FAG 74986 Funksjonal-integral metoder
HØST 1996

Lærebok: John W. Negele og Henri Orland, "Quantum Many Particle Systems", Addison-Wesley Publishing Company, 1988.

Foreløpig innhold:

-Kort rekapitulering av 2. kvantisering for fermioner og bosoner.
-Koherente tilstander for bosoner.
-Grassmann variable.
-Koherente tilstander for fermioner.
-Gaussiske integraler.
-Matsubara summer og kontur-integraler.
-Feynman vei integraler.
-Imaginær-tids vei integraler og partisjonsfunksjonen.
-Partisjonsfunksjonen for fri elektron gass.
-Funksjonal-integraler over kvantefelt.
-Koherent tilstands vei integraler.
-Partisjons funksjonen for et mange-partikkel system.
-Genererende funksjon for Green's funksjoner.
-Slave boson felt.
-Vekselvirkende fermioner som en effektiv boson teori.
-Overkomplette sett av tilstander.
-Resolvent operatoren.
-Hartree tilnærmelsen.
-Løkke-utvikling.

De mest relevante seksjonene i læreboken er: 1.1-1.5, 2.1,2.3,2.4,2.5, 7.1,7.2,8.4.
I tillegg vil vi se på bruk av formalismen i noen viktige problemer i fysikk: Kondo problemet, Anderson modellen, Hubbard modellen, BCS modellen, som ikke er eksplisitt behandlet i læreboken.

Erfaringer fra høst:
Kommentarer: Litt mer om Hubbard

Det var god tid til i forrige det som vi forlot her. Derfor her var det mer grundig.
Bedre øvingsopplegg!

X-operatorer i forbindelse med $U=\infty$ Hubbard-modellen.
Noen anvendelser i øvingen?
Litt mer generelt om bruning av korrelasjons-funksjoner? Litt mer om fysikken til høytemp. tilstanden?

Kort rekapitulering:
2. kvantisering for fermioner og bosoner

Notasjon: λ = sett av kvantetall som bestemmer en en-partikkel tilstand

Eks: $\lambda = (\vec{k}, \sigma)$: Bølgetall, spinn
$\lambda = (i, \sigma)$: Gitterpkt, spinn
$\lambda = (n, i)$: Orbital, gitterpkt (spinnløse fermioner)

Mange-partikkel basis:

$$|\Phi\rangle = |n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, \ldots, n_{\lambda_N}\rangle$$

Mange-partikkeltilstand ~~bare~~ som er bygd opp av en-partikkel tilstander, men hvor en-partikkel tilstandene ikke nødvendigvis er uavhengige: dersom et av kvantetall-settene, λ_i, endres, fører dette spredningen gjennom konsekvens for fordelingen av kvantetall i de øvrige settene $\{\lambda_j\}$; $j \neq i$.

Vi trenger ofte at en generell mange-partikkeltilstand kan bygges opp som en lineær-kombinasjon

av $|\phi\rangle$-er:

$$|\psi\rangle = \sum_{\{n_{\lambda_1}, \dots n_{\lambda_N}\}} \varphi_{n_{\lambda_1} \dots n_{\lambda_N}} |n_{\lambda_1}, \dots n_{\lambda_N}\rangle$$

En-bestemt tilstandsvektor

$|n_{\lambda_1} \dots\dots n_{\lambda_N}\rangle$ kan konstruere

fra en <u>vakuum</u>-tilstand $|0\rangle$
(ingen bosoner i <u>rom</u> av de multipe en-partikkel tilstandene)

via kreasjons-operatorer

Notasjon: Kreasjons-operator
for boson: a^+_λ
For fermion: c^+_λ

Et boson i en en-partikkel tilstand kan destrueres v.h.a. annihilasjons-operatorer:

Boson: a_λ
Fermion: c_λ

<u>Komm. rels:</u>

$$[a_\lambda, a_{\lambda'}] = [a^+_\lambda, a^+_{\lambda'}] = 0$$
$$[a_\lambda, a^+_{\lambda'}] = \delta_{\lambda\lambda'}$$
$$[A, B] = AB - BA$$
$$\{c^+_\lambda, c^+_{\lambda'}\} = \{c_\lambda, c_{\lambda'}\} = 0$$
$$\{c_\lambda, c^+_{\lambda'}\} = \delta_{\lambda\lambda'}$$

Pauli-prinsipp + symmetri under ombytte

Klassisk én-partikkel operator:

$$T = \sum_i T(\vec{r}_i, \vec{p}_i) = \sum_i T\left(\vec{r}_i, \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i}\right)$$

Eks: Eksternt elektrostatisk potensial:

$$T = \sum_i V_{ext}(\vec{r}_i)$$

Kinetisk energi:

$$T = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} = \sum_i -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m}$$

Krystall-potensial:

$$T = \sum_i \sum_j v_{cryst}(\vec{r}_i; \vec{R}_j)$$

$\vec{r}_i$: Elektron-koord.
$\vec{R}_i$: Ion-koordinat.

2. Kvantisert versjon av en slik operator

$$T = \sum_{\lambda, \lambda'} T_{\lambda\lambda'} c_\lambda^+ c_{\lambda'}$$

$$T_{\lambda\lambda'} = \langle \lambda | T(\vec{r}, \vec{p}) | \lambda' \rangle$$

NB!! Matrise-elementa av én-partikkel operatorer er bestemt av matrise elementa i Hilbertrommet av én-partikkel tilstanden

Klassisk to-partikkel operator:

$$V = \sum_{i,j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$$

Eks: Vekselvirkning mellom to ladninger

$$V = \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

2. kvantisert version

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1, \ldots \lambda_4} V_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} c^+_{\lambda_1} c^+_{\lambda_2} c_{\lambda_3} c_{\lambda_4}$$

$$V_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} = \langle \lambda_1 \lambda_2 | V(r_i, \vec{r}_j) | \lambda_4 \lambda_3 \rangle$$

Matrise-elementer av to-partikkel operatorer er bestemt av matrise-elementer i Hilbert-rommet av to-partikkel tilstander

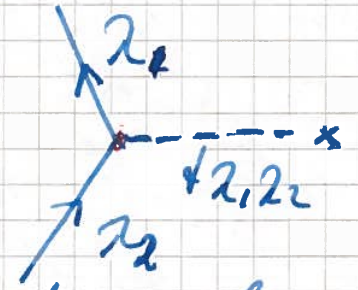
Viktig operator: Hamilton-operatoren

$$H = T + V$$

$$T = \sum_i -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m}$$

Dette var så langt gjort for fermion-operatorer, (c_λ^+, c_λ). Men helt tilsvarende utsagn gjelder selvsagt for bosoner (materielle), og 2. kvantisert versjon av Hamilton-operatoren for et vekselvirkende, materielt, boson-system er identisk samme form som H på side 5. Legg merke til et hvert ledd i H har like mange c_λ^+ som $c_{\lambda'}$.

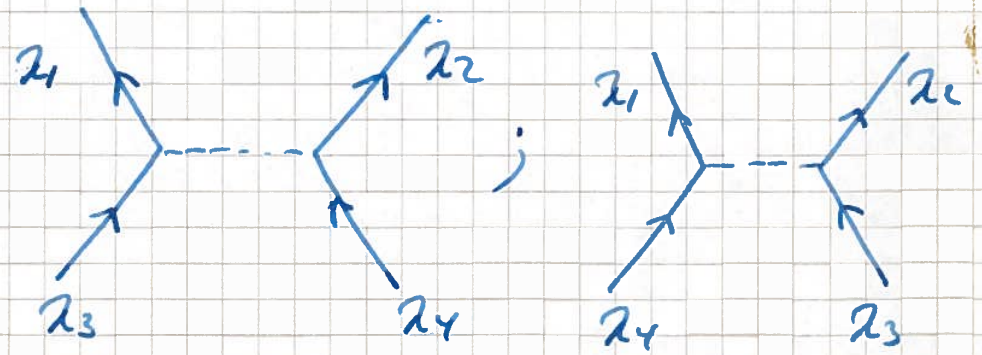
<u>I</u> :



$t_{\lambda_1\lambda_2}\, c_{\lambda_1}^+ c_{\lambda_2}$

„Spredning fra „eksternt" potensial"

<u>V</u> :



„Vekselvirkning mellom to partikler".

Statistisk mekanikk

Anta at vi kjenner spektret E_N^n til et u.u. mange-partikkel system, definert ved en tilstand $|\psi_N\rangle_n$ (N: # partikler i systemet)

$|\psi_N\rangle$ antas også kjent, slik at matrise-elementer av observable ønsker beregnes i $_n\langle\psi_N|\mathcal{O}|\psi_N\rangle_n$

$$H\,|\psi_N\rangle_n = E_N^n\,|\psi_N\rangle_n$$

n: Index som angir hvilken eksitasjons tilstand $|\psi_N\rangle_n$ systemet befinner seg i. Temp. β inn for temperatur for i kanon. stat. mek.!!

Temperaturen innføres da ved partisjonsfunksjonen

$$Z_N = \sum_n e^{-\beta E_N^n}$$

Kanonisk partisjons-funksjon

NB!! Her summeres det over tilstander, ikke energi-nivå E_N^n

$$Z = \sum_n {}_n\langle\psi_N|\,e^{-\beta H}\,|\psi_N\rangle_n$$

$$= \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right) = \mathrm{Tr}\left(S^{-1} S\, e^{-\beta H}\right)$$

$$= \mathrm{Tr}\left(S\, e^{-\beta H} S^{-1}\right)$$

$$= \sum_{n'} {}_{n'}\langle\phi_N|\,e^{-\beta H}\,|\phi_N\rangle_{n'}$$

NB!! Oppe spor over fysikalske tilstander kan brukes!! Dette skal vi bruke snart, for å få den hensiktsmessige formulering.

Vi kan bruke en <u>vilkårlig</u> basis til å regne ut partisjonsfunksjonen. Den mest hensiktsmessige er ofte den hvor Hamilton-operatoren er <u>diagonal</u>, men ikke nødvendigvis.

Statistisk middelverdi av operator:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{Z} \, \mathrm{Tr}\left(\hat{O} e^{-\beta H}\right)$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_n {}_n\langle \psi_N | \hat{O} e^{-\beta H} | \psi_N \rangle_n$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{n,n'} {}_n\langle \psi_N | \hat{O} | \psi_N \rangle_{n'} \underbrace{{}_{n'}\langle \psi_N | e^{-\beta H} | \psi_N \rangle_n}_{\delta_{nn'} e^{-\beta E_{n'}}}$$

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \underbrace{{}_n\langle \psi_N | \hat{O} | \psi_N \rangle_n}_{\text{Kv. mek. matr. element.}} \underbrace{e^{-\beta E_n}}_{T \text{ inngår kun her.}}$$

Grunntilstand: $n = 0$

(ikke degenerert) $\underline{E_0}$; $|\psi_N\rangle_0$

$\beta \to \infty \Leftrightarrow T \to 0$:

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \frac{1}{Z_{\beta=\infty}} e^{-\beta E_0} \, {}_0\langle \psi_N | \hat{O} | \psi_N \rangle_0$$

$$= \frac{e^{-\beta E_N^0}}{e^{-\beta E_N^0}} \; {}_0\langle \psi_N | \hat{O} | \psi_N \rangle_0$$

$$\langle \hat{O} \rangle \overset{\beta \to \infty}{=} {}_0\langle \psi_N | \hat{O} | \psi_N \rangle_0$$

$\underline{T=0}$: Statistisk middelværdi = middelværdi af $\hat{O}$ i grundtilstand

Anta at spektret er slik at grundtilstanden er adskilt fra eksiterte tilstande ved et gap (bånd-isolator, halvleder, superleder)

$$E_N^1 = E_N^0 + \Delta_N$$

$$E_N^2, E_N^3, \ldots \geq E_N^1$$

Da har vi:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{e^{-\beta E_N^0} \, {}_0\langle \psi_N | \hat{O} | \psi_N \rangle_0 \left(1 + e^{-\beta \Delta} \ldots\right)}{e^{-\beta E_N^0} \left(1 + e^{-\beta \Delta} \ldots\right)}$$

$\beta\Delta \gg 1 \Rightarrow$

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq {}_0\langle \Psi_N | \hat{O} | \Psi_N \rangle_0$$

I halvleder:	$\Delta \sim 10$ meV
	~ 1000 K
$T \ll 1000$K $\Rightarrow$	"0 temperatur"

Koherente tilstander

En koherent tilstand (både for fermioner og bosoner) er definert som en egentilstand til en destruksjons-operator

$$\underline{\underline{a}}\lambda\, |\phi\rangle = \varphi\lambda\, |\phi\rangle \qquad \text{Bosoner}$$

$$\underline{\underline{c}}\lambda\, |\Psi\rangle = \xi\lambda\, |\Psi\rangle \qquad \text{Fermioner}$$

Både $|\phi\rangle$ og $|\Psi\rangle$ må inneholde en komponent som har et minste antall ($\lambda \geq 0$) partikler i seg. Men det er umiddelbart klart at $|\phi\rangle$ og $|\Psi\rangle$ ikke kan være tilstander med et skarpt

definert antall partikler i se.
De er også „vanskelige å ødelegge". Stivhet i tilstanden.
Fra det overstående er det
også klart hvorfor vi
definerer de koherente tilstandene
som egentilstander til a_λ, c_λ,
og ikke a_λ^+, c_λ^+. Vi kommer tilbake
til konstruksjon av koherente tilst. litt senere.

Se først litt nærmere på boson
tilfellet:

$$a_\lambda |\phi\rangle = \phi_\lambda |\phi\rangle$$

$$[a_\lambda, a_{\lambda'}] = 0 \Rightarrow$$

$$(a_\lambda a_{\lambda'} - a_{\lambda'} a_\lambda) |\phi\rangle = 0$$

$$= (\phi_\lambda \phi_{\lambda'} - \phi_{\lambda'} \phi_\lambda) |\phi\rangle \Rightarrow$$

$$[\phi_\lambda, \phi_{\lambda'}] = 0$$

Dersom ϕ_λ er et c-tall,
vil alltid dette være oppfylt.

$\Rightarrow$

$$\boxed{\text{Egenverdiet til koherente boson-tilstander kan velges som c-tall (komplekse tall)}}$$

Dette er altså et utsagn vi kan gå
utenpå noen måte å spesifisere hvordan
den koherente boson-tilstanden skal bygges.

Se nå litt nærmere på fermion-tilfellet:

$$\{c_\lambda, c_{\lambda'}\} = 0 \Rightarrow$$

$$(c_\lambda c_{\lambda'} + c_{\lambda'} c_\lambda)|\psi\rangle = 0$$

$$= (\xi_\lambda \xi_{\lambda'} + \xi_{\lambda'} \xi_\lambda)|\psi\rangle \Rightarrow$$

$$\{\xi_\lambda, \xi_{\lambda'}\} = 0$$

Dersom ξ_λ er et c-tall vil dette bare være oppfylt for $\{\xi_\lambda\} = 0$: trivielle egenverdier.

$\Rightarrow$

$$\boxed{\text{Egenverdiene til hoholnte fermion-tilstander må velges som antikommuterende tall, Grassmann-variable.}}$$

Fundamental egenskap:

$$\boxed{\xi_\lambda \xi_{\lambda'} + \xi_{\lambda'} \xi_\lambda = 0}$$

Det følger umiddelbart:

$$\xi_\lambda^2 = 0$$

Grassmann-variable har kvadrat = 0!

Likeledes: $\xi^n \quad ; \; n > 2$

$$= \xi^2 \cdot \xi^{n-2} = 0$$

En vilkårlig funksjon som ekkeutvikles i Grassmann-variable:

$$f(\xi) = \sum_n c_n \xi^n$$

$$= c_0 + c_1 \xi + \cdots$$

$$\underline{\underline{f(\xi) = c_0 + c_1 \xi}} \qquad \text{Lineær!}$$

$$\underline{\underline{f(\xi^*) = c_0 + c_1 \xi^*}} \quad , \quad (\xi^*)^* = \xi$$

Vilkårlig funksjon av ξ, ξ^*:

$$A(\xi, \xi^*) = c_0 + c_1 \xi + c_2 \xi^* + c_3 \xi \xi^*$$

$$= c_0 + c_1 \xi + c_2 \xi^* + d_3 \xi^* \xi$$

Grassmann-algebra

Vi skal nå se litt på egenskaper til funksjoner av Grassmann-variable

Derivasjon m.h.p. Grassmann-variable:

$$\frac{\partial \xi}{\partial \xi} = 1 \quad ; \quad \frac{\partial \xi}{\partial \xi^*} = 0$$

$$\frac{\partial \xi^*}{\partial \xi} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial \xi^*}{\partial \xi^*} = 1$$

$$\frac{\partial(\xi\xi^*)}{\partial\xi} = \xi^*$$

$$\frac{\partial(\xi\xi^*)}{\partial\xi^*} = -\frac{\partial(\xi^*\xi)}{\partial\xi^*} = -\xi$$

$$\frac{\partial f(\xi)}{\partial\xi^*} = 0$$

$$\frac{\partial f(\xi)}{\partial\xi} = c_1 = \frac{\partial f(\xi^*)}{\partial\xi^*}$$

$$\frac{\partial}{\partial\xi} A(\xi,\xi^*) = \frac{\partial}{\partial\xi}\left(c_0 + c_1\xi + c_2\xi^* + c_3\xi\xi^*\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial\xi} A(\xi,\xi^*) = c_1 + c_3\xi^*$$

$$\frac{\partial}{\partial\xi^*} A(\xi,\xi^*) = c_2 - c_3\xi$$

Integrasjon m.h.p. Grassmann-variable:

Motivert ut fra egenskaper til vanlige Riemann-integral:

$f(x=\pm\infty) = 0$. Da er

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{df}{dx} = 0$$

Tilsvarende:

$$\int d\xi \cdot 1 = \int d\xi \, \frac{d\xi}{d\xi} = 0$$

$$\int d\xi^* = 0$$

Integralet av et totalt differensial er null.

$$\int d\xi \, \xi = 1. \quad \text{„Normalisering"}$$

Dette har ikke formen som et totalt differensial

$$\int d\xi^* \, \xi^* = 1. \quad \text{„Normalisering"}$$

Disse relasjonene definerer hva vi mener med Grassmann-integrasjon

$$\int d\xi \, f(\xi) = c_0$$

$$\frac{\partial f}{\partial \xi} = c_1$$

„Integrasjon = derivasjon"
„Integrasjon = differensiering"

$$\int d\xi \, A(\xi, \xi^*)$$

$$= \int d\xi \left(c_0 + c_1 \xi + c_2 \xi^* + c_3 \xi \xi^*\right)$$

$$= c_1 + c_3 \xi^*$$

„Integrasjon = derivasjon"

Merknad:

$$a_\lambda^+ |\emptyset\rangle \neq |\emptyset\rangle$$

$$c_\lambda^+ |\xi\rangle \neq |\xi\rangle$$

$$a_\lambda^+ a_\lambda |\emptyset\rangle \neq N_\lambda^B |\emptyset\rangle$$

$$c_\lambda^+ c_\lambda |\xi\rangle \neq N_\lambda^F |\xi\rangle$$

De ubeskrevne tilstandene er ikke egentilstander til antallsoperatoren.

$$\hat{N}_{tot}^B = \sum_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda$$

$$\hat{N}_{tot}^F = \sum_\lambda c_\lambda^+ c_\lambda$$

$$N_{tot}^B |\emptyset\rangle \neq N_{tot}^B |\emptyset\rangle$$

$$N_{tot}^F |\xi\rangle \neq N_{tot}^F |\xi\rangle$$

$|\emptyset\rangle$, $|\xi\rangle$: ikke tilstander med bestemt antall partikler i seg.

Algebra

Vektor-rom, med følgende tillegg-egenskaper:

i) $(xy)z = x(yz)$

ii) $x(y+z) = xy + xz$

iii) $(x+y)z = xz + yz$

iv) $\alpha xy = x\alpha y$

Abelsk algebra: $xy = yx$

Grassmann algebra: $xy = -yx$

<u>C-tall</u>: Generator for den Abelske algebra over feltet $\mathbb{C}$ av kommuterende tall:

<u>Grassmann-tall</u>: Generator for algebraen over feltet $\mathbb{C}$ av antikommuterende tall.

Den litt spesielle definisjonen av integrasjon er motivert ved at den gir resultater som minner om resultater fra teori for komplekse funksjoner

Konstruksjon av koherente tilstander, bosoner

~~Sett fokus på tilfellet med en sett av kvantall~~

$$a_\lambda |\phi\rangle = \phi_\lambda |\phi\rangle$$

$|\phi\rangle$: Koherent boson-tilstand

Ansatz:

$$|\phi\rangle = e^{\sum_\lambda \phi_\lambda a^+_\lambda} |0\rangle$$

Påstand:

$$a_\lambda e^{\sum_{\lambda'} \phi_{\lambda'} a^+_{\lambda'}} |0\rangle = \phi_\lambda \cdot e^{\sum_{\lambda'} \phi_{\lambda'} a^+_{\lambda'}} |0\rangle$$

Bevis:

$$a \sum_{n=0} \frac{(\phi a^+)^n}{n!} |0\rangle$$

$$= a \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi^n}{n!} (a^+)^n |0\rangle$$

$(a^+)^n a |0\rangle = 0$: Ønsker å kommutere a igjennom

$$[a, f(a^+)]$$

$$= \sum_{n=1} c_n \; [a, (a^+)^n]$$

$$= \sum_{n=1} n c_n \; (a^+)^{n-1}$$

$$f(a^+) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \; (a^+)^n$$

$$\Rightarrow \quad [a, f(a^+)] = \frac{\partial}{\partial a^+} f(a^+)$$

<u>Mer generelt:</u>

$$[g(a), f(a^+)] = g\left(\frac{\partial}{\partial a^+}\right) f(a^+)$$

Trenger:

$$[a, (a^+)^n] = n \; (a^+)^{n-1}$$

$$[(a)^m, (a^+)^n] = \frac{n!}{(n-m)!} (a^+)^{n-m}$$

$$\{c, f(c^+)\} = \frac{\partial}{\partial c^+} f(c^+)$$

$$\underline{\{g(c), f(c^+)\} = g\left(\frac{\partial}{\partial c^+}\right) f(c^+)}$$

$$[a, (a^+)^n] = ?$$

Ved gjentatt bruk av

$$[A, BC] = [A,B]C + B[A,C]$$

$A = a$

$B = a^+$

$C = (a^+)^{n-1} \quad \Rightarrow$

$$[a, (a^+)^n] = (a^+)^{n-1} + a^+[a, (a^+)^{n-1}]$$
$$= n(a^+)^{n-1}$$

$$\Rightarrow \quad a(a^+)^n|0\rangle = n(a^+)^{n-1}|0\rangle$$

$$\Rightarrow \quad a e^{\phi a}|0\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi^n \cdot n (a^+)^{n-1}}{n!}|0\rangle$$

$$= \phi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\phi a^+)^{n-1}}{(n-1)!}|0\rangle = \phi e^{\phi a^+}|0\rangle$$

Flere modi: (sett av hverdetell)

$$\sum_{\lambda} \phi_\lambda a_\lambda^+$$

Koherent bosondilstand

$$|\phi\rangle = e^{}|0\rangle$$

$$a_\lambda|\phi\rangle = \phi_\lambda|\phi\rangle$$

Koherent tilstand:
„Vanskelig å ødelegge"
Eks: Laser (Glauber)

Vi kunne gjort dette med direkte:

Anta at $|\emptyset\rangle = \prod_\lambda f_\lambda(\varphi_\lambda, a_\lambda^+)\,|0\rangle$

$$a_\lambda\,|\emptyset\rangle = \varphi_\lambda\,|\emptyset\rangle$$

Da krever vi

$$a_\lambda\, f_\lambda(\varphi_\lambda, a_\lambda^+)|0\rangle = \varphi_\lambda\, f(\varphi_\lambda, a_\lambda^+)|0\rangle$$

Men:

$$[a_\lambda, f_\lambda]|0\rangle = a_\lambda f_\lambda\,|0\rangle$$

$$[a_\lambda, f_\lambda(\varphi_\lambda, a_\lambda^+)]$$

$$= \frac{\partial}{\partial a_\lambda^+} f_\lambda = \varphi_\lambda f_\lambda$$

$$\frac{df_\lambda}{f_\lambda} = \varphi_\lambda\, d a_\lambda^+$$

$$\ln f_\lambda = \varphi_\lambda a_\lambda^+$$

$$\underline{\underline{f_\lambda = e^{\varphi_\lambda a_\lambda^+}}}$$

Noen egenskaper til koherente boson tilstander

$$a_\lambda^+ |\phi\rangle = a_\lambda^+ e^{\sum_{\lambda'} \varphi_{\lambda'} a_{\lambda'}^+} |0\rangle$$

$$= \frac{\partial}{\partial \varphi_\lambda} |\phi\rangle$$

$$\langle\phi| = \langle 0| e^{\sum_\lambda \varphi_\lambda^* a_\lambda} \Rightarrow$$

$$\langle\phi| a_\lambda = \frac{\partial}{\partial \varphi_\lambda^*} \langle\phi|$$

Overlapp mellom to koherente tilstander:

$$\langle\phi|\phi'\rangle = \langle 0| e^{\sum_{\lambda_1} \varphi_{\lambda_1}^* a_{\lambda_1}} e^{\sum_{\lambda_2} \varphi_{\lambda_2} a_{\lambda_2}^+} |0\rangle$$

Definer: $A = \sum_{\lambda_1} \varphi_{\lambda_1}^* a_\lambda$

$B = \sum_{\lambda_2} \varphi'_{\lambda_2} a_{\lambda_2}^+$

$$\langle\phi|\phi'\rangle = \langle 0| e^A e^B |0\rangle$$

Vi ser: $\langle 0| e^B e^A |0\rangle = 1$

Baker-Hausdorf:

$$\left.\begin{aligned} e^{A+B} &= e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \\ &= e^B e^A e^{-\frac{1}{2}[B,A]} \end{aligned}\right\} \begin{array}{l}[A,B] \\ \text{kommuterer} \\ \text{med } A, B.\end{array}$$

$$\Rightarrow \quad e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]}$$

$$[A,B] = \sum_{\lambda_1,\lambda_2} \varphi_{\lambda_1}^* \varphi'_{\lambda_2} \underbrace{[a_{\lambda_1}, a_{\lambda_2}^+]}_{\delta_{\lambda_1\lambda_2}}$$

$$[A,B] = \sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi'_\lambda$$

$\Rightarrow$

$$\langle \phi | \phi' \rangle = e^{\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi'_\lambda} \underbrace{\langle 0 | e^B e^A | 0 \rangle}_{=1}$$

$$= \underline{\underline{e^{\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi'_\lambda}}}$$

Ikke orthogonale!

Dette gir altså normeringen av $|\phi\rangle$:

$$\langle \phi | \phi \rangle = e^{\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda}$$

$$= e^{\langle N \rangle}$$

$\langle N \rangle$: Gjennomsnittlig antall partikler i tilstanden $|\phi\rangle$. (Se nedenfor)

$$\frac{\langle \phi | \sum_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \langle N \rangle$$

$$= \sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda$$

$$\langle (\Delta N)^2 \rangle = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \left[\langle \phi | \hat{N}^2 | \phi \rangle - \langle \phi | \hat{N} | \phi \rangle^2 \right]$$

$$= \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \left[\langle \phi | \sum_{\lambda_1 \lambda_2} a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_1} a_{\lambda_2}^+ a_{\lambda_2} | \phi \rangle - \left(\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda \right)^2 \right] = \sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda = N$$

$$\frac{\langle \Delta N \rangle}{N} = \frac{1}{N}$$

Koherente tilstander for ein boson oscillator

$$|z\rangle = e^{za^+}|0\rangle$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n (a^+)^n}{n!}|0\rangle = \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

$$\int \frac{dz\,dz^*}{2\pi i} e^{-z^*z}|z\rangle\langle z| = \int \frac{dz\,dz^*}{2\pi i} e^{-zz^*} \sum_{n,m} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \frac{(z^*)^m}{\sqrt{m!}} |n\rangle\langle m|$$

$$= \sum_{n,m} \frac{1}{\sqrt{n!\,m!}} |n\rangle\langle m| \int \frac{dz\,dz^*}{2\pi i} e^{-zz^*} z^n (z^*)^m$$

$$= \sum_{n,m} \frac{1}{\sqrt{n!\,m!}} |n\rangle\langle m| \int \frac{dx\,dy}{\pi} e^{-(x^2+y^2)} (x+iy)^n (x-iy)^m$$

$$\int \frac{dx\,dy}{\pi} e^{-(x^2+y^2)} (x+iy)^n (x-iy)^m$$

$$= \frac{1}{\pi} \int d\rho\, \rho\, d\theta\, e^{-\rho^2} (\rho e^{i\theta})^n (\rho e^{-i\theta})^m$$

$$= \frac{1}{\pi} \underbrace{\int d\theta\, e^{i\theta(n-m)}}_{2\pi\delta_{nm}} \int d\rho\, \rho\, \rho^{n+m} e^{-\rho^2}$$

$$= 2\delta_{nm} \int d\rho\, \rho^{2n+1} e^{-\rho^2}$$

$$r = \rho^2 \Rightarrow dr = 2\rho\, d\rho \Rightarrow d\rho = \frac{dr}{2\rho} = \frac{1}{2} dr\, r^{-1/2}$$

$$\int_0^\infty d\rho\, \rho^{2n+1} e^{-\rho^2} = \frac{1}{2}\int_0^\infty dr\, r^{-1/2} (r^{1/2})^{2n+1} e^{-r} = \frac{1}{2}\int_0^\infty r^n e^{-r} = \frac{1}{2} n!$$

$$\Rightarrow \int \frac{dz\,dz^*}{2\pi i} e^{-z^*z}|z\rangle\langle z| = \sum_{nm} \frac{1}{\sqrt{n!\,m!}} |n\rangle\langle m| \cdot 2\delta_{nm} \cdot \frac{1}{2} n!$$

$$= \sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \quad \text{QED}$$

Koherente tilstander forblir koherente under tidsutvikling, men med ein annan label:

$$e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|z\rangle = e^{-\frac{i\hbar\omega a^\dagger a t}{\hbar}}|z\rangle = e^{-i\omega t a^\dagger a}|z\rangle$$

$$= e^{-i\omega t a^\dagger a}\sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t a^\dagger a}|n\rangle$$

$$= \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t n}|n\rangle = \sum_n \frac{(ze^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = |ze^{-i\omega t}\rangle$$

Propagatoren i denne basisen er difor svært enkel:

$$\langle z_n|e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|z_0\rangle = \langle z_n|z_0 e^{-i\omega t}\rangle = e^{z_n^* z_0 e^{-i\omega t}}$$

Fullstendighetsrelasjonen for boson koherente tilstander

$$\int \left(\prod_\lambda \frac{d\varphi_\lambda^* \, d\varphi_\lambda}{2\pi i} \right) e^{-\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda} \, |\phi\rangle\langle\phi|$$

$$= \int \left(\prod_\lambda \frac{d\varphi_\lambda^* \, d\varphi_\lambda}{2\pi i} \right) e^{-\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda} \, e^{\sum_\lambda \varphi_\lambda a_\lambda^+} |0\rangle\langle 0| \, e^{\sum_\lambda a_\lambda \varphi_\lambda^*}$$

$$= \int \left(\prod_\lambda \frac{d\varphi_\lambda^* \, d\varphi_\lambda}{2\pi i} \right) e^{-\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda}$$

$$\cdot \sum_{n_{\lambda_1}=0}^{\infty} \frac{(\varphi_{\lambda_1})^{n_{\lambda_1}}}{\sqrt{n_{\lambda_1}!}} \sum_{n_{\lambda_2}=0}^{\infty} \frac{(\varphi_{\lambda_2})^{n_{\lambda_2}}}{\sqrt{n_{\lambda_2}!}} \cdots \; |n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, \ldots\rangle$$

$$\sum_{m_{\lambda_1}=0}^{\infty} \frac{(\varphi_{\lambda_1}^*)^{m_{\lambda_1}}}{\sqrt{m_{\lambda_1}!}} \sum_{m_{\lambda_2}=0}^{\infty} \frac{(\varphi_{\lambda_2}^*)^{m_{\lambda_2}}}{\sqrt{m_{\lambda_2}!}} \cdots \; \langle m_{\lambda_1}, m_{\lambda_2}, \ldots|$$

e result
, one
ode

$$= \underbrace{\sum_{n_{\lambda_1}=0}^{\infty} \sum_{n_{\lambda_2}=0}^{\infty} \cdots}_{\sum_{\{n_\lambda\}}} \; |n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, \ldots\rangle\langle n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, \ldots|$$

sum over all configurations $\{n_\lambda\}$ =
sum over all many-particle states

$$= I$$

Konstruksjon av fermion koherente tilstander

Ansatz:

$$|\xi\rangle = e^{-\sum_\lambda \xi_\lambda c_\lambda^+} |0\rangle$$

$$= \prod_\lambda (1 - \xi_\lambda c_\lambda^+) |0\rangle$$

Det er lettere å vise egenskapen

$$c_\lambda |\xi\rangle = \xi_\lambda |\xi\rangle$$

for fermionene enn for bosonene:
Bruk $\xi_\lambda^2 = 0$ til å finnlik ekspansjon av exponential-funksjon $\Rightarrow$

$$c_\lambda \prod_{\lambda'} (1 - \xi_{\lambda'} c_{\lambda'}^+) |0\rangle = c_\lambda |\xi\rangle$$

Affisere igjen en av produktene:

$$c_\lambda (1 - \xi_\lambda c_\lambda^+) |0\rangle$$

$$= +\xi_\lambda \underbrace{c_\lambda c_\lambda^+}_{1 - c_\lambda^+ c_\lambda} |0\rangle$$

$$= +\xi_\lambda |0\rangle \quad ; \quad \{\xi_\lambda, c_\lambda\} = 0$$

$$\{\xi_\lambda, c_\lambda^+\} = 0$$

$$= \xi_\lambda (1 - \xi_\lambda c_\lambda^+) |0\rangle \quad \text{etc.}$$

$$\xi_\lambda^2 = 0$$

$$\Longrightarrow$$

$$c_\lambda |\xi\rangle = \xi_\lambda |\xi\rangle$$

$$c_\lambda^+ |\xi\rangle = c_\lambda^+ (1 - \xi_\lambda c_\lambda^+) \prod_{\gamma \neq \lambda} (1 - \xi_\gamma c_\gamma^+) |0\rangle$$

$$= - \frac{\partial}{\partial \xi_\lambda} (1 - \xi_\lambda c_\lambda^+) \prod_{\gamma \neq \lambda} (\quad) |0\rangle$$

$$= \underline{\underline{- \frac{\partial}{\partial \xi_\lambda} |\xi\rangle}}$$

$$\langle \xi | c_\lambda = \frac{\partial}{\partial \xi_\lambda^*} \langle \xi |$$

NB!!

$$= \prod_\lambda \langle 0 | (1 + \xi_\lambda^* c_\lambda) c_\lambda$$

$$= \frac{\partial}{\partial \xi_\lambda^*} \prod_\lambda \langle 0 | (1 + \xi_\lambda^* c_\lambda)$$

$$= \frac{\partial}{\partial \xi_\lambda^*} \langle \xi |$$

<u>Overlapp mellom koherente tilstander:</u>

$$\langle \xi | \xi' \rangle = \langle 0 | \prod_{\lambda, \lambda'} (1 + \xi_{\lambda'}^* c_{\lambda'}) (1 - \xi_\lambda c_\lambda^+) |0\rangle$$

$$= \cancel{\langle 0 |} \prod_{\lambda, \lambda'} \langle 0 | (1 - \xi_{\lambda'}^* c_{\lambda'} \xi_\lambda c_\lambda^+) |0\rangle$$

$$\underline{\{c_\lambda, \xi_\lambda\} = 0}$$

$$= \prod_{\lambda' \neq \lambda} \cdot 1 \prod_\lambda \cdot (1 + \xi_\lambda^* \xi_\lambda)$$

$$= \prod_\lambda (1 + \xi_\lambda^* \xi_\lambda)$$

Reeksponensiering $\Rightarrow$ $\underline{\underline{e^{\sum_\lambda \xi_\lambda^* \xi_\lambda}}}$ På samme form som boson-tilfellet.

Fullstendighetsrelasjon:

$$\int \prod_\lambda d\xi_\lambda^* \, d\xi_\lambda \, e^{-\sum_\lambda \xi_\lambda^* \xi_\lambda} |\xi\rangle\langle\xi| = 1$$

Sporet til en operator:

$$Tr(A) = \sum_n \langle n|A|n\rangle$$

$$= \int \prod_\lambda d\xi_\lambda^* \, d\xi_\lambda \, e^{-\sum_\lambda \xi_\lambda^* \xi_\lambda} \underbrace{\sum_n \langle n|\xi\rangle\langle\xi|A|n\rangle}$$

anti-komm

NB!! Kun under integral-tegn!!

$$= \sum_n \langle -\xi|A|n\rangle\langle n|\xi\rangle$$

NB!!! Fortegn!!

$$= \langle -\xi|A|\xi\rangle$$

$$= \int \prod_\lambda d\xi_\lambda^* \, d\xi_\lambda \, e^{-\sum_\lambda \xi_\lambda^* \xi_\lambda} \langle -\xi|A|\xi\rangle$$

$\hat{N} = \sum_\lambda c_\lambda^+ c_\lambda$: Antallsoperator

Hva er middelverdien av dette i en fermion koherent tilstand?

$$\frac{\langle\xi|\hat{N}|\xi\rangle}{\langle\xi|\xi\rangle} = \sum_\lambda \frac{\langle\xi|c_\lambda^+ c_\lambda|\xi\rangle}{\langle\xi|\xi\rangle}$$

$$= \sum_\lambda \xi_\lambda^* \xi_\lambda$$

Dette er ikke et reelt tall!! eller heltallig

Det er derfor meningsløst å snakke om midlere antall fermioner i en koherent fermion tilstand

$$\langle \psi | \zeta \rangle = c_0 + c_1 \zeta$$
$$\langle \zeta | \psi \rangle = d_0 + d_1 \zeta^*$$

Multiplisere ut.

Ledd lineære i ζ, ζ^*
$\Rightarrow 0$ under summen
integrasjon.

$$|\zeta\rangle \equiv e^{\zeta c^+} |0\rangle$$
$$|-\zeta\rangle = e^{-\zeta c^+} |0\rangle$$
$$\neq -|\zeta\rangle \quad !!!$$

$$\langle \psi | \zeta \rangle \langle \zeta | \psi \rangle \neq \langle -\zeta | \psi \rangle \langle \psi | \zeta \rangle$$

Men det blir korrekt under int.-tegn! Som vi det vi har brukt. Altså:

$$\int d\zeta\, d\zeta^* \langle \psi | \zeta \rangle \langle \zeta | \varphi \rangle = \int d\zeta\, d\zeta^* \langle -\zeta | \varphi \rangle \langle \psi | \zeta \rangle$$

Fullstendigheitsrelasjonen for fermion koherente tilstander

$$\int \prod_\lambda d\xi_\lambda^* d\xi_\lambda \, e^{-\sum_\lambda \xi_\lambda^* \xi_\lambda} \, |\xi\rangle\langle\xi|$$

1 mode:

$$\int d\xi^* d\xi \, e^{-\xi^*\xi} \, e^{-\xi c^+} |0\rangle\langle 0| \, e^{-c\xi^*}$$

$$= \int d\xi^* d\xi \, (1-\xi^*\xi)(1-\xi c^+)|0\rangle\langle 0|(1-c\xi^*)$$

$$= \int d\xi^* d\xi \, [1 - \xi^*\xi - \xi c^+]|0\rangle\langle 0|(1+\xi^* c)$$

$$= \int d\xi^* d\xi \, [(1-\xi^*\xi)|0\rangle - \xi c^+|0\rangle][\langle 0| + \xi^*\langle 0|c]$$

$$= \int d\xi^* d\xi \, [(1-\xi^*\xi)|0\rangle\langle 0| - \xi c^+|0\rangle\langle 0| + (1-\xi^*\xi)|0\rangle\xi^*\langle 0|c - \xi c^+|0\rangle\xi^*\langle 0|c]$$

$$= \int d\xi^* d\xi \, [(1-\xi^*\xi)|0\rangle\langle 0| - \xi|1\rangle\langle 0| + (1-\xi^*\xi)\xi^*|0\rangle\langle 1| + \xi\xi^*|1\rangle\langle 1|]$$

$$= |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = I \quad \text{QED}$$

(har brukt $[\xi_\lambda, |0\rangle] = 0$)

Flere moder:

$$\int \prod_\lambda d\xi_\lambda^* d\xi_\lambda \, e^{-\sum_\lambda \xi_\lambda^* \xi_\lambda} \, |\xi\rangle\langle\xi|$$

$$= \int \prod_\lambda d\xi_\lambda^* d\xi_\lambda \, e^{-\sum_\lambda \xi_\lambda^* \xi_\lambda} \, e^{-\sum_\lambda \xi_\lambda c_\lambda^+} |0\rangle\langle 0| \, e^{-\sum_\lambda c_\lambda \xi_\lambda^*}$$

$$= \int \left(\prod_\lambda d\xi_\lambda^* d\xi_\lambda\right)\left(\prod_\lambda (1-\xi_\lambda^*\xi_\lambda)\right)\left(\prod_\lambda (1-\xi_\lambda c_\lambda^+)\right)|0\rangle\langle 0| \prod_\lambda (1+\xi_\lambda^* c_\lambda)$$

Kan behandla $\xi_\lambda^* \xi_\lambda$, $\xi_\lambda c_\lambda^\dagger$ etc. som vanlige tal (sidan dei kommuterer) når ein byte plass osv.

<u>To moder:</u>

$$\int d\xi_1^* d\xi_1 d\xi_2^* d\xi_2 \, e^{-\xi_1^*\xi_1 - \xi_2^*\xi_2} \, e^{-\xi_1 c_1^\dagger - \xi_2 c_2^\dagger} |0\rangle\langle 0| e^{-c_1\xi_1^* - c_2\xi_2^*}$$

$$= \int d\xi_1^* d\xi_1 d\xi_2^* d\xi_2 \, (1-\xi_1^*\xi_1)(1-\xi_2^*\xi_2)(1-\xi_1 c_1^\dagger)(1-\xi_2 c_2^\dagger)|0\rangle$$

$$\langle 0|(1+\xi_1^* c_1)(1+\xi_2^* c_2)$$

$$= \int d\xi_1^* d\xi_1 d\xi_2^* d\xi_2 \, (1 - \xi_1^*\xi_1 - \xi_2^*\xi_2 + \xi_1^*\xi_1 \xi_2^*\xi_2)$$

$$(1 - \xi_1 c_1^\dagger - \xi_2 c_2^\dagger - \xi_1\xi_2 c_1^\dagger c_2^\dagger)|0\rangle$$

$$\langle 0|(1 + \xi_1^* c_1 + \xi_2^* c_2 + \xi_1^* c_1 \xi_2^* c_2)$$

$$= \int d\xi_1^* d\xi_1 d\xi_2^* d\xi_2 \, (1 - \xi_1^*\xi_1 - \xi_2^*\xi_2 + \xi_1^*\xi_1\xi_2^*\xi_2)$$

$$[\,|0\rangle - \xi_1 c_1^\dagger|0\rangle - \xi_2 c_2^\dagger|0\rangle - \xi_1\xi_2 c_1^\dagger c_2^\dagger|0\rangle\,]$$

$$[\,\langle 0| + \xi_1^*\langle 0|c_1 + \xi_2^*\langle 0|c_2 - \xi_1^*\xi_2^*\langle 0|c_1 c_2\,]$$

$c_1^\dagger c_2^\dagger|0\rangle \equiv |$

$$= \int d\xi_1^* d\xi_1 d\xi_2^* d\xi_2 \, (1 - \xi_1^*\xi_1 - \xi_2^*\xi_2 + \xi_1^*\xi_1\xi_2^*\xi_2)$$

$$[\,|0\rangle\langle 0| + \xi_1^*|0\rangle\langle 1,0| + \xi_2^*|0\rangle\langle 0,1| - \xi_1^*\xi_2^*|0\rangle(-\langle 1,1|)$$

$$- \xi_1|1,0\rangle\langle 0| + \xi_1\xi_1^*|1,0\rangle\langle 1,0| + \xi_1\xi_2^*|1,0\rangle\langle 0,1|$$

$$+ \xi_1\xi_1^*\xi_2^*|1,0\rangle(-\langle 1,1|) - \xi_2|0,1\rangle\langle 0| + \xi_2\xi_1^*|0,1\rangle\langle 1,0|$$

$$+ \xi_2\xi_2^*|0,1\rangle\langle 0,1| + \xi_2\xi_1^*\xi_2^*|0,1\rangle(-\langle 1,1|)$$

$$- \xi_1\xi_2|1,1\rangle\langle 0| - \xi_1\xi_2\xi_1^*|1,1\rangle\langle 1,0| - \xi_1\xi_2\xi_2^*|1,1\rangle\langle 0,1|$$

$$- \xi_1\xi_2\xi_1^*\xi_2^*|1,1\rangle\langle 1,1|\,]$$

$$= |0\rangle\langle 0| + |1,0\rangle\langle 1,0| + |0,1\rangle\langle 0,1| + |1,1\rangle\langle 1,1|$$

$$= I$$

Analogous proof for infinite no. of modes.

Grunnen til denne fundamentale forskjellen mellom Boson- og fermion koherente tilstander ligger i Pauli-prinsippet og definisjonen av koherente tilstander:

Med et gitt sett av en-partikkel tilstander, samt Pauli-prinsippet, må en fysikalsk tilstand ha et bestemt, definerbart antall partikler, og kan ikke være egentilstand til en destruksjons op. Fermion koherent tilstand ligger derfor utenfor Hilbert rommet av fysikalske tilstander, og trenger ikke å representere observable tilstander. For bosoner, betyr symmetri-egenskapen at selv med et gitt sett av kvantetall, kan en fysikalsk tilstand være egentilstand til destr. operatoren, siden hver enpartikkel tilstand kan ha et vilkårlig antall kvant i sug. Boson koherente tilstander er altså fysikalske. Faktisk er boson koherente tilstander fysikalske tilstander som fremkommer naturlig når klassisk grense av en bølge-felt teori tas. Også i laser.

Nå vi så på spørsmål av en operator A som i både fermion og boson koherente tilstander, måtte vi se på matrise-elementer

$$\langle \phi | A | \phi \rangle \qquad \text{(bosoner)}$$

$$\langle -\xi | A | \xi \rangle \qquad \text{(fermioner)}$$

Bosoner: Anta at $A(a_\lambda^+, a_\lambda)$ er normal-ordnet: alle a_λ-er står til høyre for a_λ^+

$$a_\lambda |\phi\rangle = \varphi_\lambda |\phi\rangle$$

$$(a_\lambda)^n |\phi\rangle = (\varphi_\lambda)^n |\phi\rangle$$

$$A(a_\lambda) |\phi\rangle = A(\varphi_\lambda) |\phi\rangle$$

Dermed:

$$\langle \phi | A(a_\lambda^+, a_\lambda) | \phi' \rangle$$

$$= A(\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda') \langle \phi | \phi' \rangle$$

$$= \underline{\underline{A(\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda') \, e^{\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda'}}}$$

På samme måte: $\langle \xi | A(c_\lambda^+, c_\lambda) | \xi' \rangle$

$$= \underline{\underline{A(\xi_\lambda^*, \xi_\lambda') \, e^{\sum_\lambda \xi_\lambda^* \xi_\lambda'}}}$$

Dermed er bevegning av forventningsverdier redusert til kvadratur: Multiple integraler over $(\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda)$ eller $(\xi_\lambda^*, \xi_\lambda)$

Gaussiske integraler

I en funksjonal-integral formulering av kvantefelt teori, vil en fri ikke-v.v. teori ha form som et multipelt gaussisk integral. Slike integraler er derfor av stor viktighet. Vi har også sett at spor av en operator kan uttrykkes som et integral over c-tall eller Grassmann-tall med gaussisk vekt. Dette motiverer at vi studerer multiple slike integraler. Vi ser på tilfellene hvor vi integrerer over

i) reelle variable

ii) komplekse variable

iii) Grassmann-variable

Baselformelen som vi alltid trenger, er velkjent:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{a}{2}x^2} = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

i) Multipelt gaussisk integral over reelle variable:

$$I \equiv \int \frac{dx_1}{\sqrt{2\pi}} \cdots \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{e^{-\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j + x_i J_i}}_{\text{Summekonv. i eksponenten!}}$$

$$\boxed{\begin{array}{ll} J_i: & \text{reelt tall} \\ A_{ij}: & \text{Symmetrisk, } \det A > 0 \end{array}}$$

Se på eksponenten:

$$-\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j + \frac{1}{2}(x_i J_i + x_j J_j)$$

$$= -\frac{1}{2}(x_i - A^{-1}_{ij} J_j) A_{ij} (x_j - A^{-1}_{ij} J_i)$$

$$+ \frac{1}{2} J_i A^{-1}_{ij} J_j$$

$$\left.\begin{array}{l} y_i \equiv x_i - A^{-1}_{ij} J_j \\ dy_i = dx_i \end{array}\right\} \Rightarrow$$

$$Z(J) = e^{\frac{1}{2} J_i A^{-1}_{ij} J_j} \int \frac{dy_1}{\sqrt{2\pi}} \cdots \int \frac{dy_n}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} y_i A_{ij} y_j}$$

$$y_i A_{ij} y_j = y^T A y = z^T D z$$

Orthogonal transf. som diag. A.

$$= \sum_n \lambda_n z_n^2$$

$$Z(J) = e^{\frac{1}{2} J_i A^{-1}_{ij} J_j} \int \frac{dz_1 \cdots dz_n}{(\sqrt{2\pi})^n} e^{-\frac{1}{2}\sum_n \lambda_n z_n^2}$$

$$= e^{\frac{1}{2} J_i A^{-1}_{ij} J_j} \prod_n \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_n}}$$

$$\det A = \prod_n \lambda_n$$

$$Z = \frac{1}{\sqrt{\det A}} e^{\frac{1}{2} J_i A^{-1}_{ij} J_j} = Z(\{J\})$$

Legg merke til at dersom vi definerer en middelverdi av en størrelse som avh. av x_i, som f.eks

$$\langle A(x_i)\rangle = \frac{\int \frac{dx_1}{\sqrt{2\pi}} \cdots \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi}}\, A(x_i)\, e^{-\frac{1}{2}x_i A_{ij} x_j}}{\underbrace{\int \frac{dx_1}{\sqrt{2\pi}} \cdots \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{1}{2}x_i A_{ij} x_j}}_{\equiv Z(0)}}$$

$$= \frac{1}{Z(0)} A\left(\frac{\partial}{\partial J_i}\right) Z(\{J\})\Big|_{\{J\}=0}$$

Eks:

$$\langle x_i\rangle = \frac{1}{Z(0)}\left(\frac{\partial}{\partial J_i}\right) e^{-\frac{1}{2}\sum_{i',j'} J_{i'} A^{-1}_{i'j'} J_{j'}}\Big|_{\{J\}=0}$$

$$= -\frac{1}{Z(0)}\left\{\frac{1}{2}\sum_{j'} A^{-1}_{ij'} J_{j'} - \frac{1}{2}\sum_{i'} J_{i'} A^{-1}_{i'i}\right\} e^{-\frac{1}{2}\cdots}\Big|_{\{J\}=0}$$

$$= 0$$

$Z(\{J\})$ kalles en genererende funksjonal, og som vi skal se, er den egnet til beregning av fysiske observable

$$\langle x_i x_j \rangle = \frac{1}{Z(0)} \frac{\partial}{\partial J_i} \frac{\partial}{\partial J_j} Z\{J\}$$

$$= \underline{\underline{\frac{1}{Z(0)} A_{ij}^{-1} \cdot Z(0)}} = \underline{\underline{A_{ij}^{-1}}}$$

ii) Multippelt Gaussisk integral over komplekse variable
(dette er nyttig til boson-tilfellet for spor over koherente tilstander)

$$\prod_i \int \frac{dx_i^* \, dx_i}{2\pi i} e^{-x_i^* A_{ij} x_j + x_j J_i^* + x_i^* J_i}$$

$$= \prod_i \int \frac{dz_i^* \, dz_i}{2\pi i} e^{-z_i^* A_{ij} z_j + J_i^* A_{ij}^{-1} J_j}$$

(summe-konvensjon i exponenten!)

$$=$$

$$= e^{J_i^* A_{ij}^{-1} J_j} \prod_i \int \frac{d\tilde{z}_i^* \, dz_i}{2\pi i} e^{-\sum_n \lambda_n \tilde{z}_n^* \tilde{z}_n}$$

$$\tilde{z} = r e^{i\theta} = \sqrt{u^2+v^2}\, e^{i\theta}$$

$$\tilde{z} = \sqrt{u^2+v^2}\, e^{-i\theta}$$

$$\tilde{z}^* z = u^2+v^2$$

$$dz \, d\tilde{z}^* = \underset{\hat{i}}{2} du \, dv$$

$$= e^{J_i^* A_{ij}^{-1} J_j} \underbrace{\int \prod_n \frac{du\,dv}{\pi} e^{-\sum_n \lambda_n (u^2+v^2)}}_{\prod_n \frac{1}{\lambda_n}}$$

$$= \frac{1}{\det A} e^{J_i^* A_{ij}^{-1} J_j}$$

Altså: For boson-integralet kommer determin. under brøkstreken!

og ikke med en kvadrat-rot!

iii) Det siste tilfellet vi ser på, er integrasjon over Grassmann-variable, som er aktuelle når vi skal bruke spor av operatorer i fermion koherente tilstander

$$\prod_i \int d\xi_i^* \, d\xi_i \, e^{-\xi_i^* A_{ij} \xi_j + \xi_i J_i^* + \xi_i^* J_i}$$

NB!! Her er nå J_i - ene også Grassmann-variable!!

$$\prod_i \int d\tilde{\xi}_i^* \, d\tilde{\xi}_i \, e^{-\tilde{\xi}_i^* A_{ij} \tilde{\xi}_j + J_i^* A_{ij}^{-1} J_j}$$

$$= e^{J_i^* A_{ij}^{-1} J_j} \prod_i \int d\tilde{\xi}_i^* \, d\tilde{\xi}_i \, e^{-\tilde{\xi}_i^* A_{ij} \tilde{\xi}_j}$$

$$\int d\xi^* d\xi \, e^{-\xi^* a \xi}$$ c-tall!

$$= \int d\xi^* d\xi \, (1 - \xi^* a \xi) = a \quad \underline{\underline{NB!!}}$$

NB!! Her har vi brukt integrasjonsregelen

$$\int d\xi \, \xi^* \xi = \cancel{-\xi^*} - \tilde{\xi}_i^* A_{ij} \xi_j$$

$$\prod_i \int d\tilde{\xi}_i^* \, d\tilde{\xi}_i \, e^{-\sum_n \lambda_n \eta_n^* \eta_n}$$

$$= \prod_i \int d\tilde{\eta}_i^* \, d\eta_i \, e$$

$$= \prod_n \lambda_n = \underline{\underline{\det(A)}}$$ Over brøk-strekn!

$$\Rightarrow \prod_i \int d\xi_i^* \, d\xi_i \, e^{-\xi_i^* A_{ij} \xi_j + \xi_i^* J_i + \xi_i J_i^*}$$

$$= \underline{\underline{(\det A) \, e^{J_i^* A_{ij}^{-1} J_j}}}$$

Legg merke til at for fermion-integralet, kommer det A over brøkstreken.

