alpha_p + 2(h - J)n_0 + 2(h + J)n_\pi. \quad (3.87)$$

Here as usual,  $E_p$  is the energy of excitations (see Fig. 3.4) while the constant term  $E_o$  may be interpreted as the ground state energy (see next subsection)

$$E_o = 2 \sum_{0 < p < \pi} \left[ h - J \cos p - \sqrt{(h - J \cos p)^2 + J^2 \sin^2 p} \right] - hN. \quad (3.88)$$

In the case of the even number of fermions the procedure of diagonalization of  $\mathcal{H}_e$  is similar. The antiperiodic boundary condition,  $a_{N+1} = -a_1$  implies  $\exp(ipN) = -1$ . To satisfy it, we put  $p = \pm(2n - 1)\pi/N$  with  $n = 1, \dots, N/2$ . We again assume  $N$  to be even. Then, we find

$$\mathcal{H}_e = E_e + \sum_{-\pi < p < \pi} E_p \alpha_p^\dagger \alpha_p. \quad (3.89)$$

Here the constant term  $E_e$  can be interpreted as the ground state energy

$$E_e = 2 \sum_{0 < p < \pi} \left[ h - J \cos p - \sqrt{(h - J \cos p)^2 + J^2 \sin^2 p} \right] - hN. \quad (3.90)$$

We emphasize that the excitation spectrum  $E_p$  has the gap equal to  $2|h - J|$  (see Fig. 3.4). However, at  $h = J$  the gap is closed and the spectrum becomes linear at small  $p$ . Usually, such behavior of the excitation spectrum suggests a phase transition.

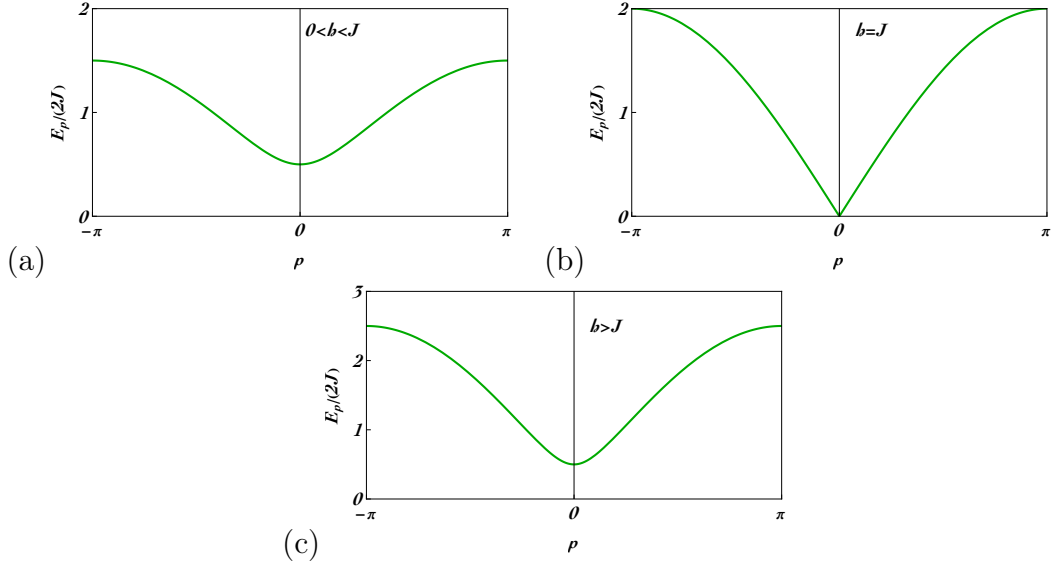
### 3.4.4 The phase diagram and topology

Let us start from the ground state of the system. In the sector with the even number of fermions the ground state is the vacuum in which the quasiparticles  $\alpha_p$  are absent,  $\alpha_p |\text{vac}\rangle = 0$ . Then the energy of the corresponding ground state is given as

$$\mathcal{E}_e^{(g)} = E_e = -2 \sum_{n=1}^{N/2} \sqrt{h^2 + J^2 - 2Jh \cos[(2n - 1)\pi/N]}, \quad (3.91)$$

where we use  $\sum_{n=1}^{N/2} \cos[(2n - 1)\pi/N] = 0$ . In the sector with the odd number of fermions the ground state is given as  $c_0^\dagger |\text{vac}\rangle$  (for  $h > 0$ ), i.e. the single fermion state at  $p = 0$  is occupied. The corresponding ground state energy reads

$$\mathcal{E}_o^{(g)} = E_e + 2(h - J) = -2J - 2 \sum_{n=1}^{N/2-1} \sqrt{h^2 + J^2 - 2Jh \cos[2n\pi/N]}, \quad (3.92)$$

Рис. 3.4: The quasiparticle spectrum  $E_p$  at the different values of ratio  $h/J$ .

where we used  $\sum_{n=1}^{N/2-1} \cos[2n\pi/N] = 0$ . In the limit  $N \rightarrow \infty$  we find the difference between two ground state energies (see Fig. 3.5(a))

$$\lim_{N \rightarrow \infty} [\mathcal{E}_o^{(g)} - \mathcal{E}_e^{(g)}] = \begin{cases} 0, & h \leq J, \\ 2(h - J), & h > J. \end{cases} \quad (3.93)$$

Therefore, there is a *quantum phase transition*, i.e. phase transition at  $T = 0$ , between the double degenerate ground state,  $\mathcal{E}_o^{(g)} = \mathcal{E}_e^{(g)}$ , for  $h < J$  and the ground state with the energy  $\mathcal{E}_e^{(g)} < \mathcal{E}_o^{(g)}$ .

The physics of these phases can be understood from the limiting cases of  $h = 0$  and  $h = \infty$ . At  $h = 0$  we have one dimensional Ising model with the ferromagnetic exchange. It has the ferromagnetic ground state with  $\langle \sigma_j^x \rangle = 1$  for all  $1 \leq j \leq N$  (or with  $\langle \sigma_j^x \rangle = -1$ ). At  $h = \infty$  we have the independent spins in the magnetic field. The ground state corresponds to  $\langle \sigma_j^z \rangle = 1$  for all  $1 \leq j \leq N$ . Consequently, at  $h = \infty$  the average spin projection along the  $x$  direction vanishes,  $\langle \sigma_j^x \rangle = 0$ . Therefore, we can expect that the magnetization along  $x$  direction,  $\langle \sigma_j^x \rangle$ , can serve as an order parameter for the quantum phase transition. Indeed, one can show that at  $N \rightarrow \infty$  and  $T = 0$  (see Fig. 3.5(b)):

$$\langle \sigma_j^x \rangle = \begin{cases} (1 - h^2/J^2)^{1/8}, & h \leq J, \\ 0, & h > J. \end{cases} \quad (3.94)$$

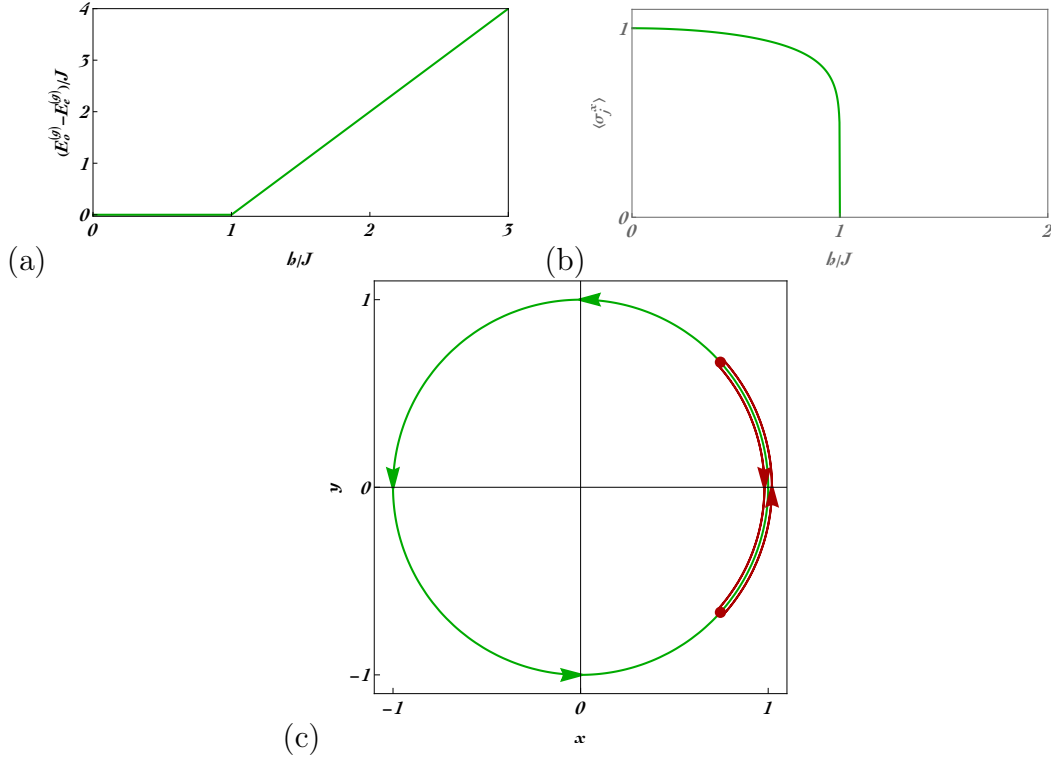


Рис. 3.5: (a) The dependence of difference  $\mathcal{E}_o^{(g)} - \mathcal{E}_e^{(g)}$  on the transverse magnetic field  $h$  for  $N = 2000$ . (b) Dependence of the magnetization per site along the  $x$  direction at  $N \rightarrow \infty$ . (c) Evolution of unit vector  $\{\cos 2\theta_p, \sin 2\theta_p\}$  with changing  $p$  from  $-\pi$  to  $\pi$  for  $h < J$  (green curve) and  $h > J$  (red curve). The arrows show the direction of evolutions.

We note the exponent  $1/8$  is not occasional. It reflects the fact that the quantum critical point at  $h = J$  describes the same critical theory as a critical point in the two-dimensional classical Ising model.

The difference between phases at  $h < J$  and  $h > J$  can be comprehended from the topological point of view. Let us consider the evolution of unit vector  $\{\cos 2\theta_p, \sin 2\theta_p\}$  while  $p$  changes from  $-\pi$  to  $\pi$  (see Fig. 3.5(c)). For  $h < J$ , the vector starts at the direction along the  $x$  axis,  $\{1, +0\}$ , for  $p = -\pi$ . Then it makes full counter clockwise rotation around the origin, becoming  $\{1, -0\}$  at  $p = \pi$ . Therefore, the unit vector makes the single winding around the origin,  $W = -1$ . The minus sign indicates that the winding is counterclockwise. For  $h > J$ , the vector starts at the direction along the  $x$  axis,  $\{1, +0\}$ , at  $p = -\pi$ . Then it rotates counterclockwise until  $p = -\arccos(J/h)$ . At that

point the vector changes the direction of its rotation and starts to rotate clockwise until  $p = \arccos(J/h)$ . Then again the vector changes the direction of its rotation and becomes to rotate counterclockwise arriving at  $\{1, -0\}$  for  $p = \pi$ . Therefore, on the whole, there is no winding of unit vector around the origin,  $W = 0$ .

The free energy can be written in the standard form

$$F = \mathcal{E}_e^{(g)} - 2T \sum_{0 < p < \pi} \ln(1 + e^{-\beta E_p}), \quad (3.95)$$

where we remind  $p = (2n - 1)\pi/N$  with  $n = 1, \dots, N/2$ . In particular, we obtain the average magnetization in the  $z$  direction per site

$$\begin{aligned} \langle \sigma_j^z \rangle &= -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} = \frac{4}{N} \sum_{0 < p < \pi} \frac{h - J \cos p}{E_p} \tanh \frac{E_p}{2T} \\ &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \int_0^\pi \frac{dp}{\pi} \frac{h - J \cos p}{\sqrt{h^2 + J^2 - 2hJ \cos p}} \tanh \frac{\sqrt{h^2 + J^2 - 2hJ \cos p}}{T}. \end{aligned} \quad (3.96)$$

At  $T = 0$  the integral over  $p$  can be evaluated in the terms of the elliptic integrals

$$\langle \sigma_j^z \rangle = \frac{h - J}{\pi h} K \left( \frac{4hJ}{(h + J)^2} \right) + \frac{h + J}{\pi h} E \left( \frac{4hJ}{(h + J)^2} \right), \quad (3.97)$$

where  $K(m) = \int_0^{\pi/2} d\phi / \sqrt{1 - m \sin^2 \phi}$  and  $E(m) = \int_0^{\pi/2} d\phi \sqrt{1 - m \sin^2 \phi}$ . The behavior of  $\langle \sigma_j^z \rangle$  as a function of  $h$  is shown in Fig. 3.6. We emphasize that  $\langle \sigma_j^z \rangle$  is nonzero for all  $h > 0$  and tends to unity as  $h \rightarrow \infty$ . There is a cusp at  $h = J$  for  $T = 0$ , indicating the quantum phase transition. At  $T > 0$  the cusp in  $\langle \sigma_j^z \rangle$  disappears. It indicates the absence of the phase transition at  $T > 0$ .

Finally, we note that the one-dimensional Ising model in the transverse field describes magnetic properties of  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$ .

*Задача на семинар 35:* Derive Eq. (3.93).

*Задача на семинар 36:* Derive Eq. (3.94).

*Упражнение 65:* Check that representation (3.73) results in the proper commutation relations for the spin operators,  $[\sigma_j^a, \sigma_k^b] = 2i\epsilon_{abc}\delta_{jk}\sigma_j^c$ .



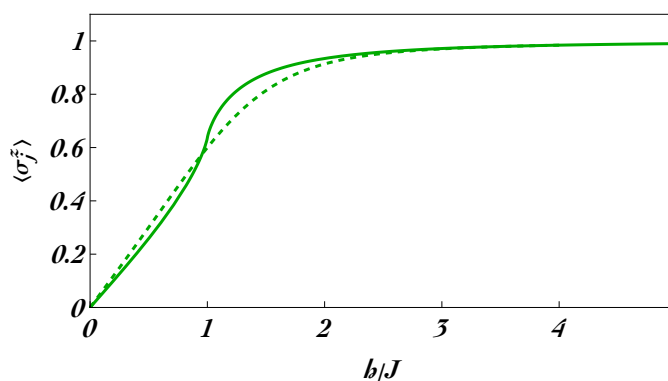


Рис. 3.6: The dependence of  $\langle \sigma_j^z \rangle$  on  $h$  at different temperatures. The solid curve is for  $T = 0$ . The dashed curve is for  $J = 0.7T$ .

Упражнение 66: Compute  $\mathcal{E}_o^{(g)} - \mathcal{E}_e^{(g)}$  at the critical point  $h = J$  for  $N \gg 1$ .

Упражнение 67: Compute the specific heat at  $T \ll |h - J| \ll h$ .

Упражнение 68: Compute the specific heat at  $h = J$ .

## 3.5 The Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition

### Introduction

In this lecture we discuss the classical XY model in two dimensions. This classical model has the phase transition known as the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition. The importance of this transition is that it is beyond the Landau paradigm of phase transitions. More details on the subject of this lecture can be found in the original works by Berezinskii [14, 15] and in a recent review by Kosterlitz [19].

#### 3.5.1 Transitions beyond the Landau paradigm

As is discussed in the previous lectures, the paradigm of the Landau expansion assumes an existence of the order parameter in the phase of lower symmetry (at  $T < T_c$ ). In particular, this implies the following relations for the correlation function of the order parameter field:

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \langle \varphi(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}') \rangle \sim \begin{cases} \exp(-|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|/\xi), & T > T_c \\ \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle^2, & T < T_c. \end{cases} \quad (3.98)$$

The presence of nonzero  $\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle$  at  $T < T_c$  breaks the corresponding symmetry down, e.g.  $SU(2)$  symmetry in the case of the paramagnet-to-ferromagnet transition. However, this is not the only possible scenario. The alternative paradigm reads

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \langle \varphi(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}') \rangle \sim \begin{cases} \exp(-|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|/\xi), & T > T_{\text{BKT}}, \\ |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-\eta}, & T < T_{\text{BKT}}, \end{cases} \quad (3.99)$$

without changing the symmetry. Although  $\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle$  vanishes above and below  $T_{\text{BKT}}$ , i.e., the long-range order is absent, the phases are different due to various behavior of the correlation functions. The corresponding transition is referred to as the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition.

#### 3.5.2 Classical 2D XY model

Let us consider classical 2D XY model described by the Hamiltonian

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle jk \rangle} (1 - \mathbf{n}_j \mathbf{n}_k) \quad (3.100)$$

where  $\mathbf{n}_j$  is the unit 2D vector associated with the site  $j$  at the 2D square lattice. The symbol  $\langle jk \rangle$  denotes summation over all neighboring sites. It is convenient to parameterize the unit vector as  $\mathbf{n} = \{\cos \theta, \sin \theta\}$ . Then the Hamiltonian reads

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle jk \rangle} [1 - \cos(\theta_j - \theta_k)]. \quad (3.101)$$

The correlation function which behavior reveals the BKT transition can be chosen as follows

$$\langle \cos(\theta_j - \theta_k) \rangle = \left( \prod_l \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_l}{2\pi} \right) \cos(\theta_j - \theta_k) e^{-\beta \mathcal{H}} / \left( \prod_l \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_l}{2\pi} \right) e^{-\beta \mathcal{H}}. \quad (3.102)$$

From the above definition we see directly that there is a single parameter governing the physics of the model, namely,  $J/T$ . At high temperatures the correlation function (3.102) can be computed perturbatively, by expanding  $\exp(-\beta \mathcal{H})$  in a series in powers  $J/T$ . Since  $\int_0^{2\pi} d\theta_l \exp(i\theta_l) = 0$ , one should first find the minimal power  $n$  such that the term  $(\beta \mathcal{H})^n$  contains the angles  $\theta_j$  and  $\theta_k$  one time, as well as the minimal number of angles on the sites belonging to the path connecting the sites  $j$  and  $k$  (see Fig. 3.7). Then in the continuous limit we find the following result for  $T \gg J$

$$\langle \cos(\theta_j - \theta_k) \rangle \sim e^{-|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|/\xi}, \quad \xi = \frac{a}{\ln(2T/J)}, \quad (3.103)$$

where  $a$  is the lattice constant.

In the opposite case of low temperatures,  $T \ll J$ , we can assume that directions of unit vectors  $\mathbf{n}_j$  on the neighboring sites are close to each other (similar to the case of the ferromagnetic state). Then, we can expand the difference  $\theta_j - \theta_k$  to lowest order in the lattice constant and find the following continuous version of the Hamiltonian (3.101):

$$\mathcal{H} = (J/2) \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \theta)^2. \quad (3.104)$$

The correlation function (3.102) can be written as

$$\begin{aligned} \langle \cos(\theta_j - \theta_k) \rangle &= \frac{1}{Z} \int D[\theta] e^{i\theta(\mathbf{r}_j) - i\theta(\mathbf{r}_k)} e^{-(\beta J/2) \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \theta)^2}, \\ Z &= \int D[\theta] e^{-(\beta J/2) \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \theta)^2}. \end{aligned} \quad (3.105)$$

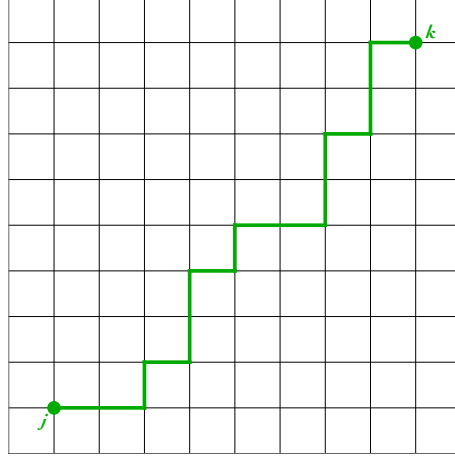


Рис. 3.7: Example of the shortest path between sites  $j$  and  $k$  on the square lattice.

In order to find the correlation function, it is convenient to introduce the Fourier transform  $\theta_{\mathbf{q}} = \int d^2\mathbf{r} \theta(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})$  and rewrite the exponent in the right hand side of the above equation as

$$-\frac{\beta J}{2} \int d^2\mathbf{r} (\nabla\theta)^2 + i\theta(\mathbf{r}_j) - i\theta(\mathbf{r}_k) = -\frac{\beta J}{2} \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} q^2 (\theta_{\mathbf{q}} + \gamma_{\mathbf{q}})(\theta_{-\mathbf{q}} + \gamma_{-\mathbf{q}}) + \frac{\beta J}{2} \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} q^2 \gamma_{\mathbf{q}} \gamma_{-\mathbf{q}}, \quad (3.106)$$

where  $\gamma_{\mathbf{q}} = (e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_k} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j})/(i\beta J q^2)$ . Introducing new variable  $\tilde{\theta}_{\mathbf{q}} = \theta_{\mathbf{q}} + \gamma_{\mathbf{q}}$ , we find

$$\langle \cos(\theta_j - \theta_k) \rangle = \exp \left( -\frac{T}{2J} \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{|1 - e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)}|^2}{q^2} \right) \times \frac{1}{Z} \int D[\tilde{\theta}] e^{-(\beta J/2) \int d^2\mathbf{r} (\nabla\tilde{\theta})^2} \quad (3.107)$$

The factors in the second line of the above equation cancel each other, and after integration over  $\mathbf{q}$  we obtain for  $T \ll J$ :

$$\langle \cos(\theta_j - \theta_k) \rangle \sim |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|^{-T/(2\pi J)}. \quad (3.108)$$

The different asymptotic behavior of the correlation function,  $\langle \cos(\theta_j - \theta_k) \rangle$ , at low and high temperatures suggests an existence of the transition at  $T \sim J$ .

### 3.5.3 The Villain model on the dual lattice

In the low temperature analysis above we have ignored the  $2\pi$ -periodicity of the Hamiltonian with substituting angle  $\theta_j$  with  $\theta_j + 2\pi$ . As we will see below, this periodicity is crucial for an accurate description of the BKT transition.

Let us introduce the function  $\tilde{V}(s)$  defined as follows

$$e^{-\beta J(1-\cos\theta)} = \sum_{s=-\infty}^{\infty} e^{is\theta + \tilde{V}(s)}, \quad e^{\tilde{V}(s)} = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-\beta J(1-\cos\theta) - is\theta} = e^{-\beta J} I_s(\beta J) \quad (3.109)$$

where  $I_s(z)$  denotes the modified Bessel function. Introducing variable  $s$  for each link of a square lattice and using the Fourier representation (3.109), we can integrate over angles  $\theta_l$ , cf. Eq. (3.102), in the partition function. Such integration for a given site  $l$  induces the constraint  $s_x + s_y = s_{-x} + s_{-y}$ , see Fig. 3.8. From physical point of view an existence of such constraints is related with the following. The number of initial variables (angles) equals the number of sites  $M$ . The number of variables  $s$  is the same as the number of links, i.e., it equals  $2M$ . The  $M$  constraints conserve the number of degrees of freedom in new representation. In order to resolve this constraint, it is useful to introduce new set of integers associated with the center of each square  $\{\tilde{s}\}$ . They are related with the initial ones as follows (see Fig. 3.8),  $s_x = \tilde{s}_A - \tilde{s}_B$ ,  $s_y = \tilde{s}_D - \tilde{s}_A$ ,  $s_{-x} = \tilde{s}_D - \tilde{s}_C$ , and  $s_{-y} = \tilde{s}_C - \tilde{s}_B$ . We note that the center of squares composes the *dual lattice* with respect to the original one. Finally, the partition function on the dual lattice can be written as

$$Z = \sum_{\{\tilde{s}_l\}} \exp \left[ \sum_{\langle ll' \rangle} \tilde{V}(\tilde{s}_l - \tilde{s}_{l'}) \right]. \quad (3.110)$$

Using the Poisson resummation formula

$$\sum_{s=-\infty}^{\infty} g(s) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\phi \, g(\phi) e^{2\pi i m \phi}, \quad (3.111)$$

we express the partition function as

$$Z = \sum_{\{m_l\}} \prod_l \left( \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_l \right) \exp \left[ \sum_{\langle ll' \rangle} \tilde{V}(\phi_l - \phi_{l'}) + 2\pi i \sum_l m_l \phi_l \right]. \quad (3.112)$$

Here  $\phi_l$  is a variable that corresponds to  $s_l$  in the Poisson formula (3.111).

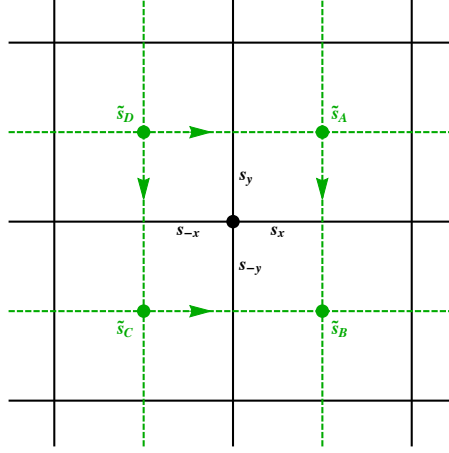


Рис. 3.8: Sketch of the original square lattice with variables  $s_x, s_y$  associated with links and of the dual lattice with variables  $\tilde{s}_{A,B,C,D}$  associated with its sites.