For bosonene kommer den under brøkstreken. Formelt skyldes dette at nevnerutviklingen

av $e^{-\zeta^* a \zeta}$ terminerer ved $1 - \zeta^* a \zeta$. Dette reflekterer, som vi husker, $(\zeta^2 = 0)$ til syvende og sist Pauli-prinsippet.

$$(\det A)^{-\zeta} = e^{-\zeta \ln \det A}$$

$$= e^{-\zeta \, \mathrm{Tr} \ln A}$$

Dermed, kan vi kombinere resultatet for bosoner og fermioner

<u>Bosoner:</u>

$$\underline{\underline{I = e^{J_i^* A_{ij}^{-1} J_j} e^{-\mathrm{Tr} \ln A}}}$$

J_i, J_i^*: c-tall

<u>Fermioner</u>

$$\underline{\underline{I = e^{J_i^* A_{ij}^{-1} J_j} e^{\mathrm{Tr} \ln A}}}$$

J_i, J_i^*: Grassmann-tall

Formelt kan de skrives på samme måte,

$$\underline{\underline{I = e^{J_i^* A_{ij}^{-1} J_j} e^{-\zeta \, \mathrm{Tr} \ln A}}}$$

$\zeta = +1$: Bosoner. $\zeta = -1$: Fermioner.

Funksjonal integral formulering av mange-partikkel fysikk.

En funksjonal f er en matematisk avbildning av et vektorrom på et skalar felt, som kan være reelt eller komplekst. La disse avbildningene være definert ved D:

$$f: \quad D(f) \rightarrow K$$

$K = R$ dersom skalarfeltet er reelt.

$K = C$ dersom skalarfeltet er komplekst.

R: Reell tallinje
C: Komplekst plan.

Vi skal etterhvert skrive partisjonsfunksjonen Z til et mange-partikkel system som en slik funksjonal. I det tilfellet er avbildningen fra Hilbertrommet ettet fermionmet ned på reell tall-linje. D er da et integral eller sum over konfigurasjoner eller tilstander et system kan befinne seg i, et funksjonal integral

En slik funksjonal integral formulering reduserer beregninger av fysiske observable til kvadraturer som vi ofte på en systematisk måte kan finne gode approximasjoner til.

For å bygge opp en slik funksjonal integral formulering av mange-partikkel fysikk, ser vi først på kvantemekanikken for en enkelt partikkel

Hamilton-operatoren er gitt ved

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

ikke eksplisitt tidsavhengig.

slik at partikkelen beveger seg i et eksternt potensial $V(x)$. „Båndstrukturproblem".

Evolusjons-operatoren for den tilhørende en-partikkel egentilstanden til H er gitt ved, i Schrødinger-bildet

$$|\psi(t_f)\rangle = U(t_f, t_i)\,|\psi(t_i)\rangle$$

$$U(t_f, t_i) = e^{-iH(t_f - t_i)}$$

t_i: Egentilstand til posisjonsop.: $|x_i\rangle$

t_f: — " — $|x_f\rangle$

Definér nå matrise-elementet til $U(t_i, t_f)$ ~~tilt~~ mellom ~~$|x_i\rangle$~~, $|x_f\rangle$

$$\mathcal{U}(x_f t_f; x_i t_i)$$

$$= \langle x_f | e^{-iH(t_f - t_i)} | x_i \rangle$$

Dette matrise-elementet kan generelt ikke beregnes eksakt. ~~Dette~~ Vi ønsker å beregne det approximativt, på en kontrollert måte: det skal finnes en likhetsparameter som kontrollerer approximasjonen.

Del opp intervallet $t_f - t_i$ i mange deler: $\varepsilon = \frac{t_f - t_i}{M}$

$\Rightarrow$

$$\mathcal{U}(x_f t_f; x_i t_i) = \langle x_f | \left(e^{-i\varepsilon H}\right)^M | x_i \rangle$$

fordi H ikke eksplisitt er tidsavh. og kommuterer med seg selv.

$$\mathcal{U} = \langle x_f | \underbrace{e^{-i\varepsilon H} e^{-i\varepsilon H} \cdots e^{-i\varepsilon H}}_{M \text{ faktorer.}} | x_i \rangle$$

Mellom hver faktor: Skyt inn en fullstendighetsrelasjon:

$$\int dx\, |x\rangle\langle x| = 1 \Rightarrow$$

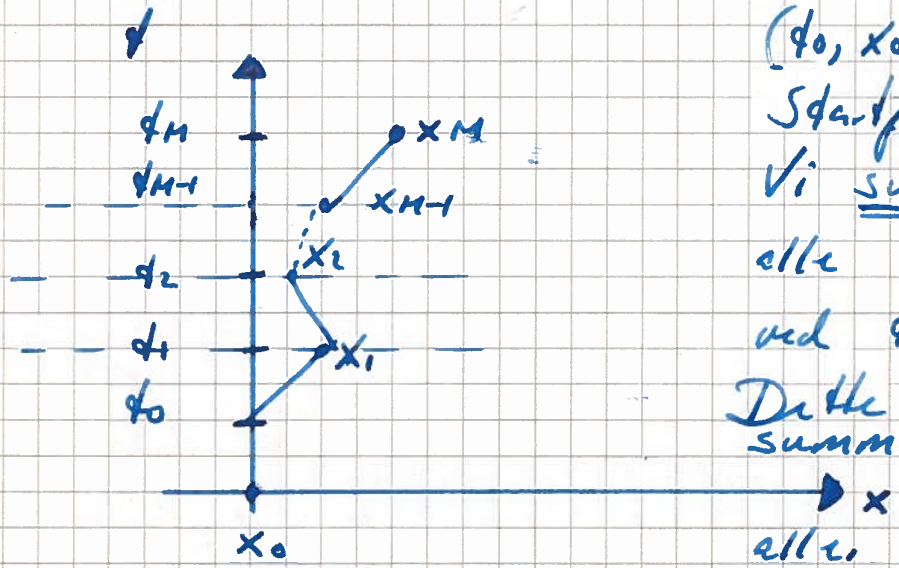
$$\mathcal{U} = \int \prod_{k=1}^{M-1} dx_k \langle x_f | e^{-i\varepsilon H} | x_{M-1} \rangle \langle x_{M-1} | e^{-i\varepsilon H} | x_{M-2} \rangle \cdots \langle x_1 | e^{-i\varepsilon H} | x_i \rangle$$

Foreløpig er dette eksakt. Det sentrale punktet nå er i finne en „god" approximasjon til matrise-elementet av $e^{-i\varepsilon H}$

NB!! Notasjon: $x_i \equiv x_0$

$x_f \equiv x_M$

$t_n \leftrightarrow x_n$



(t_0, x_0) (t_M, x_M)

Startpunkt Sluttpunkt.

Vi <u>summerer</u> over alle mulige $x_1, x_2 \ldots$ ved tiden $t_1, t_2, \ldots$

Dette er en summasjon over alle mulige <u>veier</u> er partikkel kan ta mellom start- og slutt-punkt. Altså: <u>Et vei-integral</u>

Vi begynner et tråd fort med å bryte matrise-elementet

$$\langle x_n | e^{-i\varepsilon H(p,x)} | x_{n-1} \rangle$$

$$= \int dp_n \, \langle x_n | p_n \rangle \langle p_n | e^{-i\varepsilon H(p,x)} | x_{n-1} \rangle$$

Vi har $\langle x_n | p_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i p_n x_n}$

også:

$$\langle p_n | x_{n-1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i p_n x_{n-1}}$$

For å komme nær vi med matrise-elementet

$$\langle p_n | e^{-i\varepsilon H} | x_{n-1} \rangle$$

observerer vi først at dersom

$$e^{-i\varepsilon H} = \sum_{mm'} C_{mm'} A_m(p) B_{m'}(x)$$

kunne $A_m(p)$ virke til venstre, og $B_{m'}(x)$ til høyre, slik at vi ville få:

$$\sum_{m,m'} C_{mm'} A_m(p_n) B_{m'}(x_{n-1}) e^{-ip_n x_{n-1}}$$

$$= e^{-i\varepsilon H(p_n, x_{n-1})} e^{-ip_n x_{n-1}}$$

Så enkelt er det imidlertid <u>ikke</u>! p og x kommuterer ikke, og $e^{-i\varepsilon H(p,x)}$ har ikke en ekspansjon som er slik at p står til venstre og x til høyre i hvert ledd i ekspansjonen.

For å få til dette, innfører vi en form for normal-ordning:

$$\hat{N}(e^{-i\varepsilon H}) \equiv :e^{-i\varepsilon H(p,x)}:$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i\varepsilon)^m}{m!} :\left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right)^m:$$

Binomial-formel:

$$(a+b)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} a^{n-k} b^k$$

$$= \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!(n-k)!} a^{n-k} b^k$$

$\Rightarrow$

$$:\left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right)^m: = \sum_{k=0}^{m} \frac{m!}{k!(m-k)!} \left(\frac{p^2}{2m}\right)^{m-k} \cdot \left(V(x)\right)^k$$

$\Rightarrow$: Alle p-er står <u>til venstre</u> for x:

$\Rightarrow$

$$:e^{-i\varepsilon H(p,x)}:$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\varepsilon)^n}{n!} \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!(n-k)!} \left(\frac{p^2}{2m}\right)^{n-k} \left(V(x)\right)^k$$

NB!! Poenget er så at bidd med $n=0$ og $n=1$ i expansjonen av $e^{-i\varepsilon H}$ selv opplagt er normalordnede!

Derfor har vi:

$$e^{-i\varepsilon H} = :e^{-i\varepsilon H}: + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$M \to \infty \Rightarrow \varepsilon \to 0$: Da kan vi betrakte $e^{-i\varepsilon H}$ som normalordnet! Som vi har sett, forenkler dette problemet drastisk.

Når $\varepsilon \to 0$ kan vi derfor skrive:

$$\langle x_n | e^{-i\varepsilon H(p,x)} | x_{n-1} \rangle$$

$$= \langle x_n | : e^{-i\varepsilon H} : | x_{n-1} \rangle + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$$= \int dp_n \frac{e^{i p_n x_n}}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{\langle p_n | : e^{-i\varepsilon H} : | x_{n-1} \rangle}_{= e^{-i\varepsilon H(p_n, x_{n-1})} \frac{e^{-i p_n x_{n-1}}}{\sqrt{2\pi}}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$$H(p_n, x_{n-1}) = \frac{p_n^2}{2m} + V(x_{n-1})$$

$$= \underbrace{\int \frac{dp_n}{2\pi} e^{i p_n (x_n - x_{n-1}) - i\varepsilon \frac{p_n^2}{2m} - i\varepsilon V(x_{n-1})}}_{i\varepsilon \left[\frac{m}{2\varepsilon^2} (x_n - x_{n-1})^2 - V(x_{n-1}) \right]}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \varepsilon}} \, e$$

$$+ \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

Dermed har vi en kontrollert approximasjon til dei-integralet vårt:

$$\mathcal{U} = \lim_{M\to\infty} \int \left(\prod_{k}^{M-1} dx_k \sqrt{\frac{m}{2\pi i \varepsilon}} \right) e^{i\varepsilon \left[\sum_{k=1}^{M-1} \left[\frac{m}{2\varepsilon^2} (x_k - x_{k-1})^2 - V(x_k) \right] \right]}$$

Nå innfører vi $(\lim \varepsilon \to 0)$

$$\frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \Rightarrow \frac{dx}{dt} \; ; \; \varepsilon \sum_{k=1}^{M-1} \Rightarrow \int_{t_i}^{t_f} dt$$

$$\lim_{M\to\infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} \left(dx_k \sqrt{\frac{m}{2\pi i \varepsilon}} \right) \equiv \int_{t_i, x_i}^{t_f, x_f} \mathcal{D}[x(t)] \; e^{i \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x) \right]}$$

$$\mathcal{U} = \int_{x_i, t_i}^{x_f, t_f} \mathcal{D}[x(t)] \; e^{i S[x(t)]}$$

$$= \int_{x_i, t_i}^{x_f, t_f} \mathcal{D}[x(t)] \; e$$

NB!!

S er en funksjonal av $x(t)$ (et bestemt forløp)

$\mathcal{U}$ er et funksjonal-integral: summer over alle mulige forløp

$$L[x,t] = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x(t))$$

$$S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt \; L[x(t)]$$

Hvilke veier bidrar mest til $U(x_f t_f; x_i t_i)$?

(Vi gjeninnsetter $\hbar$ et øyeblikk)

Vi har brukt:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH(t-t')} |\psi(t')\rangle$$

Schrødinger:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\psi(t)\rangle$$

som har formell løsning

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} |\psi(0)\rangle$$

slik at vi gjeninnsetter $\hbar$ ved å la $\varepsilon \to \varepsilon/\hbar$

Se nå på U:

$$\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{k=1}^{M-1} \Rightarrow \frac{1}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \Rightarrow \frac{i}{\hbar} S[x(t)]$$

$$U = \int_{x_i, t_i}^{x_f, t_f} D[x(t)]\, e$$

Se på fri partikkel, hvor $V(x) = 0$ for å få en intuisjon om hvilke bier som er de "viktigste".

$\frac{S}{\hbar}$ blir stor $\Rightarrow$

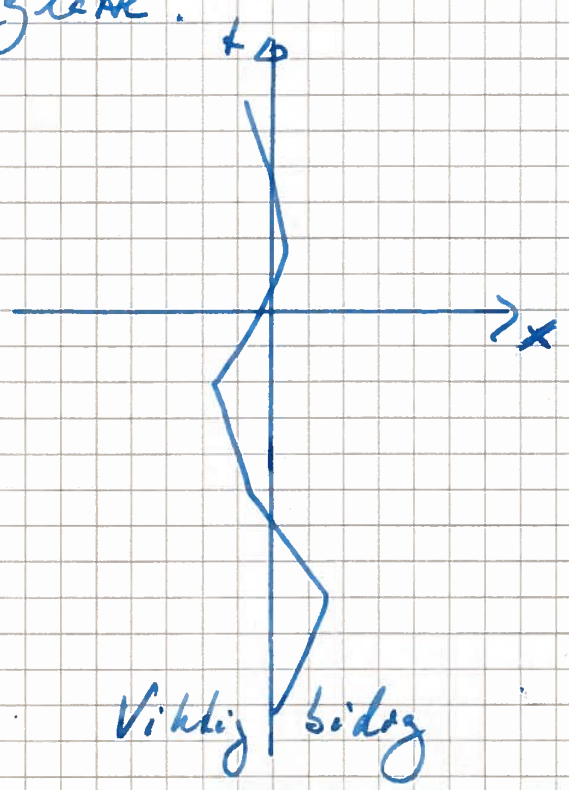
integrasjonen oscillerer raskt, og gir null bidrag, eller lik bidrag

S blir stor når $\left(\frac{dx}{dt}\right)^2$ blir stor. De viktigste veiene er derfor de hvor

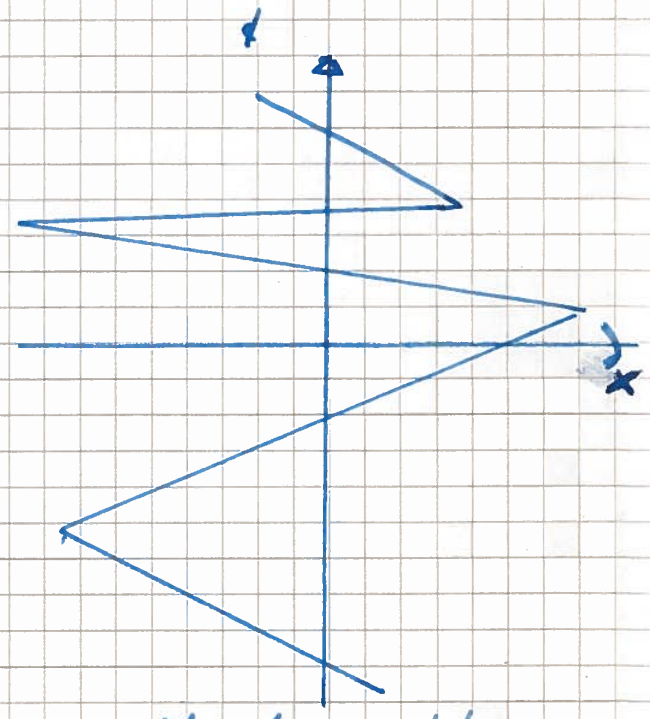
$$\frac{\varepsilon}{\hbar}\frac{m}{2\varepsilon^2}(x_k - x_{k-1})^2 \lesssim 1$$

$$\Rightarrow \quad |x_k - x_{k-1}| \lesssim \sqrt{\frac{2\varepsilon\hbar}{m}}$$

Altså: De viktigste veiene er de hvor veiene er nesten "glatte".



Viktig bidrag



Mindre viktig bidrag.

Statistisk mekanikk for en „kvantemekanisk" partikkel

Det vi hittil har gjort, gjør at vi nesten umiddelbart kan gjøre statistisk mekanikk!

Husk partisjons-funksjonen:

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right)$$

Se på partisjonsfunksjonen for en partikkel. Ut fra det vi nettopp har vært igjennom er det naturlig å benytte koordinat basis for i beregne sporet:

$$Z = \int dx \, \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle$$

$\langle x | e^{-\beta H} | x \rangle$ har samme form som $U(x_f t_f; x_i t_i)$, med

$$x_i = x(0) = x_f = x(\beta) = x$$

$$\beta = i\,(t_f - t_i) \equiv \tau \quad ; \quad dt = -i\,d\tau$$

$$\frac{d}{dt} = i\,\frac{d}{d\tau} \quad ; \quad x(t) \to x(\tau) \qquad d\tau = \frac{-dt}{i}$$

Dermed benytter vi direkte vårt resultat for $U(x_f t_f; x_i t_i)$ og får:

$$\langle x | e^{-\beta H} | x \rangle = \int_{x(0)=x(\beta)=x} D[x(\tau)]\, e^{-i \frac{i}{\hbar} \int_0^\beta d\tau \left[\underbrace{-\frac{m}{2}\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2}_{\text{Imaginær tid gjør at det ikke er et motsatt fortegn mellom kin. og pot. energi}} - V(x(\tau))\right]}$$

$$= \int_{x(0)=x(\beta)=x} D[x(\tau)]\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^\beta d\tau \underbrace{\left[\frac{m}{2}\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + V(x(\tau))\right]}_{H(x(\tau)),\ \text{ikke } L(x(\tau)),\ \text{som i vei-integral-resultatet!!}}}$$

$\Rightarrow$

$$Z = \int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle = \int_{x(0)=x(\beta)} D[x(\tau)]\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^\beta d\tau\, H[x(\tau)]}$$

$$H[x(\tau)] = \frac{m}{2}\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + V(x(\tau))$$

Igjen ser vi (betraktet fri partikkel) at de viktigste veiene er de hvor

$$\varepsilon \cdot \frac{m}{2} \frac{(x_k - x_{k-1})^2}{\varepsilon^2 \hbar} \approx 1 \Rightarrow$$

$$|x_k - x_{k-1}| \approx \sqrt{\frac{2\varepsilon\hbar}{m}}$$

NB! $\hbar \to 0$ (klassisk grense) $\Rightarrow x_k = x_{k-1}$

i.e. x er τ-uavhengig

Da blir

$$Z = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \int dx\, e^{-\beta V(x)}$$

i.e. velkjent klassisk konfigurasjons integral.

Husk: Målet i $D[x(\tau)]$!!!

Partisjons funksjonen:

$$Z = \int dx \int_{x(0)=x(\beta)=x} D[x(\tau)]\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} d\tau\, H[x(\tau)]}$$

$$= \int_{x(0)=x(\beta)} D[x(\tau)]\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} d\tau\, H[x(\tau)]}$$

Partisjons-funksjonen er altså, i denne formuleringen, et imaginær-tids vei-integral, eller funksjonal-integral. NB!! Periodisitet: $x(0)=x(\beta)$

Det er stort sett denne formuleringen som brukes når man skal gjøre kvante-statistikk på regne-maskin. Klassisk kan man f.eks. bruke Z ved Monte-Carlo simuleringer,

$$Z = \sum_{\{n_i\}} e^{-\beta H[\{n_i\}]}$$

hvor $\sum_{\{n_i\}}$ representerer en sum over faserom-konfigurasjoner som det klassiske systemet kan ha. Vårt overstående uttrykk

generalisere dette til det kvantemekaniske tilfellet. Vi ser at den klassiske faktoren β i $e^{-\beta H}$ har blitt erstattet av et integral

$$e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} d\tau\, H[x(\tau)]}$$

som gjør at systemet effektivt har fått en dimensjon til.

$$\boxed{\text{Kvantemekanisk } d\text{-dimensjonalt system} \text{ "=" klassisk } d+1\text{-dimensj. system.}}$$

Den statistiske mekanikken vi nå har gjort for en partikkel generaliseres direkte til et mange-partikkel system. Siden vi har med mer enn en-partikkel å gjøre, blir statistikk viktig: symmetrien under ombytte av par av partikler, blir viktig.

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_P \cdot \xi^P \int \prod_i dx_i \; \langle x_{P1}, \ldots x_{PN} | e^{-\beta H} | x_1, \ldots x_N \rangle$$

ξ:	$+1$	for bosons.
ξ:	-1	–"– fermioner.

$\sum_P$: Sum over mulige permutasjoner av rekkefølgen $(1, 2, \ldots N)$

$(P1, \ldots PN)$: En bestemt permutasjon av rekkefølgen $(1, 2, \ldots N)$

NB!! $(P1, \ldots PN)$ skal fås fra permutasjoner av par i rekkefølgen $(1, 2 \ldots N)$

Eks: $(1, 2, 3)$

$(2, 1, 3) = (1, 2, 3) = -(1, 2, 3)$

$(2, 3, 1) = -(2, 1, 3) = (1, 2, 3)$

etc.

Vi danner altså:

$$\langle x_{PN} \cdots x_{P1} | e^{-\beta H} | x_1 \cdots x_N \rangle$$

Husk:

$$\langle x | e^{-\beta H} | x \rangle = \int_{x(\beta)=x(0)=x} D[x(\tau)]\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^\beta d\tau\, H[x(\tau)]}$$

Generalisering er åpenbar:

$$\langle x_{PN} \cdots x_{P1} | e^{-\beta H} | x_1 \cdots x_N \rangle$$

$$= \prod_{i=1}^{N} \int D[x_i(\tau)]\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^\beta d\tau\, H[\{x_i(\tau)\}]}$$

hvor vi har

$$x_1(0) = x_{P1}(\beta)$$
$$\vdots$$
$$x_N(0) = x_{PN}(\beta)$$

Igjen: Periodisitet, fordi $Z = \mathrm{Tr}\,(e^{-\beta H})$ slik at bare diagonale matrise-el. bidrar

Mange frie partikler i eksternt potensial:

$$H[\{x_i(\tau)\}] = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx_i}{d\tau} \right)^2 + V(x_i(\tau)) \right]$$

Vekselvirkende elektroner i eksternt potensial:

$$H[\{x_i(\tau)\}]$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \frac{m}{2}\left(\frac{dx_i(\tau)}{d\tau}\right)^2 + V_{ext}[x_i(\tau)]$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V[x_i(\tau) - x_j(\tau)]$$

Det vi hittil har gjort, er å beregne $Tr(e^{-\beta H})$ i basisen av egentilstander til posisjons-operatoren. Som vi vet, kan vi bruke en vilkårlig basis. Det vi nå skal gjøre, er å bruke overstående resultater til å skrive ned partisjonsfunksjonen når vi har de koherente tilstandene som en basis for å beregne sporet.

Et viktig resultat som gjør det lett for oss å bruke formalismen med koherente tilstander, er at i vi-integral-formulering har vi, til $O(\varepsilon^2)$, kunnet bruke operatorer som vi ikke har behov å normalordne!

Funksjonal integraler over koherente tilstander

Nå definerer vi en mange-partikkel evolusjonsoperator $U(t_f, t_i)$ ved

$$\langle \varphi_f | e^{-iH(t_f - t_i)} | \varphi_i \rangle$$

$|\varphi_f\rangle$: Koherente slutt-tilstand ved tiden t_f. Har komponenter $|\varphi_{2f}\rangle$. (Notasjon for bosoner).

Tilsvarende for koherent start-tilstand ved tiden t_i

Vi splitter igjen tidsintervallet $t_f - t_i$ opp i M delintervaller

$t_i = t_0 \qquad |\varphi_{2i}\rangle = |\varphi_{20}\rangle$

$t_M = t_f \qquad |\varphi_{2f}\rangle = |\varphi_{2M}\rangle$

$t_k = t_0 + k\varepsilon$, som tidligere

Ved hvert tidssteg innfører vi koherente tilstander $|\varphi_k\rangle$ med komponenter $|\varphi_{2k}\rangle$

Ved hvert tidssteg k har vi en fullstendighetsrelasjon

$$\int \prod_2 \frac{d\varphi_{2k}^* \cdot d\varphi_{2k}}{2\pi i} e^{-\frac{\varepsilon}{2}\varphi_{2k}^* \varphi_{2k}} |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| = 1$$

$$e^{-i\frac{\varepsilon H}{\hbar}(a^+, a)} = \underbrace{:e^{-i\frac{\varepsilon H}{\hbar}(a^+, a)}:}_{\text{Normal-ordning: } a^+ \text{ til venstre for } a.} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

Altså:

$$\langle \varphi_f | e^{-i\frac{H}{\hbar}(t_f - t_i)} | \varphi_i \rangle$$

$$= \langle \varphi_f | e^{-\frac{i\varepsilon H}{\hbar}} \cdots\cdots e^{-\frac{i\varepsilon H}{\hbar}} | \varphi_i \rangle$$

$$= \langle \varphi_M | \underbrace{e^{-i\varepsilon H} \quad e^{-i\varepsilon H}}_{\text{På } M-1 \text{ steder: Bruk fullstendighetsrelasjonen}} | \varphi_0 \rangle$$

$$= \lim_{M\to\infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_{\ell} \int \frac{d\varphi_{\ell k}^* \, d\varphi_{\ell k}}{2\pi i} \underbrace{e^{-\sum_{\ell}\sum_{k=1}^{M-1} \varphi_{\ell k}^* \varphi_{\ell k}}}_{\text{New factor which we did not have previously}}$$

$$\langle \varphi_{\ell M} | e^{-\frac{i\varepsilon H}{\hbar}} | \varphi_{\ell M-1} \rangle \cdots \langle \varphi_{\ell 1} | e^{-\frac{i\varepsilon H}{\hbar}} | \varphi_{\ell 0} \rangle$$

$$= \lim_{M\to\infty} \int \prod_{\ell} \prod_{k=1}^{M-1} \frac{d\varphi_{\ell k}^* \, d\varphi_{\ell k}}{2\pi i} \langle \varphi_{\ell M} | :e^{-\frac{i\varepsilon H}{\hbar}}: | \varphi_{\ell M-1} \rangle$$

$$\vdots$$

$$\langle \varphi_{\ell 1} | :e^{-\frac{i\varepsilon H}{\hbar}}: | \varphi_{\ell 0} \rangle e^{-\sum_{\ell}\sum_{k=1}^{M-1} \varphi_{\ell k}^* \varphi_{\ell k}} + \mathcal{O}(M\varepsilon^2)$$

Men vi vet hvordan vi skal beregne matrise-elementet av typen

$$\langle \varphi_{\ell n} | :e^{-\frac{i\varepsilon H}{\hbar}}: | \varphi_{\ell n-1} \rangle :$$

$$\langle \varphi_{2n} | : e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} H(a^\dagger, a)} : | \varphi_{2n-1} \rangle$$

$$= \underline{\underline{e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} H(\varphi_{2n}^*, \varphi_{2n-1})} \cdot e^{\varphi_{2k}^* \varphi_{2k-1}}}}$$

$$\Rightarrow \langle \varphi_n | : e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} H} : | \varphi_{n-1} \rangle$$

This factor, we also did not have before.

$$= e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} H(\{\varphi_{2n}^*, \varphi_{2n-1}\})} \cdot \underbrace{e^{\varphi_{2k}^* \varphi_{2k-1}}}$$

Dette kombinert med $-\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda$ fra fullst. relasjonen $\Rightarrow \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial t}$!!

Vi samler dette, og får:

$$U(\varphi_f t_f; \varphi_i t_i)$$

$$= \lim_{M \to \infty} \int \prod_\lambda \prod_{k=1}^{M-1} \frac{d\varphi_{2k}^* \, d\varphi_{2k}}{2\pi i}$$

$$\cdot e^{-\sum_\lambda \sum_{k=1}^{M-1} (\underbrace{\varphi_{2k}^* \varphi_{2k}}_{\text{Comes from completeness-relation}} - \underbrace{\varphi_{2k}^* \varphi_{2k-1}}_{\text{Comes from matrix element } \langle \varphi_{2n}, \varphi_{2n-1} \rangle})}$$

$$\cdot \underline{\underline{e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_\lambda \sum_{k=1}^{M-1} H(\{\varphi_{2k}^*, \varphi_{2k-1}\})}}}$$

I stedet for k-index, innfører vi nå en t-variabel, som fører

$$\varepsilon \sum_{k=1}^{M-1} \to \int_{t_i}^{t_f} dt$$

$$H(\varphi_{2k}^*, \varphi_{2k-1}) \to H(\varphi_\lambda^*(t), \varphi_\lambda(t))$$

$$\lim_{M\to\infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_{\lambda} \frac{d\varphi_{\lambda k}^{*}\, d\varphi_{\lambda k}}{2\pi i}$$

$$= \int_{\varphi_\lambda(t_i)=\varphi_{\lambda 0}}^{\varphi_\lambda(t_f)=\varphi_{\lambda M}} \mathcal{D}[\varphi_\lambda^{*}(t),\ \varphi_\lambda(t)]$$

$\varphi_\lambda(t_i) = \varphi_{\lambda 0}$; $\varphi_{\lambda M}, \varphi_{\lambda 0}$: <u>Festlegte</u>

Eksponenten:

$$i\varepsilon \sum_k \sum_\lambda \left[i\left[\varphi_{\lambda k}^{*}\left(\frac{\varphi_{\lambda k} - \varphi_{\lambda k-1}}{\varepsilon}\right)\right] - \frac{1}{\hbar} H(\varphi_\lambda^{*}(t), \varphi_\lambda(t))\right]$$

$$\rightarrow\ i \sum_\lambda \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\varphi_\lambda^{*}(t) \frac{\partial \varphi_\lambda(t)}{\partial t} - \frac{1}{\hbar} H(\varphi_\lambda^{*}(t), \varphi_\lambda(t))\right]$$

$$= i \int_{t_i}^{t_f} dt\ L(t)$$

$$L(t) = \sum_\lambda \left\{ i\varphi_\lambda^{*}(t) \frac{\partial \varphi_\lambda(t)}{\partial t} - \frac{1}{\hbar} H(\varphi_\lambda^{*}(t), \varphi_\lambda(t))\right\}$$

NB!!!

Det er dermed klart hvordan vi gjør en funksjonal-integral formulering:

$$H(a^+, a) \rightarrow H(\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda)$$

For hver type felt-operator som inngår i H i 2. kvantisert formalisme, får vi et bild

$$\left[(a^+, a) \rightarrow (\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda)\right]$$

$$\boxed{\varphi_\lambda^* \quad \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial t}}$$

NB!! Det er nødvendig at operatorer (a^+, a) inngår i H før vi reformulerer det funksjonal integralet.

For bosoner $(\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda)$: $\underline{C}$-tall

For fermioner er dette Grassmann-tall

Dermed:

$$\mathcal{U}(\varphi_M t_M, \varphi_0 t_0)$$

$$= \int_{\substack{\varphi_\lambda(t_M) = \varphi_{\lambda M} \\ \varphi_\lambda(t_0) = \varphi_{\lambda 0}}} D[\varphi_\lambda^*(t)]\, D[\varphi_\lambda(t)]\, e^{i S(t_i, t_f)}$$

Completely analagous to the path-integral formulation in position-space

$$S(t_i, t_f) = \int_{t_i}^{t_f} dt\; L(t)$$

NB!! Legg merke til at $1/\hbar$ nå ikke multipliseres bare S, men sitter bare i H-delen av L. Klassisk gamle blir derfor noksa forskjellig fra tilfellet med

$$\mathcal{U}(x_f t_f; x_i t_i)$$

hvor dette ble forholdsvis „glatte" Hva de klassiske konfigurasjonene av $\{\varphi_\lambda^*(t), \varphi_\lambda(t)\}$ blir, er mindre opplagt.

For fermion tilfellet fås tilsvarende:

$$U(\xi_M, t_M; \xi_0, t_0)$$

$$\xi_\lambda(t_M) = \xi_{\lambda M} \qquad i\,S(t_i, t_f)$$

$$= \int_{\xi_\lambda(t_0) = \xi_{\lambda 0}} D[\xi_\lambda^*(t)]\, D[\xi_\lambda(t)]\; e$$

$$S(t_i, t_f) = \int_{t_i}^{t_f} dt\; L(t)$$

$$L(t) = \sum_\lambda \left[i\, \xi_\lambda^*(t) \frac{\partial \xi_\lambda(t)}{\partial t} - \frac{1}{\hbar} H(\xi_\lambda^*(t), \xi_\lambda(t)) \right]$$

Nøyaktig samme form som i boson-tilfellet, men c-tall er byttet ut med Grassman-tall.

Samme form som i boson tilfellet.

Partisjonsfunksjonen:

$$Z = Tr\left(e^{-\beta H}\right)$$

Bosonen: $$Tr(A) = \int \prod_\lambda \frac{d\varphi_\lambda^*\, d\varphi_\lambda}{2\pi i}\, e^{-\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda} \langle \varphi | A | \varphi \rangle$$

Fermionen: $$Tr(A) = \int \prod_\lambda d\xi_\lambda^*\, d\xi_\lambda\, e^{-\sum_\lambda \xi_\lambda^* \xi_\lambda} \langle -\xi | A | \xi \rangle$$

Felles notasjon:

$$Tr(A) = \int \prod_\lambda \frac{d\varphi_\lambda^*\, d\varphi_\lambda}{N}\, e^{-\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda} \langle \zeta \varphi | A | \varphi \rangle$$

Bosonen: $\zeta = +1$; $N = 2\pi i$; Fermionen: $N = 1$, $\zeta = -1$

Felles notasjon for bosoner, fermioner, partisjons-funksjonen:

$$Z = \int \prod_\lambda \frac{d\varphi_\lambda^* \, d\varphi_\lambda}{N} e^{-\sum_\lambda \varphi_\lambda^* \varphi_\lambda} \langle \zeta\varphi | e^{-\beta H} | \varphi \rangle$$

$|\varphi\rangle$ har komponent $|\varphi_{\lambda i}\rangle = |\varphi_{\lambda 0}\rangle$

$=|\zeta\varphi\rangle$ har komponent $|\zeta\varphi_{\lambda f}\rangle = |\zeta\varphi_{\lambda M}\rangle$

$$Z = \int \prod_\lambda \frac{d\varphi_{\lambda M}^* \cdots d\varphi_{\lambda 1}}{N} e^{-\sum_\lambda \varphi_{\lambda M}^* \varphi_{\lambda M}} \langle \zeta\varphi | e^{-\beta H} | \varphi \rangle$$

$\varphi_{\lambda 0} = \zeta \varphi_{\lambda M}$

For å finne $\langle \zeta\varphi | e^{-\beta H} | \varphi \rangle$

bruker vi vårt resultat for

$u(\varphi_f t_f; \varphi_i t_i)$

$$\beta = \tau \Rightarrow it = \tau$$
$$dt = -i \, d\tau$$

$$\langle \zeta\varphi | e^{-\beta H} | \varphi \rangle \qquad -i \, i \sum_{\lambda_0} \int^\beta d\tau \left[\frac{-i}{-i} \varphi_\lambda^* \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial \tau} - \frac{H}{\hbar} \right]$$

$$= \int D[\varphi^*(\tau)] \, D[\varphi(\tau)] \, e^{-\sum_\lambda \int_0^\beta d\tau \left[\varphi_\lambda^* \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial \tau} + H \right]}$$

$\varphi_\lambda(0) = \zeta \varphi_\lambda(\beta)$

$$= \int D[\varphi^*(\tau)] \, D[\varphi(\tau)] \, e$$

$\varphi_\lambda(0) = \zeta \varphi_\lambda(\beta) = \varphi_i = \varphi_{\lambda M} \leftarrow$ Festlegt

$$Z = \int D[\varphi^*(\tau)]\, D[\varphi(\tau)]\; e^{S}$$

$$\varphi_\lambda(0) = \xi\, \varphi_\lambda(\beta)$$

$\xi = +1$: Bosoner

$\xi = -1$: Fermioner

$$S = -\sum_\lambda \int_0^\beta d\tau \left[\varphi_\lambda^*(\tau) \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial \tau} + H(\{\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda\}) \right]$$

Vi ser at formalismen nå skiller mellom fermioner og bosoner via periodisitets betingelsen på $\varphi_\lambda(\tau)$.

Underveis droppet vi faktoren

$$e^{-\sum_\lambda \varphi_{\lambda n}^* \varphi_{\lambda n}} = e^{-\sum_\lambda \varphi_\lambda^*(\tau_f)\, \varphi_\lambda(\tau_f)}$$

Exponenten kan vi betrakte som et "overflate-ledd", neglisjerbar i forhold til $\int_0^\beta d\tau\, \varphi_\lambda^*(\tau) \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial \tau}$

Vi gjorde noe tilsvarende for $U(x_f\, t_f;\, x_i\, t_i)$. Vi kunne beholdt overflate-leddet i U. Det ville da konstituert faktoren $e^{-\sum_\lambda \varphi_{\lambda n}^* \varphi_{\lambda n}}$ i Z!

$$M = ABC$$

$$M_{ii} = A_{il} B_{lm} C_{mi}$$

$$Tr(M) = A_{il} B_{lm} C_{mi}$$

$$= C_{mi} A_{il} B_{lm}$$

$$= \sum_{m} K_{mm} = Tr(K)$$

$$K = CAB$$

$$Tr(M) = Tr(K)$$

$$Tr(B) = Tr(BSS^{-1})$$

$$= Tr(\underbrace{S^{-1}BS}_{D}) = Tr\, D$$

$$= \sum_{n} \lambda_n$$

Fri-elektron gass

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k \, c^+_{k\sigma} \, c_{k\sigma}$$

$$= \sum_{\sigma} \int dx \; \psi^+_\sigma(x) \, \varepsilon(\nabla) \, \psi_\sigma(x)$$

$$Z = \int \mathcal{D}[\varphi^*(\tau)] \, \mathcal{D}[\varphi(\tau)] \, e^{S}$$

$\varphi_\lambda(0) = -\varphi_\lambda(\beta)$ Antiperiodisitet for fermion!

$$S = -\sum_{\lambda} \int_0^\beta d\tau \left[\varphi^*_\lambda \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial \tau} + H(\{\varphi^*_\lambda, \varphi_\lambda\}) \right]$$

Velg kvantetall $\lambda = (k, \sigma)$

siden H er diagonal i planbølge basis

$$S = \div \sum_{k,\sigma} \int_0^\beta d\tau \; \varphi^*_{k\sigma}(\tau)(\partial_\tau + \varepsilon_k) \, \varphi_{k\sigma}(\tau)$$

$\{\varphi_{k\sigma}(\tau)\}$: Grassmann-variable!

Z blir nå et Gaussisk integral over Grassmann-variable, og dette har vi sett på f.eks. ved direkte bruk av resultatet på s. 30-31, finner vi:

Ekspander dette litt, eller om det er forst gang det oppstår

$$\underline{\underline{Z = e^{\mathrm{Tr}\ln(\partial_\tau + \varepsilon_k)}}} = \prod_{k,\sigma} \left(1 + e^{-\beta \varepsilon_k}\right)$$

$$\mathrm{Tr} = \sum_{k,\sigma} \int_0^\beta d\tau \cdot \underline{\underline{\mathbb{1}}}$$

Det betyder her et matrise-spor av operatoren $\ln(\partial_\tau + \varepsilon_k)$

$$\mathrm{tr}\ln(\partial_\tau + \varepsilon) = \sum_n \langle n|\ln(\partial_\tau + \varepsilon_k)|n\rangle$$

For i stå et lokalt uttrykk for $\ln(\partial_\tau + \varepsilon)$, er det naturlig å velge en planbølge-basis for $|n\rangle$:

$$|n\rangle = u_{nk} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_n \tau)}$$

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\cdot\pi}{\beta}$$ Fermion-Matsubara frekvens

Grunnen til dette valget av ω_n, er at vi ser at

$u_{nk}(\tau)$ har antiperiodisitets egenskaper til $\psi_\lambda(\beta)$ innbyd i sep. Det at vi ser sporet kun over slike tilstander, betyr at $\psi_\lambda(0) = -\psi_\lambda(\beta)$ krever automatisk er i vem.

$$\sum_n \langle n|\ln(\partial_\tau + \varepsilon)|n\rangle$$

$$= \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_n\tau)} \cdot \ln(\partial_\tau + \varepsilon_k)\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_n\tau)}$$

$$\mathrm{tr}\ \ln A = \sum_n \langle n | \ln A | n \rangle$$

$\ln A$: Defineret ved sin rækkeudvikling

$$\ln A = \ln(1 + A - 1)$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} (A-1)^k$$

$$\mathrm{tr}\ \ln A = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \mathrm{tr}\left[(A-1)^k\right]$$

$$B = A - 1$$

$$S^{-1} B S = S^{-1} A S - 1 = D - 1$$

Vælg S slik at A diagonaliseres.
D: Diagonal matrix

$$\mathrm{tr}\ (B^k) = \mathrm{tr}\left[(D-1)^k\right]$$

$$= \sum_{m=1}^{N} (\lambda_m - 1)^k \quad \Rightarrow$$

$$\mathrm{tr}\ \ln A = \sum_{m=1}^{N} \sum_k \frac{(-1)^{k+1}}{k} (\lambda_m - 1)^k$$

$$= \sum_{m=1}^{N} \ln(1 + \lambda_m - 1)$$

$$= \sum_m \ln(\lambda_m) = \ln\left(\prod_m \lambda_m\right)$$

$$= \ln(\det A)$$

Nå vi bruker dette, får vi $\sum_n \langle n | \ln(\partial_\tau + \varepsilon_k) | n \rangle$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \ln(-i\omega_n + \varepsilon_k)$$

$$\sum_{k,\sigma} \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau \sum_{\omega_n} \ln(-i\omega_n + \varepsilon_k)$$

$$Z = e^{\sum_{k,\sigma} \sum_{\omega_n} \ln(-i\omega_n + \varepsilon_k)} = e^{\sum_{\omega_n} \ln(-i\omega_n + \varepsilon_k)} = \prod_{k,\sigma} e$$

For å komme videre, trenger vi å utføre summasjonen over Matsubara-frekvensene ω_n

For å gjøre dette, observerer vi at $i\omega_n$ er polene til Fermi-fordelingen

$$f(z) = \frac{1}{1 + e^{\beta z}}$$

Dersom en komplekse-valuert funksjon $g(z)$ definert på $\mathbb{C}$ har en enkel pol i $z = z_0$, vil et kontur-integral som omsluttes denne polen, gi

$$\oint_C dz\, g(z) = 2\pi i \, \mathrm{Res}\,[g(z_0)]$$

$$\mathrm{Res}\,(g(z_0)) = \lim_{z \to z_0} [(z - z_0)\, g(z)]$$

$$\mathrm{Res}\,[f(i\omega_n)]$$

$$= \lim_{z \to i\omega_n} \left[(z - i\omega_n)\, f(z)\right] \qquad \text{(Enkel pol)}$$

$$\lim_{z \to i\omega_n} f(z) = \lim_{z \to i\omega_n} \frac{1}{1 + e^{\beta(z - i\omega_n + i\omega_n)}}$$

$$= \lim_{z \to i\omega_n} \frac{1}{1 - e^{\beta(z - i\omega_n)}}$$

$$= \frac{1}{1 - 1 - \beta(z - i\omega_n) + \cdots}$$

$$= -\frac{1}{\beta} \frac{1}{z - i\omega_n} \Rightarrow$$

$$\mathrm{Res}\,[f(i\omega_n)] = -\frac{1}{\beta}$$

$$\oint_{\circlearrowleft\, i\omega_n} dz\, f(z) = 2\pi i\, \mathrm{Res}\, f(z_0)$$

$$= -\frac{2\pi i}{\beta} \Rightarrow$$

$$\sum_{\substack{i\omega_n \\ \omega_n \text{ odde}}} g(i\omega_n) = -\frac{\beta}{2\pi i} \oint dz\, g(z)\, f(z)$$

hvor C omsluttar alle polane til Fermi-funksjonen.

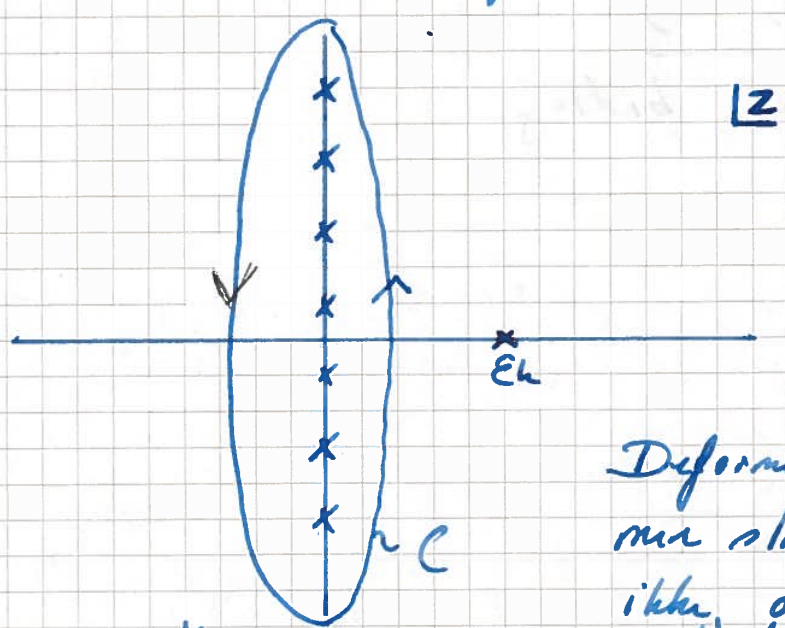
Fermi-funksjonen har <u>enkle poler</u> i $z = i\omega_n$,

derfor er

$$I = \sum_{i\omega_n} g(i\omega_n) = \frac{-\beta}{2\pi i} \oint_C dz\, g(z) f(z)$$

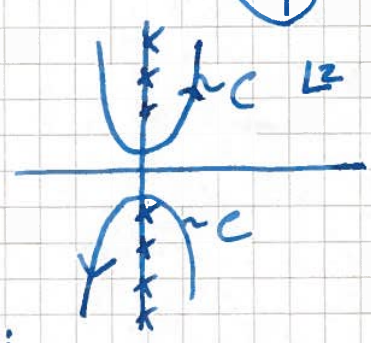
$g(i\omega_n) = \ln(-i\omega_n + \varepsilon_k)$

hvor C er en kontur som omsluttar <u>alle</u> polene til $f(z)$

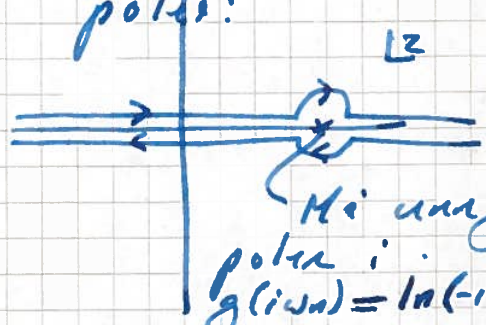


Deformer konturen C, men slik at den ikke omsluttar <u>nye</u> poler!