Using the asymptotic expression of  $\tilde{V}(\phi)$  at low temperatures  $T \ll J$ ,

$$\exp[\tilde{V}(\phi)] \approx \exp[-\phi^2/(2\beta J)]/\sqrt{2\pi\beta J}, \quad (3.113)$$

we have obtained the partition function of the so-called the *Villain model* on the dual lattice:

$$Z = \sum_{\{m_l\}} \prod_l \left( \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{\theta}_l \right) \exp \left[ -\frac{\beta J}{2} \sum_{\langle l, l' \rangle} (\tilde{\theta}_l - \tilde{\theta}_{l'})^2 + 2\pi i \beta J \sum_l m_l \tilde{\theta}_l \right]. \quad (3.114)$$

Here we have introduced  $\tilde{\theta}_l = \phi_l/(\beta J)$  and omitted the insignificant constant factor.

### 3.5.4 The renormalization group analysis

Let us now consider the partition function of the so-called generalized Villain model:

$$Z = \sum_{\{m_l\}} \prod_l \left( \int_{-\infty}^{\infty} d\theta_l y^{m_l^2} e^{2\pi i \beta J \theta_l m_l} \right) \exp \left[ -\frac{\beta J}{2} \sum_{\langle l, l' \rangle} (\theta_l - \theta_{l'})^2 \right]. \quad (3.115)$$

Here we have omitted the tilde sign in  $\theta_l$  and introduced the so-called *fugacity*  $y$ . The fugacity appears due to logarithmic interaction between the integer numbers  $m_l$  that represent vortices. This logarithmic interaction is ill-defined at small scales of the order of the lattice spacing. Therefore, it is necessary to introduce the term with the fugacity including the information about microscopics of the model. One can estimate the magnitude of the fugacity as  $\ln y \sim -\beta J$ .

In what follows, we assume that fugacity is small,  $y \ll 1$ . Then, summing over integers  $m_l$ , we arrive at

$$Z = \prod_l \left( \int_{-\infty}^{\infty} d\theta_l \vartheta_3(\pi\beta J\theta_l, y) \right) \exp \left[ -\frac{\beta J}{2} \sum_{\langle l l' \rangle} (\theta_l - \theta_{l'})^2 \right] \quad (3.116)$$

where  $\vartheta_3(u, y)$  denotes the elliptic theta-function. Using the asymptotic result  $\ln \vartheta_3(u, y) = 2y \cos(2u)$  at  $y \rightarrow 0$ , we obtain the following partition function in the continuum limit (lattice spacing  $a \rightarrow 0$ ):

$$Z = \int D[\theta] \exp(-\beta \mathcal{H}_{\text{eff}}[\theta]) \quad (3.117)$$

where

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \frac{J}{2} \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \theta)^2 - 2\tilde{y} \int d^2 \mathbf{r} \cos[2\pi\beta J\theta] \quad (3.118)$$

and  $\tilde{y} = y/a^2$ . Comparing this equation with Eq. (3.105), one can see that the presence of vortices results in appearing an additional term in the effective Hamiltonian. Since  $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\theta]$  is non-linear in  $\theta$ , we can apply the renormalization group method to analyze it. Under assumption of  $y \ll 1$ , one can derive the following renormalization group equations:

$$\frac{d\bar{y}}{dl} = -\bar{y}x, \quad \frac{dx}{dl} = -\bar{y}^2. \quad (3.119)$$

Here we introduce  $x = \pi\beta J - 2$  and  $\bar{y} = 16\sqrt{2}y/(a\Lambda)$  where  $\Lambda \sim 1/a$  denotes the ultra-violet cutoff. These renormalization group equations are valid at  $|x| \ll 1$  and  $\bar{y} \ll 1$  and demonstrate an interesting behavior.

At  $x > 0$  there is a line of fixed points  $\bar{y} = 0$  (since  $\bar{y} > 0$  by definition) stable in the infra-red. At  $x < 0$  there is a line of fixed points  $\bar{y} = 0$  unstable in the infra-red. The fixed point  $(x = 0, \bar{y} = 0)$  separates lines of stable and unstable fixed points. There are two separatrices  $x = \pm\bar{y}$ . The renormalization group flow is shown in Fig. 3.9. Since large  $x$  corresponds to low temperatures, the line of stable fixed points corresponds to the low temperature phase of the 2D XY model. The existence of the line of fixed

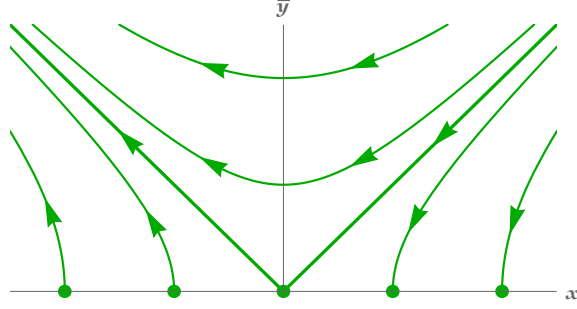


Рис. 3.9: Renormalization group flow corresponding to Eqs. (3.119). Arrows indicate flow towards infrared.

points explains the power law behavior of the correlation functions typical for the fixed points. The transition temperature is determined by the position of separatrix  $x = y$  or in terms of the temperature:  $T_{BKT} = (2 + \bar{y}_0)J/\pi$ , where  $\bar{y}_0$  is the initial magnitude of the fugacity. The appearance of the correction due to fugacity corresponds physically to the interaction of the spin waves.

For  $T > T_{BKT}$  and  $y > x$ , the fugacity finally flows in the direction of large magnitudes. The condition  $\bar{y}(l \sim \ln \xi) \sim 1$  determines the correlation length. The solution of Eqs. (3.119) leads to very unusual behavior of the correlation length:  $\ln \xi \sim \sqrt{T_{BKT}/(T - T_{BKT})}$ .

*Задача на семинар 37:* Derive Eq. (3.103).

*Задача на семинар 38:* Integrate over  $\tilde{\theta}$  and demonstrate that the integer numbers  $m_l$  satisfy the constraint  $\sum_l m_l = 0$ . In addition, demonstrate the logarithmic interaction between the integer numbers  $m_l$ .

*Задача на семинар 39:* Derive the renormalization group equations for the BKT transition, cf. Eqs. (3.119).

*Упражнение 69:* Compute the correlation function  $\langle \cos^3(\theta_j - \theta_k) \rangle$  within exponential accuracy at  $T \gg J$ .



*Упражнение 70:* Compute the integral

$$\int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{|1 - \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R})|^2}{q^2}.$$

*Упражнение 71:* Find the correlation function  $\langle \cos(3(\theta_j - \theta_k)) \rangle$  at low temperatures  $T \ll J$ .

*Упражнение 72:* Estimate the fugacity  $\ln y \sim -\beta J$  from the logarithmic interaction between vortices.

*Упражнение 73:* Find the temperature behavior of correlation length for  $T - T_{BKT} \ll T_{BKT}$ .



## Глава 4

# Statistical mechanics of open systems

### Introduction

In this chapter we discuss how to probe the system in equilibrium and describe the system coupled to thermal reservoir or thermostat. We will demonstrate that the response of the system in equilibrium to external weak perturbation is determined by the equilibrium properties.

## 4.1 Fluctuation-dissipation theorem and the Kubo formula

### Introduction

In this lecture we discuss the powerful tool used to describe the linear response of the equilibrium systems to an external perturbation. Surprisingly, such a linear response is intimately related with thermodynamic fluctuations.

#### 4.1.1 The generalized susceptibility

Let us consider time-dependent perturbation  $\mathcal{V} = -\mathcal{X}f(t)$ . Here  $f(t)$  is some given classical time-dependent force and  $\mathcal{X}$  denotes a certain (many-body) operator. The total Hamiltonian becomes  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$ . Then the quantum mechanical and thermal average of  $\mathcal{X}(t)$  are determined as follows

$$\langle \mathcal{X}(t) \rangle = \text{Tr} [U^{-1}(t) \mathcal{X} U(t) e^{-\beta \mathcal{H}_0}] / \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_0}, \quad (4.1)$$

the evolution operator being

$$U(t) = \mathcal{T} \exp \left[ -i \int_{-\infty}^t dt' \mathcal{H}(t') \right]. \quad (4.2)$$

We note that the operator  $\mathcal{X}$  couples directly to the external classical force  $f$ . This implies that the operator should obey the bosonic commutation relations. As an example, the force can be an external electric field coupling the product of creation and annihilation fermionic operators.

For simplicity, we assume that the average  $\langle \mathcal{X}(t) \rangle$  vanishes,  $\langle \mathcal{X}(t) \rangle_{f=0} = 0$ , in the absence of perturbation,  $f = 0$ . Then in the limit of  $f \rightarrow 0$ , i.e., in the *linear response* regime, the average  $\langle \mathcal{X}(t) \rangle$  should be proportional to  $f$ :

$$\langle \mathcal{X}(t) \rangle = \int_{-\infty}^t d\tau f(\tau) \alpha_{\mathcal{X}}(t - \tau). \quad (4.3)$$

The function  $\alpha_{\mathcal{X}}(t)$  is termed as the *generalized susceptibility*.

Let us consider the harmonic force  $f(t) = (f_{\omega} e^{-i\omega t} + f_{-\omega} e^{i\omega t})/2$  with  $f_{-\omega} = f_{\omega}^*$  to ensure that  $f(t)$  is a real function. Then we find

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{X}(t) \rangle &= \frac{1}{2} \langle \mathcal{X}(t) \rangle_{\omega} e^{-i\omega t} + \frac{1}{2} \langle \mathcal{X}(t) \rangle_{-\omega} e^{i\omega t}, \\ \langle \mathcal{X}(t) \rangle_{\omega} &= \alpha_{\mathcal{X}}(\omega) f_{\omega}, \quad \alpha_{\mathcal{X}}(\omega) = \int_0^{\infty} dt \alpha_{\mathcal{X}}(t) e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

The imaginary part of the generalized susceptibility determines the energy dissipation rate averaged in time

$$Q = \frac{dE}{dt} = \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} \right\rangle = -\overline{\langle \mathcal{X}(t) \rangle \frac{df}{dt}} = \frac{\omega}{2} \text{Im} \alpha_{\mathcal{X}}(\omega) |f_\omega|^2. \quad (4.5)$$

Here we used the following definition of the energy  $E(t) = \text{Tr}[\rho(t)\mathcal{H}(t)]$ . The condition  $Q > 0$  implies that  $\text{Im} \alpha_{\mathcal{X}}(\omega) \propto \text{sgn} \omega$ .

### 4.1.2 The fluctuation dissipation theorem

Let us compute the energy dissipation rate  $Q$  within the framework of quantum mechanics. The Hamiltonian  $\mathcal{H}_0$  has eigen energies  $E_a$  and eigenstates  $|a\rangle$ . The time-dependent perturbation results in the transitions between the unperturbed states. The transition probability from a state  $|a\rangle$  to a state  $|b\rangle$  is given by the Fermi golden rule as

$$w_{a \rightarrow b} = \frac{\pi |f_\omega|^2}{2} |\langle a | \mathcal{X} | b \rangle|^2 \left[ \delta(\omega + E_b - E_a) + \delta(\omega + E_a - E_b) \right]. \quad (4.6)$$

Then energy dissipation rate  $Q$  becomes

$$Q = \sum_{ab} \rho_a w_{a \rightarrow b} (E_b - E_a) = \frac{\pi \omega |f_\omega|^2}{2} \sum_{ab} |\langle a | \mathcal{X} | b \rangle|^2 \delta(\omega + E_a - E_b) \times [\rho_b - \rho_a] \quad (4.7)$$

where  $\rho_a = \exp(-\beta E_a)/Z$  is the density matrix in the energy representation. Comparing Eqs. (4.5) and (4.7), we find the following result for the imaginary part of the generalized susceptibility:

$$\text{Im} \alpha_{\mathcal{X}}(\omega) = \pi (1 - e^{-\beta \omega}) \sum_{ab} \rho_a |\langle a | \mathcal{X} | b \rangle|^2 \delta(\omega + E_a - E_b). \quad (4.8)$$

Let us turn now to variance for  $\mathcal{X}$  which is a different quantity on the first sight:

$$\langle \mathcal{X}^2 \rangle = \text{Tr} \rho \mathcal{X}^2 = \sum_a \rho_a \langle a | \mathcal{X}^2 | a \rangle = \sum_{ab} \rho_a |\langle a | \mathcal{X} | b \rangle|^2. \quad (4.9)$$

It is convenient to rewrite  $\langle \mathcal{X}^2 \rangle$  formally as follows

$$\langle \mathcal{X}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \langle \mathcal{X}^2 \rangle_\omega \quad (4.10)$$

where

$$\langle \mathcal{X}^2 \rangle_\omega = \pi (1 + e^{-\beta\omega}) \sum_{ab} \rho_a |\langle a | \mathcal{X} | b \rangle|^2 \delta(\omega + E_a - E_b). \quad (4.11)$$

Comparing Eqs. (4.11) and (4.8), we obtain the fluctuation dissipation theorem derived originally by H. Callen and T. Welton [20] ,

$$\langle \mathcal{X}^2 \rangle_\omega = \text{Im } \alpha_{\mathcal{X}}(\omega) \coth \frac{\omega}{2T}, \quad \langle \mathcal{X}^2 \rangle = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \text{Im } \alpha_{\mathcal{X}}(\omega) \coth \frac{\omega}{2T}. \quad (4.12)$$

In conclusion, we draw attention to this remarkable relation connecting the fluctuations in the thermally equilibrium system with the linear response to some time-dependent perturbation and, as a consequence, to energy dissipation.

### 4.1.3 The Kramers-Kronig relations

Let us consider the generalized susceptibility  $\alpha_{\mathcal{X}}(\omega)$  as a function of the frequency  $\omega$  in the complex plane,  $\omega = \omega' + i\omega''$ . Since  $\alpha_{\mathcal{X}}(t)$  is finite, the generalized susceptibility  $\alpha_{\mathcal{X}}(\omega)$  is also finite for  $\omega'' > 0$ . This implies that  $\alpha_{\mathcal{X}}(\omega)$  is analytic function in the upper half-plane of  $\omega$ , i.e., it has no poles. Such functions in physics are referred as *retarded* functions. Taking Eq. (4.8) into account, we can construct the expression for the retarded function  $\alpha_{\mathcal{X}}(\omega)$  in the following form:

$$\alpha_{\mathcal{X}}(\omega) = \sum_{ab} (\rho_b - \rho_a) \frac{|\langle a | \mathcal{X} | b \rangle|^2}{\omega + E_a - E_b + i0}. \quad (4.13)$$

Here we have used the relation  $(x + i0)^{-1} = \text{p.v. } x^{-1} - \pi\delta(x)$ , where p.v. denotes the Cauchy principal value.

Using Eq. (4.8), we find the following relation

$$\text{p.v.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{\pi} \frac{\text{Im } \alpha_{\mathcal{X}}(\Omega)}{\Omega - \omega} = \text{Re } \alpha_{\mathcal{X}}(\omega). \quad (4.14)$$

Similarly, we obtain with the help of Eq. (4.13),

$$\text{p.v.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{\pi} \frac{\text{Re } \alpha_{\mathcal{X}}(\Omega)}{\Omega - \omega} = -\text{Im } \alpha_{\mathcal{X}}(\omega). \quad (4.15)$$

The relations (4.14) and (4.15) are known as the *Kramers-Kronig relations*. In mathematics they are known as the Sokhotski–Plemelj theorem and Hilbert transform.

We note that, using Eq. (4.14), we can reproduce the result (1.33) from the fluctuation-dissipation relation. Provided that the characteristic frequencies in the generalized susceptibility are much smaller than the temperature, we find

$$\langle \mathcal{X}^2 \rangle \approx 2T \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{\text{Im } \alpha_{\mathcal{X}}(\omega)}{\omega} = T \text{Re } \alpha_{\mathcal{X}}(0). \quad (4.16)$$

#### 4.1.4 The Kubo formula

Let us consider the two-time correlation function

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{X}(t) \mathcal{X}(t') \rangle &= \text{Tr} \left[ \rho e^{-i\mathcal{H}_0 t} \mathcal{X} e^{i\mathcal{H}_0(t-t')} \mathcal{X} e^{i\mathcal{H}_0 t'} \right] \\ &= \sum_{ab} \rho_a |\langle a | \mathcal{X} | b \rangle|^2 e^{i(E_b - E_a)(t-t')}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Then one can check that

$$\alpha_{\mathcal{X}}(\omega) = \alpha_{\mathcal{X}}^R(\omega) = i \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i0)t} \text{Tr} \left( [\mathcal{X}(t), \mathcal{X}(0)] \rho \right). \quad (4.18)$$

This relation is referred to as the *Kubo formula*. It is a practical tool of calculating the generalized susceptibilities.

In the similar way one can check that the following relation holds for

$$\langle \mathcal{X}^2 \rangle_\omega = \frac{1}{2i} \alpha_{\mathcal{X}}^K(\omega), \quad \alpha_{\mathcal{X}}^K(\omega) = i \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \text{Tr} \left( \{ \mathcal{X}(t), \mathcal{X}(0) \} \rho \right). \quad (4.19)$$

The function  $\alpha_{\mathcal{X}}^K(\omega)$  is termed as the *Keldysh function*. The fluctuation dissipation theorem relates the Keldysh and retarded response functions as

$$\alpha_{\mathcal{X}}^K(\omega) = 2i \text{Im } \alpha_{\mathcal{X}}^R(\omega) \coth \frac{\omega}{2T}. \quad (4.20)$$

We note that there is analogous expression for the operators obeying the fermionic anti-commutation relations.

*Задача на семинар 40:* Consider the Hamiltonian  $H = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha}$  where  $b_{\alpha}^{\dagger}$  and  $b_{\alpha}$  are the creation and annihilation bosonic operators. Find  $i \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i0)t} \text{Tr}([b_{\alpha}(t), b_{\alpha}^{\dagger}] \rho)$  and  $i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \text{Tr}(\{b_{\alpha}(t), b_{\alpha}^{\dagger}\} \rho)$ .

*Задача на семинар 41:* Discuss the fluctuation-dissipation relation for the case of spatially dependent force.

*Упражнение 74:* Prove the relation

$$\alpha(i\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{\pi} \frac{\text{Im } \alpha_{\mathcal{X}}(\Omega)}{\Omega - i\omega}.$$

*Упражнение 75:* Let us define the correlation function  $R_{\mathcal{X}}(\omega) = \int dt \langle \mathcal{X}(t) \mathcal{X}(0) \rangle e^{i\omega t}$ . Demonstrate that it satisfies the detailed balance condition:  $R_{\mathcal{X}}(-\omega) = e^{-\beta\omega} R_{\mathcal{X}}(\omega)$ .

*Упражнение 76:* To derive expression (4.18) by solving the equation for the density matrix to first order in perturbation  $V = -\mathcal{X} f(t)$ .

*Упражнение 77:* The Hamiltonian is affected by the force  $f(t) = ut$ . Determine the time dependence of  $\langle [\mathcal{H}(t) - \mathcal{H}(0)]^2 \rangle$ . Express the result in terms of the generalized susceptibility  $\alpha_{\mathcal{X}}$ .



## 4.2 The Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad equation

### Introduction

In this lecture we will derive the equation governing the dynamics of quantum system coupled to the thermal reservoir. We will present such a derivation for a concrete quantum system.

#### 4.2.1 Helical 1D electrons coupled to a magnetic impurity

For definiteness, we consider magnetic impurity of spin  $S$  coupled by an exchange interaction to helical 1D electrons. This system is described by the following Hamiltonian

$$H = H_e + H_i + H_{e-i}. \quad (4.21)$$

Here

$$H_e = iv \int dy \Psi^\dagger(y) \sigma_z \partial_y \Psi(y) \quad (4.22)$$

is the Hamiltonian for helical 1D electrons moving along the  $y$  axis at velocity  $v$ . Here  $\Psi(y) = \{\Psi_\uparrow(y), \Psi_\downarrow(y)\}$  and  $\Psi^\dagger(y) = \{\Psi_\uparrow^\dagger(y), \Psi_\downarrow^\dagger(y)\}$  denote the spinor annihilation and creation operators of a helical electron at point  $y$ . They satisfy the following commutation relation

$$\Psi_\sigma(y) \Psi_{\sigma'}^\dagger(y') + \Psi_{\sigma'}^\dagger(y') \Psi_\sigma(y) = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(y - y'). \quad (4.23)$$

The Hamiltonian  $H_{e-i}$  describes the exchange interaction between spin  $S$  at the point  $y_0$  and helical electrons,

$$H_{e-i} = \frac{\mathcal{J}_{jk}}{\nu} S_j : s_k :, \quad s_k = \frac{1}{2} \Psi^\dagger(y_0) \sigma_k \Psi(y_0), \quad : s_k := s_k - \langle s_k \rangle, \quad (4.24)$$

where  $\langle s_k \rangle$  is the average value of the spin density of helical electrons and  $\nu = 1/(2\pi v)$  stands for the density of states. Finally, the Hamiltonian  $H_i$  describes the dynamics of an isolated spin. In the simplest case it is given as

$$H_i = h_j S_j, \quad h_j = \mathcal{J}_{jk} \langle s_k \rangle / \nu. \quad (4.25)$$

#### 4.2.2 Perturbation theory for the reduced density matrix

The density matrix  $\rho$  of the total system is described by the *Liouville equation* with the Hamiltonian  $H$ , i.e.,  $d\rho(t)/dt = -i[H, \rho(t)]$ . Our aim is to derive

the equation governing the time dynamics for the reduced density matrix of magnetic impurity. The latter is formally defined as  $\rho_S = \text{Tr}_e \rho$ , where  $\text{Tr}_e$  denotes the trace over the electronic degrees of freedom. In order to derive the equation for  $\rho_S(t)$ , we employ second-order perturbation theory in the exchange interaction  $\mathcal{J}_{ij} \ll 1$ . At first, we change the representation to the interaction one,  $\rho(t) = U^{-1}(t)\rho_I(t)U(t)$ , where

$$U(t) = U_i(t)U_e(t) = U_e(t)U_i(t), \quad U_e(t) = e^{-iH_e t}, \quad U_i(t) = e^{-iH_i t}. \quad (4.26)$$

The density matrix  $\rho_I(t)$  satisfies the following equation

$$\frac{d\rho_I(t)}{dt} = -i[\mathcal{V}_I(t), \rho_I(t)], \quad \mathcal{V}_I(t) = U^{-1}(t)H_{e-i}U(t). \quad (4.27)$$

In order to make the perturbative treatment possible, we formally solve the evolution equation (4.27) and substitute the result back into (4.27):

$$\frac{d\rho_I}{dt} = -i[\mathcal{V}_I(t), \rho_I(-\infty)] + \int_{-\infty}^t dt' [\mathcal{V}_I(t), [\rho_I(t'), \mathcal{V}_I(t')]]. \quad (4.28)$$

Tracing out electrons, we obtain

$$\frac{d\rho_{S,I}(t)}{dt} = -i\text{Tr}_e [\mathcal{V}_I(t), \rho_I(-\infty)] + \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr}_e \left( [\mathcal{V}_I(t), [\rho_I(t'), \mathcal{V}_I(t')]] \right) \quad (4.29)$$

where  $\rho_{S,I}(t)$  is the reduced density matrix in the interacting representation,  $\rho_{S,I}(t) = U_i(t)\rho_S(t)U_i^{-1}(t)$ . We assume that the electron-impurity interaction is switched on adiabatically, so that the distribution of the edge electrons is unperturbed at  $t = -\infty$ . Therefore,  $\text{Tr}_e [\mathcal{V}_I(t), \rho_I(-\infty)] = 0$ , as  $\mathcal{V}_I$  contains the electron operators with zero average alone. Moreover, in the weak coupling regime,  $\mathcal{J}_{ij} \ll 1$ , it is possible to write approximately  $\rho_I(t) \approx \rho_{S,I} \otimes \rho_e^{(0)}$  on the right-hand side of the master equation. Here  $\rho_e^{(0)} \propto \exp[-\beta H_e - (e\beta V/2) \int dy \Psi^\dagger(y) \sigma_z \Psi(y)]$  denotes the initial density matrix for helical 1D electrons with bias voltage  $V$  applied. We note that matrix  $\rho_e^{(0)}$  is the Gibbs distribution with the chemical potential  $\pm eV/2$  for the spin-up/down electrons. Finally, substituting the explicit form of the perturbation  $\mathcal{V}_I$ , we find

$$\frac{d\rho_{S,I}}{dt} = \mathcal{J}_{rj}\mathcal{J}_{lk} \int_{-\infty}^t dt' \left( \chi_{jk}(t-t') [S_r^I(t')\rho_{S,I}(t'), S_l^I(t)] + \text{h.c.} \right)$$

where  $s_k^I(y_0, \tau) = U_e^{-1}(\tau) s_k(y_0) U_e(\tau)$ ,  $S_l^I(t) = U_i^{-1}(t) S_l U_i(t)$ , and

$$\chi_{jk}(\tau) = \frac{1}{\nu^2} \text{Tr}_e \left[ : s_k^I(y_0, \tau) :: s_j^I(y_0, 0) : \rho_0 \right]. \quad (4.30)$$

We note that  $\chi_{jk}(\tau)$  is the spin susceptibility of helical 1D electrons.