$=$



$=$



Mi unngå polen i $g(i\omega_n) = \ln(-i\omega_n + \varepsilon_k)$

Se på:

$$\tilde{I} = \frac{\beta}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \Big[f(\varepsilon + i\delta) \ln(-\varepsilon + i\delta + \varepsilon_k) - f(\varepsilon - i\delta) \ln(-\varepsilon + i\delta + \varepsilon_k) \Big]$$

$I = -\tilde{I}$

Bidrag fra polen

$$= -\frac{1}{2\pi i}\int_0^{2\pi} d\theta\, R\, \ln\left(Re^{i\theta}\right)$$

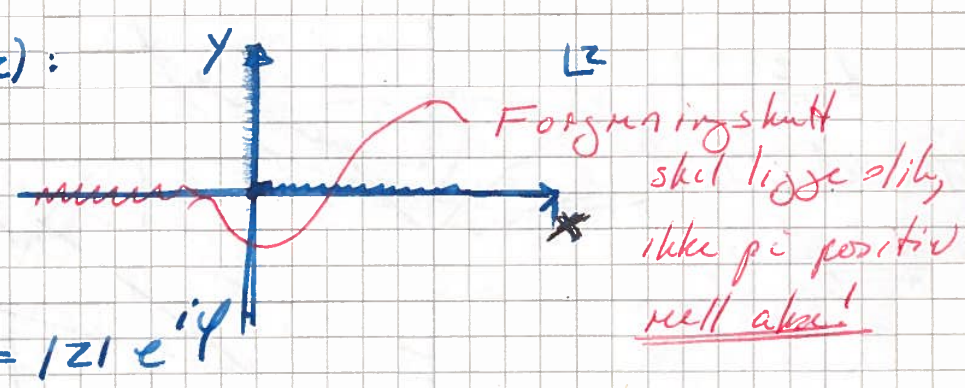
$$= -\frac{1}{2\pi i}\, R\left[2\pi \ln R + i\,\frac{4\pi^2}{2}\right]$$

$$\xrightarrow{R\to 0} 0$$

inkt bidrag

$$= \frac{\beta}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, f(\varepsilon) \left[\ln(-\varepsilon + i\delta + \varepsilon h) - \ln(-\varepsilon + i\delta + \varepsilon h) \right]$$

$\ln(z)$:



$z = |z| e^{i\varphi}$

$\varphi \in [0, 2\pi)$ 1. Riemann-flate

Forgreningskutt langs ~~positive~~ negativ reell akse for å skille 1. Riemann-flate fra neste.

$$\ln(z) = \ln|z| + i\varphi$$

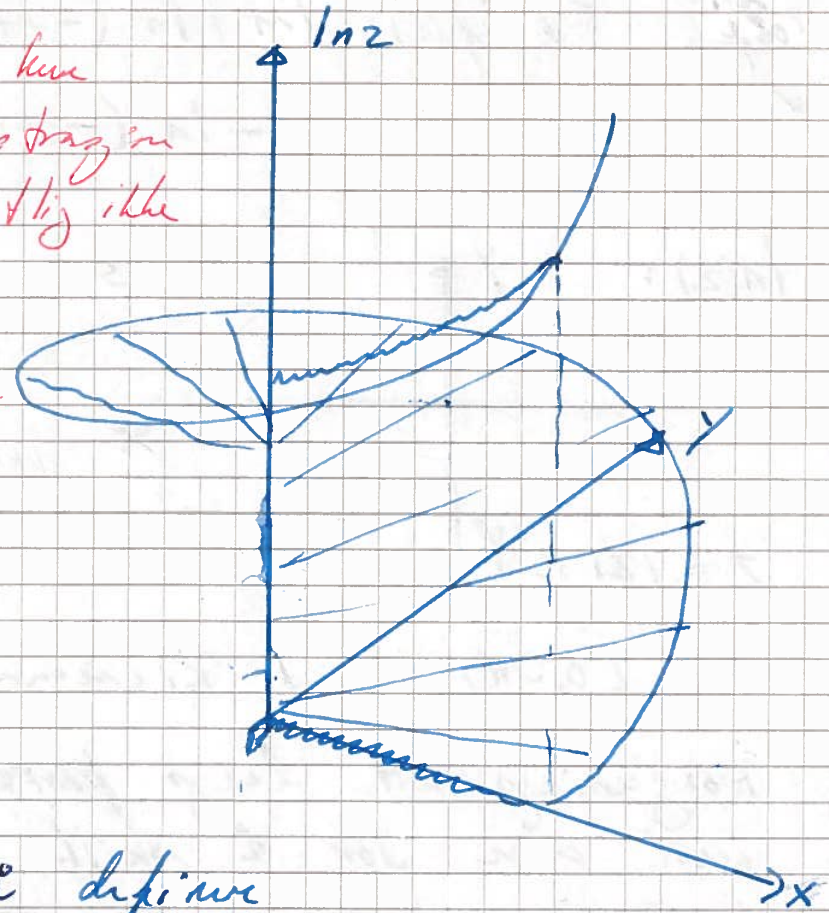
$\varphi = 2\pi n$ = „samme sted" i komplekst plan,

men ln-funksjonen har flere verdier, $n = 0, 1, 2, \ldots$

$n = 0, 1, \ldots$ definerer Riemann-flakene for å eliminere problemet med en multivektorsk funksjon, definerer vi funksjonen på spesifiserte Riemann-flate. Forgreningskuttet skiller et Riemann-flate fra et annet.

Dette er kun en illustrasjon og egentlig ikke $\ln z$

Ta et bedre eksempel



Må definere $\ln z$ på et av Riemann-flater, for å unngå problem med multivelurdte funksjoner, som representerer mangeltrekk vei vi er på i beregning av fysikalske størrelser.

Moral: Undersøk alltid nøye den analytiske strukturen til en funksjon $g(z)$, som inngår i

$$\sum_{\omega_n} g(i\omega_n)$$

$$\mathrm{Im}(\ln z) = i\varphi$$

Nå går vi tilbake til integralet vårt:

$$\frac{\beta}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, f(\varepsilon)\left[\ln(-\varepsilon+i\delta+\varepsilon_k) - \ln(-\varepsilon+i\delta+\varepsilon_k)\right]$$

$$= \frac{\beta}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, f(\varepsilon)\left[\ln(\varepsilon+i\delta-\varepsilon_k) - \ln(\varepsilon-i\delta-\varepsilon_k)\right]$$

$\varepsilon < \varepsilon_k$: $\mathrm{Im}(\ln z) = \pi^-$ over reell akse

$\mathrm{Im}(\ln z) = \pi^+$ under reell akse.

$$\ln(-\varepsilon+i\delta+\varepsilon_k) - \ln(-\varepsilon+i\delta+\varepsilon_k)$$

$$= \ln|-\varepsilon+\varepsilon_k| + i\pi^- - \ln|-\varepsilon+\varepsilon_k| - i\pi^+$$

$$= i(\pi^+ - \pi^-) = \underline{\underline{0}}$$ ikke helt rett

Intet bidrag fra $\varepsilon < \varepsilon_k$!

$\varepsilon > \varepsilon_k$: $\mathrm{Im}(\ln z) = 0$ over reell akse

$\mathrm{Im}(\ln z) = 2\pi$ under — "

$$\ln(-\varepsilon+i\delta+\varepsilon_k) - \ln(-\varepsilon+i\delta+\varepsilon_k)$$

$$= \ln|-\varepsilon+\varepsilon_k| - \ln|-\varepsilon+\varepsilon_k|$$

$$+ i\cdot 0 - i2\pi = -2\pi i$$

$$-\frac{2\pi i}{2\pi i}\beta\int_{\varepsilon_k}^{\infty} d\varepsilon\, f(\varepsilon)$$

Se baksida for mer korrekt behandling

$$= -\beta \int_{\varepsilon_k}^{\infty} d\varepsilon \, \frac{1}{e^{\beta\varepsilon}+1}$$

$$= -\beta \int_{\varepsilon_k}^{\infty} d\varepsilon \, \frac{e^{-\beta\varepsilon}}{1+e^{-\beta\varepsilon}}$$

$$= \frac{\beta}{\beta} \int_{\varepsilon_k}^{\infty} d\varepsilon \, \frac{d}{d\varepsilon} \ln\left(1+e^{-\beta\varepsilon}\right)$$

$$= -\frac{\beta}{\beta} \ln\left(1+e^{-\beta\varepsilon_k}\right) = -\ln\left(1+e^{-\beta\varepsilon_k}\right)$$

$$= I$$

Fra Matsubara sum!

Altså:

$$I = \sum_{\omega_n} \ln(-i\omega_n + \varepsilon_k) = \ln\left(1+e^{-\beta\varepsilon_k}\right)$$

$$\Rightarrow \quad Z = e^{\sum_{k,\sigma}\sum_{\omega_n} \ln(-i\omega_n+\varepsilon_k)} = e^{\sum_{k,\sigma} \ln\left(1+e^{-\beta\varepsilon_k}\right)}$$

$$= \prod_{k,\sigma} \left(1+e^{-\beta\varepsilon_k}\right)$$

Velkjent fermion-resultat.

$$F = -\frac{1}{\beta} \sum_{k,\sigma} \ln\left(1+e^{-\beta\varepsilon_k}\right)$$

Frimasse: $Z = e^{-\beta F}$

Partisjons-funksjonen for en fri fermion gass, med Hamilton-operator

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k \, c^{+}_{k\sigma} c_{k\sigma}$$

Chapter 3

The two-flavour NJL model

The Nambu–Jona-Lasinio model was proposed by Nambu and Jona-Lasinio in two papers from 1961 [4, 5] as a model of interacting nucleons. This was before QCD, and even quarks, were known, so obviously, confinement was not an issue. On the other hand, there *were* already indications of (approximate) chiral symmetry. Since this would imply (almost) massless nucleons, the problem was to find a model that could explain the the large nucleon mass without breaking chiral symmetry. They therefore introduced a Lagrangian for a nucleon field ψ with a chirally symmetric four-fermion point-like interaction,

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi + G\left[(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\tau\psi)^2\right], \tag{3.1}$$

where m is a small bare nucleon mass, τ is a Pauli matrix acting in isospin space and G is a coupling constant, the value of which is determined by experiment. The self-energy induced by the interaction generates a large effective mass M, which stays large even in the chiral limit $m \to 0$ [1].

In the 1970s, after it had become evident that the nucleons are *not* the most elementary particles, and after the ensuing development of QCD, the NJL model was reinterpreted as a model for quark-quark interactions. Since it does not take confinement into account, it has limited applicability. There are, however, situations where chiral symmetry, and not confinement, is the relevant feature.

3.1 Lagrangian density

Even after the reinterpretation of the NJL model as a quark model, it is common to use the Lagrangian shown in Eq. (3.1), with ψ being a quark field with two flavour and three colour degrees of freedom. This is not the only possible choice, there are many other chirally symmetric interaction terms one can use. In the following, however, we will use the Lagrangian given above, where we will include finite-density terms which incorporate the chemical potentials of the up and down quarks, μ_u and μ_d. We will also denote the quark field q instead of ψ, and consider an arbitrary number of colours, N_c.

In a closed system of up and down quarks, we have two conserved quantities, or *charges*: Baryon number and isospin. To a conserved charge we can always assign a chemical potential. We choose to work with the quark number instead of the baryon number, and therefore use the quark number chemical potential μ. It is easy to show that this is related to the baryon number chemical potential by $\mu_B = 3\mu$. Additionally, we define $\delta\mu$ to be a half of the isospin chemical potential μ_I. μ and $\delta\mu$ will then be dependent upon μ_u and μ_d and vice versa, and we will now derive the relations between these quantities.

The total number density of quarks is given by

$$n = n_u + n_d = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu_u} - \frac{\partial\Omega}{\partial\mu_d}, \tag{3.2}$$

where we used Eq. (2.87) in the last equality. Using the same equation in conjunction with the Chain Rule, we also get

$$n = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -\left(\frac{\partial \mu_u}{\partial \mu}\frac{\partial \Omega}{\partial \mu_u} + \frac{\partial \mu_d}{\partial \mu}\frac{\partial \Omega}{\partial \mu_d}\right). \tag{3.3}$$

Comparing Eqs. (3.2) and (3.3), we see that

$$\frac{\partial \mu_u}{\partial \mu} = 1, \quad \frac{\partial \mu_d}{\partial \mu} = 1. \tag{3.4}$$

The isospin density is given by $n_I = \frac{1}{2}(n_u - n_d)$. By the same reasoning as above, we obtain

$$\frac{\partial \mu_u}{\partial \mu_I} = \frac{1}{2}, \quad \frac{\partial \mu_d}{\partial \mu_I} = -\frac{1}{2}. \tag{3.5}$$

We then see that

$$\mu_u = \mu + \frac{\mu_I}{2} = \mu + \delta\mu \tag{3.6}$$

$$\mu_d = \mu - \frac{\mu_I}{2} = \mu - \delta\mu. \tag{3.7}$$

Conversely, we can solve for μ and $\delta\mu$, obtaining

$$\mu = \frac{\mu_u + \mu_d}{2}, \tag{3.8}$$

$$\delta\mu = \frac{\mu_u - \mu_d}{2}. \tag{3.9}$$

We may then write

$$\mathcal{L} = \bar{q}\left[i\gamma^\mu\partial_\mu - m + \mu\gamma^0 + \delta\mu\gamma^0\tau_3\right]q + G\left[(\bar{q}q)^2 + (\bar{q}i\gamma^5\tau_i q)^2\right], \tag{3.10}$$

which is confirmed by performing the matrix multiplication (in isospin space) in the third and fourth term in Eq. (3.10):

$$\bar{q}\left[\mu\gamma^0 + \delta\mu\gamma^0\tau_3\right]q = \mu_u(\bar{u}\gamma^0 u) + \mu_d(\bar{d}\gamma^0 d) = \mu_u n_u + \mu_d n_d. \tag{3.11}$$

3.2 Mean-field approximation

The ground state of the model is usually characterized by two order parameters: The diquark condensate $\langle\bar{q}q\rangle$ and the pion condensate $\langle\bar{q}\gamma^5\tau_1 q\rangle$. The former is responsible for chiral symmetry breaking, while the latter breaks parity and isotopic symmetry.

We now assume that the system is near thermodynamic equilibrium, and write

$$(\bar{q}q)^2 = (\bar{q}q - \langle\bar{q}q\rangle)^2 + 2\bar{q}q\langle\bar{q}q\rangle - \langle\bar{q}q\rangle^2 \simeq 2\bar{q}q\langle\bar{q}q\rangle - \langle\bar{q}q\rangle^2, \tag{3.12}$$

that is, we ignore the quadratic fluctuation term. We do the same for the pseudoscalar interaction term, and obtain

$$(\bar{q}i\gamma^5\tau_i q)^2 \simeq 2\bar{q}i\gamma^5\tau_1 q\langle\bar{q}i\gamma^5\tau_1 q\rangle - \langle\bar{q}i\gamma^5\tau_1 q\rangle^2. \tag{3.13}$$

The condensates $\langle\bar{q}\gamma^5\tau_2 q\rangle$ and $\langle\bar{q}\gamma^5\tau_3 q\rangle$ do not correspond to any physical particles, and are therefore zero. Then,

$$\begin{aligned}\mathcal{L} = {} & \bar{q}\left[i\gamma^\mu\partial_\mu - m + \mu\gamma^0 + \delta\mu\gamma^0\tau_3\right]q + G\left[2\langle\bar{q}q\rangle\bar{q}q + 2\langle\bar{q}i\gamma^5\tau_1 q\rangle\bar{q}i\gamma^5\tau_1 q\right] \\ & -G\left[\langle\bar{q}q\rangle^2 + \langle\bar{q}i\gamma^5\tau_1 q\rangle^2\right].\end{aligned} \tag{3.14}$$

We define the parameters

$$M \equiv m - 2G\langle\bar{q}q\rangle, \quad \Delta \equiv -2Gi\langle\bar{q}\gamma^5\tau_1 q\rangle, \tag{3.15}$$

and thus obtain the expression

$$\mathcal{L} = \bar{q}(i\gamma^\mu\partial_\mu - M + \mu\gamma^0 + \delta\mu\gamma^0\tau_3 - i\gamma^5\tau_1\Delta)q - \frac{(M-m)^2 + \Delta^2}{4G}. \tag{3.16}$$

M is called the *constituent* or *effective* quark mass.

3.3 Thermodynamic potential

It is now straightforward to calculate the TDP. By comparing Eqs. (3.16) and (2.74), and using Eq. (2.86), we see that

$$\Omega = \frac{(M-m)^2+\Delta^2}{4G} + \Omega_0, \tag{3.17}$$

where

$$\Omega_0 = -T\sum_n \int \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3} \ln\det[\beta\cdot D(p^0 = i\omega_n, \mathbf{p})], \tag{3.18}$$

and $D(p)$ is the expression between $\bar{q}$ and q in Eq. (3.16), with p^μ substituted for $i\partial^\mu$. We see that D acts in both Dirac, flavour and colour space, so the determinant has to be taken over all these spaces. As an ordinary two-dimensional matrix, D then has $4\cdot 2\cdot N_c = 8N_c$ rows and columns, and we write it in block matrix form as

$$D(p) = \begin{pmatrix} \gamma_\mu p^\mu - M + (\mu+\delta\mu)\gamma^0 & -i\gamma^5\Delta \\ -i\gamma^5\Delta & \gamma_\mu p^\mu - M + (\mu-\delta\mu)\gamma^0 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1}_c. \tag{3.19}$$

$\mathbf{1}_c$ is the identity matrix in colour space. The determinant is then

$$\begin{aligned} \det D(p) &= \{\Delta^4 + \delta\mu^4 + [(\mu+p^0)^2+E^2]^2 + 2\Delta^2[\delta\mu^2 - (\mu+p^0)^2+E^2] \\ &\quad -2\delta\mu^2[(\mu+p^0)^2+E^2]\}^{2N_c}, \end{aligned} \tag{3.20}$$

which, after some manipulation, can be written as

$$\det D(p) = \left\{[p^0 - (E_\Delta^- - \mu)][p^0 - (E_\Delta^+ - \mu)][p^0 + (E_\Delta^+ + \mu)][p^0 + (E_\Delta^- + \mu)]\right\}^{2N_c}. \tag{3.21}$$

Here, we have defined $E_\Delta^\pm \equiv \sqrt{(E^\pm)^2+\Delta^2}$, $E^\pm \equiv E \pm \delta\mu$ and $E \equiv \sqrt{\mathbf{p}^2+M^2}$. From this we obtain the dispersion relations of the four quarks by setting $\det D(p) = 0$ and solving for p^0: (TODO: Skriv hvorfor.)

$$\begin{aligned} E_u &= E_\Delta^- - \mu \\ E_d &= E_\Delta^+ - \mu \\ E_{\bar{u}} &= E_\Delta^+ + \mu \\ E_{\bar{d}} &= E_\Delta^- + \mu. \end{aligned} \tag{3.22}$$

To avoid unnecessary clutter in our calculations, we now define $\varepsilon_{u,d} = E_{u,d}$ and $\varepsilon_{\bar{u},\bar{d}} = -E_{\bar{u},\bar{d}}$. The determinant is then simply

$$\det D(p) = \prod_a (p^0 - \varepsilon_a)^{2N_c}, \qquad a = u, d, \bar{u}, \bar{d}. \tag{3.23}$$

Inserting this into Eq. (3.18), we obtain

$$\Omega_0 = -2N_c \sum_a \int \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\, T\sum_n \ln[\beta^{8N_c}(i\omega_n - \varepsilon_a)] = -2N_c\sum_a \int \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\,\xi_a, \tag{3.24}$$

where

$$\xi_a \equiv T\sum_n \ln[\beta^{8N_c}(i\omega_n - \varepsilon_a)]. \tag{3.25}$$

We will now evaluate this sum using a contour integral, and start by symmetrising:

$$\begin{aligned} \xi_a &= \frac{1}{2}T\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln[\beta^{8N_c}(i\omega_n - \varepsilon_a)] + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln[\beta^{8N_c}(-i\omega_n - \varepsilon_a)]\right) \\ &= \frac{1}{2}T\sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln\left(\beta^{16N_c}[\varepsilon_a^2 - (i\omega_n)^2]\right). \end{aligned} \tag{3.26}$$

Differentiating with respect to ε_a, we obtain

$$\frac{\mathrm{d}\xi_a}{\mathrm{d}\varepsilon_a} = -T\varepsilon_a \sum_n \frac{1}{(i\omega_n)^2 - \varepsilon_a^2}. \tag{3.27}$$

By the Residue Theorem, we can express the sum over n as a contour integral over the complex variable ω,

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\xi_a}{\mathrm{d}\varepsilon_a} &= -T\varepsilon_a \sum_n \mathrm{Res}\left\{ \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon_a^2} \tanh\frac{\beta\omega}{2}\,; \quad \omega = i\omega_n \right\} \\ &= -\frac{T\varepsilon_a}{2\pi i} \oint_C \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon_a^2} \frac{\beta}{2} \tanh\frac{\beta\omega}{2}, \end{aligned} \tag{3.28}$$

since the hyperbolic tangent has poles at $\frac{1}{2}\beta\omega = (n + \frac{1}{2})i\pi$, that is, at $\omega = i\omega_n$. The contour C, shown in Fig. 3.1a, is closed at infinity, and encircles all of these poles.

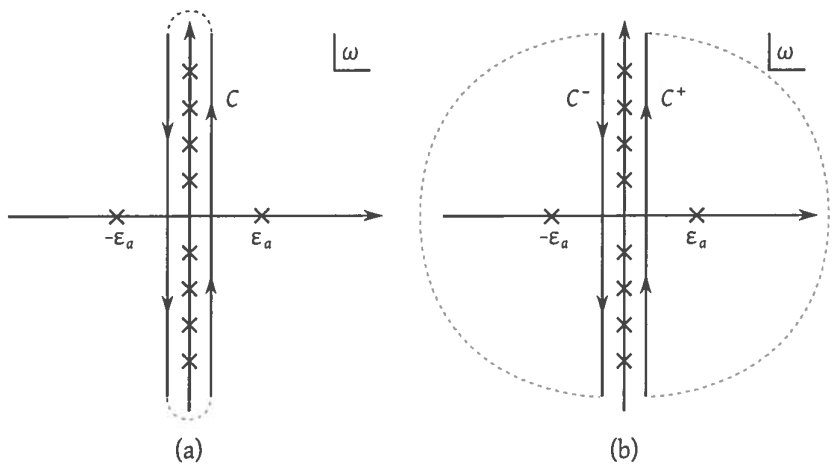


Figure 3.1: (a) The original contour C, encircling the poles of the hyperbolic tangent. (b) The contours C^+ and C^-, enclosing the poles at $\pm\varepsilon_a$.

The hyperbolic tangent is bounded everywhere but on the imaginary axis, and the factor $1/(\omega^2 + \varepsilon_a^2)$ decreases fast enough that we may instead close the contour around the poles at $\omega = \pm\varepsilon_a$. This is shown in Fig. 3.1b. Then,

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\xi_a}{\mathrm{d}\varepsilon_a} &= -\frac{\varepsilon_a}{2\pi i} \oint_{(C^+\cup C^-)} \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon_a^2} \frac{1}{2} \tanh\frac{\beta\omega}{2} \\ &= \varepsilon_a \sum_{\omega=\pm\varepsilon_a} \mathrm{Res}\left\{ \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon_a^2} \frac{1}{2} \tanh\frac{\beta\omega}{2} \right\} \\ &= \varepsilon_a \left(\frac{1}{2\varepsilon_a}\frac{1}{2} \tanh\frac{\beta\varepsilon_a}{2} - \frac{1}{2\varepsilon_a}\frac{1}{2} \tanh\frac{\beta(-\varepsilon_a)}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \tanh\frac{\beta\varepsilon_a}{2} \\ &= \frac{1}{2} - \frac{e^{-\beta\varepsilon_a}}{1 + e^{-\beta\varepsilon_a}} \end{aligned} \tag{3.29}$$

Note that the sign is switched in the second line because of the orientation (direction) of the contours. Integrating again, we obtain

$$\xi_a = \frac{1}{2}\varepsilon_a + T\ln(1 + e^{-\beta\varepsilon_a}) + \text{const}, \tag{3.30}$$

where the constant is actually divergent, but contains no physical parameters and can therefore be ignored. We now use the identity

$$T\ln(1+e^{-\beta\varepsilon_a}) = -\varepsilon_a + T\ln(1+e^{\beta\varepsilon_a}), \tag{3.31}$$

which allows us to write ξ_a in a form more suited for the explicitly negative antiparticle terms:

$$\xi_a = -\frac{1}{2}\varepsilon_a + T\ln(1+e^{\beta\varepsilon_a}). \tag{3.32}$$

Putting it all together, we arrive at a familiar expression, reminiscent of the thermodynamic potential of a free Fermi gas,

$$\begin{aligned}\Omega_0 &= -2N_c\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\Big\{E_\Delta^- + T\ln[1+e^{-\beta(E_\Delta^- -\mu)}] + T\ln[1+e^{-\beta(E_\Delta^- +\mu)}] \\ &\qquad + E_\Delta^+ + T\ln[1+e^{-\beta(E_\Delta^+ -\mu)}] + T\ln[1+e^{-\beta(E_\Delta^+ +\mu)}]\Big\},\end{aligned} \tag{3.33}$$

and thus obtain the full thermodynamic potential of the two-flavour NJL model:

$$\begin{aligned}\Omega(T,\delta\mu,\mu) &= \frac{(M-m)^2+\Delta^2}{4G} - 2N_c\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\times \\ &\quad\times\Big\{E_\Delta^- + T\ln[1+e^{-\beta(E_\Delta^- -\mu)}] + T\ln[1+e^{-\beta(E_\Delta^- +\mu)}] \\ &\qquad + E_\Delta^+ + T\ln[1+e^{-\beta(E_\Delta^+ -\mu)}] + T\ln[1+e^{-\beta(E_\Delta^+ +\mu)}]\Big\}.\end{aligned} \tag{3.34}$$

Some special cases

In the limit $T\to 0$, two of the thermal factors in Eq. (3.34) go over into step functions while two vanish. Assuming that $\mu \geq 0$, we obtain the zero-temperature thermodynamic potential

$$\begin{aligned}\Omega(0,\delta\mu,\mu) &= \frac{(M-m)^2+\Delta^2}{4G} - 2N_c\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\times \\ &\quad\times\left\{E_\Delta^+ + E_\Delta^- + (\mu - E_\Delta^+)\theta(\mu - E_\Delta^+) + (\mu - E_\Delta^-)\theta(\mu - e^-)\right\}.\end{aligned} \tag{3.35}$$

If we also take $\mu\to 0$ and $\delta\mu\to 0$, we obtain the vacuum thermodynamic potential

$$\Omega_{\mathrm{vac}} = \Omega(0,0,0) = \frac{(M-m)^2+\Delta^2}{4G} - 2N_c\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\,(E_\Delta^+ + E_\Delta^-). \tag{3.36}$$

3.4 Gap equations

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1+e^{\beta\varepsilon}} \tag{3.37}$$

$$\begin{aligned}0 &= \frac{\partial\Omega}{\partial M} = \frac{M-m}{2G} - 2N_cM\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\left\{\frac{E^-}{E_\Delta^- E}\left[1 - f(E_\Delta^- - \mu) - f(E_\Delta^- + \mu)\right]\right. \\ &\qquad\left. + \frac{E^+}{E_\Delta^+ E}\left[1 - f(E_\Delta^+ - \mu) - f(E_\Delta^+ + \mu)\right]\right\}\end{aligned} \tag{3.38}$$

$$\begin{aligned}0 &= \frac{\partial\Omega}{\partial\Delta} = \frac{\Delta}{2G} - 2N_c\Delta\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\left\{\frac{1}{E_\Delta^-}\left[1 - f(E_\Delta^- - \mu) - f(E_\Delta^- + \mu)\right]\right. \\ &\qquad\left. + \frac{1}{E_\Delta^+}\left[1 - f(E_\Delta^+ - \mu) - f(E_\Delta^+ + \mu)\right]\right\}\end{aligned} \tag{3.39}$$

Fri-boson gass

$$H = \sum_q \omega_q \, a_q^+ \, a_q$$

Frie, spinnløse, bosoner, uten indre struktur. (Eks: Fononer, longitudinale spinnbølger, solitoner i en-dimensjonale ledere etc., etc.)

$$Z = \int D[\varphi^*(\tau)] \, D[\varphi(\tau)] \, e^{S}$$

$\varphi_\lambda(0) = \varphi_\lambda(\beta)$ Periodisitet for bosonen!

$$S = -\sum_q \int_0^\beta d\tau \; \varphi_q^*(\tau) \, (\partial_\tau + \omega_q) \, \varphi_q(\tau)$$

Z blir nå et Gaussisk multipplt integral over komplekse variable, siden φ-ene nå er egenverdiene til boson koherente tilstander.

Dette har vi regnet ut før:

$$Z = e^{-\mathrm{Tr} \ln (\partial_\tau + \omega)}$$

$$\mathrm{Tr} = \sum_q \int_0^\beta d\tau \cdot \mathrm{tr}$$

Vi må altså igjen finne et lokalt uttrykk for

$$\mathrm{tr} \ln (\partial_\tau + \omega_q)$$

Siden vi nå skal da spørre om tilstanden som er periodisk:

$$\psi_\lambda(\tau \neq 0) = \psi_\lambda(\tau = \beta)$$

innføre vi plan-bølge basisen

$$u_{\nu q} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} e^{i(\bar{q}\cdot\bar{r} - \omega_\nu \tau)}$$

$$\omega_\nu = \frac{2\nu \cdot \pi}{\beta}$$

Boson Matsubara frekvens.

Disse basis-funksjonene er periodiske på intervallet $\tau \in [0, \beta]$

$$\mathrm{tr}\, \ln(\Omega\tau + \omega) = \sum_\nu \langle \nu | \ln(\Omega\tau + \omega) | \nu \rangle$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_\nu} \ln(-i\omega_\nu + \omega_q) \Rightarrow$$

$$- \sum_q \sum_{\omega_\nu} \ln(-i\omega_\nu + \omega_q)$$

$$Z = e$$

Vi trenger da et resultat for

$$\sum_{\omega_\nu} \ln(-i\omega_\nu + \omega_q) \; !$$

Vi observerer først at

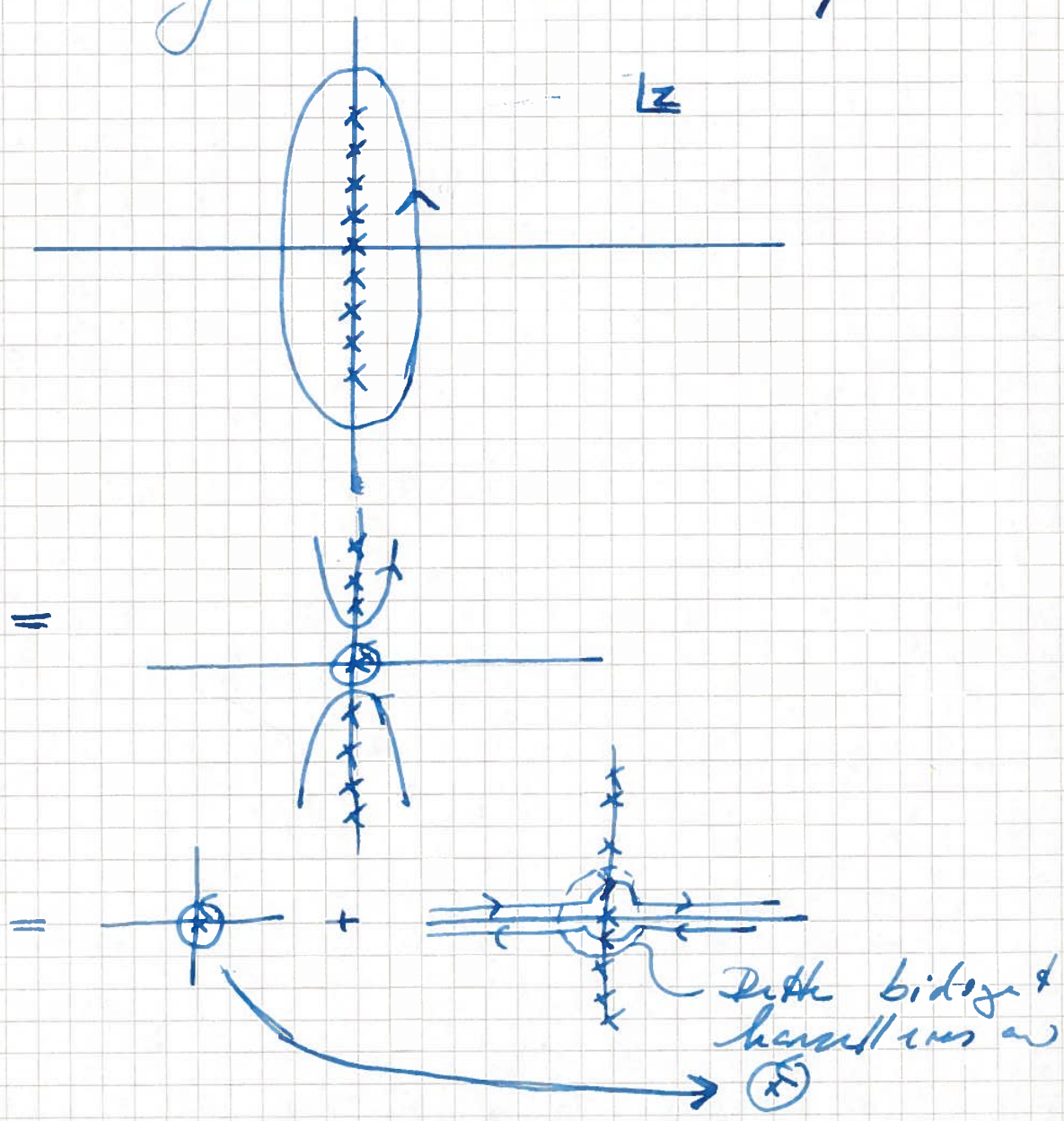
$i\omega_\nu$ er poler i Bose-fordelingen

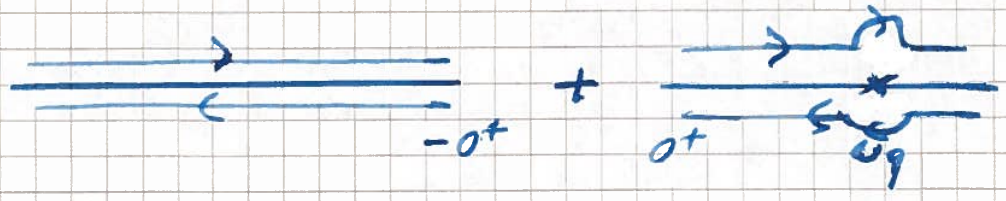
$$b(z) = \frac{1}{e^{\beta z} - 1} \; ; \; \mathrm{Res}\, b(i\omega_\nu) = \frac{1}{\beta}$$

Residy-setningen gir:

$$\sum_{\omega_\nu} g(i\omega_\nu) = + \frac{\beta}{2\pi i} \oint_C dz \, g(z) \, b(z)$$

$$g(i\omega_\nu) = \ln(-i\omega_\nu + \omega_q)$$



$=$ 

$$= \frac{\beta}{2\pi i}\int_{-\infty}^{-0^+} d\varepsilon\, b(\varepsilon)\left[\ln(-\varepsilon+i\delta+\omega_q) - \ln(-\varepsilon+i\delta+\omega_q)\right]$$

$$+ \frac{\beta}{2\pi i}\int_{0^+}^{\omega_q} d\varepsilon\, b(\varepsilon)\left[\ln(-\varepsilon+i\delta+\omega_q) - \ln(-\varepsilon+i\delta+\omega_q)\right]$$

Ikke helt $\underline{\underline{\text{ok}}}$

$$= \beta\int_{\omega_q}^{\infty} d\varepsilon\, b(\varepsilon)\left[\ln(-\varepsilon+i\delta+\omega_q) - \ln(-\varepsilon+i\delta+\omega_q)\right]$$

Bidraget fra $\varepsilon < \omega_q$ forsvinner, av nøyaktig samme grunner som i fermion tilfellet

Bidraget fra $\varepsilon > \omega_q$ blir igjen enkelt, fordi differansen mellom logaritmene blir $-2\pi i \Rightarrow$

$$-\beta\int_{\omega_q}^{\infty} d\varepsilon\, b(\varepsilon)$$

$$= -\beta \int_{\omega_q}^{\infty} d\varepsilon \, \frac{e^{-\beta\varepsilon}}{1-e^{-\beta\varepsilon}}$$

$$= -\frac{\beta}{\beta} \Big|_{\omega_q}^{\infty} \ln\left(1-e^{-\beta\varepsilon}\right)$$

$$= \ln\left(1-e^{-\beta\varepsilon}\right) \Rightarrow$$

$$Z = e^{-\sum_q \sum_{\omega_\nu} \ln(-i\omega_\nu+\omega_q)}$$

$$= e^{-\sum_q \ln\left(1-e^{-\beta\omega_q}\right)}$$

$$= \underline{\underline{\prod_q \left(\frac{1}{1-e^{-\beta\omega_q}}\right)}}$$

Partisjonsfunksjonen for fri boson-gass.

$$= e^{-\beta F}$$

$$F = \frac{1}{\beta} \sum_q \ln\left(1-e^{-\beta\omega_q}\right)$$

Fri energi

Svaret for disse enkle partisjonsfunksjonene kunne vi funnet ved trivielle kollegaumenter. Beregningene over har imidlertid illustrert hva som skjuler seg bak abstrakte uttrykk som $T_+ A(x_\tau)$. I tillegg er metodene relevant for vekselvirkende problemer, som vi skal se.

Green's funksjoner, $T > 0$

Vi skal først se på beregning av én-partikkel Green's funksjoner for bosoner og fermioner

Vi husker definisjonen av én-partikkel Green's funksjoner ved $T = 0$:

$$G_\lambda(x,t) = -i \langle \Psi | T_t \left(C_\lambda(x,t)\, C_\lambda^\dagger(0,0) \right) | \Psi \rangle$$

$|\Psi\rangle$: Eksakt (mange-partikkel) egentilstand til H

T_t: Tidsordnings-symbol $\Leftrightarrow$

$$T_t\left(A(t_1)\, B(t_2)\right) = A(t_1)\, B(t_2) \quad ; \quad t_2 < t_1$$
$$= \pm\, B(t_2)\, A(t_1) \quad ; \quad t_1 < t_2$$

$+$: Bosoner

$-$: Fermioner.

$\boxed{\text{Q: Sannsynlighetsamplitude for at, dersom et fermion finnes i tilstand } \lambda \text{ ved } (x=0, t=0), \text{ skal det finnes igjen i tilstand } \lambda \text{ ved } (x,t).}$

Denne definisjonen generaliserer vi til $T > 0$

$$G(x,\tau) = -\langle \Psi | T_\tau (C_2(x,\tau)\, C_2(0,0)) | \Psi \rangle$$

T_τ: Tidsordnings-symbol (imaginær tid τ)

$$T_\tau[A(\tau_1)\, B(\tau_2)] = A(\tau_1)\, B(\tau_2); \quad \tau_2 < \tau_1$$
$$= \pm B(\tau_2)\, A(\tau_1); \quad \tau_1 < \tau_2$$

+: Bosoner

−: Fermioner

$G(x,\tau)$: Har en tilsvarende tolkning som sannsynlighetsamplituden $G(x,t)$ ved $T=0$.

Vi kan også definere:

Fermioner: $G(k,\sigma,\tau) = -\langle \Psi | T_\tau (C_{k\sigma}(\tau)\, C^+_{k\sigma}(0)) | \Psi \rangle$

Samme sett av kvantetall, ellers er amplituden = 0, p.g.a. orthogonalitet

Bosoner: $D(q,\tau) = -\langle \Psi | T_\tau (a_q(\tau)\, a_q^+(0)) | \Psi \rangle$

q er her et sett av kvantetall, som godt kan inkludere spinn (hvilketlige, i tre dimensjoner; spinn-statistikk theorem)

Likeledes kan vi definere Fourier-transformerte Green's funksjoner

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

Bosoner: $D(q, i\omega_\nu) = \int_0^\beta d\tau\, D(q,\tau)\, e^{i\omega_\nu \tau}$

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \; ; \qquad \omega_\nu = \frac{2\pi\nu}{\beta} \; ; \quad n, \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

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

$$D(q,\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_\nu} D(q, i\omega_\nu)\, e^{-i\omega_\nu \tau}$$

I funksjonal-integral formalismen, definerer vi forventningsverdien av operatoren som

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z}\, \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H} A\right)$$

$$= \frac{1}{Z} \int D[\varphi^*]\, D[\varphi]\, A(\{\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda\})\, e^{S}$$

$$\varphi_\lambda(0) = \xi\, \varphi_\lambda(\beta)$$

$$S = -\sum_\lambda \int_0^\beta d\tau \left[\varphi_\lambda^* \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial \tau} + H(\{\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda\})\right]$$

$$S = S_0 + S_I$$

$$S_0 = -\sum_\lambda \int_0^\beta d\tau \left[\varphi_\lambda^* (\partial_\tau + \varepsilon) \varphi_\lambda \right]$$

Ikke-u.v. sektor.

$$S_I = -\sum_\lambda \int_0^\beta d\tau \; H_I \left(\{ \varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda \} \right)$$

Vekselvirkning

Vi definerer:

$$Z_0 = \int D[\varphi^*] D[\varphi] \, e^{S_0}$$

$$\langle A \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \int D[\varphi^*] D[\varphi] \, A(\{\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda\}) e^{S_0}$$

$$Z = \int D[\varphi^*] D[\varphi] \, e^{S_I} e^{S_0}$$

$$= Z_0 \langle e^{S_I} \rangle_0$$

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z_0 \langle e^{S_I} \rangle_0} \int D[\varphi^*] D[\varphi] \left(A e^{S_I} \right) e^{S_0}$$

$$= \frac{\langle A e^{S_I} \rangle_0}{\langle e^{S_I} \rangle_0}$$

Nevner kansellerer alle ikke-sammenhengende diagrammer i perturbasjonsteori, til alle ordner i S_I. $\langle e^{S_I} \rangle_0$ representerer „vakuum-fluktuasjoner," eller de fluktuasjoner som

systemet fremviser når det overlates helt til seg selv. I strømlen $\langle A \rangle$ er vi interessert i å finne systemets respons når vi prober det med operatoren A. Vakuumfluktuasjonene er uinteressante i denne forbindelsen, og faktoren $\langle e^{S_I} \rangle_0$ sørger for at de ikke bidrar til $\langle A \rangle$.

Nå innfører vi en hjelpestrømlen, en generende funksjonal for Green's funksjoner:

$$W(\{y_\lambda^*, y_\lambda\}) = \frac{1}{Z} \cdot \int D[\varphi^*] D[\varphi] \, e^{S+F}$$

$$F = \sum_\lambda \int_0^\beta d\tau \left(y_\lambda^*(\tau) \varphi_\lambda(\tau) + y_\lambda(\tau) \varphi_\lambda^*(\tau) \right)$$

Bosoner: y_λ^*, y_λ: c-tall

Fermioner: — " — : Grassmann-tall

For fermioner er rekkefølgen av y_λ- er og φ_λ- er viktig (husk divisjonsreglen for Grassmann-tall!)

$$W = \frac{\langle e^{S_I} e^{F} \rangle_0}{\cdot \langle e^{S_I} \rangle_0}$$

$$\langle A \rangle = \frac{\langle A\, e^{S_I} \rangle_0}{\langle e^{S_I} \rangle_0}$$

$$= \frac{1}{\langle e^{S_I} \rangle_0} A\left(\frac{\partial}{\partial J_\lambda}, \frac{\partial}{\partial J_\lambda^*}\right) \langle e^{S_I} e^{F} \rangle_0$$

hvor $\{J_\lambda^*, J_\lambda\}$ settes til null etter at derivasjonene er foretatt.

Ikke-vekselvirkende tilfellet

$S_I = 0$. Nå blir funksjonal integralene Gaussiske, og disse har vi sett på i detalj tidligere (s. 25-32)

$$\langle e^{F} \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \int D[\varphi^*] D[\varphi] \cdot e^{\sum_\lambda \int_0^\beta d\tau [J_\lambda^* \varphi_\lambda + J_\lambda \varphi_\lambda^*]} \cdot e^{-\sum_\lambda \int_0^\beta d\tau [\varphi_\lambda^* (\partial_\tau + \varepsilon) \varphi_\lambda]}$$

Dette har samme form som

$$\int \left(\prod_k \frac{d\varphi_k^* \, d\varphi_k}{N} \right) e^{-\left(\varphi_i^* A_{ij} \varphi_j + j_i^* \varphi_i + j_i \varphi_i^* \right)}$$

$$= e^{j_i^* A_{ij}^{-1} j_i} \underbrace{e^{-\zeta \, \mathrm{Tr} \ln A}}_{= Z_0}$$

$\zeta = \pm$: bosons / fermions $= 1$

$$\langle e^F \rangle_0 = e^{\sum_\lambda \int_0^\beta d\tau \, \eta_\lambda^*(\tau) (\partial_\tau + \varepsilon)^{-1} \eta_\lambda(\tau)}$$

Dette resultatet kan vi nå bruke til å bygge fri-partikkel Green's funksjon, $\underline{T > 0}$.

$$G(k, \sigma, \tau) = -i \langle T_\tau (C_{k\sigma}(\tau) C^+_{k\sigma}(0)) \rangle_0$$

$$= -i \Big[\theta(\tau) \langle C_{k\sigma}(\tau) C^+_{k\sigma}(0) \rangle_0$$

$$- \theta(-\tau) \langle C^+_{k\sigma}(0) C_{k\sigma}(\tau) \rangle_0 \Big]$$

$$\Rightarrow -i \Big[\theta(\tau) \langle \varphi_{k\sigma}(\tau) \varphi^*_{k\sigma}(0) \rangle_0$$

$$- \theta(-\tau) \langle \varphi^*_{k\sigma}(0) \varphi_{k\sigma}(\tau) \rangle_0 \Big]$$

Vi har implisitt gått over til funksjonal-integral formalisme ved innføring av egenverdier til koherente tilstander.

$\underline{\tau_1 > \tau_2}$

$$\mp \langle \varphi_{\underbrace{k_1\sigma_1}_{\lambda_1}}(\tau_1)\ \varphi^*_{\underbrace{k_2\sigma_2}_{\lambda_2}}(\tau_2)\rangle_0$$

[illegible]

$$= \mp \frac{\partial}{\partial J_{\lambda_1}^*(\tau_1)} \frac{\partial}{\partial J_{\lambda_2}(\tau_2)} \langle e^F\rangle_0 \Big|_{(J=0)}$$

$$= \mp (\partial_\tau + \varepsilon)^{-1}_{\tau_1,\tau_2}\ \delta_{\lambda_1\lambda_2} = G_0(\lambda_1,\lambda_2,\tau_1,\tau_2)$$

$(\partial_\tau + \varepsilon)$, $(\partial_\tau + \varepsilon)^{-1}$ må oppfattes som matriser, i: ∂_τ er kontinuumsversjonen av en operator som der symbolisert for en Trotter-slice til den neste. $(\partial_\tau + \varepsilon)$ er derfor ikke-diagonal i Trotter-indeksen τ_1, τ_2, og invertering for å finne $(\partial_\tau + \varepsilon)^{-1}_{\tau_1,\tau_2}$ er ikke-triviell.

G_0: Fri-fermion Green's funksjonen når $\tau_1 > \tau_2$

$\underline{\tau_2 > \tau_1}$:

$$+\langle \varphi^*_{\lambda_2}(\tau_2)\ \varphi_{\lambda_1}(\tau_1)\rangle$$

$$= \pm \frac{\partial}{\partial J_{\lambda_2}(\tau_2)} \frac{\partial}{\partial J_{\lambda_1}^*(\tau_1)} \langle e^F\rangle_0 \Big|_{(J=0)}$$

$$= + (\partial_\tau + \varepsilon)^{-1}_{\tau_2,\tau_1}\ \delta_{\lambda_1,\lambda_2}$$

Vi ser altså, p.g.a. definisjonen på statistisk middel, trenger vi ikke eksplisitt å bruke T_τ

$$G_0(\lambda_1, \lambda_2, \tau_1, \tau_2) = + (\partial_\tau + \varepsilon)^{-1}_{\tau_2, \tau_1} \quad \delta_{\lambda_1 \lambda_2}$$

Sett $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$, $\tau_1 - \tau_2 = \tau$

$$(\partial_\tau + \varepsilon)\, G_0(\lambda, \tau) = \delta(\tau)$$

Løs ved Fourier-tr. f.

$$+ \int_{0^-}^{\beta} d\tau\, e^{i\omega_n \tau} (\partial_\tau + \varepsilon) G_0(\lambda, \tau) = 1$$

$$+ \frac{1}{\beta} \int_{0^-}^{\beta} d\tau\, e^{i\omega_n \tau} (\partial_\tau + \varepsilon) \sum_{\omega_{n_1}} e^{-i\omega_{n_1}\tau} G_0(\lambda, i\omega_{n_1}) = 1$$

$$+ \frac{1}{\beta} \int_{0^-}^{\beta} d\tau \sum_{\omega_{n_1}} e^{i(-i\omega_{n_1} + i\omega_n)\tau} (-i\omega_{n_1} + \varepsilon) G_0(\lambda, i\omega_{n_1}) = 1$$

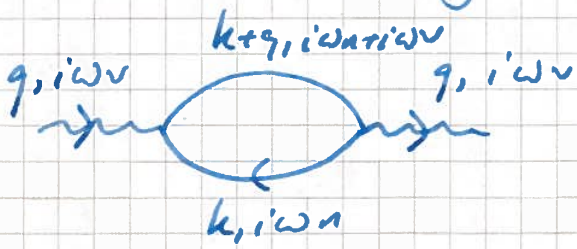
$$+ (-i\omega_n + \varepsilon)\, G_0(\lambda, i\omega_n) = 1$$

$$\boxed{G_0(\lambda, i\omega_n) = \frac{-1}{i\omega_n - \varepsilon}}$$ Frie fermioner

$$\boxed{D_0(q, i\nu) = \frac{-1}{i\nu - \omega_q}}$$ Frie bosoner

Eksempel på bruk av disse propagatorene.

Anta at vi ønsker å se på ledende ordens korreksjon til en fri boson-propagator. Fra $T=0$ perturbasjons teori, vet vi at vi må bruke Feynman-diagrammet



$$\equiv P(q, i\omega_\nu)$$

$$P(q,i\omega_\nu) \sim \frac{1}{\beta}\sum_{k,\omega_n} G_0(k,i\omega_n)\, G_0(k+q, i\omega_n+i\omega_\nu)$$

$$= \sum_k \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} \frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k}\cdot\frac{1}{i\omega_n+i\omega_\nu-\varepsilon_{k+q}}$$

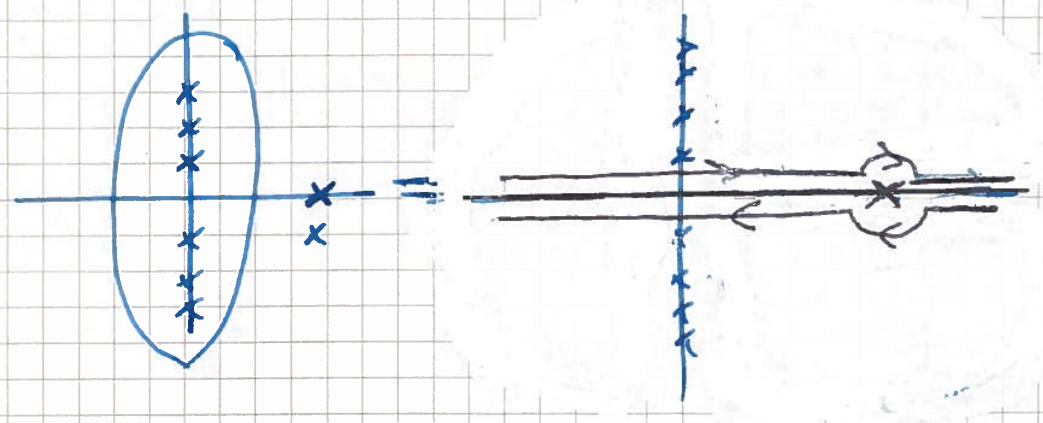
Frekvens-summasjonen er enkel:

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} \frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k}\cdot\frac{1}{i\omega_n+i\omega_\nu-\varepsilon_{k+q}}$$

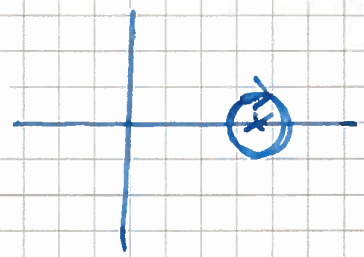
$$= \frac{1}{i\omega_\nu+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}}\cdot\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\left(\frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k}-\frac{1}{i\omega_n+i\omega_\nu-\varepsilon_{k+q}}\right)$$

Se på $\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n-x}$:

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n - x} = -\frac{1}{2\pi i}\oint dz\,\frac{f(z)}{z-x}$$



$$= \frac{-2\pi i}{-2\pi i}\cdot f(x) = f(x)$$



Ingen forgrenings punkt i dette tilfellet.

$$\Rightarrow$$

$$P(q, i\omega_\nu) \approx \frac{[f(\varepsilon_k) - f(\varepsilon_{k+q})]}{i\omega_\nu + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}$$

f-faktoren inneholder T-effekter.

Nå kan vi analytisk kontinuere:

$$i\omega_\nu \to \omega \pm i\delta \quad ; \quad \delta = 0^+$$

+: Retardert respons

−: Avansert respons.

Dermed har vi en dynamisk responsfunksjon, $\omega > 0$, ved $T > 0$.

Vekselvirkende fermion-systemer og Hubbard-Stratonovich dekobling

$$Z = \int D[\varphi^*] D[\varphi] \, e^{S_0 + S_I}$$

S_I inneholder vekselvirkningsledd (typisk av formen $\varphi^* \varphi \varphi^* \varphi$) som gjør det umulig å beregne partisjonsfunksjonen eksakt. Dersom S_I er „liten nok", fører man til perturbasjonsteori, som forventes å være g.k. dersom S_I ikke forårsaker kvalitative endringer i Z relativt Z_0 (faseovergang). Dersom S_I er „stor nok" til å forårsake en faseovergang vil dette ikke kunne detekteres til noen endelig orden i perturbasjonsteori.

Ekspansjonsdette.

Sentralt poeng som motiverer approach

$$\boxed{\text{Vår strategi vil derfor være å forsøke å beregne } Z \text{ approximativt, og ikke-perturbativt med ofte teori.}}$$

Tricket som muliggjør en slik beregning er Hubbard-Stratonovich dekoblingen av vekselvirkningsleddet i effektiv virkning S.

$$e^{S_I} = e^{-\sum_\lambda \int_0^\beta d\tau \; H_I(\{\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda\})}$$

For å dekoble noe slikt, bruker vi identiteten

$$e^{-\mathrm{Tr}\ln A} \cdot e^{y^* A^{-1} y} = \int Da^+ Da \, e^{-a^+ A a + y^* a + y a^+} \quad \checkmark$$

a^+, a: Boson-felt

y^*, y: c-tall Trenger ikke å være c-tall!

Dersom vi nå velger (valget er ikke unikt!)

$y = \varphi \quad \varphi$, Dette er ikke c-tall.

$A^{-1} = V$ så vi at

S_I kan skrives

$$e^{S_I} = e^{-\mathrm{Tr}\ln A} \cdot \int Da^+ Da \, e^{-(a^+ V^{-1} a + \varphi^* \varphi^* a + \varphi\varphi \, a^+)}$$

$e^{-\mathrm{Tr}\ln A}$ er et tall som vi kan sette $=1$, dette definerer bare nullpunkt i fri energi.

Dermed kan vi skrive partisjons-funksjonen som

$$Z = \int D\varphi^* D\varphi \, Da^+ Da$$

$$\cdot\, e^{-\varphi^*(\partial_\tau + \varepsilon)\varphi + \varphi^* a \varphi^* + \varphi a^+ \varphi - a^+ V^{-1} a}$$

$$\boxed{\text{Poenget er nå at fermion-sektoren av denne teorien er Gaussisk, slik at fermionene kan integreres eksakt ut!}}$$

$$Z = \int Da^+ Da \, e^{-a^+ V^{-1} a - \frac{1}{2} \mathrm{Tr} \ln(G^{-1})} \cdot e^{-\varphi^*(\partial_\tau + \varepsilon)\varphi + \frac{1}{2}\varphi^* a \varphi^* + \frac{1}{2}\varphi a^+ \varphi}$$

$$= -\frac{1}{2} \underbrace{(\varphi^*, \varphi)}_{\Phi^+} \underbrace{\begin{pmatrix} \partial_\tau + \varepsilon & -2a \\ 2a^+ & +(\partial_\tau + \varepsilon) \end{pmatrix}}_{G^{-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} \varphi \\ \varphi^* \end{pmatrix}}_{\Phi} ; \quad \Phi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \varphi^* \end{pmatrix}$$

$$S_{eff}(a^+, a)$$

$$Z = \int Da^+ Da \, e^{-S_{eff}(a^+, a)}$$

$$S_{eff}(a^+, a) = -\sum_\lambda \int_0^\beta d\tau \, a^+_\lambda(\tau) V^{-1} a_\lambda(\tau) + \frac{1}{2} \mathrm{Tr} \ln(G^{-1})$$

Nå har vi konvertert den vekselvirkende fermion-teorien til en effektiv, vekselvirkende boson-teori, med effektiv virkning

$$S = -\sum_{\lambda} \int_0^{\beta} d\tau \; a_\lambda^+ V^{-1} a_\lambda$$

$$+ \frac{1}{2} \, \mathrm{Tr} \ln \overbrace{\begin{pmatrix} \partial_\tau + \varepsilon & -2a(x) \\ -2a^+(x) & +(\partial_\tau - \varepsilon) \end{pmatrix}}^{\text{Fermion-determinant}}$$

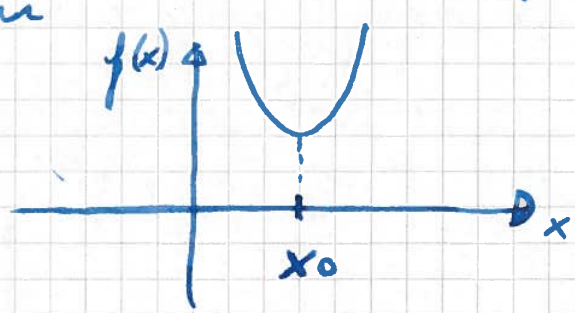
Men tilsynelatende er dette en mye mer komplisert teori enn den fermion-teorien vi startet med! Så hva har vi egentlig oppnådd?

Hovedpoenget er at sadelpunkt approximasjoner til et integral over c-tallsvariable har en mening. Noe tilsvarende approximasjon kan vi ikke finne for Grassmann-variable! Grunnen er enkel: Dersom vi prøver å finne en approximasjon til integralet

Stasjonær-punkt (sadelpunkt) approxim.

$$I = \int dx \; e^{-f(x)}$$

se vi at dersom f har formen



slik at $f(x)$ har et <u>skarpt</u> minimum ved $x = x_0$, er integralet dominert av bidraget rundt x_0:

$$f(x) = f(x_0) + \frac{1}{2}(x-x_0)^2 f''(x_0) + \cdots$$

$$I \simeq e^{-f(x_0)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-\frac{1}{2} f''(x_0)(x-x_0)^2}$$

$$= \sqrt{\frac{2\pi}{f''(x_0)}} \; e^{-f(x_0)} \; ; \quad x_0 \text{ er bestemt av } f'(x_0) = 0$$

Når x er c-tall eller reell, er dette mulig. Dersom x er et Grassmann-tall, er det <u>umulig</u> fordi, som vi vet, er

$$f(x) = c_0 + c_1 x \; ; \quad x = \text{Grassmann tall}$$

Vi har nærmeste problemet med beregning av Grassmann-integralet

approximativt, fordi H-S transformasjon gjorde det mulig å bevare det eksakt!

Boson-integralet kan vi derimot gjøre forsøk på å bevare i sadelpunkt-approximasjon. Annen måte å uttrykke dette på: Bose-korre har klassiske motstykker, det har ikke fermioner.

Noen kommentarer:

i) Partisjonsfunksjonen

NB!! Legg merke til at det ikke finnes noe tilsvarende $a^* \frac{\partial a}{\partial \tau}$ her!!

$$Z = \int D\varphi^* D\varphi \, D a^* D a \; e^{-a^* V^{-1} a + \varphi^* a + \varphi a^* + S_0}$$

NB!! Dette er også et viktig punkt.

kan tolkes som partisjonsfunksjonen for et ikke-vekselvirkende fermion system som er koblet til et dynamisk eksternt boson-felt.

$S_{eff}[a^*, a]$ er fri energi til dette fermionsystemet, for en bestemt konfigurasjon av det eksterne feltet. Total fri energi, er summen av fri energier

for gitte konfigurasjoner, summert over alle konfigurasjoner.

ii) Et meget viktig poeng, er at det er stor vilkårlighet i hvordan vi velger å H-S-dekoble U.U.-leddet i fermion-sektoren.

I det forrige eksempelet over, valgte vi å bruke

$$\mathcal{J} = \varphi^* \varphi \; ; \; \mathcal{J}^* = \varphi^* \varphi$$

Et like godt valg, som også ville reproducert e^{SI}, ville vært (det finnes mange andre)

$$\mathcal{J} = \varphi \varphi \; ; \; \mathcal{J}^* = \varphi^* \varphi^*$$

Så lenge vi beregner boson funksjonal integralet eksakt, spiller det overhodet ingen rolle hvorden vi dekobler vekselvirkningsleddet

Men: Når approximasjoner innføres, er det ikke lenger likegyldig hvorden vi dekobler vekselvirkningene.

Da er valget av dekoblings-skjema bestemt av hva slags fysikk som søkes.

Nå H-S dekopler vi S_I på ~~følgende måte:~~

$$\left.\begin{aligned} y &= \varphi_\downarrow(x,\tau)\,\varphi_\uparrow(x,\tau) \\ y^\times &= \varphi_\uparrow^\times(x,\tau)\,\varphi_\downarrow^\times(x,\tau) \end{aligned}\right\}$$

$y, y^\times$: Par-felt

a, a^+: Felt som er konjugerte til par-felttene.

$\left(e^{-\mathrm{Tr}\ln V} = 1 \text{ - kommutator} \right.$ nedover s. 79$\left.\right)$

$$e^{V y^\times y} = \int D a^+ D a \, e^{-\frac{1}{V} a^+ a + y^+ a + y a^+}$$

$\Rightarrow$

$$e^{S_I} = \int D a^+ D a \, e^{-\sum_x \left\{ \frac{1}{V} |a(x)|^2 - \varphi_\uparrow^\times \varphi_\downarrow^\times a - \varphi_\downarrow \varphi_\uparrow a^+ \right\}}$$

Altså får vi partisjonsfunksjonen

$$Z = \int D\varphi^\times D\varphi \, D a^+ D a \, e^{-\sum_x \frac{1}{V} a^+ a + A_2}$$

$$A_2 = S_0 + \sum_x^+ \left\{ a^+ \varphi_\downarrow(x)\varphi_\uparrow(x) + a\, \varphi_\uparrow^+(x)\varphi_\downarrow^+(x) \right\}$$

Nå innfører vi såkalt Nambu-formalisme, ved å definere en 4o-komponent spinor

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \varphi_\uparrow(x) \\ \varphi_\downarrow^\times(x) \end{pmatrix}$$

$$\psi^+(x) = \left(\varphi_\uparrow^\times(x), \varphi_\downarrow(x)\right)$$

Nämlich:

$$\sum_x \left(a^+ \psi_\downarrow \psi_\uparrow + \psi_\uparrow^+ \psi_\downarrow^+ a \right)$$

$$= \sum_x \psi^+(x) \begin{pmatrix} 0 & a(x) \\ a^+(x) & 0 \end{pmatrix} \psi(x)$$

$$S_0 = -\sum_{x,y} \left[\psi_\uparrow^*(x) (\partial_\tau + \varepsilon - \mu) \psi_\uparrow(y) + \psi_\downarrow^*(x) (\partial_\tau + \varepsilon - \mu) \psi_\downarrow(x) \right]$$

Hvorfor 2D?
Hvor ikke i [illegible]
[illegible] allerede?

SVAR: [illegible]
[illegible]
[illegible]

$$= -\sum_{x,y} (\psi_\uparrow^*, \psi_\downarrow) \underbrace{\begin{pmatrix} \partial_\tau + \varepsilon - \mu & 0 \\ 0 & \partial_\tau - (\varepsilon - \mu) \end{pmatrix}}_{\equiv -G_0^{-1}(x,y)} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow^* \end{pmatrix}$$

?

0

2 Hvor mit [illegible]

SVAR: NB! [illegible] (2 indeks fram)

$$= -\sum_{x,y} \psi^+(x) \left[-G_0^{-1}(x,y) \right] \psi(y)$$

Denne:

$$A_2 = -\sum_{x,y} \psi^+(x) \left[-G^{-1}(x,y) \right] \psi(y)$$

$$-G^{-1}(x,y) = -G_0^{-1}(x,y) - B(x)\, \delta_{x,y}$$

$$B(x) = \begin{pmatrix} 0 & a(x) \\ a^+(x) & 0 \end{pmatrix}$$

?

!! [illegible] input – hvi!?

SVAR: Sr [illegible] [illegible] opp!

NB!! $-\langle \psi \psi^+ \rangle = G$

2×2-matrise: Fermion propagator!

Dermed blir partisjonsfunksjonen:

$$Z = \int D\psi^+ D\psi \, Da^+ Da \, e^{-\sum_x \frac{|a|^2}{V} - \sum_{x,y} \psi^+(x)[-g^{-1}(x,y)]\psi(y)}$$

$$= \int Da^+ Da \, e^{-\sum_x \frac{|a(x)|^2}{V} + \mathrm{Tr}\ln(-g^{-1})}$$

$$= \int Da^+ Da \, e^{S_{eff}(a^+, a)}$$

Som på side 29/over ogs. 31

(Integrerte ut pga. kvadratisk form som kjøres slik som vi har det)

$$S_{eff} = -\sum_x \frac{|a(x)|^2}{V} + \mathrm{Tr}\ln\left[-g_0^{-1}(x,y) - B(x)\right]$$

Partisjons-funksjonen for BCS-modellen har nå blitt transformert til et rent boson-problem. Sadelpunkt-approximasjonen til dette integralet gir mean-field teori

Her betyr $\mathrm{Tr} = \sum_x \mathrm{tr}$, som for, hvor $\mathrm{tr} = 2\times 2$ matrise-spor

Mean-field teori:

$a(x) = a =$ constant

$$\mathrm{Tr}\ln(-g^{-1}(x,y)) = \sum_x \mathrm{tr}\ln(-g^{-1}(x,x))$$

$$= \sum_k \mathrm{tr}\ln\left[-g^{-1}(k)\right]$$

BCS-teori (revisited)

$$Z = \int D\varphi^* D\varphi \, e^{S}$$

$$S = S_0 + S_I \quad \left(= -\int_0^\beta \varphi^*_\alpha \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \tau} + H(\varphi^*_\alpha, \varphi_\alpha)\right)$$

$$S_0 = -\sum_{x,y,\sigma} \varphi^*_\sigma(x) \left(\partial_\tau + \varepsilon - \mu\right) \varphi_\sigma(y)$$

$$H_I = -V \sum_x n_\uparrow(x)\, n_\downarrow(x) \quad ; \; V > 0$$

$$S_I = +V \sum_x n_\uparrow(x)\, n_\downarrow(x) \quad ; \; V > 0$$

Attraktiv kontakt-v.v. for elektroner med motsatt spinn. (Retardert!)

$$S_I = V \sum_x \varphi^*_\uparrow(x)\, \varphi^*_\downarrow(x)\, \varphi_\downarrow(x)\, \varphi_\uparrow(x)$$

$$e^{S_I} = \int Da^+ Da \; e^{-\sum_x \left(\frac{a^+ a}{V} - a\, \varphi^*_\uparrow \varphi^*_\downarrow - a^+ \varphi_\downarrow \varphi_\uparrow\right)}$$

$$\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_\uparrow \\ \varphi^*_\downarrow \end{pmatrix} \; ; \; \Phi^+ = (\varphi^*_\uparrow, \varphi_\downarrow)$$

$$e^{S_I} = \int Da^+ Da \; e^{-\sum_x \frac{a^+ a}{V} + \sum_x \Phi^+(x)\, B(x)\, \Phi(x)}$$

$$B(x) = \begin{pmatrix} 0 & a(x) \\ a^+(x) & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_0 = -\sum_{\vec{k}} \sum_\sigma \int_0^\beta d\tau \left[\varphi^*_{k\sigma}(\tau) \left(\partial_\tau + \varepsilon_k - \mu\right) \varphi_{k\sigma}(\tau)\right]$$

Har tatt vi partiell Fourier-transformat

$$\varphi^*_\sigma(\vec{x}, \tau) \rightarrow \varphi^*_{k\sigma}(\tau)$$

Utført spin-summasjonen:

$$S_0 = -\sum_{\vec{k}} \int_0^\beta d\tau \left[\varphi_{k\uparrow}^* (\partial_\tau + \varepsilon_k - \mu) \varphi_{k\uparrow} + \varphi_{k\downarrow}^* (\partial_\tau + \varepsilon_k - \mu) \varphi_{k\downarrow} \right]$$

Se på det andre leddet:

$$\sum_k \left[\int_0^\beta d\tau \, \varphi_{k\downarrow}^* \frac{\partial \varphi_{k\downarrow}}{\partial \tau} + \int_0^\beta d\tau \, \varphi_{k\downarrow}^* \varepsilon_k \varphi_{k\downarrow} \right]$$

$$= \sum_k \left\{ \underbrace{\Big|_0^\beta \varphi_{k\downarrow}^* \varphi_{k\downarrow}}_{=0} + \int_0^\beta d\tau \, \varphi_{k\downarrow} \frac{\partial \varphi_{k\downarrow}^*}{\partial \tau} - \int_0^\beta d\tau \, \varphi_{k\downarrow} \varepsilon_k \varphi_{k\downarrow}^* \right\}$$

$$= \sum_{\vec{k}} \int_0^\beta d\tau \, \varphi_{k\downarrow} (\partial_\tau - \varepsilon_k) \varphi_{k\downarrow}^*$$

$$= \sum_{x,y} \varphi_\downarrow(x) (\partial_\tau - \varepsilon) \varphi_\downarrow^*(y)$$

$$S_0 = -\sum_{x,y} \left[\varphi_\uparrow^*(x) (\partial_\tau + \varepsilon) \varphi_\uparrow(y) + \varphi_\downarrow(x) (\partial_\tau - \varepsilon) \varphi_\downarrow^*(y) \right]$$

$$= -\sum_{x,y} \Phi^+(x) \begin{pmatrix} \partial_\tau + \varepsilon & 0 \\ 0 & \partial_\tau - \varepsilon \end{pmatrix} \Phi(y)$$

$$Z = \int \mathcal{D}\phi^+ \mathcal{D}\phi \mathcal{D}a^+ \mathcal{D}a$$

$$e^{-\sum_x \frac{a^+(x)\,a(x)}{V}} \; e^{-\sum_{x,y} \phi^+(x)\, \mathcal{G}^{-1}(x,y)\, \phi(y)}$$

$$\mathcal{G}^{-1}(x,y) = \mathcal{G}_0^{-1}(x,y) - B(x)\,\delta_{x,y}$$

$$\mathcal{G}_0^{-1}(x,y) = \begin{pmatrix} \partial\tau + \varepsilon & 0 \\ 0 & \partial\tau - \varepsilon \end{pmatrix}$$

Ut for ϕ^+, ϕ - integrasjonen:

$$Z = \int \mathcal{D}a^+ \mathcal{D}a \; e^{S_{eff}[a^+, a]}$$

Hva har egentlig skjedd her?

$$S_{eff}[a^+, a] = -\sum_x \frac{a^+(x)\,a(x)}{V}$$

Ekstra!!

$$+ \mathrm{Tr} \ln[\mathcal{G}^{-1}]$$

Middelfelt-approx $\Rightarrow a(x) = a; \quad a^*(x) = a^*$

$$\mathrm{Tr} \ln \mathcal{G}^{-1} = \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}} \sum_{\omega_n} \mathrm{tr} \ln \mathcal{G}^{-1}(\vec{k}, i\omega_n)$$

$$\mathcal{G}^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) = \begin{pmatrix} -i\omega_n + \varepsilon_k & -a \\ -a^+ & -i\omega_n - \varepsilon_k \end{pmatrix}$$

d)

$$\mathrm{tr}\ln \mathcal{G}^{-1} = \ln(\det \mathcal{G}^{-1})$$

$$= \ln\left((i\omega_n)^2 - \varepsilon_k^2 - |a|^2\right)$$

$$= \ln(i\omega_n - E_k) + \ln(i\omega_n - E_k)$$

$$\Rightarrow \quad S_{eff}^{MF} = -\frac{N\beta|a|^2}{V} + \sum_{\vec{k}} \ln\left[\left(1+e^{-\beta E_k}\right)\left(1+e^{\beta E_k}\right)\right]$$

$$= -\beta F^{MF}$$

$$f^{MF} = +\frac{|a|^2}{V} - \frac{1}{\beta}\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \ln\left[\left(1+e^{\beta E_k}\right)\left(1+e^{-\beta E_k}\right)\right]$$

NB!! Siden

$$S_{eff} = -\sum_x \frac{a^+(x)\,a(x)}{V} + \mathrm{Tr}\ln\left(\mathcal{G}^{-1}\right)$$

er eksakt, har vi automatisk en oppskrift på hvordan vi skal konstruere mean-field teorier, og også en oppskrift på hvordan vi skal undersøke stabiliteten!

$$\mathcal{G}^{-1}(k) = \begin{pmatrix} -i\omega_n + \varepsilon_k & -a \\ -a^+ & -i\omega_n - \varepsilon_k \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{G}(k) = \frac{-1}{(i\omega_n)^2 - E_k^2} \begin{pmatrix} i\omega_n + \varepsilon_k & a \\ a^+ & i\omega_n - \varepsilon_k \end{pmatrix} \equiv \langle \phi \phi^+ \rangle$$

$$E_k = \left(\varepsilon_k^2 + |a|^2\right)^{1/2}$$

$$\mathcal{G}(k) \Rightarrow -\mathcal{G}_F(k) \Rightarrow \mathcal{G}_F = -\langle \phi \phi^+ \rangle$$

$$\mathrm{tr}\, \ln\left[-\mathcal{G}_F^{-1}(k)\right]$$

$$= \ln\left(\det(-\mathcal{G}_F^{-1}(k))\right)$$

$$= \ln\left[(i\omega_n)^2 - (\varepsilon_k^2 + |a|^2)\right]$$

$$= \ln(i\omega_n - E_k) + \ln(i\omega_n + E_k)$$

$$\sum_k \mathrm{tr}\, \ln\left(-\mathcal{G}_F^{-1}(k)\right)$$

$$= \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \left[\ln(i\omega_n - E_k) + \ln(i\omega_n + E_k)\right]$$

Tidligere har vi vist at

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \ln(i\omega_n - x) = \ln\left(1 + e^{-\beta x}\right)$$

$$\Rightarrow \sum_x \mathrm{tr}\, \ln\left(-\mathcal{G}_F^{-1}(k)\right)$$

$$= \sum_{\vec{k}} \left[\ln\left(1 + e^{-\beta E_k}\right) + \ln\left(1 + e^{-\beta E_k}\right)\right]$$

$$\sum_x \frac{|a(x)|^2}{V} = \beta \cdot N \frac{|a|^2}{V}$$

$$Z_{MF} = e^{-\beta F_{MF}}$$

$$= e^{-\beta N \frac{|a|^2}{V} + \sum_{\vec{k}} \left[\ln\left(1+e^{-\beta E_k}\right) + \ln\left(1+e^{\beta E_k}\right) \right]}$$

$$\frac{F_{MF}}{N} = \frac{|a|^2}{V} - \frac{1}{\beta}\frac{1}{N}\sum_k \ln\left[\left(1+e^{\beta E_k}\right)\left(1+e^{-\beta E_k}\right)\right]$$

a: Bestemmes ved å minimalisere fri energi

$$\frac{\partial}{\partial a}\left(f_{MF}\right) = 0$$

$$\frac{2a}{V} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \frac{2a}{2E_k}\left(\frac{e^{\beta E_k}}{1+e^{\beta E_k}} - \frac{e^{-\beta E_k}}{1+e^{-\beta E_k}}\right) = 0$$

$$2a\left\{\frac{1}{V} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \frac{\tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right)}{2E_k}\right\} = 0$$

$$\boxed{\frac{1}{V} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \frac{\tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right)}{2E_k}}$$

BCS sin gap-ligning

Fordelen med vår formulering, er at det umiddelbart er klart hvordan vi skal inkorporere fluktuasjoner

Vi sjekker at $\frac{\partial f}{\partial a} = 0$ svarer til et minimum i fri energi, og ikke et maximum. Da må krumningen til f, ved det stasjonære punktet, være større enn null.

$$\left.\frac{\partial^2 f}{\partial a^2}\right|_{a=a_0} > 0,$$ hvor a_0 tilfredsstiller $\left.\frac{\partial f}{\partial a}\right|_{a=a_0} = 0$.

$$\frac{\partial^2 f}{\partial a^2} = \frac{\partial}{\partial a}\left\{2a\left(\frac{1}{V} - \frac{1}{N}\sum_k \frac{\tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right)}{2E_k}\right)\right\}$$

$$= 2\left(\frac{1}{V} - \frac{1}{N}\sum_k \frac{\tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right)}{2E_k}\right)$$

$$- 2a\,\frac{1}{N}\sum_k \frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{1}{2E}\tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right)\right)\frac{\partial E}{\partial a}$$

1. leddet er null når $\underline{\underline{a = a_0}}$

2. leddet gir

$$\frac{a^2}{N}\sum_k \frac{1}{E_k^3}\,\frac{1}{\cosh^2\left(\frac{\beta E_k}{2}\right)}\underbrace{\left(\sinh(\beta E_k) - \beta E_k\right)}_{>0}$$

$$\Rightarrow \left.\frac{\partial^2 f}{\partial a^2}\right|_{a=a_0} > 0$$ alltid! $\Rightarrow$ kun et ekstremum = minimum.

Dermed er løsningen til BCS sin gap-ligning, unik for tilfellet med kontakt-vekselvirkning

Middelfelt-Green's funksjon. Fysisk tolkning av sadelpunktet.

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi_\uparrow \\ \varphi_\downarrow^+ \end{pmatrix} ; \quad \psi^+ = (\varphi_\uparrow^+, \varphi_\downarrow)$$

Green's funksjon

$$G_F = -\langle \psi \psi^+ \rangle$$

$$= -\left\langle \begin{pmatrix} \varphi_\uparrow \\ \varphi_\downarrow^+ \end{pmatrix} (\varphi_\uparrow^+, \varphi_\downarrow) \right\rangle$$

$$= \begin{pmatrix} -\langle \varphi_\uparrow \varphi_\uparrow^+ \rangle & -\langle \varphi_\uparrow \varphi_\downarrow \rangle \\ -\langle \varphi_\downarrow^+ \varphi_\uparrow^+ \rangle & -\langle \varphi_\downarrow^+ \varphi_\downarrow \rangle \end{pmatrix}$$

$$G_F(k) = \begin{pmatrix} G_{11}(k) & F(k) \\ F^+(k) & G_{22}(k) \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{(i\omega_n)^2 - E_k^2} \cdot \begin{pmatrix} i\omega_n + \varepsilon_k & a \\ a^+ & i\omega_n - \varepsilon_k \end{pmatrix}$$

Green's funksjonen til fermion-systemet, i nærvær av statisk boson-felt, a, a^+, som <u>kreerer</u> og <u>annihilerer</u> elektronpar.

$\underline{\underline{a = a^+ = 0}}$

$$\mathcal{G}_F(\vec{k}, i\omega_n) = \begin{pmatrix} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k} & 0 \\ 0 & \frac{1}{i\omega_n + \varepsilon_k} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} G_{11} & 0 \\ 0 & G_{22} \end{pmatrix}$$

Partikkel-propagator:

$$G_{11} = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}$$

Hull-propagator:

$$G_{22} = \frac{1}{i\omega_n + \varepsilon_k}$$

Vanlig fri elektron gass.

$G_{11} =$ Partikkel-propagator (eksisterer også i nå $a=0$)

$G_{22} =$ Hull-propagator (eksisterer nå $a=0$)

$F =$

$F^+ =$

} Anomale Green's Funksjoner

F, F^+ er null, $a = a^+ = 0$

$F \sim a \; ; \quad F^+ \sim a^+$

Disse to funksjoner eksisterer ikke i den normale tilstanden, ettersom $\underline{\underline{a = a^+ = 0}}$ i normal tilstanden!

Nå er vi stand til, på en litt klarere måte, å tolke hva det betyr at $a \neq 0 \; ; \; a^+ \neq 0$

Legg merke til:

$$\boxed{\begin{array}{l} \langle \varphi_\downarrow \varphi_\uparrow \rangle \sim a \\ \langle \varphi_\uparrow^+ \varphi_\downarrow^+ \rangle \sim a^+ \end{array}}$$

NB!! Husk: Nå vi H-S dekoblet S_I, brukte vi leddene

$$a^+ \varphi_\downarrow \varphi_\uparrow + a \varphi_\uparrow^+ \varphi_\downarrow^+$$

a, a^+ er par-felt som er konjugert til ordensparametren

$$\langle \varphi_\downarrow \varphi_\uparrow \rangle, \quad \langle \varphi_\uparrow^+ \varphi_\downarrow^+ \rangle$$

(analogt tilfellet med et spinn-system i ytre magnetfelt. Da er magnet-feltet et felt som er konjugert til ordensparametren til spinn systemet, som er magnetiseringen, $\vec{M} \sim \vec{H}$)

Ordensparametren til en superleder er

$$\langle \varphi_\downarrow \varphi_\uparrow \rangle \sim a$$

$$\langle \varphi_\uparrow^+ \varphi_\downarrow^+ \rangle \sim a^+$$

Når disse er forskjellige fra 0, er det en symmetri i problemet som er spontant brutt. Gå tilbake til H:

$$H = \sum_x \varphi^x \varepsilon(\nabla) \varphi + V \sum_x \varphi^x \varphi \, \varphi^x \varphi$$

Denne modellen har en kontinuerlig symmetri:

$$\left.\begin{array}{l} \varphi(x) \to \varphi(x) e^{i\theta(x)} \\ H \to H \end{array}\right\} \Rightarrow U(1)\text{-symmetri}$$

Men:

$\langle \varphi_\downarrow \varphi_\uparrow \rangle$ kombineres ikke fasene.

Den går til

$$\langle \varphi_\downarrow \varphi_\uparrow e^{2i\theta} \rangle$$

Dersom fasen er helt ubestemt, vil dette midles til null!

$\langle \varphi_\downarrow \varphi_\uparrow \rangle \neq 0$ må bety at θ er bestemt, ∴ symmetrien er spontant brutt! $\langle \varphi_\downarrow \varphi_\uparrow \rangle$ er en ordensparameter.

Generelt:

> Når vi antar et sadelpunkt i et funksjonal-integral, og også antar at S_{eff} er minimum for endelige verdier av $\langle a \rangle$, $\langle a^+ \rangle$, er dette ekvivalent til å anta at en eller annen symmetri er spontant brutt, som oftest.

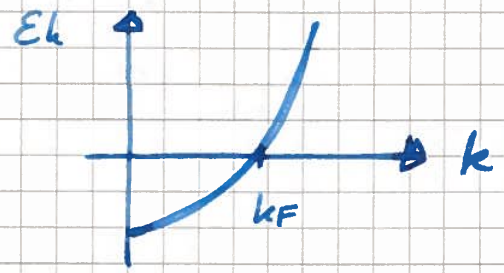
Derfor: For å velge hensiktsmessig diagonalisering, må vi velge „rett type" bosoner i H-S transformen. Dette valget er bestemt av den fysikken vi forsøker.

Spektret E_k

Konsekvensen av den brutte symmetrien over er at man får et gap i spektret

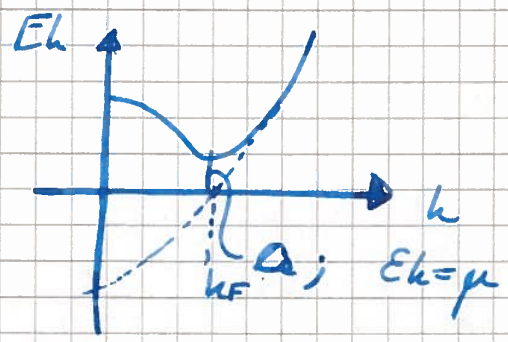
$a = 0$

$$H = \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_k - \mu)\, c_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma}$$



$a \neq 0$

$$H = E_0 + \sum E_k \left(\gamma_k^{+}\gamma_k - \eta_k^{+}\eta_k\right)$$



$a = a \neq 0 \Rightarrow$ null resistivitet og Meissner-effekt

$\Rightarrow$ $a \neq 0$: Superledning

NB!!

Vi startet med en Hamilton-operator definert for fermioner. Derfor innførte vi partisjons-funksjonen og effektiv virkning S (Lagrange-funksjonen)

$$H(\varphi^x, \varphi) \to \varphi^x \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + H(\varphi^x, \varphi)$$

$$= S_0 + S_I$$

Legg merke til at det dynamiske leddet $\varphi^x \frac{\partial \varphi}{\partial \tau}$ oppstår kun i fermion-sektoren.

Så H-S-dekomponerte vi S_I

$$e^{S_I} = \int \mathcal{D}a^+ \mathcal{D}a \, e^{-\frac{1}{V} a^+ a + a \varphi_\uparrow^x \varphi_\downarrow^x + a^x \varphi_\downarrow \varphi_\uparrow}$$

Men: Vi får ingen $a^+ \frac{\partial a}{\partial \tau}$-ledd. (a^+, a)-bosonene eksisterer ikke i Hamilton-formalismen, kun i Lagrange-formalismen. Derfor har de ingen egen dynamikk $a^+ \frac{\partial a}{\partial \tau}$. Dynamikken til a-bosonene er generert av fermionene, via $\mathrm{Tr}\ln(\mathcal{G}^{-1})$.

Litt om fluktuasjoner.

Senere skal vi komme tilbake til hvordan vi korrigerer mean-field approksimasjonen til $S_{eff}[a^+, a]$. Det kan vi for eks. gjøre ved å utvikle til Gaussisk orden (2. orden) i fluktuasjonene i bose-feltene a^+, a, rundt sadelpunktet.

Strukturen blir grovt sagt slik:

Innføre $A = \begin{pmatrix} \delta a^+ \\ \delta a \end{pmatrix}$; $A^+ = (\delta a, \delta a^+)$

$$S_{eff} \approx S_{MF} + \sum_q A^+ D^{-1}(q) A$$

$$Z \simeq e^{S_{MF} - \sum_q A^+ D^{-1} A} \int DA^+ DA \, e$$

$$\underline{\underline{Z = e^{S_{MF}} \, e^{-\mathrm{Tr} \ln D^{-1}}}}$$

D^{-1}: 2x2 matrise

Krav til stabilitet av sadelpunkt: D^{-1} positiv definit, dvs. D^{-1} må kun ha positive egenverdier.

$$Z = e^{-\beta F}$$

$$F = F_{MF} + \frac{1}{\beta} \operatorname{Tr} \ln D^{-1}$$

Nå har vi i prinsippet

korrigere mean-field-verdiene til a, a^*, ved å minimalisere m.h.p. $\underline{\underline{a, a^*}}$.

$$\frac{\partial F}{\partial a} = 0 = \frac{\partial F^{MF}}{\partial a} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{1}{\beta} \operatorname{Tr} \ln D^{-1}\right)}_{\text{Korreksjonsledd.}}$$

Det betyr at vi har fine fluktuasjons korreksjoner til T_c etc. Disse forventes vi å bli signifikante nei T_c blir stor. En slik fluktuasjons beregning har foreløpig ikke blitt gjennomført (oktober '96)

Hubbard-modellen ($U = \infty$)

$$H = -\sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}$$

$U = 0$: $H = \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma}$

Nærmeste nabo hopping : $\varepsilon_k = -2t \sum_{i=1}^{d} \cos k_i = -2t\gamma_k$

$0 < U < \infty$: Svært komplisert problem
Lite eller ingenting kjent,
$D > 0$

$U = \infty$: Da forenkler problemet sig litt, (men kan ikke løses eksakt)

$$H = -\sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma}$$

med en <u>føringsbetingelse</u> på hvert gitterpunkt, til enhver tid:

$$\sum_\sigma \hat{n}_{i\sigma} |\Psi\rangle = \sum_\sigma n_{i\sigma} |\Psi\rangle ; \quad \sum_\sigma n_{i\sigma} \leq 1$$

(Høyst ett fermion på gitterpunkt)

Denne type føringsbetingelse, representert ved ulikhet, er vanskelige å håndtere med.

NB!! Viktig å innføre ~~ifjerd~~!

Disse må innføres: Hubbard-operatorer

$$|\alpha, i\rangle : \quad \alpha \in 0, \sigma, 2$$

$$\sigma = \uparrow, \downarrow$$

Tom, enkelt-okkupert, eller dobbelt-okkupert tilstand

Definer:

$$X_i^{\alpha\beta} = |\alpha, i\rangle\langle\beta i|$$

$$\hat{O} = \sum_{\alpha\beta} |\alpha i\rangle\langle\alpha i|\hat{O}|\beta i\rangle\langle\beta i|$$

$$= \sum_{\alpha\beta} X_i^{\alpha\beta} \langle\alpha i|\hat{O}|\beta i\rangle$$

Eks:

$$c_{i\sigma} = \sum_{\alpha\beta} X_i^{\alpha\beta} \langle\alpha i|\hat{c}_{i\sigma}|\beta i\rangle$$

$$= X_i^{0\sigma} + X_i^{-\sigma 2}$$

$$c_{i\sigma}^{+} = X_i^{\sigma 0} + X^{2-\sigma}$$

$U = \infty$: Drop $X^{2,-\sigma}$, $X^{-\sigma,2}$

$$c_{i\sigma}^{+} = X_i^{\sigma 0}$$

$$c_{j\sigma} = X_j^{0\sigma}$$

Dette gjelder når dobbelt-okkuperte tilstander er projisert ut av Hilbert-rommet.

NB!!

Da blir Hubbard-modellen

$$H = -t \sum_{ij\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma}$$

Hopping med no-double occupancy constraint

Restriksjon på $c_{i\sigma}$, $c_{i\sigma}^{+}$ operatorer, men ikke

restr. på Hubbard ops

$\underline{\underline{X_i^{\sigma 0}}}$ Men problemet er nå komplisert

er det så at tilfredsstiller

Til gjengjeld tillfredsstiller

$X_i^{\alpha\beta}$ - operatorene

kompliserte komm. rels.

$$\left[X_i^{\alpha\beta}, X_j^{\eta\gamma}\right]_{\pm}$$

$$= |\alpha\beta\rangle_i \langle\beta|\eta\rangle_j \langle\gamma| \pm |\eta\rangle_j \langle\gamma|\alpha\rangle_i \langle\beta|$$

$$= \delta_{ij}\, \delta_{\beta\eta}\, X_i^{\alpha\gamma} \pm \delta_{ij}\, \delta_{\gamma\alpha}\, X_i^{\eta\beta}$$

$$= \delta_{ij} \left[\delta_{\beta\eta}\, X_i^{\alpha\gamma} \pm \delta_{\gamma\alpha}\, X_i^{\eta\beta}\right]$$

Repr. av X-operatorene

v.h.a. fermion/boson

operatorer:

Med disse mfr. har vi korrekte komm. rel. for X-op. dvs f, b-op er h.h.v. fermion og boson

$$|0i\rangle\langle 0i| = b_i^+ b_i$$

$$|\sigma i\rangle\langle 0i| = f_{\sigma i}^+ b_i = X_i^{\sigma 0}$$

$$|0i\rangle\langle \sigma i| = b_i^+ f_{\sigma i} = X_i^{0\sigma}$$

$$|\sigma i\rangle\langle \sigma i| = f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma}$$

$$H = -t \sum_{ij\sigma} f_{\sigma i}^+ b_i b_j^+ f_{\sigma j}$$

Fullstendighet:

$$\sum_\alpha |\alpha i\rangle\langle \alpha i| = 1$$

$$= X_i^{00} + \sum_\sigma X_i^{\sigma\sigma} = 1$$

$$= b_i^+ b_i + \sum_\sigma f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} = 1 \qquad \underline{\underline{U=\infty}}$$

Vi har sjekket at, dersom b_i, $f_{i\sigma}$ er harmoniske boson- og fermion operatorer, så tilfredsstiller korrekte komm. rel. for Hubbard-operatorene.

$$[X_i^{00}, X_j^{00}]_-$$

Dette er en mulig øving oppgave.

$$= [b_i^+ b_i, b_j^+ b_j]$$

$$= b_i^+ b_i b_j^+ b_j - b_j^+ b_j b_i^+ b_i$$

$$= \delta_{ij} b_i^+ b_j + b_i^+ b_j^+ b_i b_j$$

$$- \delta_{ij} b_j^+ b_i + b_j^+ b_i^+ b_j b_i$$

$$= \delta_{ij} (b_i^+ b_j - b_j^+ b_i) = \delta_{ij} (X_i^{00} - X_i^{00})$$

$$= 0$$

NB!!

$$H = -t \sum_{ij\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} \qquad i \neq j$$

Strengt det ikke korrekt!!

Husk $X_i^{\alpha\beta} X_j^{\eta\gamma} = \delta_{ij}\,\delta_{\beta\eta}\, X_i^{\alpha\gamma} = 0$; $i \neq j$

X_i - ops kan uttrykkes

lokale operatorer, men ikke ikke-lokalt!

Derfor:

$$H = -t \sum_{ij\sigma} c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma}$$

med kontraint

$$c_{i\sigma}^{+} = X_i^{\sigma 0}$$

$$c_{j\sigma} = X_j^{0\sigma}$$

Dette innfører representasjoner

$$X_{i\sigma}^{\sigma 0} = f_{i\sigma}^{+} b_i$$

$$X_j^{0\sigma} = b_j^{+} f_{j\sigma}$$

Dette, innført representasjoner:

Setter dette inn

$$H = -t \sum_{ij\sigma} f_{i\sigma}^{+} b_i\, b_j^{+} f_{j\sigma}$$

$$\sum_{\alpha} |\alpha i\rangle\langle \alpha i| = X_i^{00} + \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} =$$

$$b_i^{+} b_i + \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^{+} f_{i\sigma} = 1$$

Kommutator for X-operatorene:

$$[X_i^{\alpha\beta}, X_j^{\eta\gamma}]_\pm$$

$$= \delta_{ij}[\delta_{\beta\eta} X_i^{\alpha\gamma} \pm \delta_{\alpha\gamma} X_i^{\eta\beta}]$$

Vi introduserer kanoniske boson- og fermion-operatorer og uttrykker X-operatorene ved hjelp av <u>disse</u>

$$X_i^{00} = |0i\rangle\langle 0i|$$

$$\Leftrightarrow b_i^+ b_i$$

$$X_i^{\sigma 0} = |\sigma i\rangle\langle 0i|$$

$$\Leftrightarrow f_{i\sigma}^+ b_i$$

$$X_i^{0\sigma} = |0i\rangle\langle \sigma i|$$

$$= b_i^+ f_{i\sigma}$$

$$X_i^{\sigma\sigma'} = f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma'}$$

Vi kan kontrollere, at <u>disse</u>

$\cancel{[X_i^{00}, X_i^{\sigma' 0}]}$ f, b er h.h.v. kanoniske fermion- og boson

operatorer, så er komm. rels

for X-op. o.k.

$$[X_i^{0\sigma}, X_i^{\sigma' 0}]_+$$

$$= X_i^{0\sigma} X_i^{\sigma' 0} + X_i^{\sigma' 0} X_i^{0\sigma}$$

$$= \delta_{\sigma\sigma'} X_i^{00} + X_i^{\sigma'\sigma}$$

$$= \underline{\delta_{\sigma\sigma'} b_i^+ b_i + f_{i\sigma'}^+ f_{i\sigma}}$$

Bruk repr. for X-ene:

$$b_i^+ f_{i\sigma} f_{i\sigma'}^+ b_i + f_{i\sigma'}^+ b_i b_i^+ f_{i\sigma}$$

$$= f_{i\sigma'}^+ f_{i\sigma} (1 + b_i^+ b_i)$$

$$+ b_i^+ b_i (\delta_{\sigma\sigma'} - f_{i\sigma'}^+ f_{i\sigma})$$

$$= \delta_{\sigma\sigma'} b_i^+ b_i + f_{i\sigma'}^+ f_{i\sigma}$$

$$= \underline{\delta_{\sigma\sigma'} X_i^{00} + X_i^{\sigma'\sigma}} \quad \checkmark$$

$$X_i^{\alpha\beta} X_j^{\gamma\delta} = \delta_{ij} \delta_{\beta\gamma} X_i^{\alpha\delta}$$

Vi ønsker å konvertere dette til en <u>likhet</u>, som vi kan finne metode til å handle med (som vi skal se)

For å få til dette, innfører vi et hjelpe-boson, b_i som holder rede på når gitterpunktet i er <u>ubesatt</u>.

$$c_{i\sigma}^{+} \Leftrightarrow d_{i\sigma}^{+} b_i \; ; \; c_{i\sigma} \Leftrightarrow d_{i\sigma} b_i^{+}$$

Men gjør dette via Hubbard X-operatorer

$d_{i\sigma}^{+}$: Kreasjons-operator for et fermionisk gitterpunkt i

b_i^{+}: Kreasjonsoperator for et ubesatt gitterpunkt.

$d_{i\sigma}^{+} d_{i\sigma}$ = # fermioner på gitterpunkt i

Enten er gitterpunktet besatt, 1 fermion, eller ubesatt. Dette uttrykkes ved betingelsen

$$\sum_{\sigma} d_{i\sigma}^{+} d_{i\sigma} + b_i^{+} b_i = 1$$

som altså blir en fermionbetingelse uttrykt ved en <u>likhet</u>.

Mer kompakt

$$c_{i\sigma}^{+} = d_{i\sigma}^{+} b_i \qquad c_{i\sigma}^{+} \Leftrightarrow X_i^{\sigma 0} \Leftrightarrow d_{i\sigma}^{+} b_i$$

$$c_{j\sigma} = b_j^{+} d_{j\sigma} \qquad c_{j\sigma} \Leftrightarrow X_j^{0\sigma} \Leftrightarrow b_j^{+} d_{j\sigma}$$

Sjekk at kommutasjonsrel. O.K. for X.
Dermed satt inn i Hubbard-modell. Så at som

$$H = -\sum_{i,j,\sigma} t_{ij} d_{i\sigma}^{+} b_i b_j^{+} d_{j\sigma}$$ fri teori!

Ekstra betingelse, som gjør problemet vanskelig:

$$\sum_{\sigma} d_{i\sigma}^{+} d_{i\sigma} + b_i^{+} b_i = 1$$

Definer: $Q_i \equiv \sum_{\sigma} d_{i\sigma}^{+} d_{i\sigma} + b_i^{+} b_i$

Føringsbetingelsen blir da:

$$Q_i = 1$$

Abrikosov's trick:

$$\prod_i \prod_{\tau} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\lambda_i}{2\pi} e^{-i\int_0^{\beta} \lambda_i(\tau)(Q_i - 1)\, d\tau} = \prod_{i,\tau} \delta_{Q_i,1}$$

Partisjons-funksjonen er gitt ved:

$$Z = \int D\psi\, D\psi\, Db^{+} Db \underbrace{\left(\prod_i \prod_{\tau} \delta_{Q_i,1}\right)}_{\text{Faktor som}} e^{S}$$

NB!! Gir τ-integr.

gjør at funksjonal-integralet er begrenset til å inneholde tilstander hvor gittepunkt ikke er dobbelt okkupert,

$$S = -\sum_{i,\sigma} \int_0^\beta d\tau \Big[\underbrace{b_i^* \frac{\partial b_i}{\partial \tau}}_{\text{NB!!}} + \varphi_{i\sigma}^* \frac{\partial \varphi_{i\sigma}}{\partial \tau} \Big]$$

$$+ \sum_{i,j,\sigma} \int_0^\beta d\tau \; \varphi_{i\sigma}^*(\tau)\, b_i(\tau)\, t_{ij}\, b_j^*(\tau)\, \varphi_{j\sigma}(\tau)$$

<u>NB!!</u> $b_i^* \frac{\partial b_i}{\partial \tau}$ - leddene har vi nå med om, fordi b-bosonene eksisterer også i <u>Hamilton-formuleringen</u> av teorien.
Dette er en vesentlig forskjell fra det vi hadde med H-S dekobling, fordi b-bosonene har egen, intrinsikk dynamikk.

$$S' = -\sum_i \int_0^\beta d\tau \; b_i^* \frac{\partial b_i}{\partial \tau}$$

$$- \sum_{i,j,\sigma} \int_0^\beta d\tau \; \varphi_{i\sigma}^* \left(\partial_\tau \delta_{ij} + t_{ij}\, b_i\, b_j^* \right) \varphi_{j\sigma}$$

Innfør Abrikosov's trick: (fra hov τ-vedi)

$$Z = \int D\varphi^* D\varphi\, Db^* Db\, D\lambda\; e^{S}$$

$$\mathcal{S} = -\sum_i \int_0^\beta d\tau\, b_i^+ (\partial_\tau + i\lambda_i) b_i + i \sum_i \int_0^\beta \lambda_i\, d\tau$$

$$\underbrace{- \sum_{ij\sigma} \int_0^\beta d\tau\, \varphi_{i\sigma}^* \left[\delta_{ij} (\partial_\tau + i\lambda_i) - t\, b_i b_j^* \right] \varphi_{j\sigma}}_{\text{Gaussisk fermion-sektor.}}$$

Nå kan fermion-sektoren integreres ut eksakt!

$$Z = \int \mathcal{D}b^+ \mathcal{D}b\, \mathcal{D}\lambda\, e^{S_{eff}[b^+, b, \lambda]}$$

$$S_{eff}[b^+, b, \lambda]$$

$$= -\sum_i \int_0^\beta d\tau\, b_i^+ (\partial_\tau + i\lambda_i) b_i + i \sum_i \int_0^\beta \lambda_i\, d\tau$$

$$+ \mathrm{Tr} \ln \mathcal{G}^{-1}$$

Eksakt boson teori

$$\mathcal{G}^{-1} = (\partial_\tau + i\lambda_i)\, \delta_{ij} - t_{ij}\, b_i b_j^+$$

Igjen har vi konvertert et fermion system (ekstrakt korrelert) til et vekselvirkende boson system.