### 4.2.3 The Markov approximation and final form of the master equation

Next we employ the *Markov approximation*, i.e., we substitute  $\rho_{S,I}(t')$  to  $\rho_{S,I}(t)$ . This approximation is justified since the correlators  $\chi_{jk}$  decay typically over the time proportional to either  $1/|eV|$  or  $1/T$ , while the relaxation time of matrix  $\rho_{S,I}$  is determined by the scale of the order of  $1/[\mathcal{J}^2 \max\{T, |eV|\}]$ . Switching back to the Heisenberg picture, we obtain

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -i [H_i, \rho_S(t)] + \mathcal{J}_{rj} \mathcal{J}_{lk} \int_0^{+\infty} d\tau \left( \chi_{jk}(\tau) [S_r^I(-\tau) \rho_S(t), S_l] + \text{h.c.} \right). \quad (4.31)$$

In order to write down the final form of this master equation, we should compute  $\chi_{jk}(\omega) = \int_0^{+\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \chi_{jk}(\tau)$ . Evaluating the trace in Eq. (4.30) yields

$$\chi_{jk}(\omega) = \frac{i}{4} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d\xi_1 d\xi_2 \sigma_k^{\sigma_1 \sigma_2} \sigma_j^{\sigma_2 \sigma_1} \frac{1 - f_F(\xi_2 - \sigma_2 V/2)}{\omega + \xi_1 - \xi_2 + i0} f_F(\xi_1 - \sigma_1 V/2) \quad (4.32)$$

where  $f_F(\varepsilon) = 1/[e^{\varepsilon/T} + 1]$ .

The spin susceptibility can be split into the Hermitian and anti-Hermitian parts:

$$\chi_{jk}(\omega) = \frac{1}{2} \chi_{jk}^{(1)}(\omega) + i \chi_{jk}^{(2)}(\omega), \quad \chi^{(1)} = \chi^{(1)\dagger}, \quad \chi^{(2)} = \chi^{(2)\dagger}. \quad (4.33)$$

Here we introduce

$$\begin{aligned} \chi_{jk}^{(1)}(\omega) &= \frac{\pi}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d\xi_1 d\xi_2 \sigma_k^{\sigma_1 \sigma_2} \sigma_j^{\sigma_2 \sigma_1} \delta(\omega + \xi_1 - \xi_2) (1 - f_F(\xi_2 - \sigma_2 V/2)) \\ &\quad \times f_F(\xi_1 - \sigma_1 V/2) \end{aligned} \quad (4.34)$$

and

$$\begin{aligned} \chi_{jk}^{(2)}(\omega) = \frac{1}{4} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \text{p.v.} \int d\xi_1 d\xi_2 \sigma_k^{\sigma_1 \sigma_2} \sigma_j^{\sigma_2 \sigma_1} f_F\left(\xi_1 - \frac{\sigma_1 V}{2}\right) \\ \times \frac{(1 - f_F(\xi_2 - \sigma_2 V/2))}{\omega + \xi_1 - \xi_2} \end{aligned} \quad (4.35)$$

where p.v. denotes the Cauchy principal value. The part  $\chi_{jk}^{(2)}$  contains the logarithmically diverging contributions. The corresponding terms in the master equation (4.31) can be cast in the form of unitary dynamics, i.e., they provide us the renormalization of  $H_i$  — the so-called Lamb shift. These logarithmically divergent contributions describe the Kondo renormalization of the coupling constants  $\mathcal{J}_{jk}$ .

Omitting  $\chi_{jk}^{(2)}$ , we finally obtain the quantum master equation in the following form

$$\frac{d\rho_S}{dt} = i[\rho_S, H_i] + \eta_{jk} \left[ S_j \rho_S S_k - \rho_S S_k S_j / 2 - S_k S_j \rho_S / 2 \right]. \quad (4.36)$$

Here the  $3 \times 3$  matrix  $\eta_{jk} = \pi T (\mathcal{J} \Pi_V \mathcal{J}^T)_{jk}$  governs the non-unitary evolution of the reduced generalized density matrix. Here we have introduced

$$\Pi_V = \begin{pmatrix} \frac{V}{2T} \coth \frac{V}{2T} & -\frac{iV}{2T} & 0 \\ \frac{iV}{2T} & \frac{V}{2T} \coth \frac{V}{2T} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.37)$$

We note that the eigenvalues of the matrix  $\Pi_V$  are equal to 1 and  $(V/2T)[\coth(V/2T) \pm 1] \geq 0$ . Therefore, the matrix  $\eta$  is positive semi-definite and the master equation (4.36) has the Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad form, ensuring the positivity of  $\rho_S$ .

#### 4.2.4 The Gibbs distribution for the reduced density matrix

Applying the corresponding rotation of the spin basis, an arbitrary exchange matrix  $\mathcal{J}$  can be reduced to the lower triangular form

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} \mathcal{J}_{xx} & 0 & 0 \\ \mathcal{J}_{yx} & \mathcal{J}_{yy} & 0 \\ \mathcal{J}_{zx} & \mathcal{J}_{zy} & \mathcal{J}_{zz} \end{pmatrix}. \quad (4.38)$$

Then the Hamiltonian  $H_i$  becomes proportional to spin  $S_z$ . Therefore, the stationary density matrix of the spin should be diagonal in the eigen basis of spin  $S_z$ , i.e.,

$$\langle m|\rho_S|m'\rangle = \delta_{m,m'}\rho_{S,m}, \quad S_z|m\rangle = m|m\rangle, \quad m = -S, \dots, S. \quad (4.39)$$

Substituting this diagonal ansatz into Eq. (4.36), we find that  $\rho_{S,m}$  should satisfy the following equation

$$\begin{aligned} \eta_{jk}\rho_{S,m+1}\langle m|S_j|m+1\rangle\langle m+1|S_k|m\rangle + \eta_{jk}\rho_{S,m-1}\langle m|S_j|m-1\rangle\langle m-1|S_k|m\rangle \\ = \eta_{jk}\rho_{S,m}\langle m|S_k|m+1\rangle\langle m+1|S_j|m\rangle + \eta_{jk}\rho_{S,m}\langle m|S_k|m-1\rangle\langle m-1|S_j|m\rangle. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Let us demonstrate that the solution of this equation has the form  $\rho_{S,m} \propto \exp(\beta_{\text{eff}}m)$ . Using the matrix elements of the spin operators,

$$\begin{aligned} \langle m|S_x|m+1\rangle &= \langle m+1|S_x|m\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(S+m+1)(S-m)}, \\ \langle m|S_y|m+1\rangle &= -\langle m+1|S_y|m\rangle = \frac{i}{2}\sqrt{(S+m+1)(S-m)}, \end{aligned} \quad (4.41)$$

we find

$$\begin{aligned} (e^{\beta_{\text{eff}}}\eta_+ - \eta_-)(S+m+1)(S-m) + (e^{-\beta_{\text{eff}}}\eta_- - \eta_+) \\ \times (S+m)(S-m+1) = 0 \end{aligned} \quad (4.42)$$

where  $\eta_{\pm} = \eta_{xx} + \eta_{yy} \pm i\eta_{xy} \mp i\eta_{yx}$ . Hence, we obtain that

$$e^{\beta_{\text{eff}}} = \frac{\eta_-}{\eta_+}. \quad (4.43)$$

At  $V = 0$  the parameter  $\beta_{\text{eff}}$  vanishes, i.e., the impurity spin is equally distributed over the states with all possible spin projections. At  $V \gg T$ , the parameter  $\beta_{\text{eff}}$  tends to the  $V$ -independent constant. Therefore, at large voltage the impurity spin is still not fully polarized.

*Задача на семинар 42:* Derive Eq. (4.32).

*Задача на семинар 43:* Analyse  $\chi_{jk}^{(2)}(\omega)$  and derive the Kondo renormalization of  $\mathcal{J}_{jk}$ .

*Упражнение 78:* Prove commutation relation (4.23).

*Упражнение 79:* Compute the density of states of 1D helical electrons governed by the Hamiltonian  $H_e$ .

*Упражнение 80:* Demonstrate that  $\chi_{jk}^{(2)}(\omega)$  results in the unitary dynamics for  $\rho_S(t)$ .

*Упражнение 81:* Compute  $\text{Tr } \rho_S(t)$ .

*Упражнение 82:* The evolution of the density matrix for the system of one-dimensional fermions with spin 1/2 is described by the following GKSL equation

$$\frac{d\rho}{dt} = \gamma \sum_{j=1}^N \left[ 2L_j \rho L_j^\dagger - L_j^\dagger L_j \rho - \rho L_j^\dagger L_j \right], \quad L_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{j\downarrow}^\dagger + a_{j\uparrow}^\dagger)a_{j\uparrow}.$$

To find the evolution of the density matrix if the initial density matrix is given as

$$\rho(t=0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_N.$$

## Глава 5

# Thermalization of an isolated quantum system

### Introduction

In this chapter we discuss how the Gibbs distribution emerges in an isolated quantum system. This phenomenon is known under the name *the eigenstate thermalization hypothesis* and is intensively studied now.

## 5.1 The eigenstate thermalization hypothesis

### Introduction

In the present course we have postulated the Gibbs distribution for the density matrix of quantum system. One way of how such distribution could occur we discussed in the previous lecture. For a quantum system weakly coupled to large quantum system (reservoir), the Gibbs distribution for the reduced density matrix can be induced as a result of the interaction. However, one can ask what happens if the quantum system is completely isolated. In this lecture we discuss this point, following recent review by Deutsch [21].

#### 5.1.1 Ergodicity and chaos in classical mechanics

Let us consider classical system described by a set of  $N$  canonically conjugated coordinates  $\Gamma = \{q_1, p_1, \dots, q_N, p_N\}$ . During its time evolution the system moves in the  $2^N$  dimensional phase space  $\mathcal{S}$ . The system is called *ergodic* if the time average of observable  $O$  is equivalent to microcanonical average,

$$\lim_{\mathcal{T} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{T}} \int_0^{\mathcal{T}} dt O(\Gamma(t)) \equiv \frac{\int_{\Gamma_E} d\Gamma O(\Gamma)}{\int_{\Gamma_E} d\Gamma}. \quad (5.1)$$

Here  $\Gamma_E$  denotes the subspace of  $\mathcal{S}$  in which the constants of motion, e.g. energy, remain fixed. Although the ergodicity exists in many systems, there is a class of systems in which ergodicity breaks down. They are so-called the integrable models. The phonon modes in the perfect harmonic crystal are an example of such system. For the system close to integrable one, the ergodicity occurs in the limit  $N \rightarrow \infty$  as follows from the Kolmogorov–Arnold–Moser theorem.

Another important concept related to the classical systems is *chaos*. A chaotic system is such that, if one starts to evolve it from two close initial conditions, after sufficiently long time these two states will be in very different places of the phase space. This implies a divergence of the neighboring trajectories in the phase space. This divergence is characterized by the Lyapunov exponents. We underline that ergodicity and chaos are not interchangeable notions. However, in the limit  $N \rightarrow \infty$  the majority of classical systems are ergodic and chaotic. Ergodicity and chaos of a classical system allow its thermalization.



### 5.1.2 Chaos in an isolated quantum system

The concept of chaos comes across difficulties to define in the case of quantum dynamics. The problem lies in linearity of the Schrödinger equation. However, quantum chaotic system can be formulated in terms of statistics of its energy levels. There is the Bohigas–Giannoni–Schmit conjecture. The energy levels of a quantum system, which the classical analogue is chaotic, have the statistics described by the random matrix theory (for the theory of random matrices see the book [22]). The chaotic behavior in the quantum systems is active field of research at present.

### 5.1.3 Eigenstate thermalization hypothesis

An idea of how the quantum system thermalizes is based on the *eigenstate thermalization hypothesis*. It can be formulated in the following form. The matrix element of some operator  $A$  can be written as

$$\langle a|A|b\rangle = \mathcal{A}(E)\delta_{ab} + e^{-S(E)/2}g_{ab}(E, \omega) \quad (5.2)$$

where  $E = (E_a + E_b)/2$  and  $\omega = E_a - E_b$ , and  $g_{ab}(E, \omega)$  is a bounded smooth function. The entropy is defined as

$$e^{S(E)} = E \sum_a \delta_\Gamma(E - E_a) = \frac{E}{\pi} \sum_a \frac{\Gamma}{(E - E_a)^2 + \Gamma^2}. \quad (5.3)$$

Here  $\Gamma$  is a small broadening of the many-particle levels  $E_a$ , making function  $S(E)$  smeared and monotonous,

$$dS/dE \equiv 1/T > 0. \quad (5.4)$$

The entropy  $S(E)$  is an extensive quantity proportional to the number of degrees of freedom in the quantum system. We assume that the energy  $E$  changes slowly on the energy scale of the order of temperature  $T$ . We note that the statistical properties of  $g_{ab}(E, \omega)$  resemble the random independent quantities from the Gaussian distribution.

Let us demonstrate that, if Eq. (5.2) holds for, then the function  $\mathcal{A}(E)$  coincides with the proper Gibbs average,

$$\mathcal{A}_G = \frac{\text{Tr } A e^{-H/T}}{\text{Tr } e^{-H/T}} \quad (5.5)$$

where temperature  $T$  is defined in Eq. (5.4). Let us consider

$$\text{Tr } A e^{-H/T} = \sum_a \langle a|A|a\rangle e^{-E_a/T} = \int d\varepsilon e^{-\varepsilon/T} \sum_a \delta(\varepsilon - E_a) \langle a|A|a\rangle. \quad (5.6)$$

Now using Eq. (5.2), we find

$$\mathrm{Tr} A e^{-H/T} \approx \int d\varepsilon e^{-\varepsilon/T} \mathcal{A}(\varepsilon) \sum_a \delta(\varepsilon - E_a) = \int d\varepsilon e^{S(\varepsilon) - \varepsilon/T} \mathcal{A}(\varepsilon) / \varepsilon \quad (5.7)$$

Since  $S(\varepsilon)$  is an extensive quantity, we can take the integral over  $\varepsilon$  by the saddle-point method. The saddle-point magnitude of  $\varepsilon = E$  is determined by Eq. (5.4). Then we find

$$\mathrm{Tr} A e^{-H/T} \approx e^{S(E) - E/T} \mathcal{A}(E) / E. \quad (5.8)$$

Hence, we obtain

$$\mathcal{A}_G \approx \mathcal{A}(E) + O(1/S). \quad (5.9)$$

We note that this relation implies that in essence, the matrix element of an operator behaves as a thermal (Gibbs) average with the proper temperature.

Now we consider time average of operator. Let us introduce the state  $|\psi_t\rangle = \sum_a c_a e^{-iE_a t} |a\rangle$  and define the average  $A_t = \langle \psi_t | A | \psi_t \rangle$ . Then we can define the time average as

$$\bar{A} = \lim_{\mathcal{T} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{T}} \int_0^{\mathcal{T}} dt A_t. \quad (5.10)$$

Under assumption that Eq. (5.2) holds for, we demonstrate that the time average  $\bar{A}$  coincides with the thermal or Gibbs average for the temperature corresponding to the energy  $E = \sum_a |c_a|^2 E_a$ . We can write

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \lim_{\mathcal{T} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{T}} \int_0^{\mathcal{T}} dt \left[ \sum_a |c_a|^2 \langle a | A | a \rangle + \sum_{b \neq a} c_a^* c_b e^{i(E_a - E_b)t} \langle a | A | b \rangle \right] \\ &= \sum_a |c_a|^2 \langle a | A | a \rangle, \end{aligned} \quad (5.11)$$

since for the non-degenerate levels the oscillating terms vanish in the limit  $\mathcal{T} \rightarrow \infty$ . Next using Eq. (5.2), we find

$$\bar{A} \approx \sum_a |c_a|^2 \left[ \mathcal{A}(E) + \mathcal{A}'(E)(E_a - E) + \frac{1}{2} \mathcal{A}''(E)(E - E_a)^2 + \dots \right] \approx \mathcal{A}(E). \quad (5.12)$$

Since we have demonstrated above that  $\mathcal{A}(E)$  is equivalent to the Gibbs average  $\mathcal{A}_G$ , we show that the ETH hypothesis implies the ergodicity.

*Упражнение 83:* Show that  $\overline{(A_t - \bar{A})^2} \propto \exp(-S(E))$ .

## Глава 6

# Решения задач для семинаров

### Введение

В этой главе представлены краткие решения задач, обозначенных выше как задачи для семинаров. Мы рекомендуем читателю попытаться решить эти задачи самостоятельно, а затем обращаться к приведённым решениям.

## 6.1 Seminar I

In this section, we present solutions for the problems Nos. 1, 2 and 3.

### 6.1.1 Problems 1 and 2

We consider simplest system in statistical physics. The system obeys the following assumptions:

- all particles are identical;
- particles are non-interacting;
- each particle can occupy two energy levels (the ground state and the excited state).

The above assumptions lead to the following Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N H_j, \quad H_j = -\frac{B}{2} \sigma_j^z. \quad (6.1)$$

All information about the system could be obtained from the statistical sum which can be calculated in two ways.

The first one is applicable for the non-interacting systems. In this case the system can be split into two independent parts, A and B, such that  $H = H_A + H_B$ . Then the partition function becomes  $Z = Z_A \times Z_B$  where  $Z_i = \text{tr}_i[\exp(-\beta H_i)]$ . Applying this result to our system, we arrive at

$$\text{Partition function: } Z = \text{tr} \left\{ \exp \left( \frac{B}{2T} \sigma^z \right) \right\}^N = 2^N \cosh^N \left( \frac{B}{2T} \right) \quad (6.2)$$

$$\text{Free energy: } F = -T \ln Z = -TN \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{B}{2T} \right) \right] \quad (6.3)$$

$$\text{Entropy: } S = -\frac{\partial F}{\partial T} = N \left[ \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{B}{2T} \right) \right] - \frac{B}{2T} \tanh \left( \frac{B}{2T} \right) \right] \quad (6.4)$$

$$\text{Energy: } E = F + TS = -N \frac{B}{2} \tanh \left( \frac{B}{2T} \right) \quad (6.5)$$

$$\text{Specific heat: } C_V = T \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{N}{4 \cosh^2 \left( \frac{B}{2T} \right)} \left( \frac{B}{T} \right)^2 \quad (6.6)$$

$$\text{Chemical potential: } \mu = \frac{\partial F}{\partial N} = -TN \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{B}{2T} \right) \right] \quad (6.7)$$

The second interesting approach is the following. Instead of summation over all independent states, we perform it over all possible eigen energies  $\mathcal{E}_\lambda$  of the many-body Hamiltonian  $\mathcal{H}$ . Then, the partition function becomes

$$Z = \sum_{\lambda} \exp(-\beta \mathcal{E}_\lambda) = \sum_{\mathcal{E}_\lambda} g(\mathcal{E}_\lambda) \exp(-\beta \mathcal{E}_\lambda). \quad (6.8)$$

On the right hand side one should take the sum over all possible eigen energies and the quantity  $g(\mathcal{E}_\lambda)$  is termed as the density of states. It characterizes the degeneracy of the eigenstates. In our case, the eigenstates can be described by a number of spins  $k$  anti-parallel to the direction of the magnetic field  $B$ . Then, one can find  $\mathcal{E}_k = -BN/2 + Bk$ . Since we can choose arbitrary  $k$  spins among  $N$ , such eigenstate has the degeneracy  $g(\mathcal{E}_k) = C_N^k$ , where  $C_N^k$  denotes the binomial coefficients. Finally, using Newton's binomial theorem, we obtain the same result as in the first approach.

### 6.1.2 Problem 3

One of most powerful techniques to prove the thermodynamics identities is a method of Jacobians. Let us suppose that we have a pair of independent thermodynamics variables  $X$  and  $Y$ , for example,  $V, T$  or  $P, S$  but not conjugated, e.g.  $P, V$ . Then, the Jacobian of transformation from variables  $X, Y$  to  $A, B$  reads

$$\frac{\partial(A, B)}{\partial(X, Y)} = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial A}{\partial X} & \frac{\partial B}{\partial X} \\ \frac{\partial A}{\partial Y} & \frac{\partial B}{\partial Y} \end{pmatrix}. \quad (6.9)$$

The definition of the Jacobian leads to several useful identities:

$$\frac{\partial(A, Y)}{\partial(X, Y)} = \left( \frac{\partial A}{\partial X} \right)_Y, \quad \frac{\partial(A, B)}{\partial(X, Y)} = \frac{\partial(A, B)}{\partial(C, D)} \frac{\partial(C, D)}{\partial(X, Y)}. \quad (6.10)$$

Using this identities, we obtain

$$\begin{aligned} C_P - C_V &= T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_P - T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = T \frac{\partial(S, P)}{\partial(T, P)} - T \frac{\partial(S, V)}{\partial(T, V)} \\ &= T \frac{\partial(S, P)}{\partial(T, V)} \frac{\partial(T, V)}{\partial(T, P)} - T \frac{\partial(S, V)}{\partial(T, V)}, \\ T \left[ \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T - \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_T \right] &= \frac{1}{\left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T} - C_V \\ &= -T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \frac{\partial^2 F}{\partial V \partial T} \frac{1}{\left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T} = -T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V^2 \frac{1}{\left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

## 6.2 Seminar II

In this section, we consider the solutions of problems Nos. 4, 5, and 6.

### 6.2.1 Problem 4

In the previous seminar we have found several thermodynamic quantities of the spin system in the magnetic field. One can calculate the fluctuation of energy, using the expression from the second lecture. However, it is instructive to calculate fluctuations from the first principles. We will use the second approach for calculating the partition function from the previous seminar. This leads to

$$\langle\langle E^2 \rangle\rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z} \sum_E E^2 g(E) e^{-\beta E} - \left[ \frac{1}{Z} \sum_E E g(E) e^{-\beta E} \right]^2. \quad (6.12)$$

As is mentioned in the previous seminar, we can parametrize  $E$  by the number  $k$  of the “flipped” spins,  $E = -\frac{NB}{2} + kB$ . It is worthwhile to note that the fluctuations similar to the other measured thermodynamic characteristics are independent of the ground state energy. Therefore, we can use the expression  $E = Bk$  for the energy of the spin configuration with  $k$  “flipped” spins. We start our calculation from the last term on the right hand side of Eq. (6.12) ( $p = e^{-\beta B}$ ),

$$\frac{1}{Z} \sum_E E g(E) e^{-\beta E} = \frac{1}{Z} \sum_{k=0}^N Bk C_N^k e^{-\beta Bk} = \frac{B}{Z} \sum_{k=0}^N k C_N^k p^k = \frac{B}{Z} Np(1+p)^{N-1}. \quad (6.13)$$

Since the partition function is given as  $Z = (1+p)^N$ , we find  $\langle E \rangle = NBp/(1+p)$ . The same technique yields,

$$\langle\langle E^2 \rangle\rangle = B^2 \left( \frac{pN}{1+p} + \frac{p^2 N(N-1)}{(1+p)^2} \right) = \frac{B^2 Np}{(1+p)^2} = \frac{B^2 N}{4 \cosh^2(\frac{B}{2T})}. \quad (6.14)$$

### 6.2.2 Problem 5

The free energy is calculated in Problems 1 and 2. Using these results, we can obtain the following expressions,

$$\begin{aligned} \text{Magnetization: } M &= -\frac{\partial F}{\partial B} = \frac{N}{2} \tanh\left(\frac{B}{2T}\right), \\ \text{Spin susceptibility: } \chi &= \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{N}{4T} \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{B}{2T}\right)}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

For the fluctuation of magnetization, we find

$$\langle\langle M^2 \rangle\rangle = \frac{\langle\langle E^2 \rangle\rangle}{B^2} = \frac{N}{4 \cosh(\frac{B}{2T})} \quad (6.16)$$

as is expected.