Den resulterende boson-teorien er igjen så komplisert at eksakt beregning av Z blir altfor vanskelig. Vi tyr igjen til stasjonærpunkt-approximasjon

$$\left.\begin{aligned} b_i &= b \\ i\lambda_i &= \lambda \end{aligned}\right\}$$ Det blir klart nedenfor hva den fysikalske betydningen av dette er.

$$\mathcal{G}^{-1} = (\partial\tau + \lambda)\,\delta_{ij} - |b|^2 t_{ij}$$

Igjen beregner vi $\mathrm{Tr}\ln\mathcal{G}^{-1}$ ved å Fourier-transformere $\mathcal{G}^{-1}$

$$\mathcal{F}(\delta_{ij}) \Rightarrow 1$$

$$\mathcal{F}(t_{ij}) \Rightarrow \tilde{\gamma}_k = 2t\underbrace{\sum_i \cos k_i}_{\gamma_k}$$

$$\partial\tau \Rightarrow -i\omega_n$$

$$\mathrm{Tr}\ln\mathcal{G}^{-1}$$

$$= \frac{1}{\beta}\sum_k\sum_{\omega_n} \ln(-i\omega_n + \varepsilon_k)$$

$$= \frac{1}{\beta}\sum_k\sum_{\omega_n} \ln(i\omega_n - \varepsilon_k)$$

$$\varepsilon_k = -2t\,b^2\sum_i \cos k_i + \lambda$$

Dersom vi hadde inkludert kjemisk potensial μ fra start:

$$\varepsilon_k = -2t\,b^2\gamma_k - (\mu+\lambda)$$

$$S^{MF}_{eff} = -N\beta b^2\lambda + N\beta\lambda + \sum_k \ln(1+e^{-\beta\varepsilon_k})$$

$$f^{MF} = (b^2+1)\lambda - \frac{1}{N\beta}\sum_k \ln(1+e^{-\beta\varepsilon_k})$$

Mean-field:

$$\mathcal{G}^{-1}(k, i\omega_n) = -i\omega_n + \varepsilon_k$$

$$\mathcal{G}_F(k, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k} = -\langle \varphi \varphi^+ \rangle$$

$$\varepsilon_k = -2t\, b^2 \gamma_k - (\mu + \mu)$$

$\mathcal{G}_F(\vec{k}, i\omega_n)$:

Green's funksjon for fri kvasipartikkel med renormalisert båndstruktur (mindre båndbredde, korrelasjons effekt) og renormalisert kjemisk potensial.

Begge typer renormalisering her sitt opphav i

„the no double-occupancy constraint".

Stasjonær-punkt betingelser

$$\frac{\partial f^{MF}}{\partial b^2} = 0 \Leftrightarrow -\lambda + \frac{1}{N}\sum_k \frac{e^{-\beta\varepsilon_k}}{1+e^{-\beta\varepsilon_k}} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial b^2} = 0$$

$$\frac{\partial f^{MF}}{\partial \lambda} = 0 \Leftrightarrow 1+b^2 + \frac{1}{N}\sum_k \frac{e^{-\beta\varepsilon_k}}{1+e^{-\beta\varepsilon_k}} \cdot \underbrace{\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \lambda}}_{+1} = 0$$

I tillegg har vi brukt:

$$n = -\frac{\partial f^{MF}}{\partial \mu} = \frac{1}{N}\sum_k f(\varepsilon_k)$$; # fermioner pr gitterpunkt.

$\Rightarrow \quad n = 1 - b^2 \Rightarrow \quad n + b^2 = 1$ Constraint!

Se på spektret

$$\varepsilon_k = -2t\, b^2 \gamma_k - (\lambda + \mu)$$

Sammenlign med spektret for fri-teori: $(U=0)$

$$\varepsilon_k = -2t\, \gamma_k - \mu \qquad (b=1,\ \lambda=0)$$

λ: Renormalisering av kjemisk potensial for, i gjennomsnitt, å tilfredsstille, $\langle Q_i \rangle = 1$

b^2: Renormalisering av båndbredden, korrelasjonseffekt.

$Q_i = n + b^2 = 1$

$n = 1$: Helvfylt bånd

$b^2 = 0$

$\varepsilon_k = -(\lambda + \mu)$

Ingen k-avhengighet ⇒:

lokalisute fermioner.

Dermed har vi, i mean-field teori, funnet at systemet $U = \infty$ ved halvfylt bånd er en isolator.

Mean-field teorien predikterer også at $b^2 > 0$; $n < 1$

⇒: når systemet dopes bort fra halv-fylning. Dermed blir, i middelfelt teori, systemet et metall så fort som vi beveger oss bort fra halvfylning. Nær halvfylning er båndet meget smalt,

dvs. kvasipartiklene er svært tunge

$b \to 0 \Rightarrow m^* \to \infty$

„Effektive masse": $m^* \sim \frac{1}{b^2}$

⇒: metall-isolator overgang (Brinkman-Rice)

Ved ½-fylt bånd er modellen en veldig enkel isolator. Fiks. reduserer den seg til Heisenberg modellen

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad \text{fordi}$$

$$J \sim \frac{t^2}{U} \to 0 \; ; \; U \to \infty$$

Spinn-deg. grunntilstand $n = 1$

$$S_{eff} = -\sum_i \int_0^\beta d\tau \; b_i^+ (\partial_\tau + i\lambda_i) b_i + i \sum_i \int_0^\beta d\tau \; \lambda_i(\tau)$$

$$+ \mathrm{Tr} \ln(G^{-1})$$

$$S_{eff}^{MF} = -N\beta (b^2 - 1)\lambda + \sum_{\vec{k}} \ln\left(1 + e^{-\beta \varepsilon_k}\right)$$

$$\varepsilon_k = -2t b^2 \gamma_k - (\lambda \mp \mu)$$

Igjen gjør det enkelte uttrykket det mulig for oss å gjøre korreksjoner til mean-field teori. Vi kommer kanskje tilbake til dette.

I denne sadelpunkt approximasjonen har vi $\langle b \rangle \neq 0$. Se på Hamilton operatoren

$$H = -\sum_{i,j,\sigma} t_{ij}\, d_{i\sigma}^{+}\, b_i\, b_j^{+}\, d_{j\sigma}$$

Her er ingen global symmetri brutt, fordi selv om

$$b_i \to b_i e^{i\theta}$$

så kompenserer dette av

$$b_j^{+} \to b_j^{+} e^{-i\theta}$$

slik at

$$H \to H$$

Altså er $U(1)$ (global) symmetri ikke brutt, når $b \neq 0$.

Derimot har systemet, ved innføringen av bosonene b, b^{+}, fått en større symmetri gruppe enn den opprinnelige H, definert ved <u>lokal</u> $U(1)$-symm.

$$\left.\begin{aligned} d_{i\sigma} &\to d_{i\sigma} e^{i\varphi_i} \\ b_i &\to b_i e^{i\varphi_i} \end{aligned}\right\} \Rightarrow H \to H$$

Ved sadelpunktet er det denne <u>lokale</u> symmetrien som er brutt, fordi boson-feltet b har fått en endelig forventningsverdi $\langle b \rangle \neq 0$.

Hadde den lokale $U(1)$-symmetrien ikke vært spontant brutt, ville $\langle b \rangle = 0$, p.g.a. fasefluktuasjoner assosiert med symmetrien.

$\langle b \rangle$ har igjen gis en tolkning som en ordensparameter, <u>men for hva</u>? For å svare på dette, ser vi, som for superledere, igjen på spektret.

$$E_k = -2t\, b^2 \gamma_k - (\lambda + \mu)$$

$b \neq 0 \Rightarrow E_k$ har dispersjon

$b = 0 \Rightarrow E_k$ k-uavh. $\Rightarrow$ lokaliserte hvesipartikler i problemet, ∴ systemet er isolator

$$\boxed{b: \text{ordensparameter for metall}}$$

Ekvivalent betraktning:

Den lokale $U(1)$-invariansen innebærer at vi har antallskonservering for partikler, lokalt. Dette må bety at partiklene er lokalisert. Dersom vi går tilbake til opprinnelig H,:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^{+} c_{i\sigma}$$

ser vi, at så lenge hopp-leddet er oppfylt, eksisterer ikke den lokale $U(1)$-invariansen. Så lenge fermionene er mobile, er altså den lokale $U(1)$-invariansen brutt.

Dersom hopp-leddet ikke er oppfylt, som betyr lokaliserte fermioner, har systemet lokal $U(1)$-invarians. Igjen ser vi konklusjonen at brutt lokal $U(1)$-invarians betyr at fermion-antallet lokalt ikke er konservert, som betyr at de er mobile; altså metallisk system.

$$\boxed{\begin{array}{l} \langle b \rangle \neq 0 \Rightarrow \text{brutt lokal } U(1)\text{-inv.} \\ \Rightarrow \langle b \rangle \text{ ordensparameter for metall.} \end{array}}$$

Generelt har konduktiviteten til et translasjons-invariant system følgende form:

$$\sigma(\omega) = D\,\delta(\omega) + \sigma_{reg}(\omega)$$

Altså: Et translasjonsinvariant system har <u>endelig</u> d.c. ledningsevne.

D kalles ofte <u>ledningsstivheten</u> til systemet, eller ofte også <u>Drude-vekten</u>.

I vår modell finner vi

$$D \sim b^2$$

For mange år siden foreslo Walter Kohn å bruke Drude-vekten som ordensparameter for et metallisk system (et system med non-zero Drude vekt)

Eksempelet vårt viser at dette forslaget stett ikke er så enkelt.

Det å beskrive en metall-isolator <u>forovergang</u> er et notorisk vanskelig problem.

Det at vi finner dette i en så enkel approximasjon som vi brukte ovenfor, viser om det fantastiske potensialet som funksjonal integral teknikken har, spesielt i sterkt korrelerte systemer.

Fri teori ved halvfylt bånd er et godt metall, ikke en isolator. Det ville vært helt håpløst å prøve å finne denne overgangen fra metall til isolator i perturbasjons-teori, på samme måte som det ville vært håpløst å detektere superledn - metall overgang i perturbasjonsteori rundt fri elektron gass.

<u>NB!!</u> Legg merke til at denne mean-field teorien predikterer at selv for $U = \infty$,

er Hubbard-modellen, bort fra halv-fylt bånd, alltid er Fermi-væske. I én dimensjon vet vi at dette er galt, fordi ethvert vekselvirkende én-dimensjonalt system alltid er en Luttinger-væske, som er en kvante-fluid uten karakteristiske fermion én-partikkel eksitasjoner. I én dimensjon er vekselvirkninger alltid effektive, p.g.a. restriksjoner i kinematikk: Partikler kan ikke passere hverandre uten å kollidere. I høyere dimensjoner kan elektroner unngå hverandre, og en Fermi-væske er mulig. I tre dimensjoner er det sannsynlig at vår mean-field teori er kvalitativt korrekt. Det er nye som tyder på at to-dimensjonale sterkt korrelerte fermion-systemer kan fremvise ikke-Fermi væske oppførsel. Så her er neppe overstående mean-field teori siste ord i saken! Det er mulig at vi senere skal komme tilbake til hva fluktuasjoner gjør, i denne modellen. De forårsaker vekselvirkning mellom kvasipartikkel fermioner vi fant på mean-field nivå; Resultat: ødeleggelse!

Constraint local

$Q_i(\tau) = 1$

$$\prod_{i,\tau} \delta\, Q_i(\tau), 1$$

$$= \prod_{i,\tau} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\lambda_i(\tau)}{2\pi}\, e^{-i \int_0^\beta \sum_i d\tau\, \lambda_i(\tau)(Q_i - 1)}$$

Enforce constraint in a different way, by using the Abrikosov trick

Two limits of the Hubbard model

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}]$$

a) $U = \infty, \quad t \neq 0$

$$\left.\begin{aligned} c_{i\sigma} &= b_i^{+} f_{i\sigma} \\ c_{i\sigma}^{+} &= b_i f_{i\sigma}^{+} \end{aligned}\right\} \text{Slave-bosons Pseudofermions.}$$

1) Write down H in slave-boson representation. What is the constraint on the system? Physical interpretation

2) Write down the partition function as a functional integral over pseudo-fermions, slave-bosons, and Lagrange multiplier fields enforcing the necessary constraints.

3). Integrate out the fermions to give an effective purely bosonic action.

4. Give the mean-field expression for the quasiparticle band, with physical interpretation of the result.

b) $U \neq 0, \quad t = 0 \Rightarrow$

Partition function is a product of N single-site partition functions

$$Z = \int Dc_\sigma^+ Dc_\sigma \, e^{-S}$$

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[c_\sigma^+ (\partial_\tau - \mu) c_\sigma + U n_\uparrow n_\downarrow \right]$$

1. Integrate out the $c_\downarrow$ - sector and find an effective action for up-spins.

2. Find Z ~~exactly~~ exactly

Formula: $\sum_n \ln(i\omega_n - x) = \ln(1 + e^{\beta x})$

$$\int Dc^+ Dc \, e^{-\int_0^\beta d\tau \, c^+ A c} = \det(A)$$

$$= e^{\mathrm{Tr}(\ln(A))}$$

b) $U \neq 0$, $t = 0 \Rightarrow N$ single-site partition functions, of the form

$$Z = \int D c_\sigma^+ \, D c_\sigma \, e^{-S}$$

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[c_\sigma^+ (\partial_\tau - \mu) c_\sigma + U n_\uparrow n_\downarrow \right]$$

$$n_\sigma = c_\sigma^+ c_\sigma \qquad c_\sigma(0) = -c_\sigma(\beta)$$

as usual.

1. Integrate out $\downarrow$-spin fermions to find an effective $\uparrow$-spin action.

$$S_{eff} = \int_0^\beta d\tau \, c_\uparrow^+ (\partial_\tau - \mu) c_\uparrow$$

$$- \ln \left[\det (\partial_\tau - \mu + U n_\uparrow) \right]$$

Here

$$\det (\partial_\tau - \mu + U n_\uparrow) = \prod_n \lambda_n$$

2. Eigenvalues of the matrix

$$(\partial_\tau - \mu + U n_\uparrow) \psi_n = \lambda_n \psi_n$$

$$\partial_\tau \psi_n = (\lambda_n + \mu - U n_\uparrow) \psi_n$$

$$\psi_n(\tau) = \psi_n(0) \, e^{\int_0^\tau d\tau' [\lambda_n + \mu - U n_\uparrow(\tau')]}$$

$$\psi_n(\tau) = \psi_n(0)\, e^{\tau(\lambda_n+\mu) - U\int_0^\tau d\tau'\, n_\phi(\tau')}$$

$$\psi_n(\beta) = -\psi_n(0)$$

$$-1 = e^{\underbrace{\beta(\lambda_n+\mu) - U\int_0^\beta d\tau\, n_\phi(\tau)}_{\pm 2\pi i\,(2n+1)}} \; ; \; n = 0, \pm 1$$

$$\beta(\lambda_n+\mu) - U\int_0^\beta d\tau\, n_\phi(\tau) = -\pi i\,(2n+1)$$

$$\lambda_n = -\mu - i\omega_n + \frac{U}{\beta}\int_0^\beta d\tau\, n_\phi(\tau)$$

$$S_{eff} = \int_0^\beta d\tau\, c_\phi^+ (\partial_\tau - \mu)\, c_\phi$$

$$- \sum_n \ln\left(-i\omega_n - \mu + \frac{U}{\beta}\int_0^\beta d\tau\, c_\phi^+(\tau)\, c_\phi(\tau)\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned} \text{Bmk} \quad & \sum_n \ln(-i\omega_n - x) \\ &= \ln\left(1 + e^{+\beta x}\right) \end{aligned}}$$

$$S_{eff} = \int_0^\beta d\tau\, c_\phi^+ (\partial_\tau - \mu)\, c_\phi$$

$$- \ln\left[1 + e^{+\beta\left(\mu - \frac{U}{\beta}\int_0^\beta d\tau\, c_\phi^+(\tau)\, c_\phi(\tau)\right)}\right]$$

Formulas:

a) $$\sum_n \ln(-i\omega_n - x) = \ln(1+e^{\beta x})$$

b) $$\int \mathcal{D}c^+ \mathcal{D}c \, e^{-\int_0^\beta d\tau \, c^+(\partial_\tau - x)c}$$

$$= 1 + e^{\beta x}$$

$$Z = \int D c_\phi^\dagger \int D c_\phi \, e^{-\int_0^\beta d\tau \, c_\phi^\dagger (\partial_\tau - \mu) c_\phi}$$

$$\cdot \left[1 + e^{\beta\mu - U \int_0^\beta d\tau \, c_\phi^\dagger(\tau) c_\phi(\tau)} \right]$$

$$= \underbrace{1 + e^{\beta\mu}}_{Z_0}$$

$$+ e^{\beta\mu} \int D c_\phi^\dagger D c_\phi \, e^{-\int_0^\beta d\tau \, c_\phi^\dagger (\partial_\tau - \mu + U) c_\phi}$$

$$= 1 + e^{\beta\mu} + e^{\beta\mu} \left(1 + e^{\beta(\mu - U)} \right)$$

$$Z = \underline{\underline{\left(1 + 2 e^{\beta\mu} + e^{\beta(2\mu - U)} \right)^N}}$$

Brutte, kontinuerlige symmetrier. Goldstone-modus

Begge de to foregående eksemplene, BCS-modellen og Hubbard-modellen, har vist at et system hvor Hamilton-operatoren er invariant under en kontinuerlig symmetri gruppe (U(1) i begge tilfeller) tenger ikke grunntilstanden, som systemet selv velger, å respektere denne samme symmetrien.

Systemene fremviser da brutte symmetrier, og fordi de finner på dette "på egen hånd", sies systemene å ha spontant brutte (kontinuerlige) symmetrier.

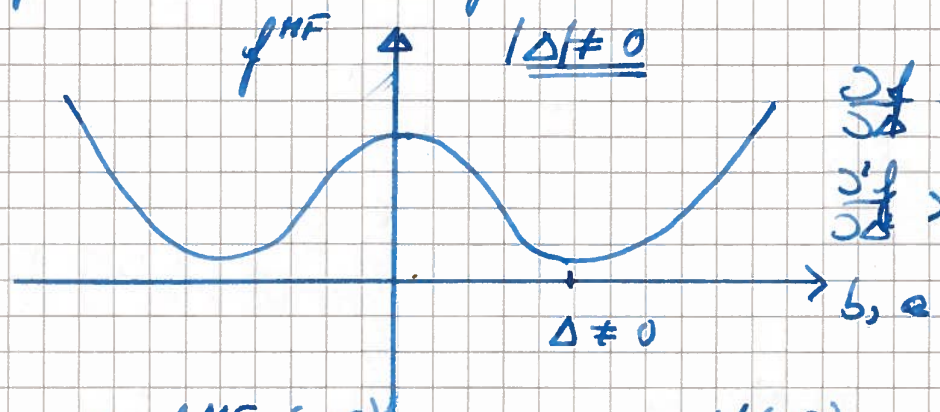
Vi skal kort se litt nærmere på en viktig konsekvens av en kontinuerlig spontant brutt symmetri. (Det følgende gjelder altså ikke dersom den spontant brutte symmetrien er diskret, som i Ising-modellen).

BCS-modellen:

$$f^{MF}(a^+, a) = f(|a|^2) \qquad \langle a^+\rangle \neq 0, \quad \langle a\rangle \neq 0$$

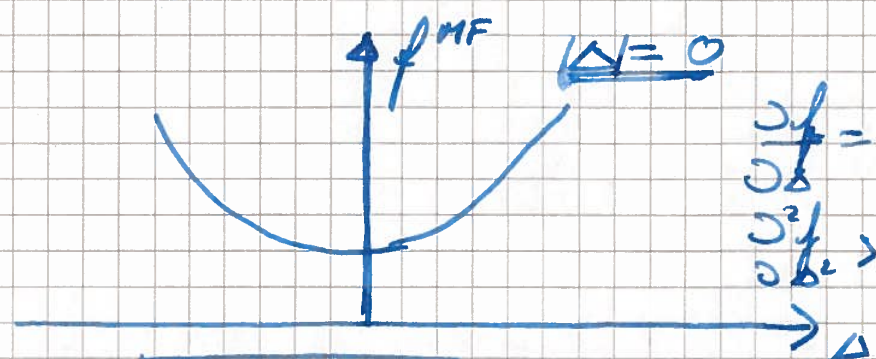
$U = \infty$ Hubbard-modellen

$$f^{MF}(b^+, b) = f(|b|^2)$$



$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \Delta} &= 0 \\ \frac{\partial^2 f}{\partial \Delta} &> 0 \end{aligned}\right\} |\Delta| \neq 0$$

$$\frac{\partial f^{MF}(\Delta^2)}{\partial \Delta} = 2\Delta\, f'(\Delta^2)$$



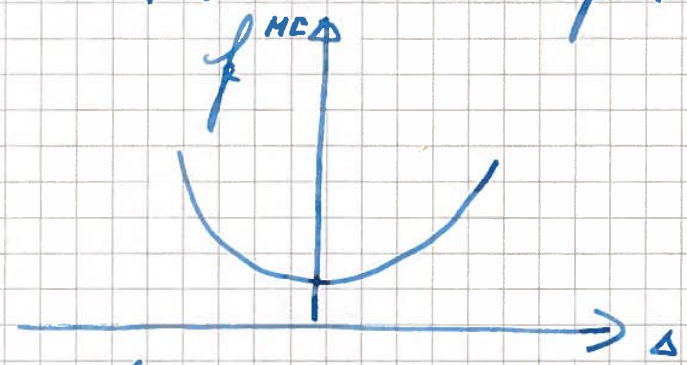
$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \Delta} &= 0 \\ \frac{\partial^2 f}{\partial \Delta^2} &> 0 \end{aligned}\right\} \Delta = 0$$

$$\boxed{|\Delta| = |a|, |b|}$$

Vi har satt at både $\langle a\rangle$ og $\langle b\rangle$ generelt er kompleksen ordensparametre. Dermed kan vi betrakte f^{MF} som en funksjon av en kompleks variabel, men slik at f^{MF} er uavhengig

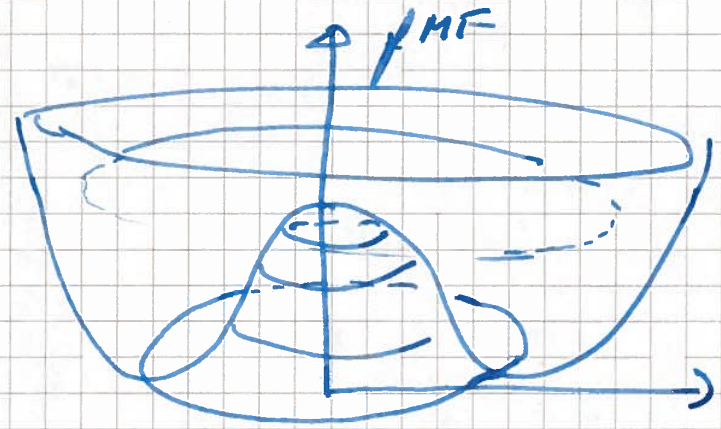
av fasen til ordensparametern.

Nå $|\Delta| = 0$ ved f^{MF}_{min}



blir fasen udefinert når f^{MF} er minimal.

Når $|\Delta| \neq 0$ for f^{MF}_{min}, har vi en litt annen situasjon.



Minimumet i fri energi er uendelig degenerert, fordi

$$f^{MF}(\Delta, \Delta^*)$$

$$= f^{MF}(|\Delta|, \varphi)$$

er uavhengig av φ

$$\Delta = |\Delta| e^{i\varphi}$$

Dermed ser vi at fase-fluktuasjon koster null energi. Amplitude fluktuasjoner koster energi:

$|\Delta|$-amplitude fluktuasjoner } „Longitudinale" fluktuasjoner

φ-fluktuasjoner: „Transversale" fluktuasjoner.

$|\Delta|$-fluktuasjonene sies å være massive.

φ-fluktuasjonene sies å være masseløse.

Masseløse fluktuasjoner:
Goldstone-moder.
En dårlig uttrykksmåte på virkningen:

Vi har sett at en brutt symmetri innebærer at det finnes Goldstone-moder

I vårt tilfelle, hadde ordensparameteren 2 komponenter:

$$\Delta = |\Delta| e^{i\varphi}$$

Amplitude, fase.

$|\Delta| \neq 0 \Rightarrow$ 1 Goldstone-mode: φ-fluktuasjoner.

Generelt, for en n-komponent ordensparameter $\underline{\Delta}$:

$$|\Delta| \neq 0 \Rightarrow$$

vi får <u>n-1</u> <u>Goldstone-moder</u>

Tilstedeværelsen av Goldstone moder gjør det til symmetrisk problematisk å definere en fluktuasjons-beregning rundt stasjonære-punkter, fordi Goldstone-modene gjør et minst ett av egenverdiene til fluktuasjons-propagatoren her egenverdi $= 0$

$$S = S^{MF} + \mathrm{Tr} \ln D^{-1}$$

$$Z = e^{S^{MF}} \frac{1}{\det D^{-1}}$$

$$D^{-1} = \prod_i \lambda_i \quad ; \quad \lambda_1 = 0 \,!$$

For å kunne snakke om små fluktuasjoner mot en middelfelt-tolk, er det selvsagt uholdbart med et slikt problem. Det viser seg at dette bare er et tilsynelatende problem som kan unngås, som vi nå skal se.

Vi skal se på Gaussiske fluktuasjoner mot en spontant brutt, kontinuerlig symmetri.

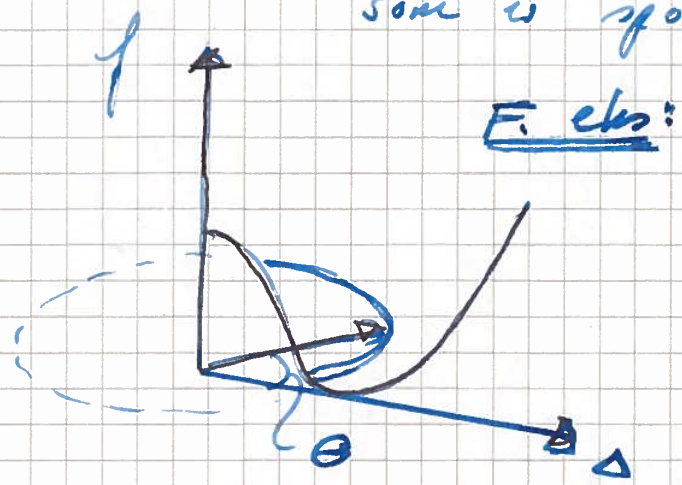
Effektiv action spesifiseres ikke mer vi se for enkelhets skyld på et mett felt med mett rotasjonsinvarians (F. eks. en X-Y-modell, hvor spinnene kan peke hvor som helst i et x-y plan. Det understreches likevel at diskusjonen er generell)

$$Z = \int D\varphi \, e^{iS[\varphi]}$$

$$\frac{\delta S}{\delta \varphi} = 0 \quad \text{for} \quad \underline{\underline{\varphi = \varphi_0}}$$

φ er funksjon av $x = (\vec{x}, \tau)$

$\underline{\varphi_0}$: Inneholder en parameter θ, som er en parameter som beskriver symmetritransformasjonen til symmetrien som er spontant brutt



F. eks:

Utvikling av S til Gaussisk orden

$$Z = e^{S_{MF}} \int D\varphi \, e^{-\frac{1}{2}\sum_{x,y} (\varphi-\varphi_0)\cdot A \cdot (\varphi-\varphi_0)}$$

$$A = \frac{\delta^2 S}{\delta\varphi_0(x)\,\delta\varphi_0(y)}$$

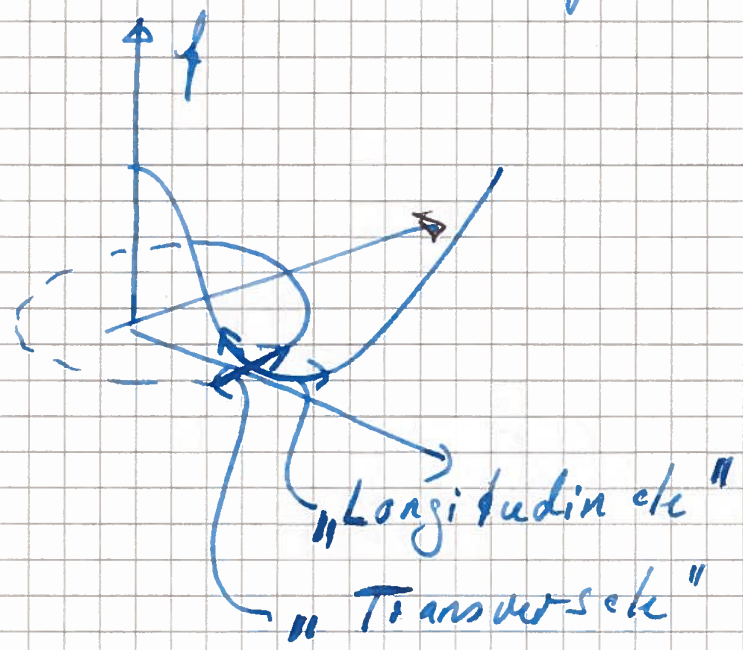
Naivt blir dette:

$$Z = e^{S_{MF}} \frac{1}{\sqrt{\det A}}$$

Men p.g.a. Goldstone-moden, diverger fluktuasjonene, til symmetrien!

Det ser dermed ut som om ethvert forsøk på å gjøre middelfelt-teori når symmetrien som brytes er kontinuerlig er dømt til å mislykkes. Likevel vet vi at f.eks. middelfelt-approximasjonen for BCS fungerer utmerket! Det må være en grunn for dette.

For å unngå divergensen, er ideen å splitte opp fluktuasjoner i „longitudinale" og „transversale" komponenter



$$A = \frac{\delta^2 S}{\delta\varphi_0(x)\,\delta\varphi_0(y)}$$ må diagonalisers

for å finne fluktuasjons-korreksjonene.

Problemet er at det finns egenverdier $= 0$. Tilhørende egenvektorer: Goldstone-moder

Goldstone moder er altså komponenter i fluktuasjons-vektoren $\varphi(x) - \varphi_0(x, \theta)$ med egenverdier lik null!

$$\left.\begin{aligned} \vec{A} \cdot \vec{x} &= \lambda \vec{x} \\ \vec{A} \cdot \vec{x}_G &= 0 \\ \vec{A} \cdot \vec{x}_\perp &\neq 0 \end{aligned}\right\}$$

Egenmoder som tilhører forskjellige egenverdier, er ortogonale.

$$\underline{\underline{\vec{x}_\perp \cdot \vec{x}_G = 0}}$$

<u>„Indre-produkt"</u>: $\int dx \, (\varphi(x) - \varphi_0(x))_\perp \cdot (\varphi(x) - \varphi_0(x))_G$

Ved stasjonær-punktet, har vi (uavhengig av verdien på θ):

$$\frac{\delta S}{\delta \varphi_0(x, \theta)} = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\delta S}{\delta \varphi_0(x, \theta)} \right) = 0$$

$$= \int dy \, \frac{\delta^2 S}{\delta \varphi_0(x) \, \delta \varphi_0(y)} \cdot \frac{\partial \varphi_0(y, \theta)}{\partial \theta} = 0$$

$$= \int dy \; A(x,y) \frac{\partial \varphi_0(y,\theta)}{\partial \theta} = 0$$

$$= \vec{A} \cdot \underbrace{\frac{\partial \vec{\varphi}_0}{\partial \theta}}_{= \vec{X}_G \; !} = 0$$

Dermed har vi identifisert Goldstone-modus.

<u>Goldstone-modes:</u> $\dfrac{\partial \varphi_0(x,\theta)}{\partial \theta}$

Neste steg er å splitte opp fluktuasjonene i Goldstone-modes og komponentene "vertikale" på dette.

Innfør:

$$f(\theta) \equiv \int dx \; \overbrace{\frac{\partial \varphi_0(x)}{\partial \theta}}^{\text{Goldstone mode}} \left[\varphi(x) + \varphi_0(x,\theta) \right]$$

Komponentene av $\varphi(x) - \varphi_0(x,\theta)$ som er ortogonale på $\dfrac{\partial \varphi_0}{\partial \theta}$ er definert ved:

$$\boxed{f(\theta) = 0}$$

Vi kan altså skrive

$$\varphi(x) - \varphi_0(x,\theta) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \varphi_0}{\partial \theta} \\ \left(\varphi(x) - \varphi_0(x,\theta)\right)_\perp \end{pmatrix}$$

Vi hadde:

$$[\varphi(x) - \varphi_0(x,\theta)]\, A(x,y)\, [\varphi(y) - \varphi_0(y,\theta)]$$

Med overstående oppsplitting av fluktuasjonsvektoren, kan A skrives

$$A(x,y) = \begin{pmatrix} A_G & 0 \\ 0 & A_\perp \end{pmatrix}$$

Problem: $\underline{\underline{A_G = 0}}$

$$\det A = \det A_G \cdot \det A_\perp = 0$$

$A_G = 0$ fordi energien assosiert med kvadratiske Goldstone-mode fluktuasjoner, er null!

Trick: Innfør en infinitesimal $A_G = \varepsilon$ (En enkelt Goldstone mode)

$$A = \begin{pmatrix} \varepsilon & \\ & A_\perp \end{pmatrix}$$

$$\underline{\det A = \varepsilon \det A_\perp \neq 0}$$

Etter at de gaussiske fluktuasjonene er gjort, setter vi $\varepsilon = 0$!
Får vi da noe endelig?

Vi ønsker å splitte funksjonal integralet opp i to bidrag:

Ett over Goldstone moder, $f=1$, ✓
og ett over longitudinale moder, $f=0$ ✓

$$\left.\begin{aligned} &\int df\ \delta(f) = 1 \\ &\int d\theta\ \frac{df}{d\theta}\ \delta(f) = 1 \end{aligned}\right\} \Leftrightarrow \quad ✓$$

Poeng: $\boxed{\delta(f) \text{ bidrar kun når } f=0.}$

$$Z = e^{S_{MF}} \int D\psi\, e^{-\frac{1}{2}\sum_{xy} \psi(x) A\, \psi(y)}$$

Generell fluktuasjonsvektor:

$$\psi = \varphi(x) - \varphi_0(x,\theta)$$

$$Z = Z_{MF} \int D\psi \Big[\overbrace{\int d\theta\ f'(\theta)\ \delta(f)}^{=1}\Big] e^{-\frac{1}{2}\sum_{x,y} \psi(x) A\, \psi(y)}$$

Se på de to ekstra faktorene i integralet:

$$f'(\theta) = \frac{\partial}{\partial\theta} \int dx\ \frac{\partial\varphi_0}{\partial\theta}\Big[-\varphi(x) + \varphi_0(x,\theta)\Big]$$

$$= \int dx \left[-\frac{\partial^2\varphi_0}{\partial\theta^2}\,\psi + \left(\frac{\partial\varphi_0}{\partial\theta}\right)^2\right]$$

$$\delta(f) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\alpha}{2\pi}\, e^{i\alpha f}$$

α-integrasjonen projiserer ut Goldstone-mode bidrag til fluktuasjoner.

„Variant av Abrikosov-trick".

$$Z = Z_{MF} \int D\psi \, d\theta \, \frac{d\alpha}{2\pi} \int dx \left[\underbrace{-\frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial \theta^2} \psi}_{\text{Dette heldet forvirrende. Forklar hvorfor!}} + \left(\frac{\partial \varphi_0}{\partial \theta}\right)^2 \right]$$

$$\cdot\, e^{-\frac{1}{2}\sum_{x,y} \psi(x) A(x,y) \psi(y) + i\alpha \sum_x \frac{\partial \varphi_0(x,\theta)}{\partial \theta} \psi(x)}$$

$$= Z_{MF} \int d\theta \, \frac{d\alpha}{2\pi} \underbrace{\left[\int dx \left(\frac{\partial \varphi_0}{\partial \theta}\right)^2 \right]}_{\equiv g(\theta)}$$

$$\underbrace{\int D\psi \cdot e^{-\frac{1}{2}\sum_{x,y} \psi(x) A(x,y) \psi(y) + i\alpha \sum_x \frac{\partial \varphi_0(x)}{\partial \theta} \psi(x)}}_{= e^{-\frac{\alpha^2}{2} \sum_{x,y} \frac{\partial \varphi_0(x)}{\partial \theta} A^{-1}(x,y) \frac{\partial \varphi_0(y)}{\partial \theta}} \frac{1}{\sqrt{\det A}}}$$

(se s. 26)

Nå er også α-integrasjonen Gaussisk!

Se først litt på:

$$\sum_{x,y} \frac{\partial \varphi_0(x)}{\partial \theta} A^{-1}(x,y) \frac{\partial \varphi_0(y)}{\partial \theta}$$

$$A = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & A_\perp \end{pmatrix}$$

Nå innfører vi $\varepsilon \neq 0$ som egenverdi for Goldstone-modus:

$$\sum_y A(x,y) \frac{\partial \varphi_0(y)}{\partial \theta} = \varepsilon \frac{\partial \varphi_0(x)}{\partial \theta}$$

$$\Rightarrow$$

$$\sum_{x,y} \frac{\partial \varphi_0(x)}{\partial \theta} A^{-1}(x,y) \frac{\partial \varphi_0(y)}{\partial \theta}$$

$$= \sum_{x,y,y'} \frac{\partial \varphi_0(x)}{\partial \theta} \underbrace{\frac{A^{-1}(x,y)\, A(y,y')}{\varepsilon}} \frac{\partial \varphi_0(y')}{\partial \theta}$$

$$\sum_y A^{-1}(x,y) A(y,y') = \frac{1}{\varepsilon} \delta_{x,y'}$$ Matrise-multiplikasjon

$$= \sum_{x,y'} \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \varphi_0(x)}{\partial \theta} \frac{\partial \varphi_0(y')}{\partial \theta} \delta_{x,y'}$$

$$= \frac{1}{\varepsilon} \sum_x \left(\frac{\partial \varphi_0(x)}{\partial \theta} \right)^2 = \frac{1}{\varepsilon} g(\theta)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\alpha}{2\pi} e^{-\frac{\alpha^2}{2} \frac{g(\theta)}{\varepsilon}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2\pi \varepsilon}{g(\theta)}}$$

α-integrasjonen projiserer ut $q=0$-bidraget, dvs:

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\varepsilon}{g(\theta)}}$$

Goldstone-mode bidraget

$$Z = Z_{MF} \int \frac{d\theta}{\sqrt{2\pi}} \; g(\theta) \sqrt{\frac{\varepsilon}{g(\theta)}} \; \frac{1}{\sqrt{\det A}}$$

$$= Z_{MF} \int \frac{d\theta}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{g(\theta)} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon \det A_\perp}}$$

$$= Z_{MF} \frac{1}{\sqrt{\det A_\perp}} \cdot \left\{ \int \frac{d\theta}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{g(\theta)} \right\}$$

$\varepsilon \to 0$: $\boxed{\text{Svaret blir endelig!}}$

$$Z = \frac{Z_{MF}}{\sqrt{\det A}}$$ er endelig av

$$Z = \frac{Z_{MF}}{\sqrt{\det A_\perp}} \cdot \underbrace{\int \frac{d\theta}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{g(\theta)}}_{\text{Effekten av Goldstone-modusen sitter her}}$$

$\det A_\perp \neq 0$, spart av massive fluktuasjoner

Fra figuren på s. 119, forventer vi, nesten opplagt, at de dominerende fluktuasjonene er de "transverse".

Hadde dette vært gjort for det komplekse tilfellet

$$Z = Z_{MF} \int D\varphi^* D\varphi \, e^{-\sum_{x,y} \varphi^*(x) A(x,y) \varphi(y)}$$

ville vi fått

$$\underline{\underline{Z = Z_{MF} \cdot \frac{1}{\det A_\perp} \cdot \int \frac{d\theta}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{g(\theta)}}}$$

$$\underline{\underline{g(\theta) = \int dx \left| \frac{\partial \varphi_0(x)}{\partial \theta} \right|^2}}$$

Eks: Goldstone-mode bidrage

til fluktuasjonene i BCS-teori:

Fluktuasjonsvektor:

$$\Phi^+ = (a^+, a) \quad ; \quad \Phi = \begin{pmatrix} a^- \\ a^+ \end{pmatrix}$$

$A = D^{-1}$ som ~~er~~ uendelig i begge.

$$\varphi_0(x, \theta) = \varphi_0(\theta) = |a| e^{i\theta}$$

$$\frac{\partial \varphi_0}{\partial \theta} = i \varphi_0$$

$$\left|\frac{\partial \varphi_0}{\partial \theta}\right|^2 = |a|^2$$

$$g(\theta) = \int dx \cdot |a|^2 = \sum_x \cdot \int_0^\beta d\tau \cdot |a|^2$$

$$= \beta \cdot N \, |a|^2$$

N: Volumet til systemet.

$$\int_0^{2\pi} d\theta \sqrt{\frac{g(\theta)}{2\pi}} = \frac{2\pi}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\beta N} \cdot |a| = \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi}} \cdot |a|$$

$$S = S_{MF} - \mathrm{Tr} \ln (D_L^{-1}) + \ln\left(\sqrt{\frac{\beta N}{2\pi}} |a|\right)$$

Dersom vi neglisjerer $\mathrm{Tr} \ln D_L^{-1}$-bidraget, har vi enkelt funnet korrigert

amplitude tal. NB!! Legg merke til at det er fase-fluktuasjoner som gir et bidrag til amplitude-fluktuasjoner. Forsøk å forklare hvorfor!

Vi ser også at Goldstone-mode bidraget til fluktuasjonene ikke inneholder noe informasjon om

$$A = \frac{\delta^2 S}{\delta\varphi(x)\,\delta\varphi(y)},$$

kun informasjon om egenverdiene med egenverdi = 0.

Dette skyldes nettopp at informasjonen om A forsvinner, siden

$$\sum_{x,y} \frac{\partial\varphi_0}{\partial\theta}(x)\, A(x,y)\, \frac{\partial\varphi_0}{\partial\theta}(y) = 0$$

Litt om Fermi-væske teori:

En fri elektrongass har Hamilton operator

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k \, c^+_{k\sigma} c_{k\sigma}$$

med $(T=0)$ en-partikkel propagator

$$G_0(k,\omega) = \mathcal{F}(G(x,t))$$

$$G_0(x,t) = -i \langle T(\psi_\sigma(x,t)\, \psi^+(0,0)) \rangle$$

$$G_0(k,\omega) = \frac{\theta(\varepsilon_k - \varepsilon_F)}{\omega - \varepsilon_k + i\delta} + \frac{\theta(\varepsilon_F - \varepsilon_k)}{\omega - \varepsilon_k - i\delta}$$

$$= \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i\delta_k}$$

$$\delta_k = \text{sign}(\varepsilon_k - \varepsilon_F) \cdot \delta \; ; \quad \delta = 0^+$$

$G(k,\omega)$ har en <u>enkel pol</u> som gir eksitasjons-spektret i systemet. At polen er enkel betyr at en-partikkel eksitasjonene beskrevet ved operatorene $(c^+_{k\sigma}, c_{k\sigma})$ er veldefinerte, med levetid $\tau_k = 1/2\delta_k \to \infty$; langlivede eksitasjoner.

Dersom vi inkluderer vekselvirkninger mellom fermioner, kan vi skrive ned et formelt uttrykk, eksakt, for en-partikkel propagatoren: (Dyson's ligning)

$$\mathcal{G}^{-1}(k,\omega) = \mathcal{G}_0^{-1}(k,\omega) - \Sigma(k,\omega)$$

All effekt av vekselvirkninger ligger i størrelsen Σ, ofte kalt systemets selvenergi.

Nå kan vi skrive $\mathcal{G}(k,\omega)$ på samme form som $\mathcal{G}_0(k,\omega)$? Dette skal vi se litt nærmere på. Spørsmålet er ekvivalent til å spørre: Når er et vekselvirkende fermion-system ut som et fritt elektronsystem?

Vi antar at effekten av vekselvirkninger er slik at

$$\Sigma$$

er kompleks,

$$\Sigma = \Sigma_R + i\Sigma_I,$$

men slik at $\Sigma_I \ll \Sigma_R$

Dempningen av en-partikkel-eksitasjoner antas dermed å ikke være alltfor stor.

Polen i $G(k,\omega)$, som bestemmer eksitasjons-spektret, er gitt ved

$$\omega - \varepsilon_k - \Sigma_R - i\,\Sigma_I = 0$$

Til null'te orden i Σ_I, fås vi:

$$\left.\begin{aligned} \omega &= \varepsilon_k + \Sigma_R(\tilde{\varepsilon}_k, \omega) \\ \tilde{\varepsilon}_k &= \varepsilon_k + \Sigma_R(k, \tilde{\varepsilon}_k) \end{aligned}\right\}$$

Hovedeffekt: Shift ω p. Selv-konsistent ligning for $\tilde{\varepsilon}_k$.

Anta at vi nå bringer inn effekten av Σ_I til 1. orden:

$$\omega - \left(\varepsilon_k + \Sigma_R(k,\omega)\right) - i\,\Sigma_I(k, \tilde{\varepsilon}_k) = 0$$

$$\Sigma_R(k,\omega) = \Sigma_R(k, \tilde{\varepsilon}_k) + (\omega - \tilde{\varepsilon}_k)\left.\frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega}\right|_{\omega=\tilde{\varepsilon}_k}$$

$$\omega \to \tilde{\varepsilon}_k + i\,x$$

$$\tilde{\varepsilon}_k + i\,x - \left(\varepsilon_k + \Sigma_R(k, \tilde{\varepsilon}_k)\right) - \left(i\,x\right)\frac{\partial \Sigma}{\partial \omega} - i\,\Sigma_I = 0$$

$$i\,x\left(1 - \frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega}\right) = i\,\Sigma_I$$

$$x = \frac{\Sigma_I}{1 - \frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega}}$$

$$\omega = \tilde{\varepsilon}_k + i \frac{\Sigma_I}{1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial \omega}}$$

$$= \tilde{\varepsilon}_k + i/2\tau_k$$

$$G = \frac{1}{\omega - \tilde{\varepsilon}_k - (\omega - \tilde{\varepsilon}_k)\frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega} - i\Sigma_I}$$

$$= \frac{1}{\omega\left(1 - \frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega}\right) - \tilde{\varepsilon}_k\left(1 - \frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega}\right) - i\Sigma_I}$$

$$= \frac{1/\left(1 - \frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega}\right)}{\omega - \tilde{\varepsilon}_k + i/2\tau_k}$$

$$\frac{1}{2\tau_k} = -\frac{\Sigma_I}{1 - \frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega}}$$

Inn for kvasipartikkel-residyet:

$$Z_k = \left(1 - \frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega}\right)^{-1}$$

$$\boxed{\mathcal{G}(k,\omega) = \frac{Z_k}{\omega - \tilde{\varepsilon}_k + i/2\tau_k}}$$

Husk:

$$\mathcal{G}_0(k,\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i\,\delta_k}$$

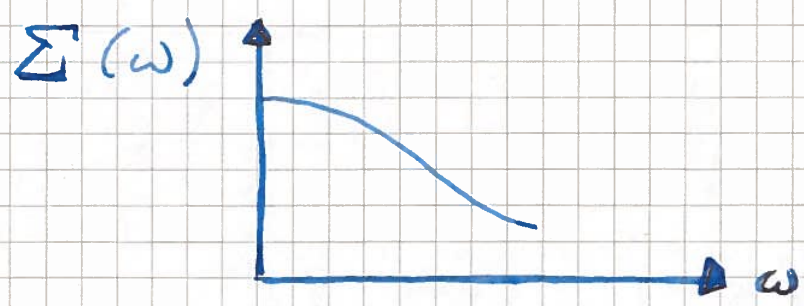
Vekselvirkningen har altså tre primære effekter:

i) $\varepsilon_k \to \tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k + \Sigma_R(k, \tilde{\varepsilon}_k)$

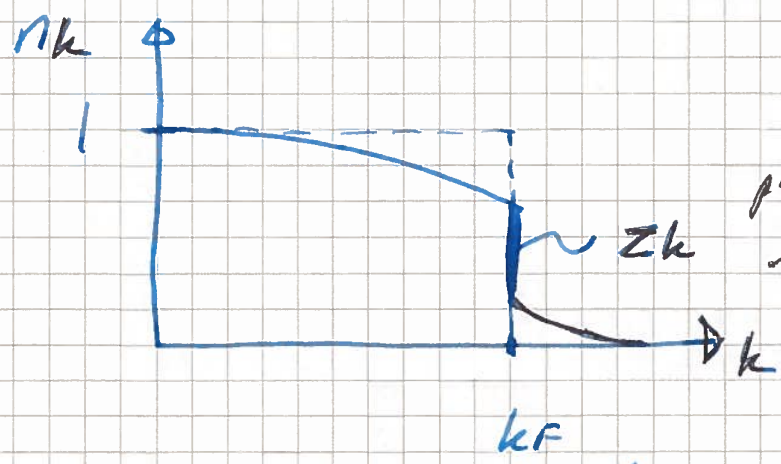
Et reaktivt shift av eksitasjons-spektret.

ii) $\tau_k = \delta_k^{-1} = 1/\gamma_k$. Levetid blir endelig, ikke lenger uendelig.

iii) Pol-residyet Z_k blir redusert fra 1



$$\frac{\partial \Sigma}{\partial \omega} < 0 \Rightarrow \frac{1}{1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial \omega}} < 1$$



Det finns patologiske unntak hvor n_k har disk., men $Z_k = 0$!!

$Z_k \neq 0 \Rightarrow$ systemet er en Fermi-væske

Dersom vi starter med en ikke-vekselvirkende elektrongass, H_0, og slår på vekselvirkning, vil det være en en-til-en sammenheng mellom lav-energi-eksitasjoner i H_0, og lav-energi-eksitasjoner i det vekselvirkende systemet. Med lavenergi-eksitasjoner, menes eksitasjoner nært fermi-nivå, hvor eksitasjonsenergien involvert er langt mindre enn selve fermi-energien, ε_F.

Typisk, i en Fermi-væske, har vi:

$$\Sigma_I \sim (\omega - \varepsilon_F)^2$$

Det betyr at når $\omega \to \varepsilon_F$, forsvinner dempningen av en-partikkel-eksitasjoner raskere enn $\omega - \varepsilon_F$. Disse eksitasjoner blir dermed veldefinerte på fermi-nivå. Langt over fermi-nivå blir de ikke veldefinerte, men dempes raskt.

$$\boxed{\text{Fermi-væske: } Z_{k=k_F} \neq 0}$$

$Z(k=k_F)$

Litt generelt om brutte symmetrier.

En symmetri for et system definert ved en Lagrange-tetthet

$\mathcal{L}(\{\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda\})$ er definert ved at, dersom en ellers annen transformasjon T_λ er slik at

$$T_\lambda(\varphi_\lambda) \to \varphi'_\lambda$$

$$T_\lambda(\varphi_\lambda^*) \to \varphi'^*_\lambda$$

$$\mathcal{L}(\{\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda\}) \to \mathcal{L}(\{\varphi'^*_\lambda, \varphi'_\lambda\})$$

så er T_λ en symmetri-transformasjon for systemets løsninger av bevegelses ligningene (Euler-Lagrange ligningen for klassiske felt-teorier) avbildes på nye løsninger under transformasjonen $\underline{T_\lambda}$.

$$\boxed{\text{Til enhver symmetri som systemet har, hører en bevaringslov (Nöther's teorem).}}$$

Noen eksempler

Symmetri-transf.		Konservningslov
i) Tidstranslasjon	$\Longleftrightarrow$	Energibevarelse
ii) Romtranslasjon	$\Longleftrightarrow$	Impulsbevarelse
iii) Rotasjon	$\Longleftrightarrow$	Dreieimpulsbevarelse
iv) Dreining av spinn $\vec{S}' = \vec{A}\cdot\vec{S}$ O(3)-symmetri	$\Longleftrightarrow$	Spinn-rotasjons invarians.
v) $\varphi' \to e^{i\varphi}\varphi$ U(1)-symmetri	$\Longleftrightarrow$	Ladningsbevarelse

Til en symmetri hører en konservert „strøm". Dersom symmetrien brytes (spontant eller på annen måte) er ikke „strømmen" lenger konservert.

i) „strøm" = energi
ii) —"— = impuls
iii) —"— = dreieimpuls
iv) = —"—
v) „strøm" = ladning

Dersom vi har en familie av transformasjoner

$$T_\eta : \varphi_\alpha(x) \to \varphi'_\alpha(x;\eta)$$

$$\varphi'_\alpha(x;0) = \varphi_\alpha(x)$$

Definer:

$$Q_\alpha(x) = \frac{d}{d\eta}\varphi_\alpha(x;\eta)\Big|_{\eta=0}$$

som har komponenter ved en koordinat-transformasjon:

$$x_\mu \to x'_\mu(x;\eta)$$

$$\frac{d}{d\eta}x'_\mu(x;\eta)\Big|_{\eta=0} \equiv R_\mu$$

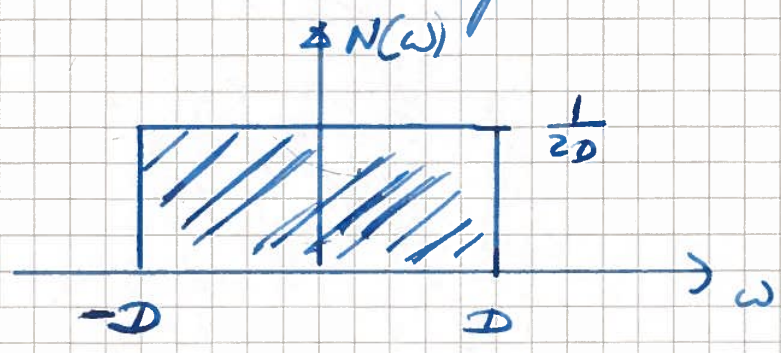
så har systemet en konservert strøm:

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \; ; \; \underline{\underline{j^\mu = \pi_\alpha{}^\mu Q_\alpha - R^\mu \mathcal{L}}}$$

<u>Eksempel: $U(1)$-symmetri</u>

Magnetiske urenheter i metaller: Anderson- og Kondo-modellene.

Vi tenker oss at vi har et system som er definert ved frie, identiske elektroner, beskrevet ved et ledningsbånd med dispersjonsrelasjon ε_k, og hvor vi for enkelhets skyld antar at en-partikkel tilstandstettheten har en enkel form:



Båndbredden er $2D$.

Dette systemet har en Hamilton-operator

$$H_c = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k \, c^+_{k\sigma} c_{k\sigma}$$

Vi skal nå studere effekten av å inkludere et magnetisk urenhet i problemet, hvor den magnetiske urenheten bidrar til ledningselektronene, men er lokalisert i rommet. Vi ser først på system med én urenhet.

Hamilton-operatoren for urenheten er gitt ved

$$H_f = E_0 \sum_m f_m^+ f_m + U f_{\frac{1}{2}}^+ f_{-\frac{1}{2}}^+ f_{-\frac{1}{2}} f_{\frac{1}{2}}$$

m: Kvantetall som angir z-komponenten til spinnet til urenheten.

(f_m, f_m^+) er destruksjons- og kreasjonsoperatorer for urenheten, i tilstand m.

$S = 1/2$: $m = \pm 1$

U: Coulomb-energi assosiert med dobbelt-okkupasjon av den magnetiske urenheten. Vi skal senere anta at dette er den største energien i systemet.

Koblingen mellom ledningselektronene, og den lokaliserte urenheten, er gitt ved:

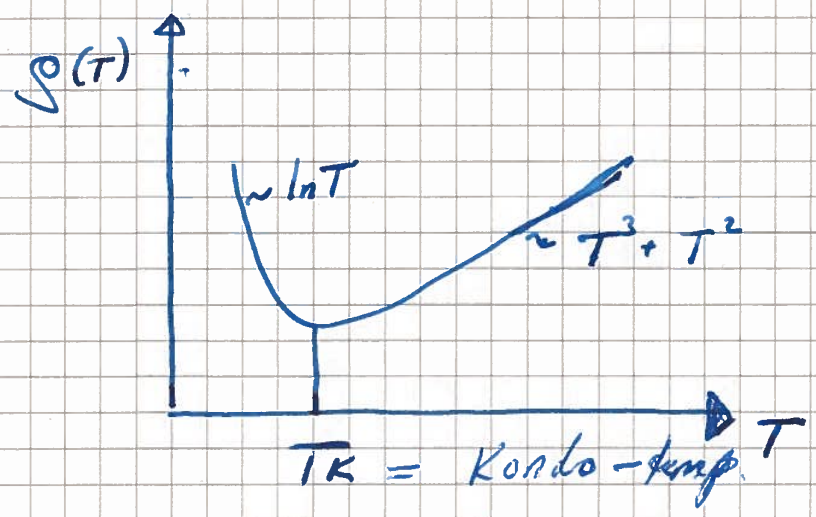
$$H_{cf} = \sum_{\vec{k}\sigma m} \left[V_{m\sigma}(\vec{k})\, f_m^{+}\, C_{k\sigma} + h.c. \right]$$

$V_{m\sigma}(\vec{k})$: Matrise-element som overfører et elektron fra urenheten til ledningsbåndet, eller omvendt.

$$H = H_c + H_f + H_{cf}$$

H kalles ofte Anderson-modellen. Den danner grunnlaget for vår forståelse av tungefermion systemer. Vi skal nå bruke funksjonalintegral teknikk til å studere effekten av å inkludere en magnetisk urenhet i ledningsbåndet.

En viktig effekt av magnetiske urenheter er at et metall vil fremvise et minimum i resistiviteten:



Det viser seg at T_K bare er noen få grader Kelvin, mens Fermi-energien er av størrelsesorden 10^4 K.

Hvordan kan det oppstå en så liten energi skala (T_K) i problemet, når utgangspunktet er at den relevante energi-skalaen er $\varepsilon_F \sim 10^4\,K$? (Dersom magnetiske urenheter fas ut, er resistiviteten uniformt avtagende.)

J. Kondo fant, teoretisk, at i perturbasjonsteori, divergens

$$\rho(T) \sim \ln T \; ; \quad T \ll T_K$$

Dermed oppstår et nytt problem: Hvordan gi en konsistent beskrivelse av lavtemperatur fysikken $T \ll T_K$, i systemer med et resistivitets minimum. Dette problemet refereres ofte til som „Konto-problemet."

Det vi skal gjøre, er å se hvorledes energi-skalaen T_K, Konto-temperatura, oppstår, samt å gi en konsistent beskrivelse av lavtemperatur-fysikken i metaller dopet med magnetiske urenheter, i sadelpunkt-approximasjon

Typiske materialer som beskrives av disse teoriene, er metaller som aluminium og gull, dopet med sjeldne jordarter. De sjeldne jordarter er da de magnetiske urenheter i problemet. (Sjeldne jordarter: Lantanider og actinider. De kvantiseringsmessige: Ce lantanid og U (actinid))

I lantanidene er valens-elektronene i 4f skallet, i actinidene i 5f skallet (derfor f^n, f^n)

Vi formulerer Anderson-modellen til:

Vanlig studerte stoff er

$CeAl_2$ (lantanid)

UPd_3 (Actinid-forbindelse)

UPd_3 er karakterisert den mulige superledere som finnes ($T_c \sim 1mK$) med svært komplisert ordensparameter.

$CeAl_2$ og UPd_3 er vidt forskjellige:

i) $\underline{\underline{U = \infty}}$

Da forbys dobbelt-okkupasjon av de magnetiske urenhetene.
Altså: Hvis det allerede sitter et spinn på urenheten, kan ikke et lednings-elektron hoppe inn i den lokaliserte orbitalen.

ii) Vi antar at koblingen mellom f- og c-elektroner er slik at $m = \sigma$:

$$V_{m\sigma}(k) = \delta_{m\sigma} V(k)$$

og at $V(k)$ er k-uavhengig.
(hold lokalisert kobling)

$$V_{m\sigma}(k) = V \delta_{m\sigma} \Rightarrow$$

$$H_{cf} = V \sum_{\sigma k} \left(f_\sigma^+ c_{k\sigma} + h.c. \right)$$

V: Hybridiserings-matrise-element.

Altså har vi modellen

$$H = E_0 \sum_\sigma f_\sigma^+ f_\sigma + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}$$

$$+ V \sum_{k\sigma} \left[f_\sigma^+ c_{k\sigma} + h.c. \right]$$

$$\sum_m f_m^+ f_m \leq 1$$

Det er restriksjoner på bunnhulsis-antallet på urenheten som gjør dette til et vanskelig problem.

For senere referanse, løser vi først problemet med $U=0$.

$\underline{U=0}$

$$Z = \int Dc^+ Dc\, Df^+ Df\, e^{S}$$

$$S = -\int \Big\{ \sum_{k,\sigma} c_{k\sigma}^+ \frac{\partial c_{k\sigma}}{\partial \tau} + \sum_m f_m^+ \frac{\partial f_m}{\partial \tau} \Big) d\tau$$

$$+ H \Big\}$$

$$S = -\int_0^\beta \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ (\partial_\tau + \varepsilon_k) c_{k\sigma}\, d\tau$$

$$-\int_0^\beta \sum_\sigma f_\sigma^+ (\partial_\tau + E_0) f_\sigma\, d\tau$$

$$-\int_0^\beta V \sum_{k\sigma} \left[f_\sigma^+ c_{k\sigma} + h.c. \right] d\tau$$

Z kan bregnes eksakt, ved et lineært shift av fermion-operatorene. $(c_{k\sigma}, c_{k\sigma}^+)$

Innfør:

$$\mathcal{G}_0^{-1} = \partial\tau + \varepsilon_k$$

Se direkte på:

$$\sum_{k\sigma} \left[c_{k\sigma}^{+} \mathcal{G}_0^{-1} c_{k\sigma} + V f_\sigma^{+} c_{k\sigma} + V c_{k\sigma}^{+} f_\sigma \right]$$

$$= \sum_{k\sigma} \left(c_{k\sigma}^{+} + V f_\sigma^{+} \mathcal{G}_0 \right) \mathcal{G}_0^{-1} \left(c_{k\sigma} + V \mathcal{G}_0 f_\sigma \right)$$

$$- \sum_{k\sigma} V^2 f_\sigma^{+} \mathcal{G}_0 f_\sigma$$

$$= \sum_{k\sigma} \tilde{c}_{k\sigma}^{+} \mathcal{G}_0^{-1} \tilde{c}_{k\sigma}$$

$$- \sum_{\sigma} f_\sigma^{+} \left(\sum_k V^2 \mathcal{G}_0 \right) f_\sigma$$

$$S = - \sum_{k\sigma} \tilde{c}_{k\sigma}^{+} \mathcal{G}_0^{-1} c_{k\sigma}$$

$$- \sum_{\sigma} f_\sigma^{+} \left(\partial\tau + E_0 - V^2 \sum_k \frac{1}{\partial\tau + \varepsilon_k} \right) f_\sigma$$

Kvadratisk i c- og f-sektor

$$Z = \int D\tilde{c}^{+} D\tilde{c}\, Df^{+} Df\, e^{S}$$

$$= Z_c \cdot Z_f$$

$$Z_c = e^{\mathrm{Tr}\ln(\mathcal{G}_0^{-1})}$$

Fri elektron gas

$$Z_f = e^{\mathrm{Tr}\ln(\mathcal{G}_f^{-1})}$$

Partisjons-funksj. for urenhet, koblet til fri elektron gass.

$$\mathcal{G}_0^{-1} = \partial\tau + \varepsilon_k$$

$$\mathcal{G}_f^{-1} = \partial\tau + E_0 \ominus V^2 \sum_k \frac{1}{\partial\tau + \varepsilon_k}$$

$$\mathrm{Tr}\ln \mathcal{G}_0^{-1} = \sum_{k\sigma} \ln\left(1 + e^{-\beta\varepsilon_k}\right)$$

Fri energi for ikke-u.u. elektrongass.

$$\mathrm{Tr}\ln(\mathcal{G}_f^{-1})$$

$$= \sum_\sigma \sum_{\omega_n} \ln\left(-i\omega_n + E_0 \oplus V^2 \sum_k \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}\right)$$

Se på:

$$\sum_k \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k} = \frac{1}{2D}\int_{-D}^{D} d\varepsilon \, \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon}$$

$$= -\frac{1}{2D} \ln\left(\frac{D - i\omega_n}{-D - i\omega_n}\right)$$

$$= -\frac{1}{2D} \ln\left(\frac{\omega_n + iD}{\omega_n - iD}\right)$$

$$-\frac{\beta}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, f(\varepsilon)\left[\ln(-\varepsilon - i\delta + E_0 - i\Delta) - \ln(-\varepsilon + i\delta + E_0 + i\Delta)\right]$$

$\Delta \neq 0$; $|\varepsilon| < D$

$|\varepsilon| > 0$: Fri elektron bidrag som vi ikke er på vider

$$-\frac{\beta}{2\pi i}\int_{-D}^{D} d\varepsilon\, f(\varepsilon)\left[\ln(-\varepsilon + E_0 - i\Delta) - \ln(-\varepsilon + E_0 + i\Delta)\right]$$

$$= -\frac{\beta}{2\pi i}\cdot 2i\int_{-D}^{D} d\varepsilon\, f(\varepsilon)\, \tan^{-1}\left(\frac{-\Delta}{E_0 - \varepsilon}\right)$$

$$= \beta\int_{-D}^{D}\frac{d\varepsilon}{\pi}\, \tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{E_0 - \varepsilon}\right)$$

$$\ln\left(\frac{z}{z^*}\right) = \ln\left(\frac{|z|\, e^{i\varphi}}{|z|\, e^{-i\varphi}}\right)$$

$$= 2i\varphi$$

$$\varphi = \tan^{-1}\left(\frac{D}{\omega_n}\right) \simeq \frac{\pi}{2}\,\mathrm{sign}(\omega_n)\,;\quad T \to 0$$

$$\sum_k \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k} \cong -i\,\frac{\pi}{2}\cdot 2\,\frac{1}{2D}\cdot \mathrm{sign}(\omega_n)$$

$$= -i\,\pi\,\rho_0\,\mathrm{sign}(\omega_n)\,;\quad \underline{\underline{\rho_0 = \frac{1}{2D}}}$$

$$\sum_\sigma \sum_{\omega_n} \ln\left(-i\omega_n + E_0 \underset{\ominus\ \checkmark}{\overset{?}{+}} V^2 i\pi\rho_0\,\mathrm{sign}(\omega_n)\right)$$

$$\Delta_0 \equiv \pi\rho_0 V^2$$

$$\sum_{\omega_n} \cdots = -\frac{\beta}{2\pi i}\oint dz\, f(z)$$

$$\cdot\ \ln\left(-z + E_0 - i\Delta_0\,\mathrm{sign}(\mathrm{Im}\, z)\right)$$

$$= -\frac{\beta}{2\pi i}\int_{-D}^{D} d\varepsilon\, f(\varepsilon)\left[\ln(-\varepsilon + E_0 - i\Delta_0) - \ln(-\varepsilon + E_0 + i\Delta_0)\right]$$

$$= \beta\int_{-D}^{D}\frac{d\varepsilon}{\pi}\, f(\varepsilon)\,\tan^{-1}\left(\frac{\Delta_0}{E_0 - \varepsilon}\right) \quad \checkmark$$

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

$$+ 2\beta \int_{-D}^{D} \frac{d\varepsilon}{\pi} f(\varepsilon) \tan^{-1}\left(\frac{\Delta_0}{E_0 - \varepsilon}\right)$$

Faktor 2 kommer fra spinn-summasjon.

Fysikken her er at S beskriver en fri elektrongass, pluss en <u>spredningsresonans</u> ved energien E_0 som skyldes koblingen (hybridisering) mellom f og c elektroner.

Legg merke til at dersom $|E_0| \gg D$, har 2. ledd neglisjerbar. Resultater ligger langt utenfor ledningsbånd, og spiller ingen <u>rolle</u>.

$|E_0| \gg V$??

Når $U = \infty$, forandres dette resultatet drastisk, som vi skal se.

<u>NB!!</u> Green's funksjonen:

$$-\langle f\, f^+\rangle = -\frac{1}{\partial\tau + E_0 + V^2 \sum_k \frac{1}{\partial\tau + \varepsilon_k}}$$

$$\rightarrow \frac{1}{i\omega_n - E_0 + V^2 \sum_k \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}}$$

$$-\langle \tilde{c}\, \tilde{c}^+\rangle = -\frac{1}{\partial\tau + \varepsilon_k}$$

$$= \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}$$

Men $\tilde{c}$ - „elektronen" er <u>ikke</u> fysiske elektroner:

$$\tilde{c} = c + V G_0 f_\sigma \Rightarrow$$

$$c = \tilde{c} - V G_0 f_\sigma \Rightarrow$$

Ledningselektron-propagatoren er modifisert.

$$-\langle c\, c^+\rangle$$

$$= -\left[\langle \tilde{c} - V G_0 f_\sigma (\tilde{c}^+ - V G_0 f_\sigma)\rangle\right]$$

$$= -G_0 + V G_0 \langle \tilde{c}\, f^+\rangle + V G_0 \langle f\, \tilde{c}^+\rangle - V^2 G_0 \langle f\, f^+\rangle G_0$$

$$G(\omega_\tau, \varepsilon_k) = -\left[G_0(\omega_\tau, \varepsilon_k) + V^2 \, G_0(\omega_\tau, \varepsilon_k) \, G_f(\omega_\tau) \, G_0(\omega_\tau, \varepsilon_k) \right]$$

$U = \infty$

$$H = E_0 \sum_\sigma F_\sigma^+ F_\sigma$$

$$+ \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}$$

$$+ V \sum_{k\sigma} \left(F_\sigma^+ c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^+ F_\sigma \right)$$

$$\sum_m F_m^+ F_m \ll 1$$ Ingen dobbelt-okkupasjon

Innfør b-bosoner, som for $U = \infty$ Hubbard-modellen.

$$F_m^+ = f_m^+ b$$

$$F_m = f_m b^+$$

F_m, F_m^+: Hubbard-operatorer. Tilfr. ikke enkle kommut.rels.

$$\sum_m f_m^+ f_m + b^+ b = 1$$

Når disse restriksjoner er tilfredsstilt, har vi:

$$\sum_m F_m^+ F_m = \sum_m f_m^+ f_m$$

$$H = E_0 \sum_m f_m^+ f_m + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}$$

$$+ V \sum_{k\sigma} \left(f_\sigma^+ b c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^+ b^+ f_\sigma \right)$$

med restriksjonen

$$\sum_m f_m^+ f_m + b^+ b = 1 \equiv Q$$

Som for $U=\infty$ Hubbard:

$$Z = \int Dc^+ Dc\, Df^+ Df\, Db^+ Db\; e^{S}\; \delta_{Q,1}$$

$$S = -\sum_m \int_0^\beta f_m^+ (\partial_\tau + E_0) f_m - \int_0^\beta \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ (\partial_\tau + \varepsilon_k) c_{k\sigma}\, d\tau$$
$$- \int_0^\beta d\tau\, b^+ \partial_\tau b - \int_0^\beta V \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^+ b^+ f_\sigma + f_\sigma^+ b\, c_{k\sigma})\, d\tau$$

Abrikosov's trick: (utfør for hver τ-verdi)

$$\delta_{Q,1} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\lambda}{2\pi}\, e^{-i\lambda(Q-1)}$$

$\Rightarrow$

$$Z = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} \int Dc^+ Dc\, Df^+ Df\, Db^+ Db\; e^{\tilde{S}}$$

$$\tilde{S} = -\int_0^\beta \Big[b^+ (\partial_\tau + i\lambda) b + \sum_m f_m^+ (\partial_\tau + E_0 + i\lambda) f_m \Big] d\tau$$
$$+ i \int_0^\beta \lambda\, d\tau - \int_0^\beta \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ (\partial_\tau + \varepsilon_k) c_{k\sigma}\, d\tau$$
$$- \int_0^\beta V \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^+ b^+ f_\sigma + f_\sigma^+ b\, c_{k\sigma})\, d\tau$$

Vi innfører igjen $\mathcal{G}_0^{-1} = \partial_\tau + \varepsilon_k$.

Vi utfører igjen et shift av c-felter:

$$\sum_{k\sigma} \left[c_{k\sigma}^+ \mathcal{G}_0^{-1} c_{k\sigma} + V \left(c_{k\sigma}^+ b^+ f_\sigma + f_\sigma^+ b\, c_{k\sigma} \right) \right]$$

$$= \sum_{k\sigma} \left(c_{k\sigma}^+ + V f_\sigma^+ b\, \mathcal{G}_0 \right) \mathcal{G}_0^{-1} \left(c_{k\sigma} + V \mathcal{G}_0 b^+ f_\sigma \right)$$

$$- V^2 \sum_\sigma f_\sigma^+ b \left(\sum_k \mathcal{G}_0 \right) b^+ f_\sigma$$

Utfør $\int D\tilde{c}^+ Dc$ funksjonal integralet:

$$Z = Z_0 \cdot \tilde{Z} \quad ; \quad Z_0 = e^{\mathrm{Tr} \ln(\mathcal{G}_0^{-1})}$$

$$\tilde{Z} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} \int Df^+ Df\, Db^+ Db\, e^{S_{eff}}$$

$$S_{eff} = \int_0^\beta d\tau \Big[-b^+ (\partial_\tau + i\lambda) b - \sum_m f_m^+ (\partial_\tau + E_0 + i\lambda) f_m$$

$$+ \sum_m f_m^+ V^2 b \left(\sum_k \mathcal{G}_0 \right) b^+ f_m$$

$$+ i\lambda \Big]$$

Nå kan vi utføre

$\int Df^+ Df$ integrasjonene:

$$Z = Z_0 \cdot \tilde{Z}$$

$$\tilde{S}_{eff}[b^+, b, \lambda]$$

$$\tilde{Z} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} \int Db^+ Db \, e$$

Dermed er kosten bosonisert, med:

$$\tilde{S}_{eff}[b^+, b, \lambda]$$

$$= -\int_0^\beta b^+ (\partial_\tau + i\lambda) b \, d\tau + i\lambda \int_0^\beta d\tau$$

$$+ \operatorname{Tr} \ln [\mathcal{G}_f^{-1}(b^+, b, \lambda)]$$

$$\mathcal{G}_f^{-1} = \partial_\tau + E_0 + i\lambda - V^2 b^+ \left(\sum_k \frac{1}{\partial_\tau + \varepsilon_k} \right) b$$

Husk svaret fra $U = 0$:

$$\mathcal{G}_f^{-1} = \partial_\tau + E_0 - V^2 \sum_k \frac{1}{\partial_\tau + \varepsilon_k}$$

$U = \infty$ har to effekter:

i) Shift av E_0 !!!

ii) Renormalisert hybridisering.

Igjen blir den resulterende effektive action for komplisert dil å beregne eksakt. Vi innfører, som tidligere, en sadelpunkt approximasjon, ved:

$$b(\tau) = b$$

$$i\lambda = \lambda$$

$$\tilde{S}_{eff} = -\beta\lambda(b^2-1) + \mathrm{Tr}\ln\left(\partial_\tau + E_0 + \lambda - V^2 b^2 \sum_k G_0\right)$$

$$= -\beta\lambda(b^2-1)$$

$$+ \sum_\sigma \sum_{\omega_n} \ln\left(-i\omega_n + \varepsilon_f + s_0^2 \sum_k \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}\right) \checkmark$$

$$= -\beta\lambda(b^2-1) + 2\sum_{\omega_n} \ln\left(-i\omega_n + \varepsilon_f - i\Delta\,\mathrm{sign}(\omega_n)\right) \checkmark$$

For $\sum_{\omega_n}$: se s.148. $(E_0 \to \varepsilon_f)$ $(\Delta_0 \to \Delta)$

$$\Delta = \pi\rho_0 s_0^2 \quad ; \quad s_0 = b \cdot V$$

$$= -\beta\lambda(b^2-1) + 2\beta \int_{-D}^{D} \frac{d\varepsilon}{\pi} f(\varepsilon) \tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f - \varepsilon}\right) \checkmark$$

(se s. 148)

For $U = 0$, hadde vi:

$$\tilde{S}_{eff} = +2\beta \int_{-D}^{D} \frac{d\varepsilon}{\pi} f(\varepsilon) \tan^{-1}\left(\frac{\Delta_0}{E_0 - \varepsilon}\right)$$

Til forskjell fra $U=0$ tilfellet, hvor vi hadde en spredningsresonans ved E_0, har vi nå fått en spredningsresonans ved $\varepsilon_f = E_0 + \lambda$.

Som vi nå skal se, vil ε_f "spikret" fast til Fermi-nivået, slik at selv om E_0 ligger langt utenfor ledningsbåndet, ligger ε_f praktisk talt på Fermi-nivå. Urenhetene oppfører dermed alltid fysikken ved Fermi-nivå. Det er disse fastspikringen som gir opphav til Kondo-effekt og Anderson-modellen opptrinn.

Det er altså en korrelasjons-effekt!

Vi minimaliserer nå effektiv action m.h.p. b^2 og λ.

Siden vi hadde $\varepsilon_f = E_0 + \lambda \Rightarrow$

$$\lambda = \varepsilon_f - E_0$$

Likeledes: $s_0 = Vb \Rightarrow b^2 = \frac{s_0^2}{V^2} \Rightarrow$

$$\tilde{S}_{eff} = -\beta(\varepsilon_f - E_0)\left(\frac{s_0^2}{V^2} - 1\right)$$

$$+ 2\beta \int_{-D}^{D} \frac{d\varepsilon}{\pi} f(\varepsilon) \tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f - \varepsilon}\right)$$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{S}_{eff}}{\partial \varepsilon_f} &= 0 \\ \frac{\partial \tilde{S}_{eff}}{\partial s_0} &= 0 \end{aligned}\right\}$$

Selvkonsistente ligninger til å bestemme ε_f, s_0

Legg også merke til at for $T=0$, er effektiv action fullstendig veldefinert. Metoden gir altså en veldefinert beskrivelse av lavtemperatur-fysikken.

NB!! Den er selvsagt o.k. for $T>0$! Men det er ikke opplagt at den er o.k. ved $T=0$!

$\underline{\underline{T=0}}$

$$\tilde{S}_{eff} = -\beta(\varepsilon_f - E_0)\left(\frac{s_0^2}{V^2} - 1\right)$$

$$+ 2\beta \int_{-D}^{0} \frac{d\varepsilon}{\pi} \tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f - \varepsilon}\right)$$

$$\tan^{-1}(x) = -\frac{i}{2} \ln\left(\frac{1+ix}{1-ix}\right)$$

$$\int_{-D}^{0} \frac{d\varepsilon}{\pi} \tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f - \varepsilon}\right)$$

$$= \int_{0}^{D} \frac{d\varepsilon}{\pi} \tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f + \varepsilon}\right) = \int_{\varepsilon_f}^{D+\varepsilon_f} \frac{dx}{\pi} \tan^{-1}\frac{\Delta}{x}$$

$$= \frac{1}{\pi} \Big|_{\varepsilon_f}^{D+\varepsilon_f} x \tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{x}\right) - \frac{1}{\pi} \int_{\varepsilon_f}^{D+\varepsilon_f} dx \frac{x}{1+\frac{\Delta^2}{x^2}} \left(-\frac{\Delta}{x^2}\right)$$

$$= \frac{1}{\pi}\left[(D+\varepsilon_f)\tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{D+\varepsilon_f}\right) - \varepsilon_f \tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f}\right)\right]$$

$$+ \frac{\Delta}{2\pi} \ln\left(\frac{(D+\varepsilon_f)^2+\Delta^2}{\varepsilon_f^2+\Delta^2}\right) \qquad \underline{\underline{\text{Ehrlich}}}$$

$$D \gg (\Delta, \varepsilon_f)$$

$$\simeq -\frac{\varepsilon_f}{\pi}\tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f}\right) - \frac{\Delta}{2\pi}\ln\left(\frac{\varepsilon_f^2+\Delta^2}{D^2}\right)$$

$$+ \frac{(D+\varepsilon_f)}{\pi}\tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{D+\varepsilon_f}\right)$$

$$\varepsilon_f + D \gg (\Delta, \varepsilon_f) \Rightarrow \tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{D+\varepsilon_f}\right) \simeq \frac{\Delta}{D+\varepsilon_f}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\Delta}{\pi} - \frac{\varepsilon_f}{\pi}\tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f}\right) - \frac{\Delta}{2\pi}\ln\left(\frac{\varepsilon_f^2+\Delta^2}{D^2}\right) \simeq \int_{-D}^{0} d\varepsilon \tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f - \varepsilon}\right)}$$

$$\tilde{S}_{eff} = -\beta(\varepsilon_f - E_0)\left(\frac{\Delta}{\Delta_0} - 1\right)$$

$$+ 2\beta\left(\frac{\Delta}{\pi} - \frac{\varepsilon_f}{\pi}\tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f}\right)\right.$$

$$\left. - \frac{\Delta}{2\pi}\ln\left(\frac{\varepsilon_f^2 + \Delta^2}{D^2}\right)\right) \quad ; \quad \underline{T = 0}$$

$$= -\beta\,\tilde{\mathcal{U}}_{eff}$$

$$\frac{\Delta_0^2}{V^2} = \frac{\Delta}{\Delta_0} \quad ; \quad \begin{cases} \Delta = \pi\rho_0\Delta_0^2 \\ \Delta_0 = \pi\rho_0 V^2 \end{cases}$$

$$\frac{\partial\tilde{\mathcal{U}}_{eff}}{\partial\Delta} = 0$$

$$\frac{\partial\tilde{\mathcal{U}}_{eff}}{\partial\varepsilon_f} = 0$$

$$\frac{\partial\tilde{\mathcal{U}}_{eff}}{\partial\Delta} = 0$$

$$= \frac{1}{\Delta_0}(\varepsilon_f - E_0) - \frac{2}{\pi} + \frac{2\varepsilon_f}{\pi}\frac{1}{1+\frac{\Delta^2}{\varepsilon_f^2}}\frac{1}{\varepsilon_f}$$

$$+ \frac{2}{2\pi}\ln\left(\frac{\varepsilon_f^2+\Delta^2}{D^2}\right) + \frac{2\Delta}{2\pi}\frac{2\Delta}{\varepsilon_f^2+\Delta^2}$$

$$= \frac{1}{\Delta_0}(\varepsilon_f - E_0) - \frac{2}{\pi} + \frac{2}{\pi}\left(\frac{\varepsilon_f^2+\Delta^2}{\varepsilon_f^2+\Delta^2}\right)$$

$$+ \frac{1}{\pi}\ln\left(\frac{\varepsilon_f^2+\Delta^2}{D^2}\right) = 0$$

$$\frac{\Delta_0}{\pi} \ln\left(\frac{\varepsilon_f^2+\Delta^2}{D^2}\right) = E_0 - \varepsilon_f$$

$$\frac{\partial \tilde{S}_{eff}}{\partial \tilde{\varepsilon}_f} = 0$$

$$\frac{\Delta}{\Delta_0} - 1 + \frac{2}{\pi}\tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f}\right) = 0$$

$$\frac{2}{\pi}\tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f}\right) = 1 - \frac{\Delta}{\Delta_0} \equiv \sum_m \langle f_m^+ f_m\rangle$$

$$= \sum_m \langle F_m^+ F_m\rangle$$

$$= n_f$$

$$\frac{\partial \tilde{S}_{eff}}{\partial \varepsilon_f} = 0$$

$$= \frac{\Delta}{\Delta_0} - 1 + \frac{2}{\pi}\tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f}\right)$$

$$+ \frac{2\varepsilon_f}{\pi}\,\frac{1}{1+\frac{\Delta^2}{\varepsilon_f^2}}\left(-\frac{\Delta}{\varepsilon_f^2}\right)$$

$$+ \frac{2\Delta}{2\pi}\,\frac{2\varepsilon_f}{\varepsilon_f^2+\Delta^2}$$

$$= \frac{\Delta}{\Delta_0} - 1 + \frac{2}{\pi}\tan^{-1}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon_f}\right) = 0$$

Anta at E_0 er stor og negativ, $|E_0| \gg D$.

$n_f \cong 1 \Rightarrow$

$$\frac{\Delta_0}{\varepsilon_f} \ln\left(\frac{\varepsilon_f^2 + \Delta^2}{D^2}\right) \simeq E_0$$

$$k_B T_K \equiv \sqrt{\varepsilon_f^2 + \Delta^2} \; :$$

Typisk energi for resonansen.

$$\frac{2\Delta_0}{\pi} \ln\left(\frac{k_B T_K}{D}\right) = -|E_0|$$

$$k_B T_K \simeq D\, e^{-\frac{\pi |E_0|}{2\Delta_0}}$$

D: 10^4 K

$k_B T_K$: 1 K når $|E_0|$ stor.

$\boxed{\varepsilon_f \simeq k_B T_K}$

Dersom $U = 0$:

$$U_{eff} = -\frac{2\Delta_0}{\pi} + \frac{2E_0}{\pi} \tan^{-1}\left(\frac{\Delta_0}{E_0}\right) + \frac{2\Delta_0}{\pi} \ln\left(\frac{E_0^2 + \Delta_0^2}{D^2}\right)$$

$\Rightarrow$ „$k_B T_K$" $\sim E_0$ Altså ingen liten skala!

Når $|E_0|$ er moderat, er

$$n_f = 1 - \frac{\Delta}{\Delta_0} < 1$$

Det betyr at vi har valens-fluktuasjoner på den magn. urenheten. (Valens-fluktuasjoner = ladnings- og spinn-fluktuasjoner)

Når $|E_0| \gg D \Rightarrow n_f \Rightarrow 1$

Ikke lenger valens-fluktuasjoner (Valens-fluktuasjoner = ladningsfluktuasjoner).

Hvilke fluktuasjoner står vi igjen med i denne grensen?

Svaret er: Spinn-fluktuasjoner.
Fysikken blir at et lokalisert impurity-spin forårsaker spinn-flip hos et forbi-passerende ledningsbånds-elektron

En modell til beskrivelse av slik spredning er Kondo-modellen:

$$H_c = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k \, c^+_{k\sigma} c_{k\sigma}$$

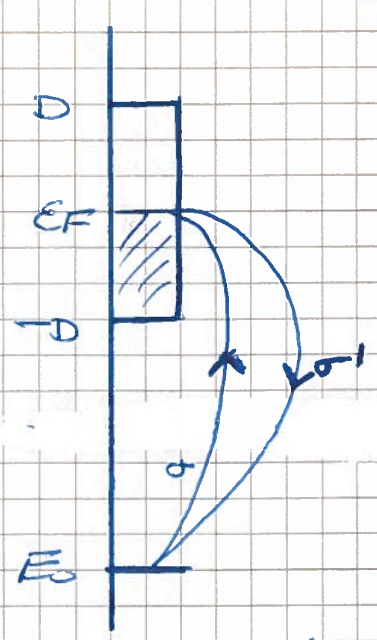
$$+ J \sum_{\substack{k,k' \\ \sigma\sigma'}} \vec{S} \cdot c^+_{k\sigma} \tau_{\sigma\sigma'} c_{k'\sigma'}$$

$\tau_{\sigma\sigma'}$: Pauli-matriser.

$\vec{S}$: Impurity-spin. (lokalisert)

Siden denne modellen beskriver fysikken til Anderson-modellen i grensen $|E_d| \gg D$ (som kalles Kondo-grensen) bør vi kunne utlede H_{ic} fra Anderson-modellen i denne grensen. Det viser seg å bli som følger:

$|E_d| \gg D \Rightarrow$ De er magnetisk urenhet kun virtuelt utbredt:



Effekten av hoppleddet V kan tas med til 2. orden i perturbasjonsteori:

$$H = H_0 + H_I$$

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} + E_0 \sum_\sigma F^+_\sigma F_\sigma$$

$$H_I = V \sum_{k\sigma} \left(F^+_\sigma c_{k\sigma} + h.c. \right)$$

2. ordens prosessen i figuren over, er beskrevet ved:

$$- \frac{V^2}{-E_0 + \varepsilon_F} \sum_{k\sigma} c^+_{k\sigma} F_\sigma \sum_{k'\sigma'} F^+_{\sigma'} c_{k'\sigma'}$$

$$\cong + \frac{V^2}{|E_0|} \sum_{\substack{k k' \\ \sigma \sigma'}} F^+_{\sigma'} F_\sigma c^+_{k\sigma} c_{k'\sigma'}$$

Neglisjerte ε_F, dropper et potensialbrønnbidrag

$$= J \sum_{\substack{kk' \\ \sigma\sigma'}} F^+_{\sigma'} F_\sigma \, C^+_{k\sigma} \, C_{k'\sigma'}$$

$$J = \frac{V^2}{|E_0|}$$

Det er klart at dette på en eller annen måte inkluderer spin-flip-prosesser, og vi viser eksplisitt at (for $S = 1/2$) har dette formen som i Kondo-modellen.

Utfør først spin-summasjonene i overstående summer:

$$\sum_{\sigma\sigma'} F^+_{\sigma'} F_\sigma \, C^+_{k\sigma} \, C_{k'\sigma'}$$

$$= \underbrace{\uparrow \quad \uparrow}_{} \cdot \underbrace{\uparrow \quad \uparrow}_{}$$

$$+ \underbrace{\downarrow \quad \uparrow}_{} \cdot \underbrace{\uparrow \quad \downarrow}_{}$$

$$+ \underbrace{\uparrow \quad \downarrow}_{} \cdot \underbrace{\downarrow \quad \uparrow}_{}$$

$$+ \underbrace{\downarrow \quad \downarrow}_{} \cdot \underbrace{\downarrow \quad \downarrow}_{}$$

$$F \qquad \cdot \qquad C$$

Spin-tilstander:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad ; \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$\left.\begin{aligned}
c_\uparrow^+ c_\uparrow |\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle \\
\text{—"—} \quad |\downarrow\rangle &= 0 \\
c_\downarrow^+ c_\downarrow |\uparrow\rangle &= 0 \\
c_\downarrow^+ c_\downarrow |\downarrow\rangle &= |\downarrow\rangle \\
c_\uparrow^+ c_\downarrow |\uparrow\rangle &= 0 \\
c_\uparrow^+ c_\downarrow |\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle \\
c_\downarrow^+ c_\uparrow |\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle \\
c_\downarrow^+ c_\uparrow |\downarrow\rangle &= 0
\end{aligned}\right\} \text{Tilsvarende for F-operatorene.}$$

$$\Rightarrow \quad c_\uparrow^+ c_\uparrow = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1+\tau_z)$$

$$c_\downarrow^+ c_\downarrow = \begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1-\tau_z)$$

$$c_\uparrow^+ c_\downarrow = \begin{pmatrix}0 & 1\\0 & 0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\tau_x + i\tau_y)$$

$$c_\downarrow^+ c_\uparrow = \begin{pmatrix}0 & 0\\1 & 0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\tau_x - i\tau_y)$$

$$\Rightarrow J \sum_{\substack{kk' \\ \sigma\sigma'}} \Big[F^+_{\sigma'} \tfrac{1}{2}(\delta_{\sigma'\sigma} + \tau^z_{\sigma'\sigma}) F_\sigma \cdot C^+_{k\sigma} \tfrac{1}{2}(\delta_{\sigma\sigma'} + \tau^z_{\sigma\sigma'}) C_{k'\sigma'}$$

$$+ F^+_{\sigma'} \tau^-_{\sigma'\sigma} F_\sigma \; C^+_{k\sigma} \tau^+_{\sigma\sigma'} C_{k'\sigma'}$$

$$+ F^+_{\sigma'} \tau^+_{\sigma'\sigma} F_\sigma \; C^+_{k\sigma} \tau^-_{\sigma\sigma'} C_{k'\sigma'}$$

$$+ F^+_{\sigma'} \tfrac{1}{2}(\delta_{\sigma'\sigma} - \tau^z_{\sigma'\sigma}) F_\sigma \cdot C^+_{k\sigma} \tfrac{1}{2}(\delta_{\sigma\sigma'} - \tau^z_{\sigma\sigma'}) C_{k'\sigma'} \Big]$$

$\delta_{\sigma\sigma'}$: Potensial-spredning.
Disse leddene neglisjeres.

$$\Rightarrow J \sum_{\substack{kk' \\ \sigma\sigma'}} \underbrace{F^+_{\sigma'} \vec{\tau}_{\sigma'\sigma} F_\sigma}_{\text{Impurity-spinn}} \cdot \underbrace{C^+_{k\sigma} \vec{\tau}_{\sigma\sigma'} C_{k'\sigma'}}_{\text{Elektron-spinn}}$$

$$J \; \vec{S} \cdot \vec{s} \; ; \; J > 0$$

Antiferromagnetisk kobling
Det som skjer under T_K:
Spinnet til ledningselektronet

binder seg i en singlet til impurity spinnet (i Kondo-grensen) og lager en spredningsresonans på Fermi-nivå.

Impurity-spinnet kompenseres altså av spinnet i ledningsbåndet: Ledningsbånd-elektronet „skjermer" ut impurity spinnet.

Når det er få impurity spinn sammenlignet med antall elektroner innenfor en energi $\sim T_K$ fra ε_F, vil alle impurity-spinn som måtte finnes skjermes ut.

Grunntilstanden er ikke magnetisk ordnet. Vi får istedet en (uromelisnet) Fermi-væske.

$T \gg T_K$: Ledningsbånd-elektroner holdt dekoplet fra impurity-spinn (svakt kobling regime)

$T < T_K$: Ledningsbånd og impurity spinn koblet sammen i spinn-singlet. Spredningsresonans. (Sterkt kobling regime)

Anderson gittermodell.
Tunge fermion system.

Anta at vi ser på et metall hvor vi har introdusert så stor konsentrasjon av magnetiske urenheter at vi ikke lenger kan betrakte dem som isolerte. Vi ser derfor på et interagerende elektron-system, koblet til et gitter av Kondo-type urenheter, av det samme slaget som vi så på i forrige avsnitt. Modellen blir Anderson gitter modellen:

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} + E_0 \sum_{i\sigma} f^+_{i\sigma} f_{i\sigma}$$

$$+ U \sum_i f^+_{i\uparrow} f_{i\uparrow} f^+_{i\downarrow} f_{i\downarrow}$$

$$+ \sum_{ik\sigma} V_{k\sigma i} \left(c^+_{k\sigma} f_{i\sigma} + f^+_{i\sigma} c_{k\sigma} \right)$$

Igjen blir dette et komplisert problem p.g.a. leddet med U

Som i impurity problemet, setter vi $U = \infty$, som innebærer no-double occupancy constraint, på hvert enkelt impurity gitterpunkt. (# impurity gitterpunkt er fastlagt, men disse kan variere) Vi innfører derfor, som tidligere, nye fermion og boson-operatorer

$$F_{i\sigma}^{+} = f_{i\sigma}^{+} b_i$$

$$F_{i\sigma} = f_{i\sigma} b_i^{+}$$

Altså har vi et hjelpeboson b_i, som i impurity-problemet, men nå på hvert gitterpunkt. Da oppnår vi:

$$\sum_{\sigma} F_{i\sigma}^{+} F_{i\sigma} \leq 1 \Rightarrow$$

$$Q_i \equiv \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^{+} f_{i\sigma} + b_i^{+} b_i = 1$$

Partisjons-funksjonen ($U = \infty$)

$$Z = \int Dc^{+} Dc\, Df^{+} Df\, Db^{+} Db \left(\prod_i \delta_{Q_i,1}\right) e^{S}$$

$$S = -\sum_i \int_0^{\beta} d\tau \left[b_i^{+} \frac{\partial b_i}{\partial \tau} + f_{i\sigma}^{+} (\partial_\tau + E_0) f_{i\sigma} \right]$$

$$- \sum_{k\sigma} \int_0^{\beta} c_{k\sigma}^{+} (\partial_\tau + \varepsilon_k) c_{k\sigma}\, d\tau$$

$$- \sum_{ik\sigma} \int_0^{\beta} d\tau\, V_{k\sigma i} \left(c_{k\sigma}^{+} b_i^{+} f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^{+} c_{k\sigma} b_i \right)$$

For hver τ-verdi:

$$\prod_{i,\tau} \delta_{Q_i,1} = \left(\prod_{i,\tau} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\lambda_i}{2\pi}\right) e^{-i\sum_i \int_0^\beta \lambda_i (Q_i - 1)\, d\tau}$$

constraint innføres pr. hvert gitterpunkt, og for alle tider!

Dermed får vi, som i urenhetsproblemet, partisjonsfunksjonen skrevet som et unrestrikt funksjonalintegral:

$$Z = \int Dc^+ Dc\, Df^+ Df\, Db^+ Db\, D\lambda\, e^{\tilde{S}}$$

$$\tilde{S} = -\sum_i \int_0^\beta d\tau \left[b_i^+ \frac{\partial b_i}{\partial \tau} + f_{i\sigma}^+ (\partial_\tau + E_0) f_{i\sigma} \right]$$

$$- \sum_{k\sigma} \int_0^\beta d\tau\, c_{k\sigma}^+ (\partial_\tau + \varepsilon_k) c_{k\sigma}$$

$$- \sum_{ik\sigma} \int_0^\beta d\tau\, V_{k\sigma i} \left(c_{k\sigma}^+ f_{i\sigma} b_i^+ + f_{i\sigma}^+ c_{k\sigma} b_i \right)$$

$$- \sum_i \int_0^\beta d\tau\, i\lambda_i \left(\sum_\sigma f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + b_i^+ b_i - 1 \right)$$

$$= \sum_i \int_0^\beta d\tau \cdot i\lambda_i$$

$$- \sum_{i\sigma} \int_0^\beta d\tau \left[b_i^+ (\partial_\tau + i\lambda_i) b_i + f_{i\sigma}^+ (\partial_\tau + E_0 + i\lambda_i) f_{i\sigma} \right]$$

$$- \sum_{k\sigma} \int_0^\beta d\tau\, c_{k\sigma}^+ (\partial_\tau + \varepsilon_k) c_{k\sigma}$$

$$- \sum_{k\sigma i} \int_0^\beta d\tau\, V_{k\sigma i} \left(c_{k\sigma}^+ f_{i\sigma} b_i^+ + f_{i\sigma}^+ b_i c_{k\sigma} \right)$$

Mean-field:

$$i\lambda_i \to \lambda$$
$$b_i \to b$$
$$E_0 + i\lambda_i \to E_0 + \lambda \equiv \varepsilon_f$$

$$\tilde{S} = + N\beta\,\lambda - N\beta\,\lambda b^2$$
$$- \sum_{i\sigma} \int_0^\beta f_{i\sigma}^+ (\partial_\tau + \varepsilon_f) f_{i\sigma}\, d\tau$$
$$- \sum_{k\sigma} \int_0^\beta c_{k\sigma}^+ (\partial_\tau + \varepsilon_k) c_{k\sigma}\, d\tau$$
$$- \sum_{ki\sigma} \int_0^\beta d\tau\, b V_{ki} \left(c_{k\sigma}^+ f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^+ c_{k\sigma}\right)$$

N: „Volumet" av systemet = # impurity gitterpunkt!

Forenkling av modell: Koblings-leddet skrives:

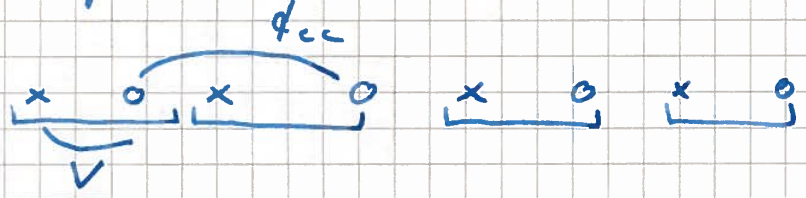
$$- \sum_{k\sigma} \int_0^\beta d\tau\, b \cdot V \left(c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + f_{k\sigma} c_{k\sigma}\right)$$

Likeledes:

$$- \sum_{i\sigma} \int_0^\beta d\tau\, f_{i\sigma}^+ (\partial_\tau + \varepsilon_f) f_{i\sigma}$$
$$= - \sum_{k\sigma} \int_0^\beta d\tau\, f_{k\sigma}^+ (\partial_\tau + \varepsilon_f) f_{k\sigma}$$

Nå vi skriver modellen slik,
er det ekvivalent Fourier-transform
av en rell-roms modell
med en enhetscelle som består
av et c-elektron-orbital
og en f-elektron-orbital.

c-elektronene har hopp
f- -"- har ikke hopp



f-elektronene blir mobile, fordi
de er koblet til c-elektronene
med matrise-elementet V

$$\sum_{ij\sigma} t_{cc}^{ij}\, c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma} \rightarrow \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma}$$

$$E_0 \sum_i F_{i\sigma}^{+} F_{i\sigma} \rightarrow E_0 \sum_k F_{k\sigma}^{+} F_{k\sigma}$$

$$V \sum_i \left(c_i^{+} f_i + f_i^{+} c_i \right)$$

$$\rightarrow V \sum_{k\sigma} \left(c_{k\sigma}^{+} F_{k\sigma} + F_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma} \right)$$

Like mange c-gitterpunkt som
F-gitterpunkt.