### 6.2.3 Problem 6

At first, we express  $\Delta P$  and  $\Delta S$  via  $\Delta P$  and  $\Delta V$ ,

$$\begin{pmatrix} \Delta P \\ \Delta S \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \Delta V \\ \Delta T \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} (\frac{\partial P}{\partial V})_T & (\frac{\partial P}{\partial T})_V \\ (\frac{\partial S}{\partial V})_T & (\frac{\partial S}{\partial T})_V \end{pmatrix}. \quad (6.17)$$

We note that  $M^T = M$ . Using this expression, we obtain the following result for  $U_{\min}$ ,

$$U_{\min} = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V (\Delta T)^2 - \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 \right]. \quad (6.18)$$

Hence we derive the following expression for the correlation functions (the standard answer for the Gaussian distribution),

$$\begin{aligned} G &= \left\langle \begin{pmatrix} \Delta V \\ \Delta T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta V \\ \Delta T \end{pmatrix}^T \right\rangle = \begin{pmatrix} \langle \Delta V \Delta V \rangle & \langle \Delta T \Delta V \rangle \\ \langle \Delta V \Delta T \rangle & \langle \Delta T \Delta T \rangle \end{pmatrix} \\ &= T \begin{pmatrix} -(\frac{\partial V}{\partial P})_T & 0 \\ 0 & (\frac{\partial T}{\partial S})_V \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Both matrices  $G$  and  $M$  are necessary to calculate the other fluctuations. This can be done in the following way,

$$\begin{aligned} \left\langle \begin{pmatrix} \Delta P \\ \Delta S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta V \\ \Delta T \end{pmatrix}^T \right\rangle &= \begin{pmatrix} \langle \Delta P \Delta V \rangle & \langle \Delta P \Delta T \rangle \\ \langle \Delta S \Delta V \rangle & \langle \Delta S \Delta T \rangle \end{pmatrix} = MG \\ &= T \begin{pmatrix} -1 & (\frac{\partial P}{\partial T})_V (\frac{\partial T}{\partial S})_V \\ -(\frac{\partial S}{\partial V})_T (\frac{\partial V}{\partial P})_T & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Finally, we find

$$\begin{aligned} \left\langle \begin{pmatrix} \Delta P \\ \Delta S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta P \\ \Delta S \end{pmatrix}^T \right\rangle &= \begin{pmatrix} \langle \Delta P \Delta P \rangle & \langle \Delta P \Delta S \rangle \\ \langle \Delta S \Delta P \rangle & \langle \Delta S \Delta S \rangle \end{pmatrix} = MGM^T \\ &= T \begin{pmatrix} -(\frac{\partial P}{\partial V})_T + (\frac{\partial P}{\partial T})_V (\frac{\partial T}{\partial S})_V (\frac{\partial S}{\partial V})_T & 0 \\ 0 & (\frac{\partial S}{\partial T})_V - (\frac{\partial S}{\partial V})_T (\frac{\partial V}{\partial P})_T (\frac{\partial P}{\partial T})_V \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.21)$$

In order to calculate the last expression, one can use the Jacobian method,

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \frac{\partial(P S)}{\partial(T V)} + \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T. \quad (6.22)$$

Using the above relation, we find the following result,

$$\begin{pmatrix} \langle \Delta P \Delta P \rangle & \langle \Delta P \Delta S \rangle \\ \langle \Delta S \Delta P \rangle & \langle \Delta S \Delta S \rangle \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_S & 0 \\ 0 & \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P \end{pmatrix}. \quad (6.23)$$

### 6.3 Seminar III

In this section, we discuss solutions of Problems Nos. 7, 8, 9, 10, and 11.

#### 6.3.1 Problem 7

In this problem we will find the density of state for free quantum particle in an arbitrary spatial dimension. To solve this problem, we must write the integral for the density of states and use the spherical coordinate system,

$$\begin{aligned} g(\varepsilon) &= \int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^d} \delta\left(\varepsilon - \frac{p^2}{2m}\right) = \int_0^\infty \frac{S_d p^{d-1} dp}{(2\pi\hbar)^d} \delta\left(\varepsilon - \frac{p^2}{2m}\right) \\ &= \frac{S_d m}{(2\pi\hbar)^d} (\sqrt{2m\varepsilon})^{d-2}. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Here  $S_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$  denotes the area of  $d$ -dimensional sphere,  $S_d$ .

#### 6.3.2 Problem 8

In this problem, we will find the density of states of ideal two-dimensional electron gas in the perpendicular magnetic field. Let vector potential be  $\mathbf{A} = \{0, Bx, 0\}$ . Then Hamiltonian is  $H = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{(p_y - \frac{eB}{c}x)^2}{2m} \pm \mu_B B$ . Here  $\mu_B$  denotes the Bohr magneton. We note that the momentum along  $y$ -axis and the spin are conserved. Then the eigen energies are given as  $\varepsilon_n = \omega_c(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2})$  where  $\omega_c = \frac{eB}{mc}$  is the cyclotron frequency (the Landau level problem is treated in the course of the quantum mechanics). Then, we obtain

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{S} \frac{S}{2\pi l_H^2} \left[ \delta(\varepsilon) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \delta(\varepsilon - \omega_c n) \right] = \frac{m\omega_c}{2\pi} \left[ \delta(\varepsilon) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \delta(\varepsilon - \omega_c n) \right]. \quad (6.25)$$

Here  $l_H = \sqrt{c\hbar/(eB)}$  denotes the magnetic length and  $S/(2\pi l_H^2)$  stands for the Landau level degeneracy.



### 6.3.3 Problem 9

This problem is important in the Fermi gas theory. We will calculate the temperature correction to the chemical potential at  $T \ll E_F$  for an ideal Fermi gas. We note that for all normal metals in  $d = 3$ , the Fermi energy is of the order of  $E_F \approx 1 \text{ eV} \approx 1.1 \times 10^5 \text{ K}$ .

The temperature behavior of the chemical potential is related with conserving the number of particles at a given volume, cf. Eq. (1.50). Let  $\beta = \beta_0 + \delta\beta$ , then we find

$$0 = \frac{\partial N}{\partial T} = \int_0^\infty \frac{e^{\beta_0(\varepsilon-\mu)}}{(1 + e^{\beta_0(\varepsilon-\mu)})^2} \left( \frac{\varepsilon - \mu}{T^2} + \frac{1}{T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) g(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (6.26)$$

The main technique to calculate such integrals with the Fermi distribution is integration over variable  $\xi = \varepsilon - \mu$ . The advantage of using such variable is that the fermions only in the vicinity of the Fermi surface take part in perturbing the ground state, i.e.,  $\xi \sim T$  provides the dominant contribution to the integrals. Using condition,  $E_F \gg T$ , we obtain

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial N}{\partial T} = \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{4 \cosh^2(\beta\xi/2)} \left( \frac{\xi}{T^2} + \frac{1}{T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) (g(\mu) + g'(\mu)\xi) d\xi \\ &= \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{4 \cosh^2(\beta\xi/2)} \left( g'(\mu) \frac{\xi^2}{T^2} + \frac{g(\mu)}{T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) d\xi = \frac{\pi^2}{3} T g'(\mu) + g \frac{\partial \mu}{\partial T}. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Hence, we find  $\partial \mu / \partial T = -\pi^2 g'(\mu) T / (3g(\mu))$  and, consequently,  $\mu = E_F - \pi^2 g'(\mu) T^2 / [6g(\mu)]$ .

### 6.3.4 Problem 10

In this problem we find the specific heat of ideal degenerate Fermi gas in an arbitrary spatial dimension. We use integration over  $\xi$  to find an answer. Then, we obtain, cf. Eq. (1.52),

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{\partial}{\partial T} \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon) \varepsilon f_F(\varepsilon) = \int_{-\infty}^\infty d\xi \frac{1}{4 \cosh^2(\beta\xi/2)} \left( \frac{g(\mu)\mu}{T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right. \\ &\quad \left. + (g(\mu) + g'(\mu)\mu) \frac{\xi^2}{T^2} \right) = g(\mu)\mu \frac{\partial \mu}{\partial T} + (g(\mu) + g'(\mu)\mu) \frac{\pi^2}{3} T = \frac{\pi^2}{3} g(\mu) T. \end{aligned} \quad (6.28)$$

### 6.3.5 Problem 11

We find the zero-field spin susceptibility of ideal two-dimensional electron gas. The weak fields do not change “trajectories” of electrons. Thus we can use the density of states for a Fermi gas in the absence of the magnetic field. This problem could also be solved by taking the derivative of integral over the chemical potential (For  $d = 2$ , the density of states is constant,  $g(\varepsilon) = m/(2\pi)\cdot$ ),

$$\begin{aligned} \chi &= -\frac{\partial^2 \Omega}{\partial B^2} = -\frac{\partial^2}{\partial B^2} \frac{\Omega_0(\mu + \mu_B B) + \Omega_0(\mu - \mu_B B)}{2} = \frac{\mu_B}{2} \frac{\partial}{\partial B} \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon) \\ &\times \left[ f_F(\varepsilon - \mu_B B) - f_F(\varepsilon + \mu_B B) \right] = \mu_B^2 \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon) \left( -\frac{\partial f_F(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) = \mu_B^2 g(\mu). \end{aligned} \quad (6.29)$$

Here  $\Omega_0(\mu)$  stands for the thermodynamic potential of ideal Fermi gas at  $B = 0$ .

## 6.4 Seminar IV

In this section, we consider the solutions for Problems Nos. 12 and 13.

### 6.4.1 Problem 12

The problem is to find the magnetization of ideal two-dimensional electron gas in the presence of a relatively strong perpendicular magnetic field  $T \ll \mu_B B \ll E_F$ . It is more complicated problem compared with the previous one. In this case we should use the expression for the density of states, obtained in the Problem 8. Then the energy can be written as

$$E = \int_0^\infty \varepsilon g(\varepsilon) f_F(\varepsilon - \mu) d\varepsilon = \frac{m\omega_c}{\pi} \sum_{n=1}^\infty \omega_c n f_F(\omega_c n - \mu). \quad (6.30)$$

In the limit  $\mu_B B = \omega_c/2 \gg T$  we can approximate the Fermi distribution function by the Heaviside step function. In this case the energy becomes

$$E = \frac{m\omega_c^2}{\pi} \sum_{n=1}^N n = \frac{m\omega_c^2 N(N+1)}{2\pi}. \quad (6.31)$$

Here  $N = [\mu/\omega_c]$  is the number of filled states. As a result, the magnetization reads,

$$M = -\frac{\partial E}{\partial B} = -\frac{2\mu_B m \omega_c N^2}{\pi}. \quad (6.32)$$

In order to find the magnetization at  $T \sim \omega_c$ , we use the Poisson summation formula,

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(n-x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i k x}. \quad (6.33)$$

Using this formula to simplify the expression for the energy, we obtain

$$\begin{aligned} E &= \frac{m\omega_c^2}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-n) |x| f_F(\omega_c |x| - \mu) \\ &= \frac{m\omega_c^2}{\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dx e^{i2\pi k x} x f_F(\omega_c x - \mu). \end{aligned} \quad (6.34)$$

The term  $k = 0$  in the sum is an energy of the Fermi gas at temperature  $T$  in zero magnetic field. Since it is independent of the magnetic field, we can study the difference  $\Delta E$  between the energy in the finite and zero magnetic fields,

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{2m\omega_c^2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dx e^{i2\pi k x} x f_F(\omega_c x - \mu) = \frac{2m\omega_c^2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4\pi^2 k^2} \\ &\quad \times \operatorname{Re} \left( 1 - \int_0^{\infty} dx e^{i2\pi k x} (1 - i2\pi k x) \partial_x f_F(\omega_c x - \mu) \right). \end{aligned} \quad (6.35)$$

The last formula is obtained using integration by parts. This expression is suitable for the integration over variable  $\xi = \omega_c x - \mu$  at  $\mu \gg T$ . This leads to the following integral,

$$\Delta E = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{m\omega_c^2}{2\pi^3 k^2} \operatorname{Re} \left[ 1 + \left( i2\pi k \frac{\mu}{\omega_c} - 1 \right) e^{i2\pi k \mu / \omega_c} \beta \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{e^{i2\pi k \xi / \omega_c}}{4 \cosh^2(\beta \xi / 2)} \right]. \quad (6.36)$$

The last integral can be calculated and finally:

$$\begin{aligned}
\Delta E &= \frac{2m\omega_c^2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4\pi^2 k^2} \operatorname{Re} \left( 1 + \left( i2\pi k \frac{\mu}{\omega_c} - 1 \right) e^{i2\pi k \mu / \omega_c} \frac{2\pi^2 k T}{\omega_c \sinh \left( \frac{2\pi^2 k T}{\omega_c} \right)} \right) \\
&= \frac{2m\omega_c^2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4\pi^2 k^2} \left[ 1 - \left( \sin(2\pi k \mu / \omega_c) 2\pi k \frac{\mu}{\omega_c} + \cos(2\pi k \mu / \omega_c) \right) \right. \\
&\quad \left. \times \frac{2\pi^2 k T}{\omega_c \sinh \left( \frac{2\pi^2 k T}{\omega_c} \right)} \right]. \tag{6.37}
\end{aligned}$$

To find the expression for the magnetization per unit area, it is enough to take the derivative of “fast” terms with respect to magnetic field alone,

$$M = -\frac{\partial \Delta E}{\partial B} = -\frac{2m\mu^2}{B\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2\pi^2 k T}{\omega_c \sinh \left( \frac{2\pi^2 k T}{\omega_c} \right)} \cos(2\pi k \mu / \omega_c). \tag{6.38}$$

Thus we obtained that the magnetization of the Fermi gas oscillates with the magnetic field. This effect is known as *de Haas – van Alphen oscillations*.

### 6.4.2 Problem 13

The study of the Bose-Einstein condensate starts from calculating the number of non-condensed particles. For  $T > T_{\text{BEC}}$ , all particles are non-condensed and this number conserves,

$$N = \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} g(\varepsilon) d\varepsilon. \tag{6.39}$$

For  $d = 3$ , the density of states is given as  $g(\varepsilon) = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2}} \sqrt{\varepsilon}$ . Substituting the expression for the density of states into the integral, we arrive at,

$$\begin{aligned}
N &= \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} d\varepsilon = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon} e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}} d\varepsilon \\
&= \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2}} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} e^{-\beta(\varepsilon - \mu)n} d\varepsilon \approx \left( \frac{mT}{2\pi} \right)^{3/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n)^{3/2}} e^{\beta\mu n} \tag{6.40}
\end{aligned}$$

One can take the derivative with respect to the temperature for small  $\mu$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial T} &= \left(\frac{m}{2\pi}\right)^{3/2} \frac{3}{2} T^{1/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-|\beta\mu|n}}{n^{3/2}} + \left(\frac{mT}{2\pi}\right)^{3/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-|\beta\mu|n}}{n^{1/2}} \left(-\frac{\mu}{T^2} + \frac{1}{T} \frac{\partial \mu}{\partial T}\right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (6.41)$$

The main contribution to the first term can be calculated for  $\mu = 0$ . To calculate the second term, we can replace the sum with the integral. Also we note that we can neglect the term proportional to  $\mu$ . Then we obtain,

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{3N}{2} T_{\text{BEC}}^{-3/2} T^{1/2} + \left(\frac{mT}{2\pi}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} dn \frac{1}{n^{1/2}} e^{-|\beta\mu|n} \frac{1}{T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \\ &= \frac{3N}{2} T_{\text{BEC}}^{-3/2} T^{1/2} + N \left(\frac{T}{T_{\text{BEC}}}\right)^{3/2} \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{\sqrt{\pi T}}{\sqrt{|\mu|}} \frac{1}{T} \frac{\partial \mu}{\partial T}. \end{aligned} \quad (6.42)$$

Eventually, this leads to the following equation for  $\mu$ ,

$$0 = \frac{3}{2\sqrt{\pi}} \zeta(3/2) + \frac{T_{\text{BEC}}^{1/2}}{\sqrt{|\mu|}} \frac{\partial \mu}{\partial T}. \quad (6.43)$$

Hence, we obtain,

$$\mu = - \left( \frac{3\zeta(3/2)}{4\sqrt{\pi}} \right)^2 \frac{(T - T_{\text{BEC}})^2}{T_{\text{BEC}}}. \quad (6.44)$$

## 6.5 Seminar V

In this section, we present the solution of Problem 14.

### 6.5.1 Problem 14

Using expression (2.9) for the first-order correction to the thermodynamic potential, we find

$$\begin{aligned} \Omega &= \frac{\Omega_0(\mu_+) + \Omega_0(\mu_-)}{2} + \frac{U}{V} \left[ \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \langle a_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{p}\uparrow} \rangle \right] \left[ \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} \langle a_{\mathbf{q}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{q}\downarrow} \rangle \right] \\ &= \frac{\Omega_0(\mu_+) + \Omega_0(\mu_-)}{2} + \frac{U}{4V} N_0(\mu_+) N_0(\mu_-). \end{aligned} \quad (6.45)$$

Here  $\mu_{\pm} = \mu \pm \mu_B B$ ,  $\Omega_0(\mu)$  is the thermodynamic potential of noninteracting electrons in zero magnetic field, and  $N_0(\mu)$  is the number of particles as a function of the chemical potential in the absence of interaction.

As in the lecture, we determine the chemical potential from the condition of the fixed number of particles,

$$N = \frac{N_0(\mu_+) + N_0(\mu_-)}{2} - \frac{U}{4V} \frac{\partial}{\partial \mu} [N_0(\mu_+) N_0(\mu_-)]. \quad (6.46)$$

Hence, we find that the chemical potential is given as

$$\mu = \mu_0 + \frac{U}{2V} \frac{\frac{\partial}{\partial \mu_0} [N_0(\mu_0^+) N_0(\mu_0^-)]}{\frac{\partial}{\partial \mu_0} [N_0(\mu_0^+) + N_0(\mu_0^-)]} \quad (6.47)$$

where  $\mu_0^\pm = \mu_0 \pm \mu_B B$ , and

$$N = [N_0(\mu_0^+) + N_0(\mu_0^-)]/2. \quad (6.48)$$

Therefore, we can write the thermodynamic potential as

$$\begin{aligned} \Omega(\mu) = & \frac{\Omega_0(\mu_0^+) + \Omega_0(\mu_0^-)}{2} - \frac{UN}{2V} \frac{\frac{\partial}{\partial \mu_0} [N_0(\mu_0^+) N_0(\mu_0^-)]}{\frac{\partial}{\partial \mu_0} [N_0(\mu_0^+) + N_0(\mu_0^-)]} \\ & + \frac{U}{4V} N_0(\mu_0^+) N_0(\mu_0^-). \end{aligned} \quad (6.49)$$

Next, we find the free energy,

$$\begin{aligned} F = \Omega + \mu N &= F_0(B) + \frac{U}{4V} N_0(\mu_0^+) N_0(\mu_0^-), \\ F_0(B) &= \frac{\Omega_0(\mu_0^+) + \Omega_0(\mu_0^-)}{2} + \mu_0 N. \end{aligned} \quad (6.50)$$

Here  $F_0(B)$  stands for the free energy in the absence of interaction. We note that the chemical potential  $\mu_0$  is a function of  $B$  in accordance with Eq. (6.48). Using Eq. (6.48), we find in the limit  $B \rightarrow 0$ ,

$$\mu_0(B) = \mu_0 - \frac{1}{2} (\mu_B B)^2 \frac{N_0''(\mu_0)}{N_0'(\mu_0)}. \quad (6.51)$$

We note that  $\chi_0 = \mu_B^2 N_0'(\mu_0)$ . At low temperatures,  $T \ll E_F$ , we can write  $N_0(\mu_0) \propto \mu_0^{3/2}$ . Therefore, we find  $\mu_0(B) = \mu_0 - (\mu_B B/2)^2/\mu_0$ . Now we can compute the zero-field spin susceptibility (per unit volume) at the fixed number of particles,

$$\begin{aligned} \chi = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 F}{\partial B^2} \Big|_{B=0} &= \chi_0 - \frac{U}{4V^2} \frac{\partial^2}{\partial B^2} [N_0(\mu_0(B) + \mu_B B) N_0(\mu_0(B) - \mu_B B)] \Big|_{B=0} \\ &= \chi_0 + \frac{\mu_B^2 U}{2V^2} N_0''(\mu_0). \end{aligned} \quad (6.52)$$

At low temperatures,  $T \ll E_F$ , we obtain

$$\chi = \chi_0 + \frac{9}{8} \frac{\mu_B^2 U N^2}{V^2 E_F^2} = \nu_F \mu_B^2 \left[ 1 + \frac{2}{\pi^3} a p_F \right] \quad (6.53)$$

where  $\nu_F = m p_F / \pi^2$  denotes the noninteracting density of states at the Fermi energy. Equation (6.53) provides us the expression for  $\chi$  as a function of  $N$ .

We note that result (6.53) can readily be obtained from Eq. (6.45),

$$\begin{aligned} \chi = -\frac{\partial^2 \Omega}{\partial B^2} = \chi_0 - \frac{U}{4V} \frac{\partial^2}{\partial B^2} [N_0(\mu_+) N_0(\mu_-)] = \chi_0 + \frac{\mu_B^2 U}{2V} \left[ N_0'^2(\mu) \right. \\ \left. - N_0(\mu) N_0''(\mu) \right]. \end{aligned} \quad (6.54)$$

This result gives the spin susceptibility as a function of chemical potential. In order to express it as a function of  $N$ , we should involve that  $\chi_0 = \mu_B^2 N_0'(\mu)$  and the shift of the chemical potential due to interaction, see Eq. (6.53). Then, we obtain

$$\begin{aligned} \chi = \mu_B^2 N_0'(\mu_0) + \frac{\mu_B^2 U}{2V} N_0(\mu_0) N_0''(\mu_0) + \frac{\mu_B^2 U}{2V} \left[ N_0'^2(\mu_0) - N_0(\mu_0) N_0''(\mu_0) \right] \\ = \mu_B^2 N_0'(\mu_0) + \frac{\mu_B^2 U}{2V} N_0'^2(\mu_0). \end{aligned} \quad (6.55)$$

## 6.6 Seminar VI

In this section, we consider Problems Nos. 15 and 16.

### 6.6.1 Problem 15

Let us find variation of chemical potential  $\delta\mu$  at zero temperature due to varying the number of particles,  $\delta N$ . Let us use Eq. (2.21) at  $p = p_F$  such that  $\delta\varepsilon_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{p}) \equiv \delta\mu \delta_{\sigma_1\sigma_2}$ . Then we obtain

$$\delta\mu \delta_{\sigma_1\sigma_2} = \delta\varepsilon_F \delta_{\sigma_1\sigma_2} + \sum_{\sigma_3, \sigma_4} \int \frac{d^3 \mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} f_{\sigma_1\sigma_4, \sigma_2\sigma_3}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n_{\sigma_3\sigma_4}(\mathbf{p}'). \quad (6.56)$$

Here  $\delta\varepsilon_F$  is the change of the Fermi energy due to varying the Fermi momentum,

$$\delta\varepsilon_F = \frac{\partial\varepsilon_F}{\partial p_F} \delta p_F = v_F \delta p_F = \frac{p_F}{m_*} \delta p_F, \quad \delta N = \frac{V p_F^2}{\pi^2 \hbar^3} \delta p_F. \quad (6.57)$$

Next, at zero temperature we can write

$$\delta n_{\sigma_3\sigma_4}(\mathbf{p}') = -\frac{\partial n^{(0)}(p')}{\partial \varepsilon_{\mathbf{p}'}} \frac{\pi^2 \hbar^3 \delta N}{p_F m_* V} \delta_{\sigma_3, \sigma_4} = \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'} - \varepsilon_F) \frac{\pi^2 \hbar^3 \delta N}{p_F m_* V} \delta_{\sigma_3, \sigma_4}. \quad (6.58)$$

Substituting Eqs. (6.57) and (6.58) into Eq. (6.56), we find

$$\begin{aligned} \delta\mu \delta_{\sigma_1\sigma_2} = & \frac{\pi^2 \hbar^3 \delta N}{p_F m_* V} \delta_{\sigma_1\sigma_2} + \frac{\pi^2 \hbar^3 \delta N}{2p_F m_* V} \sum_{\sigma_3, \sigma_4} \int_0^\pi \frac{d\theta \sin \theta}{2} \left[ F^{(0)}(\theta) \delta_{\sigma_1\sigma_2} \delta_{\sigma_4\sigma_3} \right. \\ & \left. + F^{(\sigma)}(\theta) \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1\sigma_2} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_4\sigma_3} \right] \delta_{\sigma_3\sigma_4}, \end{aligned} \quad (6.59)$$

where  $\theta = \angle(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ . Hence, we obtain,

$$\delta\mu = \frac{1 + F_0^{(0)}}{\nu_F V} \delta N. \quad (6.60)$$

Here  $\nu_F = \frac{p_F m_*}{\pi^2 \hbar^3}$  denotes the density of states at the Fermi surface. Finally, we find

$$\frac{\partial \mu}{\partial N} = \frac{1 + F_0^{(0)}}{\nu_F V}. \quad (6.61)$$

### 6.6.2 Problem 16

The correction to the quasiparticle energy at  $p = p_F$  in the magnetic field and interaction can be written as,

$$\delta\varepsilon(\mathbf{p})_{\sigma_1, \sigma_2} = -\mu_B \mathbf{B} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2} + \sum_{\sigma_3, \sigma_4} \int \frac{d^3 \mathbf{p}'}{(2\pi \hbar)^3} f_{\sigma_1\sigma_4, \sigma_2\sigma_3} \delta n_{\sigma_3\sigma_4}(\mathbf{p}'). \quad (6.62)$$

We are interested in the change  $\delta n_{\sigma_3\sigma_4}(\mathbf{p}')$  that occurs due to magnetic field. At zero temperature we find

$$\delta n_{\sigma_3\sigma_4}(\mathbf{p}') = \frac{\partial n^{(0)}(p')}{\partial \varepsilon_{\mathbf{p}'}} \delta\varepsilon(\mathbf{p}')_{\sigma_3, \sigma_4} = -\delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'} - \varepsilon_F) \delta\varepsilon(\mathbf{p}')_{\sigma_3, \sigma_4}. \quad (6.63)$$

Hence, we obtain

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon(\mathbf{p})_{\sigma_1, \sigma_2} = & -\mu_B (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{B})_{\sigma_1, \sigma_2} - \frac{1}{2} \sum_{\sigma_3, \sigma_4} \int_0^\pi \frac{d\theta \sin \theta}{2} \left[ F^{(0)}(\theta) \delta_{\sigma_1\sigma_2} \delta_{\sigma_4\sigma_3} \right. \\ & \left. + F^{(\sigma)}(\theta) \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1\sigma_2} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_4\sigma_3} \right] \delta\varepsilon_{\sigma_3\sigma_4}(\mathbf{p}'), \end{aligned} \quad (6.64)$$



where  $\theta = \angle(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ . Let us seek the solution of Eq. (6.64) in the form of the energy shift in the absence of interaction but with the renormalized  $g$ -factor,  $\delta\varepsilon(\mathbf{p})_{\sigma_1, \sigma_2} = -(g/2)\mu_B \mathbf{B} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2}$ . Then, it leads to the following equation,

$$-\frac{g}{2}\mu_B \mathbf{B} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2} = -\mu_B \mathbf{B} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2} + F^{(\sigma)_0} \frac{g}{2}\mu_B \mathbf{B} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2}. \quad (6.65)$$

Finally, we obtain the renormalized  $g$ -factor in the Fermi liquid,

$$g = \frac{2}{1 + F_0^{(\sigma)}}. \quad (6.66)$$

Since the quasiparticle energy shift due to magnetic field is momentum-independent, we can use the expression for the free electron gas, cf. Eq. (6.53), but with the renormalized  $g$ -factor. Then, we find the Pauli spin susceptibility of the Fermi liquid,

$$\chi = \frac{g}{2}\mu_B^2 \nu_F. \quad (6.67)$$

## 6.7 Seminar VII

In this section we present the solutions for Problems Nos. 17, 18, and 19.

### 6.7.1 Problem 17

The ground state energy of the weakly non-ideal Bose gas has the following form (see Eq. (2.42)):

$$E_0 = \frac{UN^2}{2V} + \sum_{\mathbf{p}} \left[ \varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) - \frac{UV}{N} \right]. \quad (6.68)$$

It is useful to point out that a sum over  $\mathbf{p}$  diverges. Fortunately, this divergence has a physical origin. At first, we should understand that potential  $U$  is a constant in the sum and does not represent some physical measurable quantity. The real physical quantity is the scattering length. This means that we must express all results in terms of the scattering length. In the main approximation, the ground state energy and the scattering length are  $E_0 = \frac{UN^2}{2V}$  and  $a = \frac{mU}{4\pi}$ , respectively. Therefore, we obtain  $E_0 = \frac{2\pi a N^2}{mV}$ . In order to find next order correction in the ground state energy, we have to write the following expression that relates the scattering length and  $U$ ,

$$U = \frac{4\pi a}{m} \left[ 1 - \frac{4\pi a}{mV} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{1}{p^2} \right]. \quad (6.69)$$

This expression involves a diverging sum. This divergence indicates that one cannot approximate the interaction potential by the constant  $U$  at very short scales. However, using the above expression, we find

$$E_0 = \frac{Nmu^2}{2} + \sum_{\mathbf{p}} \left[ \varepsilon(p) - \varepsilon^{(0)}(p) - mu^2 + \frac{m^3 u^4}{p^2} \right] \quad (6.70)$$

where  $u = \sqrt{\frac{4\pi a N}{m^2 V}}$ . Surprisingly this integral converges! We see that the divergence has been removed by introducing the proper expression for the scattering length. This effect is called the renormalization. Now we should calculate the following integral,

$$f(X) = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \left[ \sqrt{\varepsilon^{(0)}(p)^2 + \varepsilon^{(0)}(p)X} - \varepsilon^{(0)}(p) - \frac{X}{2} + \frac{X^2}{8\varepsilon^{(0)}(p)} \right]. \quad (6.71)$$

To calculate integral, we should find the magnitude of function  $f(X)$  at the point  $X = 2mu^2$ . To calculate the above integral we should take the third derivative and note that  $f(0) = f'(0) = f''(0) = 0$ . We have:

$$f'''(X) = V \frac{3\sqrt{2m^3}}{16\pi^2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon}{(X + \varepsilon)^{5/2}} = \frac{\sqrt{2m^3}}{4\pi^2 \sqrt{X}}. \quad (6.72)$$

As a result

$$f(X) = V \frac{2\sqrt{2m^3} X^{5/2}}{15\pi^2}, \quad f(X = 2mu^2) = V \frac{16m^4 u^5}{15}. \quad (6.73)$$

Substituting the above expression to  $E_0$  results in Eq. (2.44).

### 6.7.2 Problem 18

In this problem we should calculate the number of particles in the condensate at temperatures  $\mu(0) \ll T \ll T_{\text{BEC}}(an^{1/3})^{1/4}$ . The number of particles in the condensate can be calculated as follows, see Eq. (2.49),

$$\begin{aligned} N_0(T) &= N - V \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} [u_p^2 f_B(\varepsilon_p) + v_p^2 (f_B(\varepsilon_p) + 1)] \\ &= N - V \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \left[ \frac{\varepsilon_0(p) + mu^2}{\varepsilon_p} f_B(\varepsilon_p) + \frac{\varepsilon_0(p) + mu^2 - \varepsilon(p)}{2} \right] \\ &= N_0(T = 0) - V \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_0(p) + mu^2}{\varepsilon_p} f_B(\varepsilon_p). \end{aligned} \quad (6.74)$$

Let us transform integration over  $p$  to integration over  $\varepsilon_0 = \varepsilon_p^{(0)} = p^2/(2m)$ . Then we find

$$N_0(T) = N_0(T=0) - \frac{V}{\pi^2} \sqrt{\frac{m^3}{2}} \int_0^\infty d\varepsilon_0 \sqrt{\varepsilon_0} \frac{\varepsilon_0 + mu^2}{\varepsilon_p} f_B(\varepsilon_p). \quad (6.75)$$

Next, we change the integration variable  $\varepsilon_0$  to the integration over  $\varepsilon = \sqrt{(\varepsilon_0 + mu^2)^2 - (mu^2)^2}$ . Then we obtain

$$\begin{aligned} N_0(T) &= N_0(T=0) - \frac{V}{\pi^2} \sqrt{\frac{m^3}{2}} \int_0^\infty \sqrt{\sqrt{\varepsilon^2 + (mu^2)^2} - mu^2} f_B(\varepsilon) d\varepsilon \\ &= N_0(T=0) - N + N_0^{(0)}(T) - \frac{V}{\pi^2} \sqrt{\frac{m^3}{2}} \int_0^\infty \left( \sqrt{\sqrt{\varepsilon^2 + (mu^2)^2} - mu^2} - \sqrt{\varepsilon} \right) \\ &\quad \times f_B(\varepsilon) d\varepsilon = N_0(T=0) - N + N_0^{(0)}(T) - \frac{Vm^3u^3}{\pi^2\sqrt{2}} F(mu^2/T). \end{aligned} \quad (6.76)$$

Here  $N_0^{(0)}(T) = N[1 - (T/T_{\text{BEC}}^{(0)})^{3/2}]$  is the number of condensate particles for the noninteracting Bose gas. The function  $F(z)$  is given as

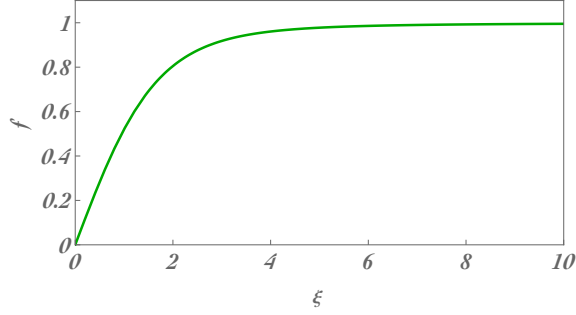
$$\begin{aligned} F(z) &= \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{\sqrt{1+x^2} - 1} - \sqrt{x}}{e^{zx} - 1} \\ &= \begin{cases} z^{-1} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{\sqrt{1+x^2} - 1} - \sqrt{x}}{x} = -\frac{\pi}{z\sqrt{2}}, & z \ll 1, \\ \int_0^\infty dy \frac{-\sqrt{y}z^{-3/2} + yz^{-2}}{e^y - 1} = -\frac{\zeta(3/2)\sqrt{\pi}}{2z^{3/2}} + \frac{\pi^2}{6z^2}, & z \gg 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (6.77)$$

Hence we obtain

$$N_0(T) = N_0(T=0) - \frac{VmT^2}{6\sqrt{2}u}, \quad T \ll mu^2, \quad (6.78)$$

and

$$N_0(T) = N_0(T=0) - N \left( \frac{T}{T_{\text{BEC}}^{(0)}} \right)^{3/2}, \quad mu^2 \ll T \ll T_{\text{BEC}}. \quad (6.79)$$

Рис. 6.1: The function  $f(\xi)$ .

### 6.7.3 Problem 19

The vortex solution of the Gross–Pitaevskii equation (2.54) can be represented as  $\Psi_0(\mathbf{r}) = e^{i\varphi} A f(r/r_0)$  and the scale  $r_0$  describes the vortex size. Substituting the above ansatz into Eq. (2.54) and introducing new variable  $\xi = r/r_0$ , we find,

$$-\frac{A}{2mr_0^2} \left[ \frac{1}{\xi} \partial_\xi (\xi \partial_\xi f) - \frac{f}{\xi^2} \right] - \mu A f + \frac{4\pi a}{m} A^3 f^3 = 0. \quad (6.80)$$

If we choose the amplitude  $A = \sqrt{\mu m / (4\pi a)}$  and the size  $r_0 = \sqrt{2m/\mu}$ , we obtain the dimensionless equation which can numerically be solved

$$-\left[ \frac{1}{\xi} \partial_\xi (\xi \partial_\xi f) - \frac{f}{\xi^2} \right] - f + f^3 = 0. \quad (6.81)$$

It is easy to check that  $f(\xi) \simeq a\xi$  at  $\xi \rightarrow 0$  and  $f(\xi) \simeq 1 + b \exp(-\sqrt{2}\xi)$  at  $\xi \rightarrow \infty$ . The numerical constants  $a$  and  $b$  can be found by means of numerical solution of the above equation. Details of numerical solution by shooting method can be found in Ref. [23]. In particular, one finds  $a \approx 0.5832$ . The behavior of the function  $f(\xi)$  is shown in Fig. 6.1.

## 6.8 Семинар VIII

В этом разделе рассматриваются решения для задач № 20, 21 и 22.

### 6.8.1 Задача 20

Энергия двух возбуждений задаётся как  $\varepsilon(p_1) + \varepsilon(p_2) + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)\mathbf{v}$ . Ожидается, что эта комбинация должна быть положительной. Это урав-

нение приводит к следующему выражению для критической скорости:  $v_{\text{cr},2} = \min \left( \frac{\varepsilon(p_1) + \varepsilon(p_2)}{p_1 + p_2} \right)$ . Введём функцию  $f(p) = \varepsilon(p)/p$ . Тогда получаем  $[\varepsilon(p_1) + \varepsilon(p_2)]/(p_1 + p_2) = [p_1 f(p_1) + p_2 f(p_2)]/(p_1 + p_2) \geq \min\{f(p_1), f(p_2)\} \geq \min_p f(p) = v_{\text{cr}}$ . Таким образом, действительно, получаем, что  $v_{\text{cr},2} \geq v_{\text{cr}}$ .

### 6.8.2 Задача 21

Плотность нормальной компоненты в сверхтекучей жидкости определяется следующим выражением, см. уравнение (2.60),

$$\rho_n = \frac{1}{3} \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} p^2 \left( -\frac{\partial f_B}{\partial \varepsilon} \right) = \frac{\beta}{12} \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{\sinh^2(\beta \varepsilon(p)/2)}. \quad (6.82)$$

Спектр возбуждений  $\varepsilon(p)$  состоит из двух сегментов: фононного и роторного. Необходимо вычислить вклады от обоих. Начнём с фононного вклада

$$\rho_{n,p} = \frac{\beta}{12} \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{\sinh^2(\beta u p/2)} = \frac{4T^4}{3\pi^2 u^5} \int_0^\infty \frac{x^4 dx}{\sinh^2 x} = \frac{2\pi^2 T^4}{45 u^5}. \quad (6.83)$$

Перейдём теперь к роторному вкладу. При низких температурах, таких что  $m_r T \ll p_0^2$  и  $\Delta \gg T$ , получаем

$$\begin{aligned} \rho_{n,r} &= \frac{\beta}{12} \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{\sinh^2(\beta \varepsilon(p)/2)} \simeq \frac{\beta}{6\pi^2} p_0^4 e^{-\Delta/T} \int_{-\infty}^\infty d\delta p e^{-\beta \delta p^2/(2m_r)} \\ &= \frac{p_0^4}{6\pi^2} \sqrt{\frac{2\pi m_r}{T}} e^{-\Delta/T}, \end{aligned} \quad (6.84)$$

где  $\delta p = p - p_0$ . Отметим, что, хотя роторный вклад экспоненциально мал при  $T \ll \Delta$ , он преобладает над фононным вкладом при более высоких температурах ( $T \gtrsim 0.7$  K).

### 6.8.3 Задача 22

Вклад роторных возбуждений в теплоёмкость можно аналогично вычислить с использованием того же интеграла, что и в предыдущей задаче. При условии, что  $m_r T \ll p_0^2$  и  $T \ll \Delta$ , получаем

$$\begin{aligned} E_r &= V \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon(p)}{e^{\beta \varepsilon(p)} - 1} \simeq V \frac{p_0^2 \Delta}{2\pi^2} e^{-\beta \Delta} \int_{-\infty}^\infty d\delta p e^{-\beta \delta p^2/(2m_r)} \\ &= V \frac{p_0^2 \Delta}{2\pi^2} e^{-\beta \Delta} \sqrt{2\pi m_r T}. \end{aligned} \quad (6.85)$$

Отсюда получаем

$$C_V = \frac{\partial E_r}{\partial T} = V \frac{p_0^2 \Delta^2 m_r^{1/2}}{\sqrt{2\pi^3 T^{3/2}}} e^{-\Delta/T}. \quad (6.86)$$

## 6.9 Seminar IX

In this section we present the solutions for Problems Nos. 23 and 24.

### 6.9.1 Problem 23

We should find the temperature dependence of the superconducting gap near  $T_c$ . It can be found from the self-consistent equation, cf. Eq. (2.77),

$$1 = \frac{\lambda g(E_F)}{2} \int_0^\infty \frac{d\xi}{\varepsilon_\xi} \tanh\left(\frac{\varepsilon_\xi}{2T}\right) \quad (6.87)$$

where  $\varepsilon_\xi = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}$  is the spectrum of superconducting quasiparticles. Here we again use the trick called “integration over  $\xi$ ”, described above. This integral does not converge and must be regularized at some ultra-violet scale. As it is mentioned in the Lecture, this ultra-violet scale determines the magnitude of the zero-temperature gap. Therefore, it is convenient to rewrite the self-consistent equation as,

$$\begin{aligned} \ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right) &= \int_0^\infty \frac{d\xi}{\varepsilon_\xi} \left(1 - \tanh\left(\frac{\varepsilon_\xi}{2T}\right)\right) = 2I(u), \\ I(u) &= \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{x^2 + u^2}} \frac{1}{\exp[\sqrt{x^2 + u^2}] + 1} \end{aligned} \quad (6.88)$$

where  $u = \Delta/T$ . In order to compute  $I(u)$  at  $u \rightarrow 0$ , let us split the integral  $I(u)$  as follows,

$$I(u) = \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^\infty dx \left( \frac{1}{\sqrt{x^2 + u^2}} - \frac{\tanh \frac{x}{2}}{x} \right)}_{I_1} + \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^\infty dx \left( \frac{\tanh \frac{x}{2}}{x} - \frac{\tanh \frac{\sqrt{x^2 + u^2}}{2}}{\sqrt{x^2 + u^2}} \right)}_{I_2}. \quad (6.89)$$

For the first integral, we obtain

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \left[ d \ln(x + \sqrt{x^2 + u^2}) - \tanh\left(\frac{x}{2}\right) d \ln x \right] = \frac{1}{2} \ln \frac{2}{u} + \frac{1}{4} \int_0^\infty \frac{dx \ln x}{\cosh^2(x/2)} \\ &= \frac{1}{2} \ln \frac{2}{u} + \frac{1}{2} \left( \ln \frac{\pi}{2} - \gamma \right), \end{aligned} \quad (6.90)$$

where  $\gamma \approx 0.577$  is the Euler constant. Expanding the second integral in powers of  $u$ , we find

$$\begin{aligned} I_2 &\simeq -\frac{u^2}{4} \int_0^\infty \frac{dx}{x} \left( \frac{1}{x} \tanh \frac{x}{2} \right)' = 2u^2 \sum_{n=0}^\infty \int_0^\infty \frac{dx}{[\pi^2(2n+1)^2 + x^2]^2} \\ &= \frac{u^2}{2\pi^2} \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{(2n+1)^3} = \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2} u^2 \end{aligned} \quad (6.91)$$

Above we used the following representation

$$\tanh \frac{x}{2} = \sum_{n=0}^\infty \frac{4x}{\pi^2(2n+1)^2 + x^2}. \quad (6.92)$$

Therefore, we obtain

$$I(u) = \frac{1}{2} (\ln(\pi/u) - \gamma) + \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2} u^2 + \dots \quad (6.93)$$

[to check solution below ]

In order to evaluate  $I(u)$ , we consider the technique which helps us to find the asymptotics of integrals. With this method one can find not only the power-law terms but also the logarithmic one. First of all, we choose  $y = \sqrt{x^2 + u^2}$  as an integration variable,

$$I(u) = \int_u^\infty \frac{dy}{\sqrt{y^2 - u^2}} \frac{1}{e^y + 1} = \int_0^\infty dy \frac{\Theta(y - u)}{\sqrt{y^2 - u^2}} \frac{1}{e^y + 1}. \quad (6.94)$$

After that we can use the representation for the first function known as the Mellin transform,

$$\frac{\Theta(y - u)}{\sqrt{y^2 - u^2}} = - \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{\sqrt{\pi} u^{\alpha-1} \Gamma(\frac{1-\alpha}{2})}{\alpha \Gamma(-\frac{\alpha}{2})} y^{-\alpha} \frac{d\alpha}{2\pi i} \quad (6.95)$$

where  $0 < a < 1$ . Substituting this expression into Eq. (6.94), we find,

$$I(u) = - \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{d\alpha}{2\pi i} \frac{\sqrt{\pi} u^{\alpha-1} \Gamma(\frac{1-\alpha}{2})}{\alpha \Gamma(-\frac{\alpha}{2})} \int_0^\infty \frac{dy y^{-\alpha}}{e^y + 1} dy = \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{d\alpha}{2\pi i} \frac{\sqrt{\pi} u^{\alpha-1} \Gamma(\frac{1-\alpha}{2})}{\alpha \Gamma(-\frac{\alpha}{2})} \times \Gamma(1-\alpha) \zeta(1-\alpha) (2^\alpha - 1). \quad (6.96)$$

Here  $\zeta(z)$  denotes the Riemann zeta-function. Using the following identity,  $\zeta(1-\alpha) = \frac{2^{-\alpha} \pi^{1-\alpha} \zeta(\alpha)}{\Gamma(1-\alpha) \sin(\pi\alpha/2)}$ , we find,

$$I(u) = \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{d\alpha}{2\pi i} \frac{\pi^{3/2-\alpha} u^{\alpha-1} \Gamma(\frac{1-\alpha}{2})}{\alpha \Gamma(-\frac{\alpha}{2}) \sin(\pi\alpha/2)} (1 - 2^{-\alpha}) \zeta(\alpha) = -\frac{1}{2} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{d\alpha}{2\pi i} \pi^{1/2-\alpha} u^{\alpha-1} \times \Gamma\left(\frac{1-\alpha}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\alpha}{2}\right) (1 - 2^{-\alpha}) \zeta(\alpha). \quad (6.97)$$

Performing this integral, one should close the contour on the right-hand side of complex plane, resulting in the expansion (6.93) in a series in  $u$ . Substituting the expansion (6.93) into the self-consistent equation, we obtain the following equation for  $\Delta \ll T$ :

$$\ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right) = \ln \frac{\pi T}{\Delta} - \gamma + \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} \left(\frac{\Delta}{T}\right)^2. \quad (6.98)$$

This expression gives the value for  $T_c = \Delta_0 e^\gamma / \pi$  and also leads to the following temperature dependence,

$$\Delta(T) = T_c \left[ \frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \right]^{1/2}. \quad (6.99)$$

The condensation free energy can be written as follows, cf. Eq. (2.76),

$$F_{\text{cond}} = F[\Delta] - F[0] = \sum_{\mathbf{p}} \left( |\xi_{\mathbf{p}}| - \varepsilon(p) + \frac{\Delta^2}{2\varepsilon(p)} \right) - \sum_{\mathbf{p}} \frac{\Delta^2}{\varepsilon(p)} f_F(\varepsilon(p)) - 2T \sum_{\mathbf{p}} \ln \frac{1 + e^{-\beta\varepsilon(p)}}{1 + e^{-\beta|\xi_{\mathbf{p}}|}}. \quad (6.100)$$

The first sum over  $p$  has been found in the Lecture. The second sum is calculated above. Therefore, we find,

$$F_{\text{cond}} = -\frac{1}{4} V g(E_F) \Delta^2 - V g(E_F) \Delta^2 I(\Delta/T) + 2V g(E_F) T^2 K(\Delta/T), \quad (6.101)$$

$$K(u) = \int_0^\infty dx \ln \frac{1 + e^{-\sqrt{x^2+u^2}}}{1 + e^{-x}}.$$



It is readily to check that  $K'(u) = uI(u)$ . Hence, we obtain at  $u \ll 1$ .

$$K(u) = \frac{u^2}{4} \left( \ln \frac{\pi}{u} - \gamma + \frac{1}{2} \right) + \frac{7\zeta(3)u^4}{64\pi^2} + \dots \quad (6.102)$$

Summing all contributions, we find

$$F_{\text{cond}} = -\frac{7\zeta(3)}{32\pi^2} \frac{Vg(E_F)\Delta^4}{T^2} = -\frac{2\pi^2}{7\zeta(3)} Vg(E_F)(T_c - T)^2. \quad (6.103)$$

### 6.9.2 Problem 24

We should find the magnitude of jump-like discontinuity in the specific heat at the superconducting transition point. We use Eq. (2.82) and the expression for  $\Delta(T)$  from the previous problem. Then, we find

$$C_V = Vg(E_F) \int_0^\infty d\xi \frac{\varepsilon(p)}{2 \cosh^2 \left( \frac{\varepsilon(p)}{2T} \right)} \left( \frac{\varepsilon(p)}{T^2} - \frac{1}{2\varepsilon(p)T} \frac{d\Delta^2}{dT} \right). \quad (6.104)$$

Hence, we find for the specific heat jump,

$$\Delta C_V = -Vg(E_F) \frac{d\Delta^2}{dT} \int_0^\infty d\xi \frac{1}{4T \cosh^2 \left( \frac{\varepsilon(p)}{2T} \right)} = V \frac{4\pi^2}{7\zeta(3)} g(E_F) T_c = V \frac{4mp_F}{7\zeta(3)} T_c. \quad (6.105)$$

We note that this result can be obtained as second derivative of  $F_{\text{cond}}$ , cf. Eq. (6.103).

## 6.10 Seminar X

In this seminar we consider Problems Nos. 25, 26, and 27.