Da får vi, i mean-field teori:

$$Z = e^{N\beta\lambda(1-b^2)} \int D\psi^+ D\psi \, e^{S_{MF}}$$

$$S_{MF} = -\sum_{k\sigma} \int_0^\beta d\tau \; \psi^+_{k\sigma} A \psi_{k\sigma}$$

$$\psi_{k\sigma} = \begin{pmatrix} c_{k\sigma} \\ f_{k\sigma} \end{pmatrix} ; \quad \psi^+_{k\sigma} = (c^+_{k\sigma}, f^+_{k\sigma})$$

$$A = \begin{pmatrix} \partial\tau + \varepsilon_k & Vb \\ Vb & \partial\tau + \varepsilon_f \end{pmatrix}$$

$$Z = e^{N\beta\lambda(1-b^2) + \mathrm{Tr}\ln A}$$

$$\mathrm{Tr}\ln A = \sum_{k\sigma} \int_0^\beta d\tau \; \mathrm{tr}\ln \begin{pmatrix} \partial\tau + \varepsilon_k & Vb \\ Vb & \partial\tau + \varepsilon_f \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\beta}\sum_{\sigma} \sum_{k\omega_n} \mathrm{tr}\ln \begin{pmatrix} -i\omega_n + \varepsilon_k & Vb \\ Vb & -i\omega_n + \varepsilon_f \end{pmatrix}$$

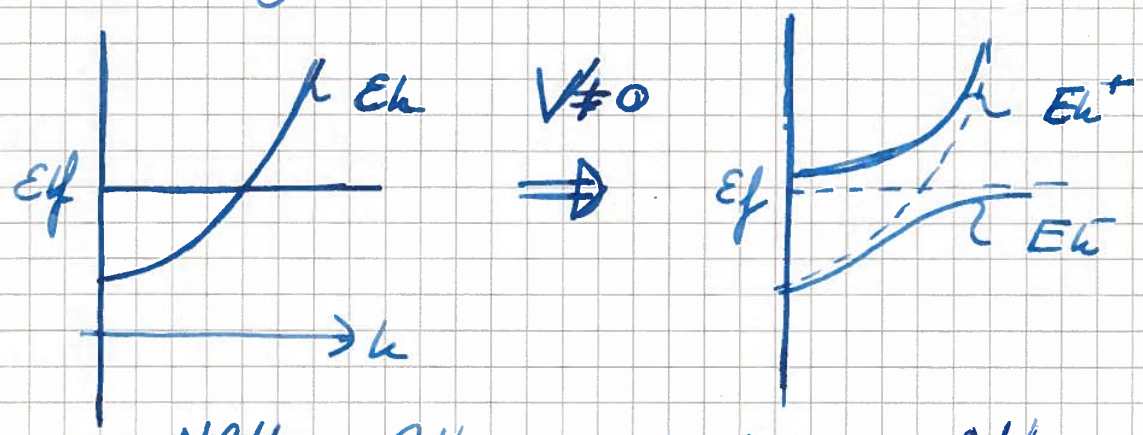
$$= \frac{1}{\beta}\sum_{\sigma} \sum_{k} \sum_{\omega_n} \ln\left[(i\omega_n - E_k^+)(i\omega_n - E_k^-)\right]$$

$$= 2 \sum_k \ln\left[(1+e^{-\beta E_k^+})(1+e^{-\beta E^-})\right]$$

$$E_k^{\pm} = \frac{1}{2}\left(\varepsilon_k + \varepsilon_f \pm \sqrt{(\varepsilon_k - \varepsilon_f)^2 + 4V^2 b^2}\right)$$

$$f = N\lambda(b^2 - D) - \frac{2}{\beta}\sum_k \left[\ln\left(1 + e^{-\beta E_k^+}\right) + \ln\left(1 + e^{-\beta E_k^-}\right)\right]$$

Igjen har dette form som en fri elektron gas. + et ekst. „bosonisk" bidrag



NB!! Alle energier målt relativt Fermi-nivå.

Vi ser at dispersjons-relasjonen nær ε_f (renormalisert impurity nivå) er veldig flat. Det betyr et effektiv masse for kvasi-partiklene, i nærheten av ε_f er veldig stor.

$$Z = Z_{boson} \cdot Z_{fermion}$$

$$Z_{fermion} = \int D\psi^+ D\psi \, e^{-\sum_{k\sigma} \int_0^\beta d\tau \, \psi^+_{k\sigma} A \psi_{k\sigma}}$$

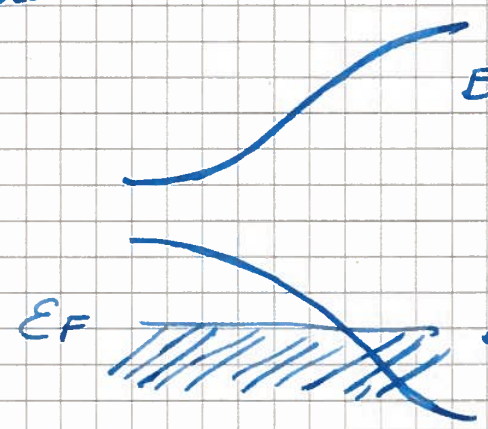
Form som for fri elektrongass med hamilton-operator

$$H = \sum_{k\sigma} \psi^+_{k\sigma} \begin{pmatrix} \varepsilon_k & V_b \\ V_b & \varepsilon_f \end{pmatrix} \psi_{k\sigma}$$

$$S = -\int_0^\beta d\tau \underbrace{\left[\sum_{k\sigma} \psi^+_{k\sigma} \frac{\partial \psi^+_{k\sigma}}{\partial \tau} + \sum_{k\sigma} \psi^+_{k\sigma} H \psi_{k\sigma} \right]}$$

$$= \sum_{k\sigma} \varphi^+_{k\sigma} \frac{\partial \varphi^+_{k\sigma}}{\partial \tau} + \sum_{k\sigma} \varphi^+_{k\sigma} D \varphi_{k\sigma}$$

$$H = \sum_{k\sigma} \varphi^{+(+)}_{k\sigma} \varphi_{k\sigma} E_k^{(+)} + \sum_{k\sigma} \varphi^{+(-)}_{k\sigma} \varphi^{(-)}_{k\sigma} E_k^{(-)}$$



$$\varphi_{k\sigma} = \begin{pmatrix} \varphi^{(+)}_{k\sigma} \\ \varphi^{(-)}_{k\sigma} \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} E_k^{(+)} & 0 \\ 0 & E_k^{(-)} \end{pmatrix}$$

Eksitasjons-spektrum (lave energier):
$E_k^{(-)}$ Selv for $U=\infty$: Renormalisert fri elektron gass, bortsett med „tunge" elektroner!!

Er kvasipartiklene „dunge"?

I forrige avsnitt viste vi at

$$\varepsilon_f = D\, e^{-\frac{\pi |E_0|}{2\Delta_0}} \quad ; \quad \Delta_0 = \pi \rho_0 V^2$$

∴ ε_f ble „spikket" fast til fermi-nivået.

Er noe tilsvarende tilfelle i gitterfelltet vi nå se på? For å besvare dette spørsmålet, må vi løse stasjonær-punkt ligningen.

Fysikken i problemet er bestemt ut fra hva som skjer på Fermi-nivå, eller i nærheten.

Dersom ε_f igjen blir „spikket" fast til Fermi-nivået, vil lavenergi kvasipartiklene i systemet, dvs. de viktigste fluktuasjonene, ha stor effektiv masse; E_F^* er flate i nærheten av ε_f.

Vi får et kurvet fermion-system, fra korrelasjons-effekter, fordi $\varepsilon_f \simeq \varepsilon_F$ skyldes stor U.

Før vi gjør st. punkt-betingelser, se vi litt nærmere på propagatorene for dette systemet.

Fermion-propagators

$$\psi_{k\sigma} = \begin{pmatrix} c_{k\sigma} \\ f_{k\sigma} \end{pmatrix}$$

$$G(\tau, \varepsilon_k, \varepsilon_f) = -\langle \psi_{k\sigma} \psi^+_{k\sigma} \rangle$$

$$G^{-1}(\tau) = -A = -\begin{pmatrix} \partial_\tau + \varepsilon_k & V_b \\ V_b & \partial_\tau + \varepsilon_f \end{pmatrix}$$

$$G^{-1}(k, i\omega_n) = -\begin{pmatrix} -i\omega_n + \varepsilon_k & V_b \\ V_b & -i\omega_n + \varepsilon_f \end{pmatrix}$$

$$G(k, i\omega_n) = \begin{pmatrix} i\omega_n - \varepsilon_f & +V_b \\ V_b & i\omega_n - \varepsilon_k \end{pmatrix} \frac{1}{\det G^{-1}}$$

$$\det G^{-1} = (i\omega_n - \varepsilon_k)(i\omega_n - \varepsilon_f) - s_0^2$$

$$= (i\omega_n - E_k^+)(i\omega_n - E_k^-)$$

$$E_k^\pm = \frac{1}{2}\left(\varepsilon_k + \varepsilon_f \pm \sqrt{(\varepsilon_k - \varepsilon_f)^2 + 4 s_0^2}\right)$$

$$G_{cc}(\vec{k}, i\omega_n) = -\langle c_{k\sigma} c^+_{k\sigma} \rangle$$

$$= \frac{i\omega_n - \varepsilon_f}{(i\omega_n - E_k^+)(i\omega_n - E_k^-)}$$

$$G_{ff}(\vec{k}, i\omega_n) = -\langle f_{k\sigma} f^+_{k\sigma} \rangle$$

$$= \frac{i\omega_n - \varepsilon_k}{(i\omega_n - E_k^+)(i\omega_n - E_k^-)}$$

$$G_{cf} = G_{fc} = -\langle c\, f^+\rangle = -\langle f\, c^+\rangle$$

$$= \frac{S_0}{(i\omega_n - E_k^+)(i\omega_n - E_k^-)}$$

$$= 0\,; \quad \underline{\underline{V=0}}$$

$\underline{\underline{V=0}}$:

$$G_{cc}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{i\omega_n - \varepsilon_f}{(i\omega_n - \varepsilon_k)(i\omega_n - \varepsilon_f)} = \underline{\underline{\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}}}$$

Fri elektrongas, som vanlig.

$$G_{ff}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{i\omega_n - \varepsilon_k}{(i\omega_n - \varepsilon_k)(i\omega_n - \varepsilon_f)}$$

$$= \underline{\underline{\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_f}}}$$

$\underline{\underline{V=0}} \Rightarrow G_{ff}$ uavhengig av $\underline{k}$

$\Rightarrow$ <u>beskriver lokaliserte elektroner</u>, som forventet.

Effekten av U forsvinner i G_{cc} når $V=0$, men er manifest i G_{ff}: $\varepsilon_0 \to \varepsilon_f$.

Disse propagatorene kan vi skrive på fermi-vaska form, selv når $V \neq 0$

Se f.eks: på:

$G_{cc}(\vec{k}, i\omega_n)$. Vi dobbeltoppsplitte utbrytelsen:

$$G_{cc}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{A}{i\omega_n - E_k^+} + \frac{B}{i\omega_n - E_k^-}$$

$$= \frac{i\omega_n - \varepsilon_f}{(i\omega_n - E_k^+)(i\omega_n - E_k^-)}$$

$\Rightarrow$

$$(A+B)\, i\omega_n - (B E_k^+ + A E_k^-) = i\omega_n - \varepsilon_f$$

$$A + B = 1$$

$$B E_k^+ + A E_k^- = \varepsilon_f$$

$$(1-A) E_k^+ + A E_k^- = \varepsilon_f$$

$$A(E_k^- - E_k^+) = \varepsilon_f - E_k^+$$

$$= \varepsilon_f - \tfrac{1}{2}(\varepsilon_f + \varepsilon_k + \Gamma)$$

$$= \tfrac{1}{2}(\varepsilon_f - \varepsilon_k - \Gamma)$$

$$E_k^- - E_k^+ = -2\Gamma$$

$$-2\Gamma A = -\tfrac{1}{2}(\Gamma + \varepsilon_k - \varepsilon_f)$$

$$A = \tfrac{1}{2}\left(1 + \frac{\varepsilon_k - \varepsilon_f}{\Gamma}\right)$$

$$B = \tfrac{1}{2}\left(1 - \frac{\varepsilon_k - \varepsilon_f}{\Gamma}\right)$$

$|\varepsilon_k - \varepsilon_f| \gg \Delta_0 \Rightarrow$

$$A \simeq 1$$

$$B \simeq 0$$

$(\varepsilon_k - \varepsilon_f) < 0;\ |\varepsilon_k - \varepsilon_f| \gg \Delta$

$$A \simeq 0$$

$$B \simeq 1$$

$E_k^+ \simeq \varepsilon_k$; $\quad \varepsilon_k - \varepsilon_f \gg \Delta_0$

$$\Rightarrow G_{cc} \simeq \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}$$

$$G_{ff} = \frac{B}{i\omega_n - E_k^+} + \frac{A}{i\omega_n - E_k^-}$$

Nå

$$G_{cc} \simeq \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}$$

og

$$G_{ff} \simeq \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_f}$$

fordi $\quad E_k^- \simeq \varepsilon_f$

nå $\quad E_k^+ \simeq \varepsilon_k$

Omvendt, når $\quad E_k^+ \simeq \varepsilon_f$

$E_k^- \simeq \varepsilon_k$

har vi

$$G_{cc} \simeq \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_f}$$

$$G_{ff} \simeq \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}$$

I alle tilfelle har propagatoren enkle poler ⇒ de har Fermi-væske form

Fri energi pr enhets-celle:

$$f = -2(1-b^2) - \frac{2}{\beta N}\sum_k \ln\left(1+e^{-\beta E_k^+}\right)\left(1\ e^{-\beta E_k^-}\right)$$

$$f = -(\varepsilon_f - E_0)\left(1-\frac{\Delta}{\Delta_0}\right) - \frac{2}{\beta N}\sum_k \ln\left[\left(1+e^{-\beta E_k^+}\right)\left(1+e^{-\beta E_k^-}\right)\right]$$

N: # gitterpunkt i problemet.

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_f} = 0 = -1 + \frac{\Delta}{\Delta_0} + \frac{2}{N}\sum_k\left[\frac{\partial E_k^-}{\partial \varepsilon_f} f(E_k^-) + \frac{\partial E_k^+}{\partial \varepsilon_f} f(E_k^+)\right]$$

$$\frac{\partial f}{\partial \Delta} = 0 = \frac{\varepsilon_f - E_0}{\Delta_0} + \frac{2}{N}\sum_k\left[\frac{\partial E_k^-}{\partial \Delta} f(E_k^-) + \frac{\partial E_k^+}{\partial \Delta} f(E_k^+)\right]$$

$$-\frac{\partial f}{\partial \mu} = \frac{2}{N}\sum_k\left[f(E_k^-) + f(E_k^+)\right] = n = \underline{\underline{n_f + n_c}}$$

$$n_f = 1 - \frac{\Delta}{\Delta_0} \simeq 1$$

(Kondo-gren)

$$\frac{(\varepsilon_f - E_0)}{\Delta_0} + 2\sum_{k\sigma} \left(-\frac{1}{\pi \rho_0}\right) \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_k - \varepsilon_f)^2 + \Delta_0^2}} = 0$$

$$\frac{\varepsilon_f - E_0}{V^2} \simeq \frac{2}{2D} \int_{-D}^{\mu} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon - \varepsilon_f}$$

$$= -\frac{1}{D} \ln\left(\frac{\mu - \varepsilon_f}{-D - \varepsilon_f}\right)$$

$$\simeq -\frac{1}{D} \ln\left(\frac{\varepsilon_f - \mu}{D}\right)$$

$$= -2\rho_0 \ln\left(\frac{\varepsilon_f - \mu}{D}\right)$$

$|E_0| \gg \varepsilon_f$

$$-\frac{\pi |E_0|}{2\Delta_0} \simeq \ln\left(\frac{T_K}{D}\right) \quad ; \quad T_K = \varepsilon_f - \mu$$

$$\underline{\underline{T_K = D\, e^{-\frac{\pi |E_0|}{2\Delta_0}}}}$$

ε_f nær Fermi-nivå

$\Rightarrow$ Quasi-partikler på Fermi-nivå er tunge (har stor effektiv masse)

Fermi-væske for $U = \infty$! $\frac{m^*}{m} \sim 10^3$!

Bildet vi får, er altså en fermion gass med sterkt renormalisert kvasipartikler på fermi-nivå.

Kvasipartiklene er en lineær-kombinasjon av c- og f- elektroner.

Jo lavere ned vi trekker E_0, jo nærmere kommer E_f Fermi-nivå E_F. Kvasipartiklene blir mer f-like. Siden f-elektronene i utgangspunktet var lokaliserte: uendelig tunge, blir kvasipartiklene tyngre når $|E_0|$ økes.

Særlig i Kondo-regimet får vi ekstremt tunge kvasipartikler, $\frac{m^*}{m} \sim 1000$. Selv med så ekstreme korrelasjons-effekter overlever altså Fermi-væske bildet, $Z(k_F) > 0$, i tre dimensjoner.

Med $U=0$ ville vi ikke få disse effektene, fordi renormalisering av f-nivået ikke ville funnet sted.

Det vi hittil har sett er ikke eksempler på, et bosonisering av en del fermion-teorier, noen med sterk repulsiv vekselvirkning, andre med svak attraktiv v.v.

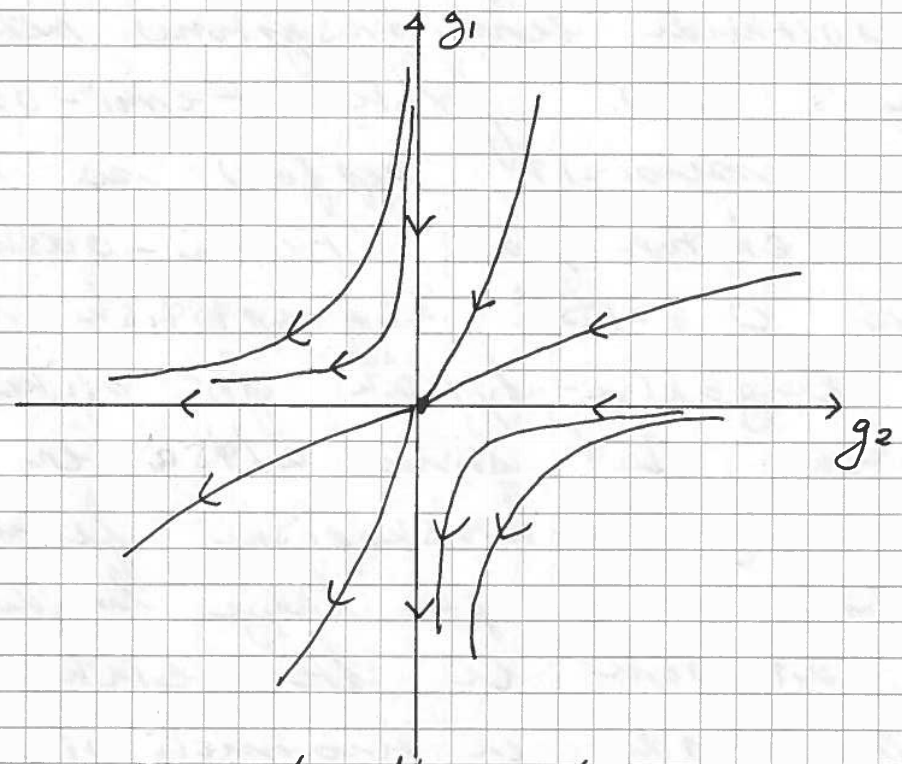
i) Svak attraktiv v.v. mellom fermioner: BCS-teori. Lett til ustabilitet av elektron gass.

ii) Sterk repulsiv v.v mellom fermioner: Hubbard-modellen, Anderson-modellen, Kondo-modellen. Selv med $U=\infty$, blir systemet en normalisert fri elektron-gass, i de tilfeller vi har sett på (med unntak av spesielle fyllingsfaktorer). Altså et systemet Fermi-væske.

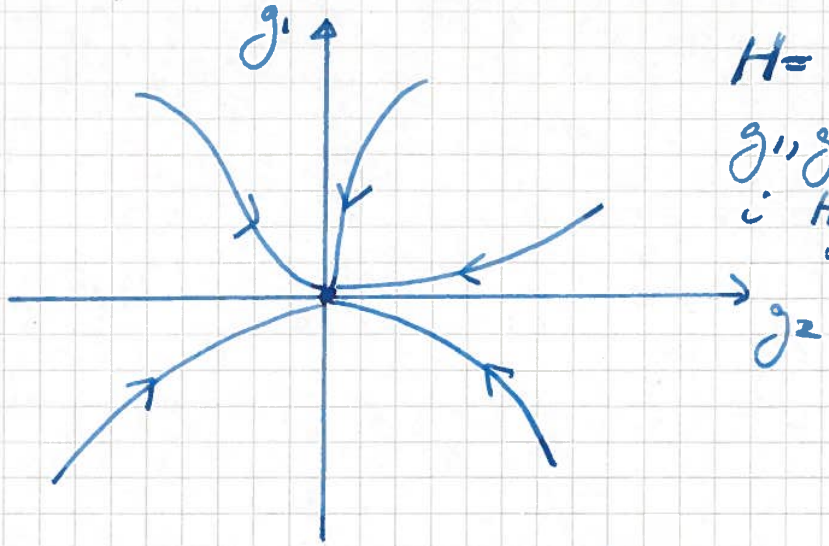
Nå skal vi se på bosonisering av 1-dimensjonale systemer, og vil oppdage at en vilkårlig svak repulsiv v.v er nok til å ødelegge Fermi-væske bildet. Istedet blir systemet en ny type metallisk system; et nytt fikspunkt som kalles en Luttinger-væske. Her er alle rester av en-elektron fysikk forsvunnet!

Vekselvirkende, en-dimensjonale fermion-systemer.

Vi har i foregående avsnitt sett gjentatte eksempler på at sterkt vekselvirkende fermionsystemer med repulsiv v.v. forble Fermi-væske, som essensielt oppfører seg som fri elektron gass. Fermi-væske teori er altså asymptotisk lavenergi- og langbølge-fysikk for slike systemer. Det finnes altså en rekke forskjellige mikroskopiske fermion modeller, som på lange lengdeskalaer ser ut som en fri elektron gass. Under en renormalisering prosedyre (som innebærer at vi betrakter et system definert ved en mikroskopisk Hamilton-operator, på stadig større lengdeskalaer) vil disse modellene flyte til et og samme punkt i et multidim. parameter-rom. Et slikt endepunkt for en renormalisering-flyt kalles et fikspunkt.



Typical flow-diagram for a fermi-gas.



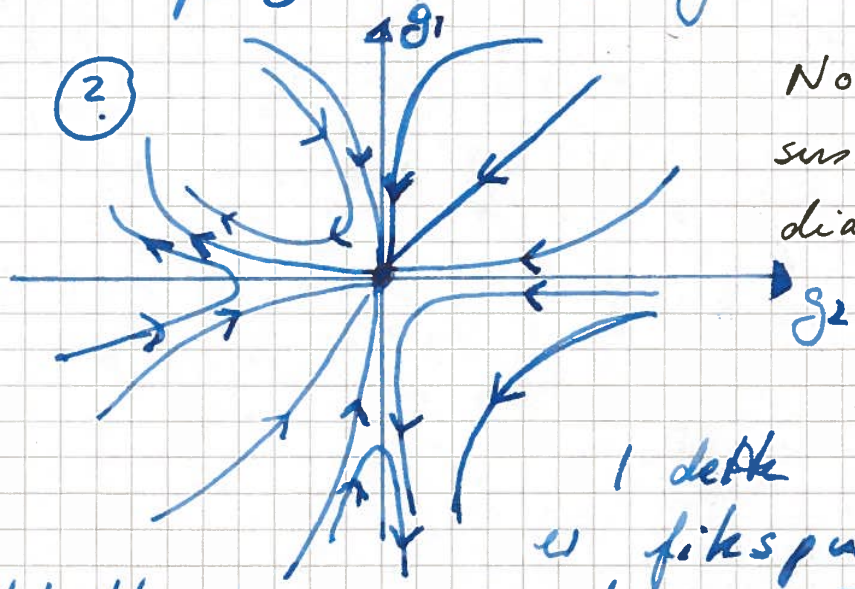
$H = H(g_1, g_2)$

g_1, g_2: Param. i Hamilton-operatoren.

Figuren illustrerer hvordan en slik flyt kan foregå. Fikspunktet (i origo) er i dette tilfellet ekstremt stabilt.

Dette trenger ikke nødvendigvis være tilfelle. Vi kan f. eks. ha følgende situasjon

2.



Not a very sensible flow-diagram.

I dette tilfellet er fikspunktet ustabilt i noen retninger. Dvs: For (g_1, g_2) - perturbasjoner med visse egenskaper, blir perturbasjonen relevante (de vokser på store length-skalaer)

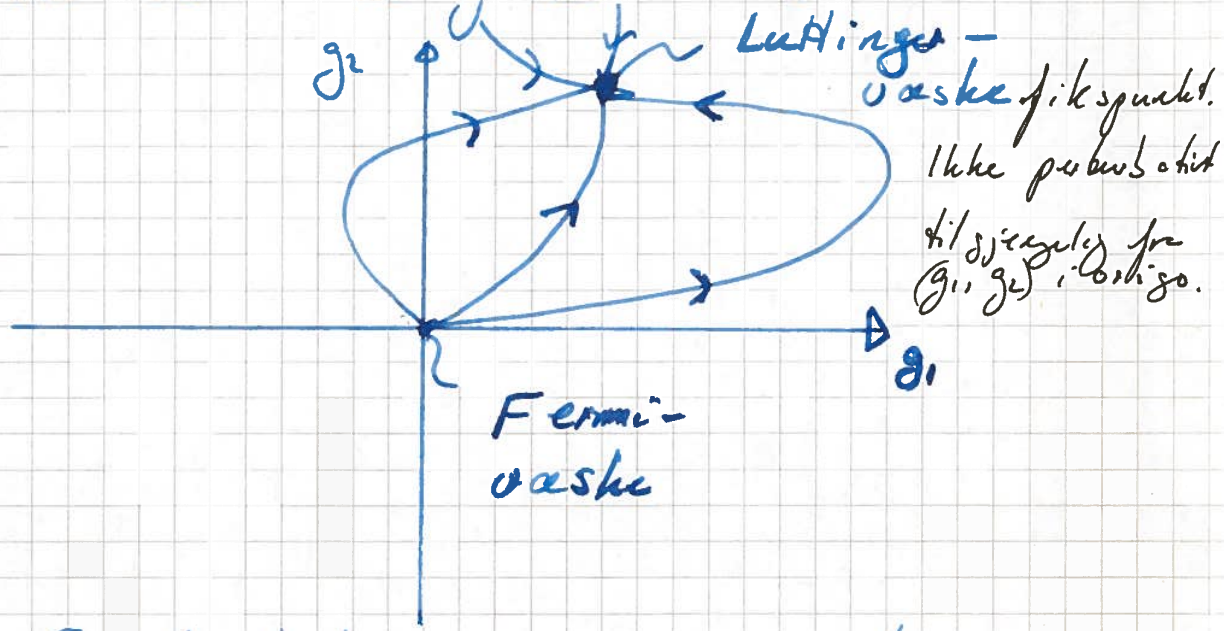
Fermi-væske teori har altså fremstås som et (svakt-koblings) fikspunkt ($g_1, g_2 \to 0$, $L \to \infty$) for usøkvirkende fermion-modeller.

(NB!! Fikspunktet er ustabilt for attraktive v.v., da får vi BCS-ustabilitet)

Likevel: Fermi-væske fikspunktet er forbløffende stabilt (robust) i 2 og 3 dimensjoner. Det eneste kjente metalliske system i mer enn én dimensjon hvor Fermi-væske teori manifest bryter sammen, er i de kvasi-todimensjonale høy-T_c superledere. Dette er kjent eksperimentelt, men fortsatt (høst '96) finnes ingen alment akseptert teori for dette.

I én dimensjon skal vi se at situasjonen er en annen. Her er Fermi-væske fikspunktet ustabilt, og tetthets- og

langbølge-fysikken er beskrevet av et annet fikspunkt: En Luttinger-væske, som har helt andre egenskaper enn en fri elektron-gass. Vi kan illustrere situasjonen slik:



Svak-koblings Fermi-væske fikspunktet $(g_1 = g_2 = 0)$ er erstattet av et <u>sterkt</u> koblings fikspunkt $(g_1, g_2 > 0)$: Luttinger-væske fikspunktet.

Vi skal se litt på dette fikspunktets egenskaper, og hvordan man kan regne på det.

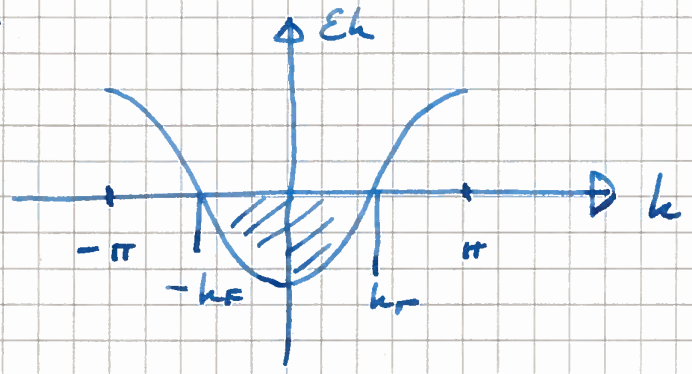
1 D vekselvirkende modell:

$$H = H_0 + H_I$$

Vi ser først på H_0:

$$H_0 = \sum_{ij\sigma} t_{ij} \, c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma}$$

$$\rightarrow \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \, c_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma}$$



Fermi-surface consists of two points.

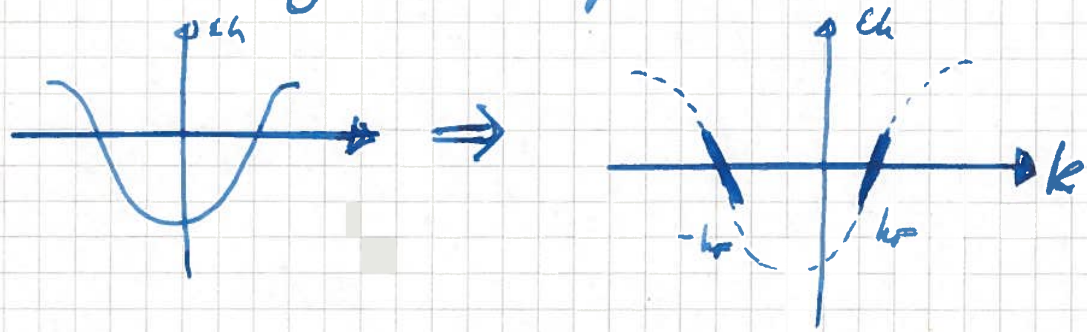
Vi er hovedsaklig interessert i lavenergi-fysikken for dette problemet; vi er hovedsaklig interessert i å beskrive ε_k i et lite område rundt Fermi-nivået, som i dette tilfellet er spesielt enkelt: Det består av kun to punkter!

$k > 0$: $\varepsilon_k \simeq v_F (k - k_F)$; $|k - k_F| \ll k_F$
Høyregående

$k < 0$: $\varepsilon_k \simeq v_F (-k - k_F)$; $|k - k_F| \ll k_F$
Venstre-gående

ε_k er her målt relativt Fermi-nivået

For hvert elektron-spinn σ har vi en type høyre-gående og en type venstre-gående fermioner.



$$H_0 \cong \sum_{k\sigma}{}' v_F(k-k_F)\, c^{+}_{1k\sigma} c_{1k\sigma} + \sum_{k\sigma}{}' v_F(-k-k_F)\, c^{+}_{2k\sigma} c_{2k\sigma}$$

NB!! Denne H_0-en er definert for $|\pm k-k_F| \ll k_F$!!

$c_{1k\sigma}$, $c^{+}_{1k\sigma}$: Høyre-gående elektroner.

$c_{2k\sigma}$, $c^{+}_{2k\sigma}$: Venstre-gående elektroner.

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \left[e^{-\alpha|k-k_F|} \left[v_F(k-k_F)\, c^{+}_{1k\sigma} c_{1k\sigma} \right] + \left[e^{-\alpha|-k-k_F|} v_F(-k-k_F)\, c^{+}_{2k\sigma} c_{2k\sigma} \right] \right]$$

$\underline{\underline{\alpha > 0}}$: Cutoff som begrenser k-summasjonen til k-vektorer nær Fermi-nivå, men slik at vi formelt har summen over alle k!!

Vi innfører fermion-operatorer i det reelle rommet:

$$\psi_{1\sigma}(x) = \int \frac{dk}{2\pi}\, c_{1k\sigma}\, e^{ikx}$$

$$\psi_{2\sigma}(x) = \int \frac{dk}{2\pi}\, c_{2k\sigma}\, e^{-ikx}$$

$\sum_k$: Begrenset til rundt Fermi-nivå

Fri fermion-propagator i x-rommet (lik tider) $\tau = \tau'$

$$G_1(x) = -i \langle : \psi_{1\sigma}(x)\, \psi^+_{1\sigma}(x') : \rangle$$

$$= -i \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{dk'}{2\pi}\, e^{ik(x-x')} \underbrace{\langle : c_{k\sigma}\, c^+_{k'\sigma} : \rangle}_{= -\delta_{kk'}\, n_k}$$

Litt mer detaljert her!

$$= i \int_{k<k_F} \frac{dk}{2\pi}\, e^{-\alpha|k-k_F|}\, e^{ik\cdot(x-x')}$$

$$= i \int_{k'<0} \frac{dk'}{2\pi} \cdot e^{-\alpha|k'|}\, e^{i(k+k_F)(x-x')}$$

$$= i\, e^{ik_F(x-x')} \int_{-\infty}^{0} \frac{dk}{2\pi}\, e^{-\alpha|k| + ik(x-x')}$$

$$= i\, e^{ik_F(x-x')} \int_{0}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, e^{-\alpha|k| + ik(x-x')}$$

$$= i\, \frac{e^{ik_F(x-x')}}{2\pi} \underbrace{\int_0^\infty dk\, e^{-k(\alpha + i(x-x'))}}_{+\ \frac{1}{\alpha + i(x-x')}}$$

$$G_1(x) = \frac{1}{2\pi}\, \frac{e^{ik_F(x-x')}}{x-x'}$$

$$G_2(x) = -\frac{1}{2\pi}\, \frac{e^{-ik_F(x-x')}}{(x-x')}$$

Enkle poler!

Via $\psi_{1\sigma}$, $\psi_{2\sigma}$ - operatorene, har vi:

$$H_0 = v_F \int_0^L dx \left[\psi_{1\sigma}^+ (-i\partial_x - k_F)\psi_{1\sigma} + \psi_{2\sigma}^+ (i\partial_x - k_F)\psi_{2\sigma}\right]$$

$$\psi_\sigma = \begin{pmatrix} \psi_{1\sigma} \\ \psi_{2\sigma} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$H_0 = v_F \sum_\sigma \int_0^L dx \left[\psi_\sigma^+ \underbrace{\begin{pmatrix} -i\partial_x - k_F & 0 \\ 0 & i\partial_x - k_F \end{pmatrix}}_{A_0} \psi_\sigma\right]$$

Vi inkluderer nå et vekselvirkningsledd i teorien.

Det har formen:

$$H_I = \sum_{\sigma,\sigma'} \int dx \int dy \; \underbrace{\psi_{1\sigma}^+(x)\psi_{1\sigma}(x)}_{\rho_{1\sigma}(x)} \, v(x-y) \, \underbrace{\psi_{2\sigma'}^+(y)\psi_{2\sigma'}(y)}_{\rho_{2\sigma'}(y)}$$

$$= \int dx\, dy \; \rho_1(x)\, v(x-y)\, \rho_2(y)$$

Vi ser ikke på ledd av typen $\rho_1\rho_1$, $\rho_2\rho_2$: Disse bidrar kun til renormalisering av v_F. ρ_1 ρ_2 derimot, gir oss interessante effekter.

Altså ønsker vi å studere teorien:

$$H = v_F \sum_\sigma \int dx \; \psi_\sigma^+ \; A_0 \; \psi_\sigma$$

$$+ \sum_{\sigma\sigma'} \int dx \; dy \quad \rho_{1\sigma}(x) \, v(x-y) \, \rho_{2\sigma'}(y)$$

For enkelhet, ser vi i fortsettelsen på spinnløse fermioner. (Senere har vi for oss det spinn-fulle problemet)

$$H = v_F \int dx \; \psi^+ A_0 \psi$$

$$+ \int dx \, dy \quad \rho_1(x) \; v(x-y) \, \rho_2(y)$$

Spinn-løst problem er det samme som et fullstendig spinn-polarisert problem.

Partisjons-funksjonen: (Ved å bruke de vanlige regler)

$$Z = \int D\psi_1^+ D\psi_1 D\psi_2^+ D\psi_2 \; e^{S}$$

$$S = -\int dx \int_0^\beta d\tau \left(\psi^+ \partial_\tau \psi + v_F \psi^+ A_0 \psi \right)$$

$$- \int dx \int dy \int_0^\beta d\tau \quad \rho_1(x) \quad v(x-y) \, \rho_2(y)$$

Vi forenkler modellen videre, til kun å inkludere kontakt-v.v. mellom fermioner.

$$v(x-y) = g \, \delta(x-y) \quad ; \quad g > 0$$

$$S = S_0 + S_I$$

$$S_0 = -\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \; \psi^+ (\partial_\tau + v_F A_0) \psi$$

$$Z_0 = e^{\mathrm{Tr} \ln (\partial_\tau + v_F A_0)}$$

$$= e^{\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \, \mathrm{tr} \ln (\partial_\tau + v_F A_0)}$$

$$e^{S_I} = e^{-g \int dx \int d\tau \; \rho_1 \rho_2}$$

Vi Hubbard-Stratonovich dekobler vekselvirknings-leddet på følgende måte:

$$\int D\varphi^+ D\varphi \; e^{-(\varphi^+ + g\rho_2)(\varphi + g\rho_2) \cdot g^{-1}}$$

$$= \text{const} = e^{-\mathrm{Tr} \ln (g^{-1})} = e^{\ln g} = g$$

Tilsvarende har vi:

$$\int D\varphi^* D\varphi \; e^{-\int (g^{-1} \varphi^* \varphi + i\varphi^* \rho_1 + i\varphi^* \rho_2) \, dx \, d\tau}$$

$$= \int D\varphi^* D\varphi \; e^{-\int [g^{-1} (\varphi^* + i g \rho_2)(\varphi + i g \rho_1) + g \rho_1 \rho_2] \, dx \, d\tau}$$

$$= e^{-\int g \rho_1 \rho_2 \, dx \, d\tau} \cdot \text{const}$$

(Sammenlign med s. 86a!)

const. er irrelevant

$$e^{S_I} = \int D\varphi^* D\varphi \; e^{-\int dx \int_0^\beta d\tau \left[g^{-1} \varphi^* \varphi + i \varphi^* g_1 + i \varphi g_2 \right]}$$

$$Z = \int D\varphi^* D\varphi \, D\psi_1^+ D\psi_1 \, D\psi_2^+ D\psi_2 \; e^{S'[\psi, \psi^+, \varphi, \varphi^*]}$$

$$S' = - \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \; \frac{\varphi^* \varphi}{g}$$

$$A = v_F A_0 + \vec{T} \partial_\tau + i \begin{pmatrix} \varphi^* & 0 \\ 0 & \varphi \end{pmatrix}$$

$$- \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \; \psi^+ \underbrace{\left[A_0 + \vec{T} \partial_\tau + i \begin{pmatrix} \varphi^* & 0 \\ 0 & \varphi \end{pmatrix} \right]}_{A = -\mathcal{G}^{-1} \; (= \langle \psi \psi^+ \rangle = \mathcal{G})} \psi$$

NB!! Ingen $\varphi^* \partial_\tau \varphi$ - ledd, fordi φ - feltet ikke inngår i H, men brukes til å dekoble V.V. - leddet, etter at partisjonsfunksjonen er skrevet ut.

$$\mathcal{G}(\partial_\tau, x) = - \langle \psi \psi^+ \rangle$$

Når vi eksplisitt bruker spinor - komponentene, finner vi

$$\mathcal{G}(\partial_\tau, x) = - \begin{pmatrix} \langle \psi_1 \psi_1^+ \rangle & 0 \\ 0 & \langle \psi_2 \psi_2^+ \rangle \end{pmatrix}$$

Siden denne matrise er diagonal, finner vi umiddelbart

$$+ \mathcal{G}_1 = - \left(-i v_F \partial_x + \partial_\tau - v_F k_F + i \varphi^* \right)^{-1}$$

$$\mathcal{G}_2 = - \left(i v_F \partial_x + \partial_\tau - v_F k_F + i \varphi \right)^{-1}$$

NB!! Fric Green's funksjon i fikserte bosoniske bakgrunnsfelt.

Differensial-ligninger for $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2$

$$\left(-i v_F \partial_x + \partial_\tau - v_F k_F + i \varphi^* \right) \mathcal{G}_1 = \delta(x) \, \delta(\tau)$$

$$\left(i v_F \partial_x + \partial_\tau - v_F k_F + \varphi \right) \mathcal{G}_2 = \delta(x) \, \delta(\tau)$$

NB!! Disse er begrenset til 1d LiM komplisitet, fordi $\varphi(x,\tau)$ og $\varphi^*(x,\tau)$ har dynamikk

Fri fermion-propagator:

er gitt ved

$$(i v_F \partial_x + \partial_\tau - v_F k_F)\, G_1^0 = -\delta(\tau)\,\delta(x)$$

$$(i v_F \partial_x + \partial_\tau - v_F k_F)\, G_2^0 = -\delta(\tau)\,\delta(x)$$

Vi ønsker å bregne G_1, G_2 siden disse gir mye informasjon om laveneergi-fysikken for den en-dimensjonale, interaktive, elektrongassen.

Husk at Green's funksjoner var viktige diagnostiske redskaper i Fermi-væske tilfellet.

Fourier-transform G_i^0-ligningene:

$$(v_F k - i\omega_n - v_F k_F)\, G_1^0 = -1$$

$$G_1^0(k, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - v_F(k - k_F)}$$

$$= \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_1(k)}$$

Kjent fri form!

$$(-v_F k - i\omega_n - v_F k_F)\, G_2^0 = -1$$

$$G_2^0 = \frac{1}{i\omega_n - v_F(-k - k_F)}$$

$$= \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_2(k)}$$

Fri form!

Hvordan ser disse frie propagatorene ut i det nulte rommet?

$$G_1^0(x,\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \underbrace{e^{-\alpha|k+k_F|}}_{\text{Cutoff-faktor}} \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} \frac{e^{ikx - i\omega_n\tau}}{i\omega_n - v_F(k-k_F)}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-\alpha|k+k_F| + ikx} f(v_F(k+k_F))\, e^{-v_F(k+k_F)\tau}$$

$$= e^{ik_Fx} \int_{-\infty}^{0} \frac{dk}{2\pi} e^{-\alpha|k| + ikx - v_F k\tau}$$

$$= \frac{e^{ik_Fx}}{2\pi} \int_0^{\infty} dk\, e^{-k(\alpha + ix - v_F\tau)}$$

$$= \frac{e^{ik_Fx}}{2\pi} \frac{1}{ix - v_F\tau + \alpha} \quad ; \alpha = 0^+$$

$\tau \to it$ $\quad G_1^0(x,\tau) \to i G_1^0(x,t)$

$$G_1^0(x,t) = i\, \frac{e^{ik_Fx}}{2\pi} \cdot \frac{1}{ix - iv_Ft + \alpha}$$

$$= \frac{e^{ik_Fx}}{2\pi} \cdot \frac{1}{x - v_Ft - i\alpha} \quad ; \alpha = 0^+$$

Pol: $x = v_Ft$. Klassisk utbredelse! (Til høyre)

$$G_2^0(x,\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, e^{-\alpha|-k-k_F|} \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} \frac{e^{ikx-i\omega_n\tau}}{i\omega_n - v_F(-k-k_F)}$$

$$k' = -k-k_F \Rightarrow k = -k'-k_F$$

$$G_2^0(x,\tau) = \frac{e^{-ik_Fx}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-\alpha|k|} \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} \frac{e^{-ikx-i\omega_n\tau}}{i\omega_n - v_F k}$$

Kan sammenligne allerede her, og se at som for $G_1^0(x,\tau)$ men med $x \to -x$.

$$= \frac{e^{-ik_Fx}}{2\pi} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-\alpha|k|-ikx} f(v_F k)\, e^{-v_F k\tau}}_{\text{Som før, med } x\to -x}$$

$$\underline{\underline{G_2^0(x,\tau) = \frac{e^{-ik_Fx}}{2\pi} \frac{1}{-ix - v_F\tau + \alpha}}} \; ; \alpha = 0^+$$

$\tau \to it$

$$\underline{\underline{G_2^0(x,t) = \frac{e^{-ik_Fx}}{2\pi} \frac{1}{-x - v_F t - i\alpha}}} \; ; \alpha = 0^+$$

<u>Pol</u>: $x = -v_F t$. Klassisk rettlinjet bevegelse, til venstre.

<u>Altså</u>: Også i det reelle rommet har Fermi-væske propagatoren enkel polstruktur, med en enkel tolkning.

Propagatorer i det vekselvirkende felt.

$$Z = \int D\psi^+ D\psi \, D\varphi^* D\varphi \, e^{S}$$

$$S = -\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \, \frac{\varphi^* \varphi}{g} - \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^\beta d\tau \, \psi^+(x,\tau) \, A(x,y,\tau) \, \psi(y,\tau)$$

$$A = \begin{pmatrix} D_1 + i\varphi^* & 0 \\ 0 & D_2 + i\varphi \end{pmatrix}$$

Fri fermion system koblet til ekstern boson-felt, φ som fluktuerer.

$$D_1 = -iv_F \partial_x + \partial_\tau - v_F k_F$$

$$D_2 = iv_F \partial_x + \partial_\tau - v_F k_F$$

Integrer ut fermioner $\Rightarrow$ $S_{eff}[\varphi^*, \varphi]$

$$Z = \int D\varphi^* D\varphi \, e^{S_{eff}}$$

$$S_{eff} = -\int_0^\beta d\tau \int_0^L dx \, \frac{\varphi^* \varphi}{g} + \mathrm{Tr} \ln (D_1 + i\varphi_1) + \mathrm{Tr} \ln (D_2 + i\varphi_2)$$

Purely bosonic theory

Notasjon: $\varphi_1 = \varphi^*$; $\varphi_2 = \varphi$

$$\left.\begin{aligned} -\mathcal{G}_1^{-1} &= D_1 + i\varphi_1 \\ -\mathcal{G}_2^{-1} &= D_2 + i\varphi_2 \end{aligned}\right\}$$

Dette er matrise i x,τ; x',τ' - indekser!

D_i inneholder (ikke-lokal) diff. operatorer.

$$\left.\begin{aligned} \mathcal{G}_1 &= \mathcal{G}_1(x,\tau;x',\tau',\varphi_1) \\ \mathcal{G}_2 &= \mathcal{G}_2(x,\tau;x',\tau',\varphi_2) \end{aligned}\right\}$$

Green's funksj. for fri fermion knytt til eksternt boson-felt!

$$\boxed{\begin{aligned} (D_1 + i\varphi_1)\mathcal{G}_1 &= -\delta(x-x')\,\delta(\tau-\tau') \\ (D_2 + i\varphi_2)\mathcal{G}_2 &= -\delta(x-x')\,\delta(\tau-\tau') \end{aligned}} \quad (*)$$

D_1, D_2 er 1. ordens diff. op.

Anta nå at vi setter $\underline{x \neq x',\ \tau \neq \tau'}$

Høyre side i ligningene er da null.

$$\left.\begin{aligned} D_i\mathcal{G}_i &= -i\varphi_i\mathcal{G}_i \\ \frac{D_i\mathcal{G}_i}{\mathcal{G}_i} &= -i\varphi_i \end{aligned}\right\} \quad i = 1,2 \quad \Rightarrow$$

Integrer:

$$\int_{x',\tau'}^{x,\tau} \frac{D_i G_i}{G_i} = -i\int_{x',\tau'}^{x,\tau} \varphi_i$$

$$\Big|_{x',\tau'}^{x,\tau} \ln G_i = -i\left[f_i(x,\tau,\varphi_i) - f_i(x',\tau',\varphi_i)\right]$$

$$D_i = d_i - v_F h_F$$

$$d_i = \pm i v_F \partial_x + \partial_\tau$$

Sett inn Ansatz i ligning for $g_i(x,\tau;\, x',\tau')$:

$$(d_i - v_F h_F + i\varphi_i)\, g_{0i}\, e^{-i(f_i - f_i')}$$

$$= [(d_i - v_F h_F)\, g_{0i}]\, e^{-i(f_i - f_i')}$$

$$+ i\varphi_i\, g_{0i}\, e^{-i(f_i - f_i')}$$

$$- i\,[d_i f_i]\, g_{0i}\, e^{-i(f_i - f_i')}$$

$$= -\delta(x-x')\,\delta(\tau-\tau')$$

Bruk:

$$[(d_i - v_F h_F)\, g_{0i}]\, e^{-i(f_i - f_i')}$$

$$= -\delta(x-x')\,\delta(\tau-\tau')\, e^{-i(f_i - f_i')}$$

$$= -\delta(x-x')\,\delta(\tau-\tau') \;;\quad \underline{\underline{x \neq x' \quad \tau = \tau'}}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{-i\, d_i f_i = -i\varphi_i}$$

$$\boxed{\begin{aligned} -i\,(-i v_F \partial_x + \partial_\tau)\, f_1 &= -i\varphi_1 \\ -i\,(i v_F \partial_x + \partial_\tau)\, f_2 &= -i\varphi_2 \end{aligned}}$$

$$G_i = A\, e^{-i\left[f_i(x,\tau) - f_i(x',\tau')\right]}$$

$$G_i = G_i\,(x,\tau;\, x',\tau',\, \varphi_i)$$

$\varphi_i = 0 \Rightarrow f = 0$. Dermed må

$$A = G_{0i}\,(x,\tau;\, x',\tau')$$

$$= G_{0i}\,(x-x',\, \tau-\tau')$$

Dette motiverer følgende ansatz for Green's funksjonene i det u.o. tilfellet:

$$\boxed{G_i(x,\tau;\, x',\tau',\, \varphi_i) = G_{0i}\,(x-x',\, \tau-\tau')\, e^{-i\left[f_i(x,\tau,\varphi_i) - f_i(x',\tau',\varphi_i)\right]}}$$

$$D_i\, G_{0i} = -\,\delta(x-x')\;\delta(\tau-\tau')$$

Ansatzen for G_i setter vi inn i ligningene ⊗, s. 197, og får enkle ligninger for $f_i(x,\tau)$

$$-i\,(-iv_F\partial_x + \partial_\tau)\, f_1(x,\tau) = -i\,\varphi_1(x,\tau)$$

$$-i\,(iv_F\,\partial_x + \partial_\tau)\, f_2(x,\tau) = -i\,\varphi_2(x,\tau)$$

Disse ligningene Fourier-transformerer vi. Siden φ_i er boson-felt,

$$f_i(x,\tau) = \frac{1}{\beta} \int \frac{dk}{2\pi} \sum_{\omega\nu} f_i(k,\omega\nu)\, e^{i(kx-\omega\nu\tau)}$$

$$\varphi_i(x,\tau) = \frac{1}{\beta} \int \frac{dk}{2\pi} \sum_{\omega\nu} \varphi_i(k,\omega\nu)\, e^{i(kx-\omega\nu\tau)}$$

bliver også f_i en boson-felt, og dermed Fourier-transformere vi i τ-variablen med bosonisk matsubara-frekvens $\omega_\nu = \frac{2\pi}{\beta}\nu$; $\nu = 0, \pm 1, \ldots$

$$-i\left(v_F k - i\omega_\nu\right) f_1(k, i\omega_\nu) = -i\, \varphi_1(k, \omega_\nu)$$

$$f_1(k, \omega_\nu) = -\frac{\varphi_1(k, \omega_\nu)}{i\omega_\nu - v_F k}$$

$$-i\left(-v_F k - i\omega_\nu\right) f_2(k, i\omega_\nu) = -i\, \varphi_2(k, \omega_\nu)$$

$$f_2(k, \omega_\nu) = -\frac{\varphi_2(k, \omega_\nu)}{i\omega_\nu + v_F k}$$

Forkert hvis? Se ovn! Se også s. 205.

$$f_i(x, \tau) = \pm \frac{1}{\beta} \int \frac{dk}{2\pi} \sum_{\omega_\nu} \frac{\varphi_i(k, \omega_\nu)}{i\omega_\nu \mp v_F k} e^{i(kx - \omega_\nu \tau)}$$

$-$: $i = 1$; $+$: $i = 2$

Dermed har vi, i princippet, fundet

$$G_i(x, \tau; x', \tau', \varphi_i) = G_{0i}(x - x', \tau - \tau')\, e^{-i\left[f_i(x, \tau, \varphi_i) - f(x', \tau', \varphi_i)\right]}$$

NB!! Men: Dette er ikke de fysiske elektron-propagatorer for systemet!