### 6.10.1 Problem 25

This problem is solved with applying the general method useful in many other problems. Let us consider two operators  $A$  and  $B$ . They obey the following property: if  $C := [A, B]$ , then  $[C, A] = [C, B] = 0$ . In this case, we can simplify the expression  $\exp(A + B)$ . First of all, let us consider how  $A$  ‘acts’ on some function of  $B$ ,

$$[A, B^n] = [A, B^{n-1}]B + B^{n-1}[A, B] = nCB^{n-1} \quad \Rightarrow \quad [A, f(B)] = Cf'(B). \quad (6.106)$$

The other important identity is a derivative of operator  $\exp[A(x)]$  with respect to  $x$ . The convenient expression can be derived in the following way,

$$\begin{aligned}
\partial_x e^{A(x)} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n-1} A^k(x) A'(x) A^{n-1-k}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{n-1} \int_0^1 dt \frac{t^k (1-t)^{n-1-k}}{k!(n-k-1)!} A^k(x) \\
&\quad \times A'(x) A^{n-1-k}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=k+1}^{\infty} \int_0^1 dt \frac{t^k (1-t)^{n-1-k}}{k!(n-k-1)!} A^k(x) A'(x) A^{n-1-k}(x) \\
&= \int_0^1 dt \left( \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^j A^j(x)}{j!} \right) A'(x) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(1-t)^l A^l(x)}{l!} = \int_0^1 dt e^{tA(x)} A'(x) e^{(1-t)A(x)}.
\end{aligned} \tag{6.107}$$

After the above preliminaries we turn our attention to the problem. We should calculate the following expression

$$f(\alpha_q, \beta_q) = \langle \exp[\alpha_q b_q + \beta_q b_q^\dagger] \rangle = \text{Tr} \left\{ \exp[\alpha_q b_q + \beta_q b_q^\dagger] e^{-\beta H} \right\} / \text{Tr} e^{-\beta H}. \tag{6.108}$$

Let us calculate the derivative over  $\alpha_q$  (here  $A = \alpha_q b_q + \beta_q b_q^\dagger$ ),

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial \alpha_q} &= \int_0^1 dt \text{Tr} \left[ e^{tA} b_q e^{(1-t)A} e^{-\beta H} \right] / \text{Tr} e^{-\beta H} = \text{Tr} [b_q e^A e^{-\beta H}] / \text{Tr} e^{-\beta H} \\
&\quad - \int_0^1 dt \text{Tr} \left\{ [b_q, e^{tA}] e^{(1-t)A} e^{-\beta H} \right\} / \text{Tr} e^{-\beta H}.
\end{aligned} \tag{6.109}$$

Since  $[b_q, A] = \beta_q$ , we find  $[b_q, e^{tA}] = \beta_q t e^{tA}$ . Next, we use the following transformations

$$\begin{aligned}
\text{Tr} [b_q e^A e^{-\beta H}] &= \text{Tr} [e^A e^{-\beta H} b_q] = e^{\beta \omega_q} \text{Tr} [e^A b_q e^{-\beta H}] = e^{\beta \omega_q} \int_0^1 dt \text{Tr} [e^{tA} e^{(1-t)A} \\
&\quad \times b_q e^{-\beta H}] = e^{\beta \omega_q} \int_0^1 dt \left( \text{Tr} [e^{tA} b_q e^{(1-t)A} e^{-\beta H}] - \text{Tr} \left\{ e^{tA} [b_q, e^{(1-t)A}] e^{-\beta H} \right\} \right) \\
&= e^{\beta \omega_q} \left( \frac{\partial f}{\partial \alpha_q} - \frac{\beta_q}{2} \right) \text{Tr} e^{-\beta H}.
\end{aligned} \tag{6.110}$$

Hence, we obtain the equation for the function  $f$ ,

$$\frac{\partial f}{\partial \alpha_q} = \frac{\beta_q}{2} \coth \frac{\omega_q}{2T} f. \quad (6.111)$$

Using the initial condition  $f(0, \beta_q) = 1$ , we find

$$f(\alpha_q, \beta_q) = \exp \left( \frac{\alpha_q \beta_q}{2} \coth \frac{\omega_q}{2T} \right). \quad (6.112)$$

As  $f(0, \alpha_+) = 1$ , we have  $f = \exp[\frac{\alpha_+ \alpha_-}{2} \coth(\frac{\omega_q}{2T})]$  yielding the answer for the problem.

### 6.10.2 Problem 26

The annihilation operator for the electron traveling to the right side is determined as  $\psi_R(x) = \sum_p \exp(-ipx) a_{+,p}^\dagger$  and obeys the commutation relations

$$[b_{+,q}^\dagger, \psi_R(x)] = -\sqrt{\frac{2\pi}{qL}} e^{-iqx} \psi_R(x), \quad [b_{+,q}, \psi_R(x)] = -\sqrt{\frac{2\pi}{qL}} e^{iqx} \psi_R(x). \quad (6.113)$$

Here we use the representation of the bosonic operators in terms of electron density. Now let us try to represent the fermionic operator  $\psi_R(x)$  as the product of fermionic operator  $\Psi_R(x)$  and bosonic operators. Using the methods developed in Problem 25, one can check that provided that  $[b_{+,q}^\dagger, \Psi_R(x)] = [b_{+,q}, \Psi_R(x)] = 0$ , the operator

$$\psi_R(x) = \Psi_R(x) \exp \left[ -(2\pi/(qL))^{1/2} \sum_{q>0} \left( e^{-iqx} b_{+,q}^\dagger - e^{iqx} b_{+,q} \right) \right] \quad (6.114)$$

obeys the commutation relations Eq. (6.113).

We note that the operator  $\Psi_R(x)$  should change the total number of the right movers  $N_R$  by one. Let us consider the operator  $\phi_{R,0}$  that satisfies the following commutation relation

$$[\mathcal{N}_R, \phi_{R,0}] = i \quad \Rightarrow \quad [e^{i\phi_{R,0}}, \mathcal{N}_R] = e^{i\phi_{R,0}}. \quad (6.115)$$

As follows from the last commutation relation, operator  $e^{i\phi_{R,0}}$  has single nonzero matrix element  $\langle N_R - 1 | e^{i\phi_{R,0}} | N_R \rangle$ . The same matrix element has the fermionic operator  $\Psi_R(x)$ .

Finally, for the formulation in the real space, it is convenient to have the following relation  $\rho_R(x) = \partial\phi_R(x)/\partial x$ . Then using the relation

$$\rho_R(x) = \frac{\mathcal{N}_R}{L} + (q/(2\pi L))^{1/2} \sum_{q>0} \left( e^{-iqx} b_{+,q}^\dagger + e^{iqx} b_{+,q} \right), \quad (6.116)$$

we find finally,

$$\psi_R(x) \sim e^{i\phi_R(x)}, \quad \phi_R(x) = \phi_{R,0} + \frac{\mathcal{N}_R x}{L} + i \sum_{q>0} \sqrt{\frac{2\pi}{qL}} (e^{-iqx} b_{+,q}^\dagger - e^{iqx} b_{+,q}). \quad (6.117)$$

This relation is referred to as the Mattis–Mandelstam formula.

### 6.10.3 Problem 27

Let us introduce new bosonic operators,

$$\begin{aligned} a_{\eta,q}^\dagger &= \frac{b_{\eta,\uparrow,q}^\dagger + b_{\eta,\downarrow,q}^\dagger}{\sqrt{2}}, & a_{\eta,q} &= \frac{b_{\eta,\uparrow,q} + b_{\eta,\downarrow,q}}{\sqrt{2}}, \\ d_{\eta,q}^\dagger &= \frac{b_{\eta,\uparrow,q}^\dagger - b_{\eta,\downarrow,q}^\dagger}{\sqrt{2}}, & d_{\eta,q} &= \frac{b_{\eta,\uparrow,q} - b_{\eta,\downarrow,q}}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (6.118)$$

We emphasize that they obey the usual commutation relations,

$$[a_{\eta,q}^\dagger, a_{\eta',q'}] = \delta_{\eta,\eta'} \delta_{q,q'}, \quad [d_{\eta,q}^\dagger, d_{\eta',q'}] = \delta_{\eta,\eta'} \delta_{q,q'}. \quad (6.119)$$

The bosonic states for operators  $a^\dagger, a$  and  $d^\dagger, d$  are independent,

$$[a_{\eta,q}^\dagger, d_{\eta',q'}] = 0, \quad [d_{\eta,q}^\dagger, a_{\eta',q'}] = 0. \quad (6.120)$$

We note that the operators  $a^\dagger, a$  corresponds to the total density whereas the operators  $d^\dagger, d$  describe the spin density. In terms of new operators the Hamiltonian can be rewritten as

$$\mathcal{H}_{LL} = \sum_{\eta,q>0} v_F q d_{\eta,q}^\dagger d_{\eta,q} + \sum_{\eta,q>0} \left[ (v_F + 2g_4) q a_{\eta,q}^\dagger a_{\eta,q} + g_2 (a_{\eta,q}^\dagger a_{-\eta,q}^\dagger + a_{\eta,q} a_{-\eta,q}) \right]. \quad (6.121)$$

We apply the canonical transformation to the operators  $a^\dagger, a$ ,

$$a_{\eta,q}^\dagger = \cosh \theta_q \beta_{\eta,q}^\dagger + \sinh \theta_q \beta_{-\eta,q}, \quad a_{\eta,q} = \cosh \theta_q \beta_{\eta,q} + \sinh \theta_q \beta_{-\eta,q}^\dagger, \quad (6.122)$$

where

$$\cosh 2\theta_q = \frac{v_F + 2g_4}{u}, \quad \sinh 2\theta_q = -\frac{2g_2}{u}, \quad u = \sqrt{(v_F + 2g_4)^2 - 4g_2^2}. \quad (6.123)$$

The Hamiltonian, rewritten in new operators, reads

$$\mathcal{H}_{\text{LL}} = E_G + \sum_{\eta, q > 0} v_F q d_{\eta, q}^\dagger d_{\eta, q} + \sum_{\eta, q > 0} u q \beta_{\eta, q}^\dagger \beta_{\eta, q}, \quad E_G = \frac{1}{2} \sum_{q > 0} (u - v_F - 2g_4) q. \quad (6.124)$$

The disentangling of spin and density channels in the Luttinger liquid Hamiltonian is an example of the spin-charge separation in the strongly correlated systems.

## 6.11 Seminar XI

In this section we present the solutions for Problems Nos. 28 and 29.

### 6.11.1 Задача 28

Рассмотрим основное состояние одномерной модели Изинга в отсутствии магнитного поля. В основном состоянии все спины ориентированы в одном направлении. Можно рассмотреть возмущение основного состояния. Возбужденное состояние, соответствующее такому возмущению, называется *доменной стенкой*: некоторые спины ориентированы параллельно исходному направлению, а другие — нет. Существует только один сайт, на котором соседние спины антипараллельны друг другу. Разница между энергией основного состояния и энергией возбужденного состояния с доменной стенкой равна  $\Delta E = 2J$ . Если имеется  $n$  доменных стенок, энергия такой конфигурации будет  $\Delta E_n = 2Jn$ .

Свободная энергия модели при нулевом магнитном поле имеет вид

$$F = -LT \ln (1 + e^{-2\beta J}).$$

Это приводит к энергии

$$E = 2LJ \frac{e^{-\beta J}}{e^{\beta J} + e^{-\beta J}}.$$

Таким образом, плотность доменных стенок можно записать как

$$\rho = \frac{E}{2JL} = \frac{1}{e^{2\beta J} + 1}.$$

Отметим, что плотность доменных стенок совпадает с распределением Ферми-Дирака.

### 6.11.2 Задача 29

Задача по вычислению корреляционной функции ранее в курсе не рассматривалась. Мы не можем использовать свободную энергию для её решения. К счастью, передаточная матрица также может служить для этой цели. Сначала вычислим среднее значение спина в одномерной модели Изинга с периодическими граничными условиями:

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \sigma_i e^{-\beta E_{\sigma_1, \dots, \sigma_N}} = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_i} \sigma_i (\mathcal{T}^L)_{\sigma_i, \sigma_i}, \quad Z = \text{tr } \mathcal{T}^L \quad (6.125)$$

где  $L = N - 1$ . Как и в лекции, можно переписать последнее выражение в виде следа от матричного произведения:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \rangle &= \frac{1}{Z} \text{tr} [\tau_z \mathcal{T}^L] = \frac{1}{Z} \text{tr} [\mathcal{U}^{-1} \tau_z \mathcal{U} \Lambda^L] = \cos(2\phi) \\ &= \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta h)}}. \end{aligned} \quad (6.126)$$

Матрица  $\tau_z$  помогает нам вычислить корреляционную функцию,

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle &= \frac{1}{Z} \text{tr} [\tau_z \mathcal{T}^n \tau_z \mathcal{T}^{L-n}] = \frac{1}{Z} \text{tr} [\mathcal{U}^{-1} \tau_z \mathcal{U} \Lambda^n \mathcal{U}^{-1} \tau_z \mathcal{U} \Lambda^{L-n}] \\ &= \cos^2(2\phi) + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^n \sin^2(2\phi). \end{aligned} \quad (6.127)$$

Для физических приложений более интересна так называемая редуцированная корреляционная функция,

$$\langle \langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle \rangle = \langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_{i+n} \rangle = e^{-n \ln(\lambda_+/\lambda_-)} \sin^2(2\phi). \quad (6.128)$$

Убывающий характер этой функции описывает физические свойства системы.

## 6.12 Seminar XII

In this section we consider Problems Nos. 30, 31, and 32.

### 6.12.1 Problem 30

The expansion of the thermodynamic potential for the antiferromagnet in the vicinity of the Néel temperature can be written as

$$F = F_0 + AL^2 + BL^4 + D(\mathbf{H}\mathbf{L})^2 + D'H^2L^2 - \frac{\chi_P}{2}H^2 + \frac{\beta}{2}(L_x^2 + L_y^2) - \frac{\gamma}{2}(H_x^2 + H_y^2) - \frac{H^2}{8\pi}. \quad (6.129)$$

Here we assume that  $A = a(T - T_c)$  and  $\beta > 0$  (easy axis). Then at  $H = 0$ , we find

$$L_z = \begin{cases} \sqrt{a(T_c - T)/(2B)}, & T < T_c, \\ 0, & T > T_c. \end{cases} \quad (6.130)$$

The magnetization is given as

$$M = -\frac{H}{4\pi} - \frac{\partial F}{\partial H}. \quad (6.131)$$

For  $T > T_c$ , in the field parallel to the  $z$  axis we find

$$M_z = \chi_z H_z, \quad \chi_z = \chi_p. \quad (6.132)$$

For  $T < T_c$ , we obtain

$$M_z = \chi_z H_z, \quad \chi_z = \chi_p - 2(D + D')L^2 = \chi_p - a(D + D')(T_c - T)/B. \quad (6.133)$$

### 6.12.2 Problem 31

The effective Hamiltonian that describes fluctuations at  $T > T_c$  has the form, cf. Eq. (3.42),

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} \approx \mathcal{H}_{\text{eff}}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \varphi_{\mathbf{p}} \varphi_{-\mathbf{p}} (bp^2 + T - T_c). \quad (6.134)$$

Here we neglect the quartic term in Eq. (3.42). To calculate the correction to the free energy due to fluctuations, we should evaluate the following integral,

$$e^{-\beta \delta F} = \int \prod_{\mathbf{p}} d\varphi_{\mathbf{p}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{eff}}^{(2)}}. \quad (6.135)$$

It is a product of the Gaussian integrals. We note that  $\varphi_{\mathbf{p}} = \varphi_{-\mathbf{p}}^\dagger$ . The result of calculation becomes (within accuracy of some constant),

$$\delta F = \frac{T}{2} \sum_{\mathbf{p}} \ln \left( \frac{bp^2 + T - T_c}{T\pi} \right). \quad (6.136)$$

To calculate the correction to the specific heat, we differentiate with respect to the temperature,

$$\begin{aligned}\delta C_P &= -T \frac{\partial^2 \delta F}{\partial^2 T} \simeq \frac{T_c^2}{2} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{(bp^2 + T - T_c)^2} = \frac{T_c^2 V}{2} \frac{S_d}{(2\pi)^d} \int_0^\infty \frac{dp p^{d-1}}{(bp^2 + T - T_c)^2} \\ &= -\frac{T_c^2 V}{2(T - T_c)^2} \frac{S_d}{(2\pi)^d} \frac{(d-2)\pi}{4 \sin(\frac{\pi d}{2})} \left( \frac{T - T_c}{b} \right)^{d/2}.\end{aligned}\quad (6.137)$$

Here  $S_d$  is the area of unit sphere in the  $d$ -dimensional space. We note that, for  $d > 4$ ,  $\delta C_P$  vanishes as  $T \rightarrow T_c$ . For  $d < 4$ ,  $\delta C_P$  diverges as the temperature approaches  $T_c$ .

### 6.12.3 Problems 32

Before calculating the order parameter, we find the following average ( $T > T_c$ )

$$\langle \varphi_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{q}} \rangle = \frac{\int \prod_{\mathbf{p}} d\varphi_{\mathbf{p}} \varphi_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{q}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{eff}}^{(2)}}}{\int \prod_{\mathbf{p}} d\varphi_{\mathbf{p}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{eff}}^{(2)}}} = \frac{\delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{q}} T_c}{bq^2 + T - T_c}.\quad (6.138)$$

We note that  $G(\mathbf{x}) = \langle \varphi((\mathbf{x})) \varphi(0) \rangle = \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} \langle \varphi_{\mathbf{p}} \varphi_{-\mathbf{p}} \rangle$ . Therefore, we find,

$$\langle \varphi^2 \rangle = G(0) = \frac{S_d V T_c}{(2\pi)^d} \int_0^\infty \frac{dp p^{d-1}}{bp^2 + T - T_c} = \frac{S_d}{(2\pi)^d} \frac{\pi V T_c (T - T_c)^{d/2-1}}{2 \sin(\frac{\pi d}{2}) b^{d/2}}.\quad (6.139)$$

## 6.13 Seminar XIII

In this section we solve Problems Nos. 33 and 34.

### 6.13.1 Problem 33

The scaling dimension of thermodynamic potential  $\delta F$  is  $\Delta_F = d$ . Therefore, one can write,

$$\delta F = t^{d/\Delta_t} f(ht^{-\Delta_h/\Delta_t}).\quad (6.140)$$

Using the relation  $\varphi = -\frac{\partial F}{\partial h}$ , we have  $\Delta_\varphi = d - \Delta_h$ . Next, using the relation  $C_P = T_c \frac{\partial^2 \delta F}{\partial^2 t}$ , one can note that (at zero field)  $\alpha = 2 - d/\Delta_t$ . This leads to the relation  $\nu d = 2 - \alpha$ . For  $t \rightarrow 0$ , we should have  $F \propto t^{d/\Delta_t} (ht^{-\Delta_h/\Delta_t})^{-\varepsilon}$  since  $C_P \propto h^{-\varepsilon}$ . Hence we obtain the relation  $\alpha\mu = \nu\varepsilon$ .



### 6.13.2 Problem 34

For the  $n$ -component field  $\varphi$ , we have the following effective Hamiltonian,

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi] = \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} \left[ \tau \varphi^2 + (\nabla \varphi)^2 + \frac{\lambda}{2} (\varphi^2)^2 \right]. \quad (6.141)$$

Our aim is to perform an integral over the modes with the momenta between  $\Lambda$  and  $\Lambda' = \Lambda/u$ . Splitting on the fast and slow components in the same way as in the lecture, we find the following expression for the effective Hamiltonian,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi] &\approx \mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi}] + \mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)}[\bar{\varphi}] + \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{int}}, \\ \mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi}] &= \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} \left[ \tau \underline{\varphi}^2 + (\nabla \underline{\varphi})^2 + \frac{\lambda}{2} (\underline{\varphi}^2)^2 \right], \\ \mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)}[\bar{\varphi}] &= \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} \left[ \tau \bar{\varphi}^2 + (\nabla \bar{\varphi})^2 \right], \\ \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{int}} &= \frac{\lambda}{4} \int d^d \mathbf{r} \left[ 2(\underline{\varphi}^2)(\bar{\varphi}^2) + 4(\underline{\varphi} \bar{\varphi})^2 \right]. \end{aligned} \quad (6.142)$$

We have neglected the terms vanishing due to fast oscillations after integration over the whole space. Also we assume that the fast component  $\bar{\varphi}$  is small. So, the term proportional to  $\lambda$  can be omitted in the effective Hamiltonian for  $\bar{\varphi}$ ,  $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)}[\bar{\varphi}]$ . Now we should take an average over  $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)}[\bar{\varphi}]$ . This produces the correction to  $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi}]$ . The correction can be written as,

$$e^{-\delta \mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi}]/T} = \int D[\bar{\varphi}] e^{-(\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{int}} + \mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)}[\bar{\varphi}])/T} \bigg/ \int D[\bar{\varphi}] e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)}[\bar{\varphi}]/T} \quad (6.143)$$

Hence, to second order in  $\lambda$ , we find

$$\delta \mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi}] = \langle \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{int}} \rangle - \frac{\beta}{2} \langle \langle (\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{int}})^2 \rangle \rangle. \quad (6.144)$$

Here  $\langle \langle (\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{int}})^2 \rangle \rangle = \langle (\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{int}})^2 \rangle - \langle \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{int}} \rangle^2$ . The average of interaction term is given as

$$\langle \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{int}} \rangle = \frac{\lambda(n+2)}{2} \int d^d \mathbf{r} \underline{\varphi}^2 G_{\bar{\varphi}}(\mathbf{0}). \quad (6.145)$$

Here  $\langle \bar{\varphi}_i(\mathbf{r}) \bar{\varphi}_j(\mathbf{r}') \rangle = \delta_{ij} G_{\bar{\varphi}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . The other term can be found as

$$\langle \langle (\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{int}})^2 \rangle \rangle = \frac{\lambda^2(n+8)}{2} \int d^d \mathbf{r} \int d^d \mathbf{r}' (\underline{\varphi}^2(\mathbf{r}))^2 G_{\bar{\varphi}}^2(\mathbf{r}'). \quad (6.146)$$

Therefore, we reproduce the same expression for  $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi}] + \delta\mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi}]$  as for  $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\underline{\varphi}]$  but the coupling constants are different,

$$\begin{aligned}\tau &\rightarrow \tau(l) = e^{2l}\tau + (n+2)\lambda e^{2l}G_{\bar{\varphi}}(\mathbf{0}), \\ \lambda &\rightarrow \lambda(l) = e^{(4-d)l}\lambda - (n+8)\beta\lambda^2 e^{(4-d)l} \int d^d\mathbf{r}' G_{\bar{\varphi}}^2(\mathbf{r}').\end{aligned}\tag{6.147}$$

Note here that we have used the same choice of exponent  $\rho = (d+2)/2$  as in the Lecture. We remind that  $u = e^l$ . Now we calculate the integrals over the Green's functions,

$$\begin{aligned}G_{\bar{\varphi}}(\mathbf{0}) &= \int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} G_{\bar{\varphi}}(\mathbf{k}) = \frac{S_d T}{(2\pi)^d} \int_{\Lambda/u}^{\Lambda} \frac{k^{d-1} dk}{k^2 + \tau} \approx \frac{S_d}{(2\pi)^d} \frac{T \Lambda^d}{\Lambda^2 + \tau} l, \\ \int d^d\mathbf{r}' G_{\bar{\varphi}}^2(\mathbf{r}') &= \int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} G_{\bar{\varphi}}^2(\mathbf{k}) = \frac{S_d T^2}{(2\pi)^d} \int_{\Lambda/u}^{\Lambda} \frac{k^{d-1} dk}{(k^2 + \tau)^2} \approx \frac{S_d}{(2\pi)^d} \frac{T^2 \Lambda^d}{(\Lambda^2 + \tau)^2} l.\end{aligned}\tag{6.148}$$

Then we substitute this expression into the previous equation. Also we will introduce new notations,  $\tilde{\tau} = \tau/\Lambda^2$  and  $\tilde{\lambda} = \lambda T \Lambda^{d-4} S_d / (2\pi)^d$ . Then, expanding to lowest order in  $l$ , we find,

$$\tilde{\tau}(l) = \tilde{\tau} + \left(2\tilde{\tau} + \frac{(n+2)\tilde{\lambda}}{1+\tilde{\tau}}\right) l, \quad \tilde{\lambda}(l) = \tilde{\lambda} + \left((4-d)\tilde{\lambda} - \frac{(n+8)\tilde{\lambda}^2}{(1+\tilde{\tau})^2}\right) l.\tag{6.149}$$

These relations can be represented in the form of the renormalization group equations,

$$\frac{d\tilde{\tau}}{dl} = 2\tilde{\tau} + \frac{(n+2)\tilde{\lambda}}{1+\tilde{\tau}}, \quad \frac{d\tilde{\lambda}}{dl} = (4-d)\tilde{\lambda} - \frac{(n+8)\tilde{\lambda}^2}{(1+\tilde{\tau})^2}.\tag{6.150}$$

## 6.14 Seminar XIV

In this section we consider Problems Nos. 35 and 36.

### 6.14.1 Problem 35

Let us rewrite the difference between the ground state energy for odd and even sectors as

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_o^{(g)} - \mathcal{E}_e^{(g)} &= 2h + 2 \sum_{n=1}^{N/2} \left( \sqrt{h^2 + J^2 - 2hJ \cos \frac{2\pi n}{N} \cos \frac{\pi}{N} - 2hJ \sin \frac{2\pi n}{N} \sin \frac{\pi}{N}} \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{h^2 + J^2 - 2hJ \cos \frac{2\pi n}{N}} \right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 2h - \frac{2\pi}{N} \sum_{n=1}^{N/2} \frac{hJ \sin \frac{2\pi n}{N}}{\sqrt{h^2 + J^2 - 2hJ \cos \frac{2\pi n}{N}}} \\
&= 2h - \int_0^\pi dp \frac{\sin p}{\sqrt{h^2 + J^2 - 2hJ \cos p}} = h - J + |h - J| \\
&= \begin{cases} 0, & h \leq J, \\ 2(h - J), & h > J. \end{cases} \tag{6.151}
\end{aligned}$$

### 6.14.2 Problem 36

In order to derive the result (3.94) for  $\langle \sigma_j^x \rangle$  we will use the following equality,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \langle \sigma_1^x \sigma_k^x \rangle \rightarrow \langle \sigma_j^x \rangle^2. \tag{6.152}$$

Let us introduce to fermionic operators

$$A_j = a_j^\dagger + a_j, \quad B_j = a_j^\dagger - a_j. \tag{6.153}$$

We note that  $A_j^2 = 1$  and  $B_j^2 = -1$ . Essentially, operators  $A_j$  and  $iB_j$  are operators of Majorana fermions. Then, we find

$$\langle \sigma_1^x \sigma_k^x \rangle = \langle A_1 K_k A_k \rangle = \langle B_1 A_2 B_2 \dots A_{k-1} B_{k-1} A_k \rangle \tag{6.154}$$

Here we used that  $K_k = \prod_{j=1}^{k-1} (1 - 2n_j) = \prod_{j=1}^{k-1} A_j B_j$ . The idea to compute (6.154) is based on application of the Wick theorem (since the Hamiltonian (3.89) is quadratic in terms of quasiparticle creation and annihilation operators. In what follows we shall work in the sector with even number of quasiparticles (since it is the ground state for all magnitudes of  $h$ ).

Let us first compute the pair averages of the fermionic operators  $a_j^\dagger$  and  $a_j$ . We find

$$\begin{aligned}
\langle a_j^\dagger a_k \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{p,p'} e^{-ipj+ip'k} \langle (\cos \theta_p \alpha_p^\dagger + i \sin \theta_p \alpha_{-p}) (\cos \theta_{p'} \alpha_{p'} - i \sin \theta_{p'} \alpha_{-p'}^\dagger) \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_p e^{-ip(j-k)} G_p, \quad G_p = \frac{1}{2} - \frac{\cos 2\theta_p}{2} [1 - 2f_F(E_p)]. \tag{6.155}
\end{aligned}$$

In a similar way we obtain

$$\langle a_j a_k^\dagger \rangle = \frac{1}{N} \sum_p e^{-ip(j-k)} [1 - G_p], \quad (6.156)$$

and

$$\begin{aligned} \langle a_j^\dagger a_k^\dagger \rangle &= \frac{1}{N} \sum_p e^{-ip(j-k)} F_p, & \langle a_j a_k \rangle &= -\frac{1}{N} \sum_p e^{-ip(j-k)} F_p, \\ F_p &= \frac{i \sin 2\theta_p}{2} [1 - 2f_F(E_p)]. \end{aligned} \quad (6.157)$$

Now we can compute the pair correlation functions of  $A$  and  $B$  operators. We find

$$\begin{aligned} \langle A_j A_k \rangle &= \frac{1}{N} \sum_p e^{-ip(j-k)} [F_p - F_p + G_p + 1 - G_p] = \delta_{jk}, \\ \langle B_j B_k \rangle &= \frac{1}{N} \sum_p e^{-ip(j-k)} [F_p - F_p - G_p - 1 + G_p] = -\delta_{jk}, \\ \langle B_j A_k \rangle &= \frac{1}{N} \sum_p e^{-ip(j-k)} [2F_p + 2G_p - 1] \\ &= -\frac{1}{N} \sum_p e^{-ip(j-k) - 2\theta_p} [1 - 2f_F(E_p)] \equiv M_{jk}, \\ \langle A_j B_k \rangle &= \frac{1}{N} \sum_p e^{-ip(j-k)} [2F_p - 2G_p + 1] \equiv -M_{kj}. \end{aligned} \quad (6.158)$$

Armed with the above expressions for  $A$  and  $B$  correlation functions, let us compute the average of two spins on the neighboring sites:

$$\langle \sigma_1^x \sigma_2^x \rangle = \langle B_1 A_2 \rangle = M_{12}. \quad (6.159)$$

Next, we find

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^x \sigma_3^x \rangle &= \langle B_1 A_2 B_2 A_3 \rangle = \langle B_1 A_2 \rangle \langle B_2 A_3 \rangle + \langle B_1 A_3 \rangle \langle A_2 B_2 \rangle \\ &= M_{12} M_{23} - M_{13} M_{22} = \begin{vmatrix} M_{12} & M_{13} \\ M_{22} & M_{23} \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (6.160)$$

We note that in the product of  $A$  and  $B$  operators all  $A$  operators are at different sites. The same holds for  $B$  operators. Therefore, the expression after application of the Wick theorem contains the function  $M_{jk}$  alone.

Next, we obtain

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_1^x \sigma_4^x \rangle &= \langle B_1 A_2 B_2 A_3 B_3 A_4 \rangle = \langle B_1 A_2 \rangle \left[ \langle B_2 A_3 \rangle \langle B_3 A_4 \rangle + \langle B_2 A_4 \rangle \langle A_3 B_3 \rangle \right] \\
&\quad + \langle B_1 A_3 \rangle \left[ \langle A_2 B_2 \rangle \langle B_3 A_4 \rangle - \langle A_2 B_3 \rangle \langle B_2 A_4 \rangle \right] + \langle B_1 A_4 \rangle \left[ \langle A_2 B_2 \rangle \langle A_3 B_3 \rangle \right. \\
&\quad \left. + \langle A_2 B_3 \rangle \langle B_2 A_3 \rangle \right] = M_{12}[M_{23}M_{34} - M_{24}M_{33}] - M_{13}[M_{22}M_{34} - M_{32}M_{24}] \\
&\quad + M_{14}[M_{22}M_{23} - M_{32}M_{23}] = \begin{vmatrix} M_{12} & M_{13} & M_{14} \\ M_{22} & M_{23} & M_{24} \\ M_{32} & M_{33} & M_{34} \end{vmatrix}. \quad (6.161)
\end{aligned}$$

For arbitrary  $k > 1$  the structure of the pair spin correlation function is clear,

$$\langle \sigma_1^x \sigma_k^x \rangle = \begin{vmatrix} M_{12} & M_{13} & \dots & M_{1k} \\ M_{22} & M_{23} & \dots & M_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ M_{k-1,2} & M_{k-1,3} & \dots & M_{k-1,k} \end{vmatrix}. \quad (6.162)$$

Now let us rewrite  $M_{jk}$  in a more convenient form,

$$\begin{aligned}
M_{jk} &= \frac{1}{N} \sum_p e^{-ip(j-k+1)} X_p \equiv \tilde{X}_{j-k+1}, \\
X_p &= \sqrt{\frac{1 - ze^{ip}}{1 - ze^{-ip}}} \tanh \left[ \frac{J}{T} \sqrt{(1 - ze^{ip})(1 - ze^{-ip})} \right]. \quad (6.163)
\end{aligned}$$

Here we introduce  $z = h/J$ . Then the pair spin correlation function acquires the form of the Toeplitz determinant,

$$\langle \sigma_1^x \sigma_k^x \rangle = \begin{vmatrix} \tilde{X}_0 & \tilde{X}_{-1} & \dots & \tilde{X}_{-(k-2)} \\ \tilde{X}_1 & \tilde{X}_0 & \dots & \tilde{X}_{-(k-3)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \tilde{X}_{k-2} & \tilde{X}_{k-3} & \dots & \tilde{X}_0 \end{vmatrix} \equiv \det \hat{X}_{k-1}. \quad (6.164)$$

Let us check the above result setting  $h = 0$ . Then, we obtain  $\tilde{X}_j = \tanh(J/T) \delta_{j0}$ . Such that  $\langle \sigma_1^x \sigma_k^x \rangle = \exp[(k-1) \ln \tanh(J/T)]$ . It is the result we derived in the classical one-dimensional Ising model.

In order to compute the Toeplitz determinant in the limit  $k \rightarrow \infty$  and  $N \rightarrow \infty$ , we employ the second Szego's theorem. Let us introduce the quantity

$$\lambda_j = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} e^{-ijp} \ln X_p, \quad j \in \mathbb{Z}. \quad (6.165)$$

Then the Szego's theorem suggests

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \langle \sigma_1^x \sigma_k^x \rangle \simeq \exp \left[ k \lambda_0 + \sum_{j=1}^{\infty} j \lambda_j \lambda_{-j} \right]. \quad (6.166)$$

In order to compute  $\lambda_j$  we use the following representation

$$\begin{aligned} \lambda_j = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \left[ e^{-ijp} - e^{ijp} \right] \ln(1 - ze^{ip}) + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} e^{-ijp} \\ \times \ln \tanh \left[ \frac{J}{T} \sqrt{(1 - ze^{ip})(1 - ze^{-ip})} \right]. \end{aligned} \quad (6.167)$$

At first, we note that at  $T = 0$  we find  $\lambda_0 = 0$ . At nonzero temperature,  $T > 0$ , we find  $\lambda_0 < 0$  (see Fig. 6.2). It implies immediately, that  $\langle \sigma_1^x \sigma_k^x \rangle \rightarrow 0$  at  $k \rightarrow \infty$  for  $T > 0$ . In other words, at nonzero temperature,  $T > 0$ ,  $\langle \sigma_j^x \rangle = 0$ , i.e. there is no phase transition. We note that  $1/|\lambda_0|$  is nothing but the correlation length. The correlation length has a cusp at  $h = J$ .

In order to compute  $\lambda_j$  at  $T = 0$ , we note that  $\lambda_{-j} = -\lambda_j$ . Then for  $z < 1$ , we find for  $j > 0$ ,

$$\lambda_j = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{4\pi} \left[ e^{-ijp} - e^{ijp} \right] \ln(1 - ze^{ip}) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{4\pi} \left[ e^{ijp} - e^{-ijp} \right] \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k e^{ikp}}{k} = -\frac{z^j}{2j}. \quad (6.168)$$

Then, we obtain

$$\sum_{j=1}^{\infty} j \lambda_j \lambda_{-j} = - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^{2j}}{4j} = \frac{1}{4} \ln(1 - z^2). \quad (6.169)$$

Hence, for  $z < 1$  and  $T = 0$ , we find

$$\langle \sigma_j^x \rangle = \left( \lim_{k \rightarrow \infty} \langle \sigma_1^x \sigma_k^x \rangle \right)^{1/2} = (1 - z^2)^{1/8}. \quad (6.170)$$

For  $z > 1$ , we proceed as follows ( $j > 0$ ),

$$\begin{aligned} \lambda_j = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{4\pi} \left[ e^{-ijp} - e^{ijp} \right] \left[ \ln z + ip + i\pi + \ln(1 - e^{-ip}/z) \right] = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} p \sin(pj) \\ + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{4\pi} \left[ e^{ijp} - e^{-ijp} \right] \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^{-k} e^{-ikp}}{k} = \frac{(-1)^{j-1}}{j} + \frac{z^{-j}}{2j}. \end{aligned} \quad (6.171)$$

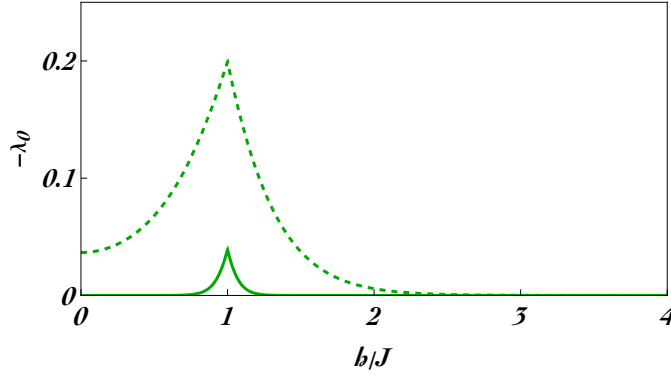


Рис. 6.2: The inverse correlation length at  $T > 0$  as a function of the ratio  $h/J$ . The solid curve is for  $T/J = 0.1$  and the dashed curve is for  $T/J = 0.5$ .

Then, we obtain

$$\sum_{j=1}^{\infty} j \lambda_j \lambda_{-j} = - \sum_{j=1}^{\infty} j \lambda_j^2 = - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} \left[ 1 - z^{-j} + z^{-2j}/4 \right] = -\infty. \quad (6.172)$$

Hence, for  $z > 1$  and  $T = 0$ , we find

$$\langle \sigma_j^x \rangle = \left( \lim_{k \rightarrow \infty} \langle \sigma_1^x \sigma_k^x \rangle \right)^{1/2} = 0. \quad (6.173)$$

## 6.15 Seminar XV

In this section we consider Problems Nos. 37, 38, and 39.

### 6.15.1 Problem 37

The correlation function  $\langle \cos(\theta_0 - \theta_n) \rangle$  is determined as

$$\begin{aligned} \langle \cos(\theta_0 - \theta_n) \rangle &= \left( \prod_l \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_l}{2\pi} \right) \cos(\theta_0 - \theta_n) \exp \left[ \beta J \sum_{\langle jk \rangle} \cos(\theta_j - \theta_k) \right] \\ &\quad / \left( \prod_l \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_l}{2\pi} \right) \exp \left[ \beta J \sum_{\langle jk \rangle} \cos(\theta_j - \theta_k) \right]. \end{aligned} \quad (6.174)$$

Let us rewrite this expression as an expression on the dual lattice in a way analogous to Eq. (3.110). Then, we find

$$\langle \cos(\theta_{\mathbf{0}} - \theta_{\mathbf{n}}) \rangle = \sum_{\{s_l\}} \prod_{\langle l, l' \rangle} I_{|s_l - s_{l'} + \Delta_{ll'}|}(\beta J) / \sum_{\{s_l\}} \prod_{\langle l, l' \rangle} I_{|s_l - s_{l'}|}(\beta J). \quad (6.175)$$

Here  $s_l$  is an integer number and  $\Delta_{\langle l, l' \rangle} = 1$  if the link between the sites  $l$  and  $l'$  on the dual lattice is crossed by the path from point  $\mathbf{0}$  to point  $\mathbf{n}$ . Otherwise,  $\Delta_{\langle l, l' \rangle} = 0$ . We note that this path can be arbitrary. The result is independent of the particular path choice. At high temperatures  $T \gg J$ , one can use the following expansion for the modified Bessel function,  $I_{|s|}(z) = (z/2)^{|s|}/(|s|!)$  at  $z \ll 1$ . Then, as it follows from Eq. (6.175), the contribution lowest in powers  $\beta J$  to the correlation function  $\langle \cos(\theta_{\mathbf{0}} - \theta_{\mathbf{n}}) \rangle$  will be determined by the shortest path between points  $\mathbf{0}$  and  $\mathbf{n}$ . Each link of this path has  $\Delta_{\langle l, l' \rangle} = 1$  and, thus, contributes a factor  $\beta J/2$ . Therefore, we find

$$\langle \cos(\theta_{\mathbf{0}} - \theta_{\mathbf{n}}) \rangle = (\beta J/2)^{N_{\text{links}}}, \quad (6.176)$$

where  $N_{\text{links}}$  is the number of shortest path links between the points  $\mathbf{0}$  and  $\mathbf{n}$ .

### 6.15.2 Problem 38

In this problem we calculate the integral over  $\tilde{\theta}_l$  in expression (3.114) from the main part of Lectures. Let us write,

$$Z = \sum_{\{m_l\}} \prod_l \left( \int d\tilde{\theta}_l \right) \exp \left[ -\beta F_0(\tilde{\theta}, m) \right],$$

$$F_0(\tilde{\theta}, m) = \frac{J}{2} \sum_{\langle l, l' \rangle} (\tilde{\theta}_l - \tilde{\theta}_{l'})^2 - i2\pi J \sum_l m_l \tilde{\theta}_l. \quad (6.177)$$

In order to calculate this integral, let us consider a shift of integration variables:  $\tilde{\theta}_l \mapsto \tilde{\theta}_l + a_l$ . We should find such variables  $a_l$  which eliminate the terms linearly dependent on  $\tilde{\theta}_l$ . After such transformation the free energy becomes

$$F_0(\tilde{\theta}, m) \mapsto F(a, \tilde{\theta}, m) = F_0(\tilde{\theta}, 0) + F_0(a, m) + F_1(a, \tilde{\theta}, m),$$

$$F_1(a, \tilde{\theta}, m) = J \sum_{\langle l, l' \rangle} (\tilde{\theta}_l - \tilde{\theta}_{l'}) (a_l - a_{l'}) - i2\pi J \sum_l m_l \tilde{\theta}_l$$

$$= 2J \sum_{\langle l, l' \rangle} \tilde{\theta}_l (a_l - a_{l'} - i\pi m_l). \quad (6.178)$$



So, we attempt to find variables  $a_l$  nullifying  $F_1$ . For the square lattice, we should solve the following set of equations

$$4a_{j,k} - a_{j+1,k} - a_{j-1,k} - a_{j,k-1} - a_{j,k+1} = 4i\pi m_{j,k}. \quad (6.179)$$

In order to solve the above equations, we use the periodic boundary conditions. We introduce the Green's function, determined as

$$4G_{j,k} - G_{j+1,k} - G_{j-1,k} - G_{j,k-1} - G_{j,k+1} = \delta_{j,0}\delta_{k,0}. \quad (6.180)$$

Performing the Fourier transform,

$$G_{j,k} = \int_0^{2\pi} \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^2} e^{iq_x aj} e^{iq_y ak} G(q_x, q_y), \quad (6.181)$$

we obtain

$$G(q_x, q_y) = \frac{1}{4 - 2\cos(q_x a) - 2\cos(q_y a)}. \quad (6.182)$$

The integral over  $\mathbf{q}$  has logarithmic divergence. The latter is associated with an existence of zero mode (translation) in the operator (6.179). Performing the integral over  $\mathbf{q}$ , we find

$$G_{j,k} = \frac{1}{2\pi} \ln \left( \frac{L}{r_{jk}} \right) \quad (6.183)$$

where  $L$  is a typical size of the system and  $r_{jk} = a\sqrt{j^2 + k^2}$  is the distance between the origin  $(0,0)$  and the point  $(j,k)$ . With the help of the Green's function  $G$  we can find  $a_l$  satisfying Eq. (6.179) as

$$a_l = \sum_{l'} G(|l - l'|) m_{l'}. \quad (6.184)$$

Hence, we obtain

$$\begin{aligned} Z &= \prod_l \left( \int d\tilde{\theta}_l \right) \exp \left[ -\beta F_0(\tilde{\theta}, 0) \right] \sum_{\{m_l\}} \exp \left[ -2\pi J\beta \sum_{l,l'} m_l m_{l'} \ln \frac{L}{|l - l'|} \right] \\ &\equiv Z_0 \sum_{\{m_l\}} \exp \left[ -2\pi J\beta \ln \frac{L}{r_v} \left( \sum_l m_l \right)^2 - 2\pi J\beta \ln \frac{r_v}{a} \sum_l m_l^2 \right. \\ &\quad \left. - 2\pi J\beta \sum_{l \neq l'} m_l m_{l'} \ln \frac{r_v}{|l - l'|} \right]. \end{aligned} \quad (6.185)$$

Here the length scales satisfy  $L \gg r_v \gg a$ , where  $r_v$  is a typical distance between vortices. In the limit  $\beta J \gg 1$ , the first two terms should acquire the minimal possible values so  $\sum_l m_l = 0$  and each  $m_l = \pm 1$ .

Now let us demonstrate that with the constraint  $\sum_l m_l = 0$  we obtain exactly the same form for the partition function as given by Eq. (3.116). Let us incorporate this constraint into Eq. (3.115), then we find

$$Z = \int_0^{2\pi} \frac{ds}{2\pi} \sum_{\{m_l\}} \prod_l \left( \int_{-\infty}^{\infty} d\theta_l y^{m_l^2} e^{2\pi i s m_l} e^{2\pi i \beta J \theta_l m_l} \right) \exp \left[ -\frac{\beta J}{2} \sum_{\langle l l' \rangle} (\theta_l - \theta_{l'})^2 \right]. \quad (6.186)$$

Performing summation over  $m_l$ , we find

$$Z = \int_0^{2\pi} \frac{ds}{2\pi} \prod_l \left( \int_{-\infty}^{\infty} d\theta_l \vartheta_3(\pi \beta J \theta_l + \pi s, y) \right) \exp \left[ -\frac{\beta J}{2} \sum_{\langle l l' \rangle} (\theta_l - \theta_{l'})^2 \right] \quad (6.187)$$

Shifting integration variables  $\theta_l \rightarrow \theta_l - s/(\beta J)$ , we obtain the expression (3.116).

### 6.15.3 Problem 39

The action  $S$  is determined as, see Eq. (3.118):

$$S = \beta \mathcal{H}_{\text{eff}} = \frac{\beta J}{2} \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \theta)^2 - 2\beta \tilde{y} \int d^2 \mathbf{r} \cos(2\pi \beta J \theta). \quad (6.188)$$

In order to derive the RG equations, let us choose the convenient variables. We denote  $2\pi \beta J = g$  and  $2\tilde{y}\beta = u$ . Also we rescale  $\theta$ :  $\theta \rightarrow \theta/g$ . Then we find

$$S = \frac{1}{4\pi g} \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \theta)^2 - u \int d^2 \mathbf{r} \cos(\theta). \quad (6.189)$$

The original field  $\theta$  is determined as

$$\theta(\mathbf{r}) = \sum_{|\mathbf{p}| < \Lambda} \theta_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}, \quad (6.190)$$

where  $\Lambda \sim 1/a$  stands for the ultra-violet cut off. Let us split the field  $\theta$  into the slow and fast components,  $\theta = \theta_s + \theta_f$ ,

$$\theta_s(\mathbf{r}) = \sum_{|\mathbf{p}| < \Lambda'} \theta_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}, \quad \theta_f(\mathbf{r}) = \sum_{\Lambda > |\mathbf{p}| > \Lambda'} \theta_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}. \quad (6.191)$$

Expanding  $S$  in the fast component  $\theta_f$  to second order, we derive the following action:

$$S \simeq \frac{1}{4\pi g} \int d^2\mathbf{r} [(\nabla\theta_s)^2 + (\nabla\theta_f)^2] - u \int d^2\mathbf{r} \left[ \cos\theta_s - \theta_f \sin\theta_s - \frac{\theta_f^2}{2} \cos\theta_s \right]. \quad (6.192)$$

The term  $-\sin(\theta_s)\theta_f$  is insignificant since it is a product of slow and fast modes. Omitting this term, we find the action for the slow modes,

$$S_{\Lambda'} = \frac{1}{4\pi g_{\Lambda}} \int d^2\mathbf{r} (\nabla\theta_s)^2 - u \int d^2\mathbf{r} \cos(\theta_s) + \delta S_{\Lambda'}, \quad (6.193)$$

where

$$\begin{aligned} \delta S_{\Lambda'} &\approx \langle S_{\text{int}} \rangle - \frac{1}{2} \langle \langle S_{\text{int}}^2 \rangle \rangle, \quad S_{\text{int}} = -\frac{u}{2} \int d^2\mathbf{r} \theta_f^2 \cos\theta_s, \\ \langle A \rangle &= \int D[\theta_f] A[\theta_f] e^{-\frac{1}{4\pi g_{\Lambda}} \int d^2\mathbf{r} (\nabla\theta_f)^2} / \int D[\theta_f] e^{-\frac{1}{4\pi g_{\Lambda}} \int d^2\mathbf{r} (\nabla\theta_f)^2}. \end{aligned} \quad (6.194)$$

Next, we find several averages. At first, we get

$$\langle S_{\text{int}} \rangle = \frac{u}{2} \int d^2\mathbf{r} \langle \theta_f^2 \rangle \cos\theta_s = \frac{u}{2} \int d^2\mathbf{r} G(0) \cos\theta_s = \frac{gu}{4\pi} \frac{\Lambda - \Lambda'}{\Lambda'} \int d^2\mathbf{r} \cos\theta_s. \quad (6.195)$$

Here

$$G(r) = \langle \theta_f(\mathbf{r}) \theta_f(0) \rangle = 2\pi g \int_{\Lambda' < q < \Lambda} \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{q^2}. \quad (6.196)$$

In particular, we find  $G(0) = g \ln \Lambda / \Lambda'$ . Thus the average  $\langle S_{\text{int}} \rangle$  entails the renormalization of the parameter  $u$ ,

$$u_{\Lambda'} = u_{\Lambda} + \frac{1}{2} g_{\Lambda} u_{\Lambda} \frac{\Lambda - \Lambda'}{\Lambda'}. \quad (6.197)$$

The second average is more complicated,

$$\begin{aligned} \langle \langle S_{\text{int}}^2 \rangle \rangle &= \frac{u^2}{4} \int d^2\mathbf{r}_1 d^2\mathbf{r}_2 \cos\theta_s(\mathbf{r}_1) \cos\theta_s(\mathbf{r}_2) \langle \langle \theta_f^2(\mathbf{r}_1) \theta_f^2(\mathbf{r}_2) \rangle \rangle = \frac{u^2}{2} \int d^2\mathbf{r}_1 d^2\mathbf{r}_2 \\ &\times \cos\theta_s(\mathbf{r}_1) \cos\theta_s(\mathbf{r}_2) G^2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{u^2}{2} \int \frac{d^2\mathbf{q} d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^4} [\cos\theta_s]_{\mathbf{q}} [\cos\theta_s]_{-\mathbf{q}} \\ &\times G(\mathbf{k}) G(\mathbf{k} + \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (6.198)$$

Let us compute the integral over  $\mathbf{k}$  at  $q \rightarrow 0$ :

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda' < k < \Lambda} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} G(\mathbf{k}) G(\mathbf{k} + \mathbf{q}) &= (2\pi g)^2 \int_{\Lambda' < k < \Lambda} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{k^2 (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2} \\ &\simeq 2\pi g^2 \left[ \frac{1}{2\Lambda'^2} - \frac{1}{2\Lambda^2} + \frac{q^2}{4\Lambda'^4} - \frac{q^2}{4\Lambda^4} \right] \\ &\simeq 2\pi g^2 \left[ \frac{\Lambda - \Lambda'}{\Lambda^3} + \frac{q^2(\Lambda - \Lambda')}{\Lambda^5} \right] \end{aligned} \quad (6.199)$$

Hence, we obtain

$$\begin{aligned} \langle \langle S_{\text{int}}^2 \rangle \rangle &= \frac{\pi g^2 u^2}{2} \frac{\Lambda - \Lambda'}{\Lambda^3} \int d^2 \mathbf{r} \cos^2 \theta_s + \frac{\pi g^2 u^2}{2} \frac{\Lambda - \Lambda'}{\Lambda^5} \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \cos \theta_s)^2 \\ &= \frac{\pi g^2 u^2}{2} \frac{\Lambda - \Lambda'}{\Lambda^3} \int d^2 \mathbf{r} \cos^2 \theta_s + \frac{\pi g^2 u^2}{4} \frac{\Lambda - \Lambda'}{\Lambda^5} \int d^2 \mathbf{r} [1 - \cos(2\theta_s)] (\nabla \theta_s)^2. \end{aligned} \quad (6.200)$$

Therefore,  $\langle \langle S_{\text{int}}^2 \rangle \rangle$  contributes to the kinetic term,  $(\nabla \theta)^2$ . We note that there are additional terms generated in the course of the renormalization group procedure. One can check that these terms do not change the critical behavior of the model. Thus, we obtain the following two relations,

$$u_{\Lambda'} = u_{\Lambda} + \frac{g_{\Lambda} u_{\Lambda}}{2} \ln \left( \frac{\Lambda}{\Lambda'} \right), \quad \frac{1}{g_{\Lambda'}} = \frac{1}{g_{\Lambda}} - \frac{\pi^2 u_{\Lambda}^2 g_{\Lambda}^2}{2} \frac{\Lambda - \Lambda'}{\Lambda^5}. \quad (6.201)$$

In order to represent the above relations as some RG equation, we introduce  $\gamma_{\Lambda} = u_{\Lambda}/\Lambda^2$  and  $l = -\ln \Lambda$ . Then, one can write

$$\frac{\partial \gamma}{\partial l} = \left( 2 - \frac{g}{2} \right) \gamma, \quad \frac{\partial g}{\partial l} = -\frac{\pi^2 \gamma^2 g^4}{2}. \quad (6.202)$$

Equivalently, we can rewrite the above equations as

$$\frac{\partial y}{\partial l} = -xy, \quad \frac{\partial x}{\partial l} = -y^2. \quad (6.203)$$

where  $x = g/2 - 2 = \pi\beta J - 2$  and  $y = 8\pi\gamma$ .

## 6.16 Seminar XVI

In this section we present the solutions for Problems Nos. 40 and 41.

### 6.16.1 Problem 40

Let us start from calculating the function

$$D^R(\omega) = i \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i0)t} \text{Tr}([b_\alpha(t), b_\alpha^\dagger] \rho). \quad (6.204)$$

The operator  $b_\alpha(t)$  satisfies the equation of motion,

$$\frac{db_\alpha(t)}{dt} = i[H, b_\alpha(t)]. \quad (6.205)$$

Using commutation relations  $[b_\alpha, b_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}$ , we find

$$b_\alpha(t) = e^{-i\varepsilon_\alpha t} b_\alpha. \quad (6.206)$$

Hence, we find

$$D^R(\omega) = i \int_0^\infty dt e^{i(\omega-\varepsilon_\alpha+i0)t} \langle [b_\alpha, b_\alpha^\dagger] \rangle = i \int_0^\infty dt e^{i(\omega-\varepsilon_\alpha+i0)t} = -\frac{1}{\omega - \varepsilon_\alpha + i0}. \quad (6.207)$$

Next, we compute the function

$$\begin{aligned} D^K(\omega) &= i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \text{Tr}(\{b_\alpha(t), b_\alpha^\dagger\} \rho) = i \int_0^\infty dt e^{i(\omega-\varepsilon_\alpha)t} [2f_B(\varepsilon_\alpha) + 1] \\ &= 2\pi i \delta(\omega - \varepsilon_\alpha) [2f_B(\varepsilon_\alpha) + 1]. \end{aligned} \quad (6.208)$$

Here we have used the fact that  $\langle b_\alpha^\dagger b_\alpha \rangle = f_B(\varepsilon_\alpha)$ .

Comparing Eqs. (6.207) and (6.208), we find

$$D^K(\omega) = 2i \text{Im } D^R(\omega) \coth \frac{\omega}{2T}. \quad (6.209)$$

### 6.16.2 Problem 41

Let us consider the case when the applied force depends on the spatial coordinate  $\mathbf{r}$ . Then the perturbation has the following form,  $\mathcal{V} = -\int d\mathbf{r} f(r, t) \mathcal{X}(\mathbf{r})$ . In what follows, we use the interaction representation. This means, in particular, that the density matrix satisfies the following equation,

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -i[\mathcal{V}(t), \rho(t)]. \quad (6.210)$$

Within the linear response one can relate the generalized susceptibility with the average of corresponding operator  $\mathcal{Y}(\mathbf{r}, t)$  and applied force  $\mathcal{X}(\mathbf{r}, t)$  by means of the following relation,

$$\langle \mathcal{Y}(\mathbf{r}, t) \rangle = \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' f(\mathbf{r}', t') \alpha_{\mathcal{Y}\mathcal{X}}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t'). \quad (6.211)$$

The average  $\langle \mathcal{Y}(\mathbf{r}, t) \rangle$  is determined in a standard way,

$$\langle \mathcal{Y}(\mathbf{r}, t) \rangle = \text{Tr}(\mathcal{Y}(\mathbf{r}, t) \rho(t)). \quad (6.212)$$

Since we are interested in the linear response, we can approximate the density matrix  $\rho(t)$  as

$$\rho(t) \approx \rho_0 - i \int_{-\infty}^t dt' [\mathcal{V}(t'), \rho_0] \quad (6.213)$$

where  $\rho_0$  is the density matrix in the absence of perturbation. Let us introduce the following notation,  $\langle \hat{O} \rangle_0 = \text{Tr}(O \rho_0)$ . Also we assume that  $\langle \mathcal{Y}(\mathbf{r}, t) \rangle_0 = 0$ . Then, we find

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{Y}(\mathbf{r}, t) \rangle &\approx -i \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr}(\mathcal{Y}(\mathbf{r}, t) [\mathcal{V}(t'), \rho_0]) = -i \int_{-\infty}^t dt' \langle [\mathcal{Y}(\mathbf{r}, t), \mathcal{V}(t')] \rangle_0 \\ &= i \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' f(\mathbf{r}', t') \langle [\mathcal{Y}(\mathbf{r}, t), \mathcal{X}(\mathbf{r}', t')] \rangle_0. \end{aligned} \quad (6.214)$$

Comparing Eqs. (6.211) and (6.214), we obtain our final conclusion:

$$\alpha_{\mathcal{Y}\mathcal{X}}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = i \langle [\mathcal{Y}(\mathbf{r}, t), \mathcal{X}(\mathbf{r}', t')] \rangle_0. \quad (6.215)$$

We note that the generalized susceptibility depends only on  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$  for the system with the translational invariance.

## 6.17 Seminar XVII

In this section we consider Problems Nos. 42 and 43.

### 6.17.1 Problem 42

Let us start from the case when the bias voltage is absent,  $V = 0$ . The spin susceptibility has the following form, see Eq. (4.30),

$$\begin{aligned} \chi_{jk}(\tau) &= \frac{1}{\nu^2} \text{Tr}_e \left[ : s_k^I(y_0, \tau) :: s_j^I(y_0, 0) : \rho_0 \right] = \frac{1}{4\nu^2} \langle : \Psi^\dagger(y_0, \tau) \sigma_k \Psi(y_0, 0) : \\ &\times : \Psi^\dagger(y_0, 0) \sigma_j \Psi(y_0, \tau) : \rangle_0 = \sum_{s_1, s_2} \frac{\sigma_k^{s_1 s_2} \sigma_j^{s_3 s_4}}{4\nu^2} \langle : \Psi_{s_1}^\dagger(y_0, \tau) \Psi_{s_2}(y_0, 0) : \\ &\times : \Psi_{s_3}^\dagger(y_0, 0) \Psi_{s_4}(y_0, \tau) : \rangle_0. \end{aligned} \quad (6.216)$$

In order to calculate the above average, we should diagonalize the Hamiltonian,

$$\begin{aligned} H_e &= iv \int dy \Psi^\dagger(y) \sigma^z \partial_y \Psi(y) = -v \sum_s s \int \frac{dk}{2\pi} \Psi_s^\dagger(k) k \Psi_s(k) \\ &= \sum_s \int \frac{dk}{2\pi} \xi_s(k) \Psi_s^\dagger(k) \Psi_s(k), \end{aligned} \quad (6.217)$$

where  $\xi_s(k) = -vsk$ . Therefore, we can write

$$\Psi_s(y, \tau) = \int \frac{dk}{2\pi} \Psi_s(k) e^{-i\xi_s(k)\tau}, \quad \Psi_s^\dagger(y, \tau) = \int \frac{dk}{2\pi} \Psi_s^\dagger(k) e^{i\xi_s(k)\tau}. \quad (6.218)$$

The commutation relations for the creation and annihilation operators have the standard form,

$$\Psi_s(k) \Psi_{s'}^\dagger(k') + \Psi_{s'}^\dagger(k') \Psi_s(k) = 2\pi \delta(k - k') \delta_{s, s'}. \quad (6.219)$$

Using the Fourier representation, we can rewrite the susceptibility as

$$\begin{aligned} \chi_{jk}(\tau) &= \sum_{s_1, s_2} \frac{\sigma_k^{s_1 s_2} \sigma_j^{s_3 s_4}}{4\nu^2} \int \prod_{i=1}^4 \frac{dk_i}{2\pi} e^{-i(\xi_{s_2}(k_2) - \xi_{s_1}(k_1))\tau} e^{-i(k_2 + k_4 - k_1 - k_3)y_0} \\ &\times \langle : \Psi_{s_1}^\dagger(k_1) \Psi_{s_2}(k_2) :: \Psi_{s_3}^\dagger(k_3) \Psi_{s_4}(k_4) : \rangle_0. \end{aligned} \quad (6.220)$$

Now we treat the average written in the last line. At first, we calculate the simpler expression,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{s_1}^\dagger(k_1) \Psi_{s_2}(k_2) \rangle_0 &= 2\pi \delta(k_1 - k_2) \delta_{s_1, s_2} - \langle \Psi_{s_2}(k_2) \Psi_{s_1}^\dagger(k_1) \rangle_0 \\ &= 2\pi \delta(k_1 - k_2) \delta_{s_1, s_2} - \langle \Psi_{s_1}^\dagger(k_1) \Psi_{s_2}(k_2) \rangle_0 e^{\beta \xi_{s_1}(k_1)}. \end{aligned} \quad (6.221)$$

To obtain the last line in the above equation, we employ the following relation,  $\Psi_{s_1}^\dagger(k_1)\rho_0 = \rho_0\Psi_{s_1}^\dagger(k_1)e^{\beta\xi_{s_1}(k_1)}$ , where  $\rho_0$  is the equilibrium density matrix. Finally, we obtain

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{s_1}^\dagger(k_1)\Psi_{s_2}(k_2)\rangle_0 &= 2\pi\delta(k_1 - k_2)\delta_{s_1,s_2}f_F(\xi_{s_1}(k_1)), \\ \langle\Psi_{s_2}(k_2)\Psi_{s_1}^\dagger(k_1)\rangle_0 &= 2\pi\delta(k_1 - k_2)\delta_{s_1,s_2}[1 - f_F(\xi_{s_1}(k_1))]\end{aligned}\quad (6.222)$$

where  $f_F(\varepsilon) = 1/[1 + \exp(\varepsilon/T)]$ . Now we are ready to calculate the average,

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{s_1}^\dagger(k_1)\Psi_{s_2}(k_2)\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\Psi_{s_4}(k_4)\rangle_0 &= 2\pi\delta(k_1 - k_2)\langle\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\Psi_{s_4}(k_4)\rangle_0\delta_{s_1,s_2} \\ &- \langle\Psi_{s_2}(k_2)\Psi_{s_1}^\dagger(k_1)\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\Psi_{s_4}(k_4)\rangle_0 = 2\pi\delta(k_1 - k_2)\langle\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\Psi_{s_4}(k_4)\rangle_0\delta_{s_1,s_2} \\ &+ \langle\Psi_{s_2}(k_2)\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\Psi_{s_1}^\dagger(k_1)\Psi_{s_4}(k_4)\rangle_0 = 2\pi\delta(k_1 - k_2)\langle\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\Psi_{s_4}(k_4)\rangle_0\delta_{s_1,s_2} \\ &+ 2\pi\delta(k_1 - k_4)\delta_{s_1,s_4}\langle\Psi_{s_2}(k_2)\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\rangle_0 - \langle\Psi_{s_2}(k_2)\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\Psi_{s_4}(k_4)\Psi_{s_1}^\dagger(k_1)\rangle_0 \\ &= 2\pi\delta(k_1 - k_2)\langle\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\Psi_{s_4}(k_4)\rangle_0\delta_{s_1,s_2} + 2\pi\delta(k_1 - k_4)\delta_{s_1,s_4}\langle\Psi_{s_2}(k_2)\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\rangle_0 \\ &- \langle\Psi_{s_1}^\dagger(k_1)\Psi_{s_2}(k_2)\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\Psi_{s_4}(k_4)\rangle_0 e^{\beta\xi_{s_1}(k_1)}.\end{aligned}\quad (6.223)$$

Hence, we find

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{s_1}^\dagger(k_1)\Psi_{s_2}(k_2)\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\Psi_{s_4}(k_4)\rangle_0 &= (2\pi)^2\left[\delta(k_1 - k_2)\delta(k_3 - k_4)f_F(\xi_{s_3}(k_3))\right. \\ &\times\delta_{s_1,s_2}\delta_{s_3,s_4} + \delta(k_1 - k_4)\delta(k_2 - k_3)\delta_{s_1,s_4}\delta_{s_2,s_3}[1 - f_F(\xi_{s_2}(k_2))]\left. \right]f_F(\xi_{s_1}(k_1)).\end{aligned}\quad (6.224)$$

Consequently, we obtain

$$\begin{aligned}\langle:\Psi_{s_1}^\dagger(k_1)\Psi_{s_2}(k_2)::\Psi_{s_3}^\dagger(k_3)\Psi_{s_4}(k_4): \rangle_0 &= (2\pi)^2\delta(k_1 - k_4)\delta(k_2 - k_3)\delta_{s_1,s_4}\delta_{s_2,s_3} \\ &\times[1 - f_F(\xi_{s_2}(k_2) - s_2eV/2)]f_F(\xi_{s_1}(k_1) - s_1eV/2).\end{aligned}\quad (6.225)$$

Here we have augmented the chemical potential  $seV/2$  to the distribution function of the edge electrons. This chemical potential appears due to the presence of a bias voltage  $V$ . Substituting this average in the expression for the susceptibility leads to

$$\begin{aligned}\chi_{jk}(\tau) &= \sum_{s_1,s_2} \frac{\sigma_k^{s_1s_3}\sigma_j^{s_3s_1}}{4\nu^2} \int \frac{dk_1}{2\pi} \frac{dk_3}{2\pi} e^{-i(\xi_{s_3}(k_3) - \xi_{s_1}(k_1))\tau} f_F(\xi_{s_1}(k_1) - s_1eV/2) \\ &\times[1 - f_F(\xi_{s_3}(k_3) - s_3eV/2)] = \frac{\sigma_k^{s_1s_2}\sigma_j^{s_2s_1}}{4} \int d\xi_1 d\xi_2 e^{-i(\xi_2 - \xi_1)\tau} f_F(\xi_1 - s_1eV/2) \\ &\times[1 - f_F(\xi_2 - s_2eV/2)].\end{aligned}\quad (6.226)$$



Next, we find in the frequency domain,

$$\chi_{jk}(\omega) = \sum_{s_1, s_2} i \frac{\sigma_k^{s_1 s_2} \sigma_j^{s_2 s_1}}{4} \int d\xi_1 d\xi_2 \frac{f_F(\xi_1 - s_1 eV/2)(1 - f_F(\xi_2 - s_2 eV/2))}{\omega - \xi_2 + \xi_1 + i0}. \quad (6.227)$$

We can simplify the above integral with the aid of shift  $\xi_{1,2} \mapsto \xi + s_{1,2}eV/2$ . Also we introduce new variable  $\omega_{12} = \omega + (s_1 - s_2)eV/2$ . As a result, we obtain

$$\begin{aligned} \chi_{jk}(\omega) &= \sum_{s_1, s_2} i \frac{\sigma_k^{s_1 s_2} \sigma_j^{s_2 s_1}}{4} \int d\xi_1 d\xi_2 \frac{f_F(\xi_1)(1 - f_F(\xi_2))}{\omega_{12} - \xi_2 + \xi_1 + i0} \\ &= \sum_{s_i} i \frac{\sigma_k^{s_1 s_2} \sigma_j^{s_2 s_1}}{4} \int d\xi_1 d\xi_2 \frac{f_F(\xi_1)f_F(\xi_2)}{\omega_{12} + \xi_2 + \xi_1 + i0}. \end{aligned} \quad (6.228)$$

Introducing new variables  $\xi_+ = \frac{\xi_1 + \xi_2}{2}$  and  $\xi_- = \xi_1 - \xi_2$ , we derive the following expression,

$$\begin{aligned} \chi_{jk}(\omega) &= \sum_{s_i} i \frac{\sigma_k^{s_1 s_2} \sigma_j^{s_2 s_1}}{4} \int d\xi_+ d\xi_- \frac{f_F(\xi_+ + \frac{\xi_-}{2})f_F(\xi_+ - \frac{\xi_-}{2})}{\omega_{12} + 2\xi_+ + i0} \\ &= \sum_{s_i} i \frac{\sigma_k^{s_1 s_2} \sigma_j^{s_2 s_1}}{4} \int d\xi \frac{1}{\omega_{12} + \xi + i0} \frac{\xi}{\exp(\xi/T) - 1}. \end{aligned} \quad (6.229)$$

Finally, for the real part of  $\chi_{jk}(\omega)$ , we find

$$\text{Re } \chi_{jk}(\omega) = -\frac{\pi}{4} \sum_{s_i} \sigma_k^{s_1 s_2} \sigma_j^{s_2 s_1} \frac{\omega_{12}}{e^{-\omega_{12}/T} - 1}. \quad (6.230)$$

### 6.17.2 Problem 43

The anti-hermitian part of the spin susceptibility is determined as (for zero frequency), see Eq. (4.35),

$$\hat{\chi}^{(2)}(0) = \frac{1}{2} \text{p.v.} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\xi}{e^{\xi/T} - 1} \begin{pmatrix} \frac{\xi}{\xi^2 - (eV)^2} & \frac{ieV}{\xi^2 - (eV)^2} & 0 \\ -\frac{ieV}{\xi^2 - (eV)^2} & \frac{\xi}{\xi^2 - (eV)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\xi} \end{pmatrix}. \quad (6.231)$$

This integral contains linearly divergent term. However, this term is independent of  $V$  and  $T$ . Therefore, we can omit it. We find to first order in

$V$ ,

$$\begin{aligned}\chi_{jk}^{(2)}(0) &\rightarrow \frac{ieV\varepsilon_{jkz}}{2} \text{p.v.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\xi} \frac{1}{e^{xi/T} - 1} = \frac{ieV\varepsilon_{jkz}}{4} \text{p.v.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\xi} \tanh \frac{\xi}{2T} \\ &\simeq \frac{ieV}{2} \varepsilon_{jkz} \ln(\Lambda/T).\end{aligned}\quad (6.232)$$

Here  $\Lambda$  is the ultra-violet cut-off. As a result, we can write,

$$\begin{aligned}\chi_{jk}^{(2)}(0) \mathcal{J}_{rj} \mathcal{J}_{lk} \left( [S_r \rho, S_l] + [S_l, \rho S_r] \right) &= \chi_{jk}^{(2)}(0) \mathcal{J}_{rj} \mathcal{J}_{lk} \left\{ S_r \rho S_l - S_l S_r \rho \right. \\ &\quad \left. + S_l \rho S_r - \rho S_r S_l \right\}.\end{aligned}\quad (6.233)$$

Since  $\chi_{jk}^{(2)}(0)$  is an antisymmetric matrix, we can omit the symmetric part in the above expression. This yields

$$\chi_{jk}^{(2)}(0) \mathcal{J}_{rj} \mathcal{J}_{lk} \left( S_r S_l \rho - \rho S_r S_l \right) = i \chi_{jk}^{(2)}(0) \mathcal{J}_{rj} \mathcal{J}_{lk} \varepsilon_{rlm} [S_m, \rho]. \quad (6.234)$$

This correction can be interpreted as a correction to the Hamiltonian of impurity,

$$\delta H_{\text{imp}} = \delta h_m S_m \quad \delta h_m = \mathcal{J}_{rj} \mathcal{J}_{lk} \varepsilon_{rlm} \varepsilon_{jkz} \frac{eV}{2} \ln(\Lambda/T). \quad (6.235)$$

Hence, we obtain

$$\mathcal{J}_{mz} \mapsto \mathcal{J}_{mz} + \nu \mathcal{J}_{rj} \mathcal{J}_{lk} \varepsilon_{rlm} \varepsilon_{jkz} \ln(\Lambda/T). \quad (6.236)$$

This is nothing but the Kondo renormalization of the exchange coupling.

# Литература

- [1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course in Theoretical Physics*, Vol. 5 (Pergamon Press, Oxford, 1984).
- [2] E. Solano-Carrillo, *Quantum theory of entropy production*, PhD Thesis, Columbia University 2018.
- [3] Yu. G. Rudoi and A. D. Sukhanov, *Thermodynamic fluctuations within the Gibbs and Einstein approaches*, Physics-Uspekhi 43, 1169 (2000).
- [4] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics. Vol. 9. Statistical Physics. Part II*, Pergamon Press, Oxford 1981.
- [5] L. D. Landau, *The theory of a Fermi liquid*, JETP **3**, 920 (1957).
- [6] P. Hohenberg and W. Kohn, *Inhomogeneous electron gas*, Phys. Rev. 136, B864 (1964).
- [7] I. M. Khalatnikov, *An introduction to the theory of superfluidity*, Perseus (2000).
- [8] P. G. De Gennes, *Superconductivity Of Metals And Alloys*, Westview Press (1999).
- [9] R. W. Richardson, *A restricted class of exact eigenstates of the pairing-force Hamiltonian*, Phys. Lett. **3**, 277, (1963); R. W. Richardson, *Exact eigenstates of pairing-force Hamiltonian*, Nucl. Phys. **52**, 221 (1964).
- [10] F. D. M. Haldane, *Luttinger liquid theory of one-dimensional quantum fluids. I. Properties of the Luttinger model and their extension to the general 1D interacting spinless Fermi gas*, J. Phys. C: Solid State Phys. 14, 2585 (1981).
- [11] E. Miranda, *Introduction to bosonization*, Braz. J. Phys. 33, 3 (2003).

- [12] R. J. Baxter, *Exactly solvable models in statistical mechanics*, Academic Press (1982).
- [13] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena*, World Scientific (1984).
- [14] V. L. Berezinskii, Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group I, Classical systems. Sov. Phys. JETP, 32, 493 (1971).
- [15] V. L. Berezinskii, Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems possessing a continuous symmetry group II, Quantum systems, Sov. Phys. JETP 34, 610 (1972).
- [16] G. B. Mbeng, A. Russomanno, and G. E. Santoro, *The quantum Ising chain for beginners*, arXiv:2009.09208.
- [17] F. Kos, D. Poland, D. Simmons-Duffin, and A. Vichi, *Precision Islands in the Ising and  $O(N)$  Models*, JHEP **2016**, 36 (2016).
- [18] D. Simmons-Duffin, *The Lightcone Bootstrap and the Spectrum of the 3d Ising CFT*, JHEP **2017**, 86 (2017).
- [19] J. M. Kosterlitz, *Kosterlitz-Thouless physics: a review of key issues*, Rep. Prog. Phys. **79**, 026001 (2016).
- [20] H. B. Callen and T. A. Welton, *Irreversibility and generalized noise*, Phys. Rev. 83, 34 (1951).
- [21] J. M. Deutsch, *Eigenstate thermalization hypothesis*, Rep. Prog. Phys. 81 082001 (2018).
- [22] M. L. Mehta, *Random Matrices*, Academic Press (1991).
- [23] H.-H. Peng, J. Deng, S.-Y. Lou, and Q. Wang, *High precision solutions to quantized vortices within Gross-Pitaevskii equation*, Commun. Theor. Phys. **74**, 095002 (2022).