Propagatoren $\mathcal{G}_i$ skiller seg bare fra de frie propagatorene ved en faktor D. De må altså forstås som frie fermion-propagatorer i en gitt bakgrunn av boson-felt hvor felt-konfigurasjonen for bosonene er spesifisert.

$$\boxed{\text{De fysiske fermion-propagatorene finnes ved å } \underline{\text{midle}} \ \mathcal{G}_i(x,\tau;x',\tau',\varphi_i) \text{ over feltene } \varphi_i.}$$

Vi skal altså beregne:

$$\langle \mathcal{G}_i \rangle_{\varphi_i} = \frac{\int D\varphi^* D\varphi \, \mathcal{G}_i(x,\tau;x',\tau',\varphi_i) \, e^{S_{eff}}}{\int D\varphi^* D\varphi \, e^{S_{eff}}}$$

For å komme noen vei med dette problemet, må vi ha et eksplisitt uttrykk for S_{eff} v.h.a. φ, φ^*. Det skal vi nå se litt nærmere på. Det understrekes at den påfølgende diskusjonen til å begynne med, er generell.

Vi hadde (s. 196)

$$S_{eff} = -\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \, \frac{\varphi_1^2}{g} + \sum_{i=1}^{2} \mathrm{Tr} \ln(D_i + i\varphi_i)$$

Fritt system:

$$S_0 = \sum_{i=1}^{2} \mathrm{Tr} \ln(D_i)$$

Dette bidraget er uvesentlig for å midle over φ_i - konfigurasjoner, og vi subtrahere det derfor ut

<u>Husk</u>: $(D_i + i\varphi_i) = -\mathcal{G}_i^{-1}(x,\tau;x',\tau',\varphi_i)$

$$(D_i + i\varphi_i)^{-1} = -\mathcal{G}_i(x,\tau;x',\tau',\varphi_i)$$

$$\ln(D_i + i\varphi_i) = \ln D_i + \ln\left(\frac{D_i + i\varphi_i}{D_i}\right)$$

$$= \ln D_i + i\varphi_i \int_0^1 d\lambda \, (D_i + i\varphi_i \lambda)^{-1}$$

$$= \ln D_i - i\varphi_i \int_0^1 d\lambda \, \underbrace{\mathcal{G}_i(x,\tau;x',\tau',\lambda\varphi_i)}_{\text{matrise}}$$

$\mathrm{Tr} \ln(D_i + i\varphi)$ betyr at vi skal summere opp diagonal-elementene i $\ln(D_i + i\varphi_i)$. Første ledd gir fri-elektron bidrag, og er kjent.

Vi må nå beregne summen av diagonal-elementene i matrisen $f_i(x,\tau)\int_0^\lambda d\lambda\, G_i(x,\tau;x',\tau',\lambda\varphi_i)$

og det innebærer at vi må la $x\to x'$, $\tau\to\tau'$ i $G_i(x,\tau,x',\tau',\lambda\varphi_i)$ og deretter integrere over λ.

Siden $G_{0i}(x-x',\tau-\tau')$ er divergent i denne grensen, må vi ta grense-overgangen forsiktig. Vi ser først på G_1:

$$G_1 = G_{10}\, e^{-i[f_1(x,\tau)-f_1(x',\tau')]}$$

Sett $\tau=\tau'$

Nå kan vi ta grensen $x'\to x$ på to måter: x' kan nærme seg x ovenfra eller nedenfra:

$$x'\to x\pm\eta \;;\; \eta\to 0^+$$

Vi tar grense-overgangen som et gjennomsnitt av begge måter.

$$G_{10}(x-x') = \frac{1}{2\pi}\frac{e^{ik_F(x-x')}}{i(x-x')}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2\pi}\frac{e^{\pm ik_F\eta}}{i(\mp\eta)} \xrightarrow[\eta\to 0]{} \mp\frac{1}{2\pi}\frac{1}{\eta}\frac{1}{i}$$

NB!! Siden $f_i \sim \varphi_i$, har vi at

$$f_i(x, \tau, \lambda \varphi_i)$$

$$= \lambda \, f_i(x, \tau, \varphi_i)$$

og dette har vi brukt for å finne faktoren $\int_0 d\lambda \, \lambda = 1/2$

Faserfaktoren:

$$f_1(x,\tau) - f_1(x \pm \eta, \tau)$$

$$= f_1(x,\tau) - f_1(x,\tau) \mp \eta \frac{\partial f_1}{\partial x}$$

$$= \mp \eta \frac{\partial f_1}{\partial x}$$

$$\lim_{x \to x'} G_1(x,\tau; x',\tau, \lambda\varphi_1)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{-1}{2\pi i}\right)\left[\frac{1}{\eta} e^{-i\left[-\eta \frac{\partial f_1}{\partial x}\right]} - \frac{1}{\eta} e^{-i\eta \frac{\partial f_1}{\partial x}}\right]$$

$$= -\frac{1}{4\pi i}\frac{1}{\eta}\left\{1 + i\eta\frac{\partial f_1}{\partial x} - \left(1 - i\eta\frac{\partial f_1}{\partial x}\right)\right\}$$

$$= -\frac{1}{2\pi}\frac{\partial f_1(x,\tau,\lambda\varphi_1)}{\partial x}$$

$$\lim_{x \to x'} G_2(x,\tau; x',\tau,\lambda\varphi_2) = \frac{1}{2\pi}\frac{\partial f_2(x,\tau,\lambda\varphi_2)}{\partial x}$$

$$S_{eff} = S_0 - \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \frac{\varphi_1 \varphi_2}{g}$$

$$- i \int_0^1 d\lambda \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \left[\varphi_1\left(-\frac{1}{2\pi}\frac{\partial f_1(x,\lambda\varphi_1)}{\partial x}\right) + \varphi_2 \frac{1}{2\pi}\frac{\partial f_2(\lambda\varphi_2)}{\partial x}\right]$$

$$= S_0 - \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \frac{\varphi_1 \varphi_2}{g}$$

NB!! Ingen λ-faktor!!

$$+ \frac{i}{2\pi} \underbrace{\int_0^1 d\lambda\, \lambda}_{1/2} \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \left[\varphi_1 \frac{\partial f_1(\varphi_1)}{\partial x} - \varphi_2 \frac{\partial f_2(\varphi_2)}{\partial x}\right]$$

Men: $\xi_i \sim \varphi_i \Rightarrow$

$S_{eff}(\varphi, \varphi^*)$ er kvadratisk i φ-feltene. Altså har vi en <u>eksakt</u> effektiv action som er en fri boson-teori!

Det er verd å merke seg hvordan dette bemerkelsesverdige resultatet ble oppnådd: Det skriver seg fra formen $G_i = G_{0i}\, e^{-i(\xi_i - \xi_i')}$

En slik Ansatz kan vi naturligvis skrive ned for Green's funksjoner for et vilkårlig system, hvis bare ξ_i-ene velges rett. Men i vårt tilfelle, hvor vi har <u>lineært</u> spektrum, ble diff-ligningen for ξ_i spesielt enkel, slik at $\xi_i \sim \varphi_i$. Derfor blir S_{eff} kvadratisk i φ_i-ene. Men generelt ville ξ_i-ene blitt komplisserte funksjoner av φ_i, og den resulterende boson-teorien ville blitt komplisert og vekselvirkende.

I det følgende droppes vi S_0 fra S_{eff}, den påvirker ikke midling over φ_i - felterne.

$$S_{eff} = -\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \; \frac{\varphi_1^* \varphi_2}{g}$$

$$+ \frac{i}{4\pi} \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \left[\varphi_1 \frac{\partial f_1}{\partial x} - \varphi_2 \frac{\partial f_2}{\partial x} \right]$$

$$\varphi_i(x,\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_\nu} \int \frac{dk}{2\pi} \varphi_i(k,\omega_\nu) e^{i(kx - \omega_\nu \tau)}$$

$$f_i(x,\tau) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_\nu} \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\varphi_i(k,\omega_\nu)}{i\omega_\nu \mp v_F k} e^{i(kx - \omega_\nu \tau)}$$

$-$: $i=1$; $+$: $i=2$

Ser på første ledd:

$$-\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \; \frac{\varphi_1(x,\tau)\, \varphi_2(x,\tau)}{g}$$

$$= -\frac{1}{g} \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \; \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_{\nu_1}} \int \frac{dk_1}{2\pi} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_{\nu_2}} \int \frac{dk_2}{2\pi}$$

$$e^{i(k_1+k_2)\cdot x - i(\omega_{\nu_1} + \omega_{\nu_2})\tau}$$

$$\cdot \; \varphi_1(k_1, \omega_{\nu_1}) \, \varphi_2(k_2, \omega_{\nu_2})$$

$$= -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_\nu} \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\varphi_1(k,\omega_\nu)\, \varphi_2(-k,-\omega_\nu)}{g}$$

Se på 2. ledd, φ_1 - ledd i funk.

$$-\lim_{x\to x'}\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \int_0^1 d\lambda \; i\varphi_1 \; G_1(x,\tau;x',\tau',\lambda\varphi_1)$$

$$= -\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \int_0^1 d\lambda \cdot \lambda \; i\varphi_1 \left(-\frac{1}{2\pi}\right) \frac{\partial f_1}{\partial x}(x,\tau,\varphi_1)$$

Her har vi brukt:

$$\frac{\partial f_1}{\partial x}(x,\tau,\lambda\varphi_1) = \lambda \frac{\partial f_1(x,\tau,\varphi_1)}{\partial x}$$

?? Skal være m.h.p. x, ikke τ!

$$= \frac{i}{4\pi}\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \; \varphi_1 \frac{\partial f_1}{\partial x} \qquad (*)$$

$$\varphi_1(x,\tau) = \frac{1}{\beta}\int\frac{dk}{2\pi}\sum_{\omega_\nu}\varphi_1(k,\omega_\nu)\, e^{i(kx-\omega_\nu\tau)}$$

$$f_1(x,\tau) = -\frac{1}{\beta}\int\frac{dk}{2\pi}\sum_{\omega_\nu}\frac{\varphi_1(k,\omega_\nu)}{i\omega_\nu - v_F k}\, e^{i(kx-\omega_\nu\tau)}$$

Setter inn i (*):

$$\frac{i}{4\pi}\int_0^L dx\int_0^\beta d\tau \; \frac{1}{\beta}\int\frac{dk_1}{2\pi}\sum_{\omega_{\nu_1}}\varphi_1(k_1,\omega_{\nu_1})\, e^{i(k_1x-\omega_{\nu_1}\tau)}$$

$$\cdot\left(\frac{-1}{\beta}\right)\int\frac{dk_2}{2\pi}\sum_{\omega_{\nu_2}}\frac{ik_2}{i\omega_{\nu_2}-v_F k_2}\varphi_1(k_2,i\omega_\nu)$$

$$\cdot\, e^{i(k_2x-\omega_{\nu_2}\tau)}$$

$$= \frac{-i^2}{4\pi} \int \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_\nu} \frac{k}{i\omega_\nu - v_F k} \varphi_1(k,\omega_\nu)\, \varphi_1(-k,-\omega_\nu)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \int \frac{dk}{2\pi} \sum_{\omega_\nu} A_1(k,\omega_\nu)\, \varphi_1(k,\omega_\nu)\, \varphi_1(-k,-\omega_\nu)$$

$$A_1(k,\omega_\nu) = -\frac{1}{4\pi} \frac{k}{i\omega_\nu - v_F k}$$

Tilsvarende for φ_2-leddet:

$$-\frac{1}{\beta} \int \frac{dk}{2\pi} \sum_{\omega_\nu} A_2(k,\omega_\nu)\, \varphi_2(k,\omega_\nu)\, \varphi_2(-k,-\omega_\nu)$$

$$A_2(k,\omega_\nu) = \frac{1}{4\pi} \frac{k}{i\omega_\nu + v_F k}$$

Dermed har vi:

$$S_{eff} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_\nu} \int \frac{dk}{2\pi} \cdot \Big\{ \frac{\varphi_1(k,\omega_\nu)\, \varphi_2(-k,-\omega_\nu)}{g}$$

$$+ A_1\, \varphi_1(k,\omega_\nu)\, \varphi_1(-k,-\omega_\nu)$$

$$+ A_2\, \varphi_2(k,\omega_\nu)\, \varphi_2(-k,-\omega_\nu) \Big\}$$

Kvadratisk form!

Nu er vi kommet så langt, at vi kan beregne

$$\langle G_i(x,\tau; x',\tau', \varphi_i) \rangle_{\varphi_i}$$

Vi ser nå på:

$$\langle G_1(x,\tau;x',\tau',\varphi_1)\rangle_\varphi$$

$$= \frac{\int D\varphi_1 D\varphi_2 \; G_1^0 \, e^{-i[f_1(x,\tau,\varphi_1)-f_1(x',\tau',\varphi_1)]} \, e^{S_{eff}}}{\int D\varphi_1 D\varphi_2 \; e^{S_{eff}}}$$

$$G_1^0 = \frac{1}{2\pi} \frac{e^{ik_F(x-x')}}{i(x-x') - v_F(\tau-\tau') + \alpha} \quad ; \alpha = 0^+$$

G_1^0 gai utenfor, som en multiplikativ faktor, siden den ikke avhenger av boson-feltene

Se litt på:

$$-i\,[f_1(x,\tau,\varphi_1) - f_1(x',\tau',\varphi_1)]$$

$$= -i\frac{(-1)}{\beta}\int\frac{dk}{2\pi}\sum_{\omega_\nu}\frac{k}{i\omega_\nu - v_F k}\,\varphi_1(k,\omega_\nu)$$

$$\cdot\left\{e^{i(kx-\omega_\nu\tau)} - e^{i(kx'-\omega_\nu\tau')}\right\}$$

$$= -i\,\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_\nu}\int\frac{dk}{2\pi}\,\varphi_1(k,\omega_\nu)\,\mathcal{J}_1(k,\omega_\nu,x,\tau;x',\tau')$$

$$\varphi_1(k)\overbrace{\left(\frac{1}{g} + \cancel{A_1 + A_2}\right)}^{D^{-1}}\varphi_2(-k)$$

$$+ A_1\, \varphi_1(k)\varphi_1(-k)$$

$$+ A_2\, \varphi_2(k)\varphi_2(-k)$$

$$+ \frac{i}{2}\left(\varphi_1(k)J_1(k) + \varphi_1^*(-k)J_1^*\right)$$

$$\varphi_2(-k, -\omega\nu)$$

$$= \left(\varphi_1 + \frac{i}{2} D J_1^*\right) D^{-1} \left(\varphi_2 + \frac{i}{2} D J_1\right)$$

$$+ \frac{D}{4}|J_1|^2$$

$$\langle G_1 \rangle_\varphi = G_{10} \frac{1}{Z_\varphi} \cdot Z_\varphi \cdot e^{-Q(x,\tau;\, x',\tau')}$$

$$\boxed{\varphi_i(k, \omega\nu) = \varphi_i^*(-k, -\omega\nu)}$$

$$j_1 = -\frac{1}{i\omega_\nu - v_F k}\left[e^{i(kx-\omega_\nu\tau)} \div e^{i(kx'-\omega_\nu\tau')}\right]$$

Definer: $Z_\varphi = \int D\varphi_1 D\varphi_2 \, e^{S_{eff}}$

$$\langle G_1\rangle_\varphi = G_{10}\frac{1}{Z_\varphi}$$

$$\cdot \int d\varphi_1 d\varphi_2 \, e^{-\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_\nu}\int\frac{dk}{2\pi}\left[\frac{\varphi_1\varphi_2}{g} + A_1\varphi_1\varphi_1^* + A_2\varphi_2\varphi_2^* + \frac{i}{2}(\varphi_1 j_1 + \varphi_1^* j_1^*)\right]}$$

<u>Eksponent:</u>

$$\left.\begin{aligned}&\frac{|\varphi|^2}{g} + (A_1+A_2)|\varphi|^2 + \frac{i}{2}(\varphi^* j_1 + \varphi j_1^*)\\ &= |\varphi|^2 D^{-1} + \frac{i}{2}(\varphi^* j_1 + \varphi j_1^*)\end{aligned}\right\}$$

Stoppyll bruk φ_1, φ_2!!

$$= \left(\varphi^* + \tfrac{i}{2}D j_1^*\right)D^{-1}\left(\varphi + \tfrac{i}{2}D j_1\right) + \frac{D}{4}|j_1|^2$$

$$\langle G_1\rangle = G_{10}\cdot e^{-Q(x,\tau;x',\tau')}$$

Litt mer detaljer!

$$Q = \frac{1}{4\beta}\sum_{\omega_\nu}\int\frac{dk}{2\pi}\, D\cdot|j_1|^2$$

$$|j_1|^2 = 2\left[1-\cos\left(k(x-x') - \omega_\nu(\tau-\tau')\right)\right]\frac{1}{\omega_\nu^2 + k^2 v_F^2}$$

$$D^{-1} = \frac{1}{g} + A_1 + A_2$$

$$D^{-1} = \frac{1}{g} - \frac{k}{4\pi}\left(\frac{1}{i\omega_\nu - v_F k} - \frac{1}{i\omega_\nu + v_F k}\right)$$

$$= \frac{1}{g} - \frac{k}{4\pi}\,\frac{2 v_F k}{(i\omega_\nu)^2 - (v_F k)^2}$$

$$= \frac{1}{g}\,\frac{\left[(i\omega_\nu)^2 - (v_F k)^2 - (v_F k)^2\, 2\tilde{g}\right]}{(i\omega_\nu)^2 - (v_F k)^2}$$

$$\tilde{g} = \frac{g}{4\pi v_F}$$

$$D^{-1} = \frac{1}{g}\,\frac{(i\omega_\nu)^2 - (v_F k)^2(1+2\tilde{g})}{(i\omega_\nu)^2 - v_F^2 k^2}$$

$$D\,|\mathcal{G}_1|^2 = \frac{2g\left(1 - \cos\left[k(x-x') - \omega_\nu(\tau-\tau')\right]\right)}{\omega_\nu^2 + (v_F k)^2(1+2\tilde{g})}$$

$$Q(x,\tau) = \frac{g}{2\beta}\sum_{\omega_\nu}\int\frac{dk}{2\pi}\,\frac{\left[1 - \cos(kx - \omega_\nu\tau)\right]}{\omega_\nu^2 + (v_F k)^2(1+2\tilde{g})}$$

$\tau = 0$

Frekvens-summasjon:

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_\nu}\frac{1}{\omega_\nu^2 + \varepsilon_k^2} = \frac{1}{2\varepsilon_k}\left(\frac{1}{e^{-\beta\varepsilon_k}-1} - \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k}-1}\right)$$

$T = 0$:

1. ledd bidrar dersom $k > 0$
2. ledd bidrar dersom $k < 0$

$$Q(x) = -\frac{g}{2}\,\frac{1}{2\pi v_F\sqrt{1+2\tilde{g}}}$$

$$\cdot\left\{\int_{-\infty}^{0} dk \left(\frac{1-\cos kx}{k}\right) - \int_{0}^{\infty} dk \left(\frac{1-\cos kx}{k}\right)\right\}$$

$$= \underbrace{\frac{g}{2}\,\frac{2}{2\pi v_F\sqrt{1+2\tilde{g}}}}_{\equiv 2\nu} \underbrace{\int_{0}^{\infty} dk \left(\frac{1-\cos kx}{k}\right) e^{-\Lambda k}}_{H(x)}$$

$$\nu = \frac{g}{2\pi v_F}\frac{1}{\sqrt{1+2\tilde{g}}}$$

Faktoren $e^{-\Lambda k}$ er innført som en cutoff på impuls-overf. tilH i en forward-scattering prosess. Denne Λ-faktoren er ikke relatert til faktoren $e^{-\alpha|k|}$ som vi brukte som cutoff på spektret til de frie fermionene.

NB!! Legg merke til hvor fullstendig feil det ville blitt med en mean-field theory of the bosonic sector, in this case!

$$\frac{\partial H}{\partial x} = \int_0^\infty dk\, e^{-\Lambda k} \sin kx$$

$$= \frac{x}{x^2+\Lambda^2}$$

$$H = \frac{1}{2} \ln\left(\frac{x^2+\Lambda^2}{\Lambda^2}\right)$$

$$Q(x) = 2\nu \frac{1}{2} \ln\left(\frac{x^2+\Lambda^2}{\Lambda^2}\right)$$

$$= \ln\left[\left(\frac{x^2+\Lambda^2}{\Lambda^2}\right)^\nu\right]$$

$$\langle G_1 \rangle_\varphi = -\langle \psi_1 \psi_1^+ \rangle = G_{10}(x-x')\, e^{-Q(x-x')}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{e^{ik_F(x-x')}}{i(x-x')+\alpha} \cdot \left(\frac{\Lambda^2}{(x-x')^2+\Lambda^2}\right)^\nu$$

$g=0 \Rightarrow \nu=0 \Rightarrow$ free fermion propagator.

Propagatoren har nå fått singularitetar som ikke lenger <u>kun</u> er enkle poler. Ikke lenger Fermi-væske!

Faktoren $\left(\frac{\Lambda^2}{x^2+\Lambda^2}\right)^\nu$ beskriver en „sky" av partikkel-hull eksitasjoner som elektronet „drar" med seg.

Eksitasjons-spektrum for bosoner.

$$S_{eff} = -\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_\nu}\int\frac{dk}{2\pi}\left\{\frac{1}{g}\varphi_1\varphi_2^* + A_1\varphi_1\varphi_1^* + A_2\varphi_2\varphi_2^*\right\}$$

Boson-propagator:

$$\varphi = \begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix}$$

- Invers propagator

$$S_{eff} = -\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_\nu}\int\frac{dk}{2\pi}\,\varphi^*\overbrace{\begin{pmatrix}A_1 & \frac{1}{2g}\\ \frac{1}{2g} & A_2\end{pmatrix}}\varphi$$

Fri energi:

$$-\beta F = -\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_\nu}\int\frac{dk}{2\pi}\left(\ln\left(A_1A_2 - \frac{1}{4g^2}\right)\right)$$

$$-\beta F_0$$

F_0: Fri energi for ikke-u.u. tilfellet. (Husk at vi tok at S_0, s. 205)

$$A_1A_2 - \frac{1}{4g^2}$$

$$= -\left(\frac{k}{4\pi}\right)^2\frac{1}{(i\omega_\nu)^2 - v_F^2k^2} - \frac{1}{4g^2}$$

$$= -\frac{1}{4g^2}\left(1 + \frac{4g^2\left(\frac{k}{4\pi}\right)^2}{(i\omega\nu)^2 - v_F^2 k^2}\right)$$

$$= -\frac{1}{4g^2}\,\frac{\left[(i\omega\nu)^2 - v_F^2 k^2\left(1-(2\tilde{g})^2\right)\right]}{(i\omega\nu)^2 - v_F^2 k^2}$$

$$2\tilde{g} = \frac{2g}{4\pi v_F}$$

$$u^2 = v_F^2\left[1-(2\tilde{g})^2\right]$$

Dropp $\ln\left(\frac{1}{4g^2}\right)$ fra fri energi (irrelevant const)

$$-\beta F = -\beta F_0 - \frac{1}{\beta}\int_k \sum_{\omega\nu}\left\{\left[\ln\left((i\omega\nu)^2 - u^2k^2\right)\right] - \underbrace{\ln\left[(i\omega\nu)^2 - v_F^2 k^2\right]}\right\}$$

Se neste side!

Fri energi for ikke-v.v. tilfelle

Kanellaren F_0!

$$-\beta F = \int \frac{dk}{2\pi}\left[\ln\left(1-e^{-\beta u k}\right) + \ln\left(1-e^{\beta u k}\right)\right]$$

$$= 2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\ln\left(1-e^{-\beta u k}\right)$$

Cancellation

$$-\beta F = \int \ln\left(-\frac{1}{4g^2}\right)\frac{dk}{2\pi}$$

$$+ \underbrace{\int \frac{dk}{2\pi}\left[\ln\left(1+e^{-\beta v_F k}\right)\right.}_{\text{Right-mover}} + \underbrace{\left.\ln\left(1+e^{\beta v_F k}\right)\right]}_{\text{Left-mover}}$$

Free fermion part

$$+ \int \frac{dk}{2\pi}\left[\ln\left(1+e^{-\beta u k}\right) + \ln\left(1-e^{\beta u k}\right)\right]$$

$$+ \underbrace{\int \frac{dk}{2\pi}\left[\ln\left(1-e^{-\beta v_F k}\right) + \ln\left(1-e^{\beta v_F k}\right)\right]}_{\text{Free boson part}}$$

Consider the $T \to 0$ limit, since the issue of Fermi-liquid vs non-Fermi-liquid <u>is</u> a $T=0$ - issue.

$$-\beta F = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dk}{2\pi}\ln\left(-\frac{1}{4g^2}\right) + \int_{-\infty}^{0} \frac{dk}{2\pi}\left(-\beta v_F k\right) + \int_{0}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\beta v_F k$$

$$+ \int_{-\infty}^{0} \frac{dk}{2\pi}\left[\ln(-1) + \beta u k\right]$$

$$+ \int_{0} \left[\ln(-1) + \beta u k\right]\frac{dk}{2\pi}$$

$$+ \int_{-\infty}^{0} \frac{dk}{2\pi}\left[\ln(-1) + (-\beta v_F k)\right]$$

$$- \int_{0}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\left(\ln(-1) + \beta v_F k\right)$$

$$= \text{const} - \beta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, k$$

$E_0 = \sum_k v_k \cdot k$ Boson - system with the spectr $\underline{\omega = u \cdot k}$.

$$F = -\frac{2}{\beta}\int \frac{dk}{2\pi} \ln\left(1 - e^{-\beta u k}\right)$$

Fri energi for et boson-system!

Eksitasjons-spektra kan da leses av:

$$\omega = uk$$

$$\underline{\underline{u = v_F \left[1 - (2g)^2\right]^{1/2}}}$$

„Lydhastigheten" til bosonene er altså renormalisert i forhold til fermi-hastigheten v_F til de ikke-vekselvirkende fermionene.

Disse bosonene er kollektive eksitasjoner bygd opp av fermioner, og er analoge til „lydbølger" i et gitter.

$$\langle G_1 \rangle = G_{10} \, e^{-Q(x,\tau;x',\tau')}$$

$$Q(x,\tau;x',\tau') = Q(x-x', \tau-\tau')$$

Consider the case

$\tau \neq \tau'$ (and set $\tau' = 0$)

($x' = 0$)

Se på Greens funksjonen $\tau \neq \tau'$

$$Q(x,\tau) = \frac{g}{2\beta} \sum_{\omega_\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{1 - \cos(kx - \omega_\nu \tau)}{\omega_\nu^2 + u^2 k^2}$$

$$u^2 = v_F^2 (1 + 2\tilde{g}) \; ; \quad \tilde{g} = \frac{g}{4\pi v_F}$$

$$Q(x,\tau) = -\frac{g}{2\beta} \sum_{\omega_\nu} \int \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{2uk} \left[1 - \cos(kx - \omega_\nu \tau)\right]$$

$$\cdot \left(\frac{1}{i\omega_\nu - uk} - \frac{1}{i\omega_\nu + uk} \right)$$

$$= -\frac{g}{2u} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, \frac{e^{-\Lambda|k|}}{k}$$

$$\cdot \Big\{ -n_B(uk) \left[1 - \cos(kx + iuk\tau)\right]$$

$$+ n_B(-uk) \left[1 - \cos(kx - iuk\tau)\right] \Big\}$$

$\underline{\underline{T = 0}}$:

$$n_B(uk) = \begin{cases} -1 \; ; & k < 0 \\ 0 \; ; & k > 0 \end{cases}$$

$$n_B(-uk) = \begin{cases} -1 \; ; & k > 0 \\ 0 \; ; & k < 0 \end{cases}$$

$$Q(x,\tau) = +\frac{g}{2u} \frac{1}{2\pi} \Big\{ -\int_{-\infty}^{0} dk \, \frac{e^{-\Lambda|k|}}{k} (1 - \cos k x_+)$$

$$+ \int_{0}^{\infty} \frac{dk}{k} e^{-\Lambda k} (1 - \cos k x_-) \Big\}$$

$$x_\pm = x \pm iu\tau$$

$$Q(x,\tau) =$$

$$\frac{g}{2u}\frac{1}{2\pi}\left\{\int_0^\infty dk\,\frac{e^{-\Lambda k}}{k}\left[1-\cos(kx_+)\right]\right.$$

$$\left.+\int_0^\infty dk\,\frac{e^{-\Lambda k}}{k}\left[1-\cos(kx_-)\right]\right\}$$

$$\nu = \frac{\tilde{g}}{v_F}\frac{1}{\sqrt{1+2\tilde{g}}}$$

$$= 2\nu\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\ln\left[\left(\frac{x_+^2+\Lambda^2}{\Lambda^2}\right)\left(\frac{x_-^2+\Lambda^2}{\Lambda^2}\right)\right]$$

$$= \ln\left(\frac{\left[(x_+^2+\Lambda^2)(x_-^2+\Lambda^2)\right]^{1/2}}{\Lambda^2}\right)^{\nu}$$

$$G(x,\tau) = G_{10}(x,\tau)\cdot\left(\frac{\Lambda^2}{\left[(x_+^2+\Lambda^2)(x_-^2+\Lambda^2)\right]^{1/2}}\right)^{\nu}$$

Notice how completely wrong a mean-field theory for the bosonic action would have been in this case.

Impuls-fordeling

$$n_k = \mathcal{F}\left[\psi^+(x)\,\psi(0)\right]$$

$$= 1 - \mathcal{F}\left[G(x)\right]$$

$$G(x) = \frac{e^{i k_F x - 1}}{2\pi} \cdot \frac{i}{x \mp i\alpha} \cdot \left(\frac{\Lambda^2}{x^2+\Lambda^2}\right)^{2\nu}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\; e^{-ikx}\; G(x)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx\; \frac{i}{x \mp i\alpha} \left(\frac{\Lambda^2}{x^2+\Lambda^2}\right)^{2\nu} e^{-i(k-k_F)\cdot x}$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} dx\; \frac{1}{x} \left(\frac{\Lambda^2}{x^2+\Lambda^2}\right)^{2\nu} \sin\left((k-k_F)\cdot x\right)$$

$$= \frac{\operatorname{sign}(k-k_F)}{\pi} \underbrace{\int_{0}^{\infty} \frac{dx}{x} \left(\frac{1}{1+x^2}\right)^{2\nu} \sin\left(|k-k_F|\,\Lambda\, x\right)}$$

$$(\Lambda|k-k_F|)\cdot a_1(\nu, \Lambda|k-k_F|)$$

$$+\; \Lambda\,(|k-k_F|)^{4\nu} \cdot a_2(\nu, \Lambda|k-k_F|)$$

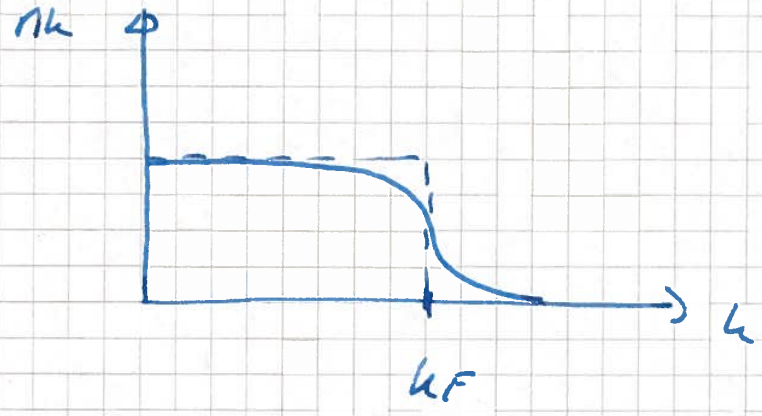
G.R. 3.773.1

a_1, a_2: Gl. A funksjoner.

$4\nu < 1 \Rightarrow$ second term dominates.

$\frac{k-k_F}{k_F} \ll 1$

$$n_k = 1 - \text{sign}(k-k_F)\,(\Lambda\,|k-k_F|)^{4\nu}$$



Diskontinuitet på Fermi-nivå er borte!

Derfor er det også fra dette klart at systemet ikke er en Fermi-væske

I én-dimensjonale systemer forventer vi ikke, i motsetning til tre-dimensjonale, at mean-field teorier skal fungere.

D=3: Forventer at både termiske fluktuasjoner og kvante fluktuasjoner er uvesentlige bortsett fra nær kritisk temperatur.

D=2: Kvantefluktuasjoner er uvesentlige. Termiske fluktuasjoner er alltid vesentlige, $T>0$ (Mermin-Wagner theorem) for systemer med kontinuerlig symmetri.

D=1: Termiske fluktuasjoner alltid vesentlige. Kvante fluktuasjoner alltid vesentlige.

Jo mindre den romlige dimensjonaliteten blir, jo viktigere blir fluktuasjoner.

I vårt én-dimensjonale eksempel har vi sett hvor viktige fluktuasjoner kan være: Dersom vi hadde brukt mean-field teori til å bygge $S_{eff}[\psi, \psi^*]$

ville vi funnet Fermi-væske Green's funksjon for elektronene!

Det er boson-fluktuasjonene som er ansvarlige for å ødelegge Fermi-væsken i dette tilfellet

NB!!

Det mer konvensjonelle bildet i en dimensjon, er at forward scattering er singulær (fordi elektronene ikke har mange hverandre), og at dette ødelegger en-partikkel bildet.

Disse to synspunktene kan forenes på følgende måte:

I mean-field teori er fermion-renormalisert, frie ikke-v.v. elektroner. Boson-feltene inngikk fordi vi H-S-dekoblet forward-scattering v.v.-leddet i Hamilton-operatoren. Boson-fluktuasjonene representerer altså residual v.v. mellom elektroner, og disse v.v. er i vårt tilfelle av forward-scattering typen.

Når disse boson-fluktuasjonene integreres ut, forandre resultatet for fermion-propagatoren kvalitativt. Vi ender opp med propagatoren som ikke lenger har enkle poler som singularitetene.

Kvasi-partikkel bildet er ødelagt av de sterke fluktuasjonene, som har sitt opphav i forward-scattering.

Vi har sett at den effektive action er en fri boson-teori.

Systemet har altså veldefinerte en-partikkel boson-eksitasjoner. Men ikke fermion kvasipartikler!
Et vekselvirkende fermion-system er eksakt erstattet av et fritt boson-system.

Et system av vekselvirkende fermioner, som har gapløse bosonisk eksitasjoner som sine laveenergi-eksitasjoner, kalles en Luttinger-væske

Lavenergi-eksitasjoner (q-ω) til et slikt system kalles Tomonaga-Luttinger bosoner.

Dersom vi hadde inkludert spinn i systemet, og sett på forward scattering, ville vi fått

$$S_{eff} = S_{eff}^{\rho} + S_{eff}^{\sigma}$$

hvor S_{eff}^{ρ} beskriver Tomonaga-Luttinger bosoner med ladning, men ikke spinn, og hvor S_{eff}^{σ} beskriver Tomonaga-Luttinger bosoner med spinn, men ikke ladning.

Det er ingen kobling mellom S_{eff}^{ρ} og S_{eff}^{σ}: Vi har spinn og ladning som dynamisk uavhengige frihetsgrader!

(Spinn-ladning-separasjon).

Ref: D.K.K. Lee and Y. Chen
J. Phys. A: Math. Gen. 21, 4155 (1988).

Tomonaga-Luttinger (TL) bosonene er eksempler på solitoner i fysikk. Det er dette som er Lorentz-ekvivalensene i 1.d. endim. fermion-systemer. Ladningstransporten i slike systemer foregår altså via ladnings-solitoner, og ikke elektroner.

Dette har vi sett i detalj på for det spinn-løse tilfellet. Vi skal nå i detalj på hva slags modifikasjoner som oppstår dersom spinn inkluderes i problemet.

Fermion med spinn.
Spinn-ladning separasjon

$$H_0 = \int_0^L dx \sum_\sigma \left\{ \psi_{1\sigma}^+ \left(-iv_F \partial_x - v_F k_F\right) \psi_{1\sigma} + \psi_{2\sigma}^+ \left(iv_F \partial_x - v_F k_F\right) \psi_{2\sigma} \right\}$$

$$H_I = g \int_0^L dx \, (\rho_{1\uparrow} + \rho_{1\downarrow})(\rho_{2\uparrow} + \rho_{2\downarrow})$$

$$e^{-g\rho_1\rho_2} = \int D\varphi^* D\varphi \, e^{-\left(\frac{1}{g}\varphi^*\varphi + i\rho_1\varphi^* + i\rho_2\varphi\right)}$$

$$S = -\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \, \frac{\varphi^*\varphi}{g}$$

$$- \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \sum_\sigma \psi_\sigma^+ \begin{pmatrix} D_1 + i\varphi^* & \\ & D_2 + i\varphi \end{pmatrix} \psi_\sigma$$

Nøyaktig som før.
Spinn-summasjon gir kun en faktor 2 i Tr ln ( ).

Men anta nå at vi gjør vekselvirkningen spinn-avhengig?

$$V = g\,\rho_1\,\rho_2 \rightarrow$$

$$V = g_{\parallel}(\rho_{1\uparrow}\rho_{2\uparrow} + \rho_{1\downarrow}\rho_{2\downarrow}) + g_{\perp}(\rho_{1\uparrow}\rho_{2\downarrow} + \rho_{1\downarrow}\rho_{2\uparrow})$$

Definer:

$$\rho_i = \rho_{i\uparrow} + \rho_{i\downarrow} \; ; \quad \text{Ladnings-tetthet}$$

$$\sigma_i = \rho_{i\uparrow} - \rho_{i\downarrow} \; ; \quad \text{Spinn-tetthet}$$

$$V = g_\rho \, \rho_1 \rho_2 + g_\sigma \, \sigma_1 \sigma_2$$

$$\left.\begin{aligned} g_\parallel &= g_\rho + g_\sigma \\ g_\perp &= g_\rho - g_\sigma \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} g_\rho &= \tfrac{1}{2}(g_\parallel + g_\perp) \\ g_\sigma &= \tfrac{1}{2}(g_\parallel - g_\perp) \end{aligned}$$

H-S dekobler i spinn- og ladningskanalen i

$$e^{-g_\nu \nu_1 \nu_2} = \int D\varphi_\nu^* D\varphi_\nu \, e^{-\left(\frac{\varphi_\nu^* \varphi_\nu}{g_\nu} + i\varphi_\nu^* \nu_1 + i\varphi_\nu \nu_2\right)}$$

$$\nu_i = \rho_i \text{ eller } \sigma_i$$

Vi må altså inn for et spinn- og et ladnings-boson, $(\varphi_\sigma, \varphi_\rho)$.

$$Z = \int D\psi^+ D\psi \, D\varphi_\rho^* D\varphi_\rho \, D\varphi_\sigma^* D\varphi_\sigma \, e^{S}$$

$$S = -\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \sum_{\nu=\sigma,\rho} \frac{\varphi_\nu^* \varphi_\nu}{g_\nu}$$

$$- \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \sum_\sigma \psi_\sigma^+ \begin{pmatrix} D_1 + i\varphi_{\rho 1} + i\sigma\varphi_{\sigma 1} & 0 \\ 0 & D_2 + i\varphi_{\rho 2} + i\sigma\varphi_{\sigma 2} \end{pmatrix} \psi_\sigma$$

Integrer ut fermioner $\Rightarrow$

$$S_{eff} = -\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \sum_\nu \frac{\varphi_\nu^* \varphi_\nu}{g_\nu}$$

$$+ \sum_\sigma \mathrm{Tr} \ln \begin{pmatrix} D_1 + i\varphi_{\rho 1} + i\sigma\varphi_{\sigma 1} & 0 \\ 0 & D_2 + i\varphi_{\rho 2} + i\sigma\varphi_{\sigma 2} \end{pmatrix}$$

Vi behandler dette på nøyaktig samme måte som før:

$$-i[f_{i\rho} + \sigma f_{i\sigma} - f'_{i\rho} - \sigma f'_{i\sigma}]$$

$$G_i = G_{i0}\, e$$

$$f_{i\rho,\sigma} = -\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_\nu}\int\frac{dk}{2\pi}\,\frac{\varphi_{i\rho,\sigma}}{i\omega_\nu - v_F k}\, e^{i(kx-\omega_\nu\tau)}$$

Dermed kan vi ta gruen $x' \to x$, $\tau' \to \tau$ i $\mathrm{Tr}\ln$ nøyaktig som i det spinn-løse tilfellet. Vi får (subtrahere ut S_0)

$$S_{eff} = -\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \sum_\nu \frac{\varphi_\nu^* \varphi_\nu}{g_\nu}$$

$$+ \sum_\sigma \frac{i}{4\pi}\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \Big\{ (\varphi_{1\rho} + \sigma\varphi_{1\sigma})\left(\frac{\partial f_{1\rho}}{\partial x} + \sigma\frac{\partial f_{1\sigma}}{\partial x}\right)$$

$$- (\varphi_{2\rho} + \sigma\varphi_{2\sigma})\left(\frac{\partial f_{2\rho}}{\partial x} + \sigma\frac{\partial f_{2\sigma}}{\partial x}\right)\Big\}$$

$$= - \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \sum_\nu \frac{\varphi_\nu^* \varphi_\nu}{g_\nu}$$

$$+ \frac{i}{4\pi} \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \sum_\nu \left(\varphi_{1\nu} \frac{\partial \varphi_{1\nu}}{\partial x} - \varphi_{2\nu} \frac{\partial \varphi_{2\nu}}{\partial x} \right)$$

Fourier-transformer nøyaktig som for det spinn-løse tilfellet.

$$= - \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_\nu} \int \frac{dk}{2\pi} \Big[D_\rho^{-1} \varphi_\rho(k, i\omega_\nu) \varphi_\rho(-k, -\omega_\nu)$$

$$+ D_\sigma^{-1} \varphi_\sigma(k, \omega_\nu) \varphi_\sigma(-k, -\omega_\nu) \Big]$$

$$D_\nu^{-1} = \frac{1}{g_\nu} - \frac{k}{4\pi} \left(\frac{1}{i\omega_\nu - v_F k} - \frac{1}{i\omega_\nu + v_F k} \right)$$

$\nu = (\sigma, \rho)$

Bose Matsubara frekvens!

$$= \frac{1}{g_\nu} \frac{(i\omega_\nu)^2 - a_\nu^2 v_F^2 k^2}{(i\omega_\nu)^2 - v_F^2 k^2}$$

$$a_\nu^2 = (2 \tilde{g}_\nu)^2$$

$$\tilde{g}_\nu = \frac{g_\nu}{4\pi v_F}$$

Nå blir restmagn bergning av fri energi nøyaktig som for det spinn-løse tilfellet. Vi får:

$$F = F_\sigma + F_\rho$$

$$F_\nu = -\frac{2}{\beta} \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} \ln\left(1 - e^{-\beta \omega_\nu k}\right)$$

$$u_\nu = v_F \sqrt{1 - (2\tilde{g}_\nu)^2}$$

u_σ, u_ρ: „Lydhastighet" for spinn- og ladningsbosonen.

$$g_\rho = \frac{1}{2}(g_\parallel + g_\perp)$$

$$g_\sigma = \frac{1}{2}(g_\parallel - g_\perp)$$

$$g_\rho > g_\sigma \Rightarrow u_\rho < u_\sigma$$

$u_\rho \neq u_\sigma$:

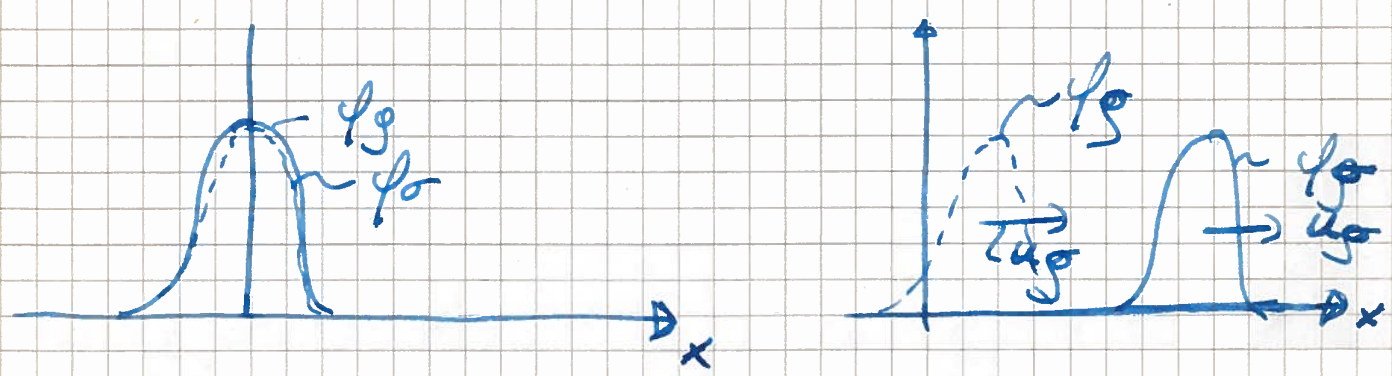
Spinn-ladnings-separasjon

$\varphi_\rho(x,\tau)$, $\varphi_\sigma(x,\tau)$:
Lokale variasjoner i
h.h.v. ladnings- og spinn-
tetthet i systemet.

Disse tetthetsbølgene har
propagert, med propagatorer
$-D_\nu(k,i\omega_\nu)$, med forskjellige
„lydhastigheter" u_ν

Ladnings-„lydbølgen"
propagerer med en annen hastighet enn
spinn-„lydbølgene" ⇒ spinn-
ladnings-separering

$\tau = 0$ $\tau > 0$



Alle fysiske systemer er realisert i en 3-dimensjonal verden. Hvilken relevans har da beregninger på en-dimensjonale systemer?

Det har lenge vært kjent at mange organiske krystaller (molekylære krystaller) har en essensiell en-dimensjonal elektron struktur. Det skyldes at krystallene består av løst koblede kjeder hvor sannsynligheten for at elektroner skal hoppe mellom kjeder er mye mindre enn at de skal hoppe langs kjedene. En en-dim. modell har da (kanskje) forventes å være adekvat.

<u>Eksempler:</u> Polyacetylene

Bechgaard-salter

Organiske fluorider.

En komplisserende faktor i disse systemene, er at de er sterkt <u>uordnet</u>; de har en del vrøvlete

Eksempel på godt kontrollerte systemer med svært lite orden, som har ensrettet en-dimensjonal ladnings transport, er kunstig fremstilte kvante-wires. Disse fremstilles ved fotolitografering av to-dimensjonale elektron-strukturer, f. eks. halvleder heterostrukturer.

Foreløpig er det slik at de kvante-wires som lages, ikke er lange nok, eller inneholder nok elektroner, til at den kontinuums-beskrivelsen vi har presentert, er gyldig. Dersom lange nok systemer av denne typen blir eksperimentelt tilgjengelige, bør den teorien vi har skissert konturen av her, fungere utmerket.

Det kan naturligvis hende at vi må inkludere litt mer generelle vekselvirkninger i problemet, også av backscattering type, som kan føre til metall/isolator overgang og andre fenomener av stor interesse i fundamental fysikk.

Appendix

Hubbard modell. Transformasjon til Ising-spinn modell (klassisk)

The Hirsch-algorithm, su(2)-noninvariant.

$$H = +\sum_{ij\sigma} t_{ij}\, c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

$U > 0$

$$n_{i\uparrow} = 0,1 \Rightarrow n_{i\uparrow}^{2} = 0,1$$

$$n_{i\downarrow} = 0,1 \Rightarrow n_{i\downarrow}^{2} = 0,1$$

$$n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} = 0, \pm 1 \Rightarrow (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^{2} = 0,1$$

$$Z = \int D c^{+} D c\, e^{S}$$

$$S = -\sum_{i,j\sigma} \int_0^{\beta} d\tau\, c_{i\sigma}^{+} (\partial_\tau \delta_{ij} + t_{ij})\, c_{j\sigma}^{+}$$

$$- U \sum_{i} \int_0^{\beta} d\tau\, n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

$$= S_0 + S_I$$

$$Z = \int D c^{+} D c\, e^{S_0 + S_I}$$

Hubbard-Stratonovich transform.

av

$$e^{S_I}$$

(Diskret H-S transformasjon)

Hubbard term:

Note: This could be done in a more general way, as a two-parameter $\underline{\alpha, \beta}$

Could this be used to avoid FeSi-problem?

E.L. suggests this.

H. J. Schulz has a SU(2)-invariant formulation of decoupling the Hubbard-term.

Poenget her er at dette har vi gjort i vilkårlige dimensjoner, siden Hubbard-leddet er lokalt $d = 3$, $T = 0$ $\Rightarrow$ 4-dim. klassisk problem! Da er Hubbard modellen løsbar ~~ved~~ på mean-field nivå!! Vi har dermed H-S-dekoble Hubbard-modellen,

$$e^{S_I} = e^{-\sum_i \int_0^\beta d\tau\, U\, n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}$$

$$= \prod_i \prod_\tau e^{-d\tau\, U\, n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}$$

$$-2 d\tau\, U\, n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = d\tau\, U\, (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2 - d\tau\, U\, (n_{i\uparrow}^2 + n_{i\downarrow}^2)$$

$$e^{-d\tau\, U\, n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}} = e^{+\frac{d\tau\, U}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2} \underbrace{e^{\frac{d\tau\, U}{2}(n_{i\uparrow}^2 + n_{i\downarrow}^2)}}_{= e^{\frac{d\tau\, U}{2}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})}}$$

<u>Påstand:</u>

$$e^{\frac{U}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2} = \frac{1}{2} \sum_{S_i(\tau) = \pm 1} e^{\lambda S_i(\tau)(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})}$$

(Diskret H-S transform!)

$$(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2 = 0, 1$$

0): $$1 = \frac{1}{2}\left(e^{\lambda(S_i = 1)\cdot 0} + e^{\lambda(S_i = -1)\cdot 0}\right) = 1$$

1): $$e^{\frac{U}{2}} = \frac{1}{2}\left(e^{\lambda} + e^{-\lambda}\right) = \cosh \lambda$$

-1): $$e^{\frac{U}{2}} = \frac{1}{2}\left(e^{-\lambda} + e^{+\lambda}\right) = (\cosh \lambda)$$

$$e^{\frac{U}{2}} = \cosh \lambda \Rightarrow \underline{\lambda = \cosh^{-1}\left(e^{\frac{U}{2}}\right)}$$

$$(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2 = n_{i\uparrow}^2 + n_{i\downarrow}^2 - 2 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

$$= n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 2 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{1}{2}\left[n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2 \right]$$

$$e^{-U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}} = e^{-\frac{U}{2}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})} e^{+\frac{U}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2}$$

$$= e^{-\frac{U}{2}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})} \frac{1}{2} \sum_{S_i = \pm 1} e^{\lambda S_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{S_i = \pm 1} e^{-c_{i\uparrow}^{+} \left(\frac{U}{2} + \lambda S_i\right) c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^{+} \left(\frac{U}{2} + \lambda S_i\right) c_{i\downarrow}}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{S_i = \pm 1} \prod_{\sigma} e^{-c_{i\sigma}^{+} \left(\frac{U}{2} - \lambda \sigma S_i\right) c_{i\sigma}}$$

$$e^{S_I} = e^{-\sum_i \int_0^\beta d\tau\, U\, n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\{S_i(\tau)=\pm 1\}} e^{\sum_i \int_0^\beta d\tau\, \lambda\, S_i(\tau)\,(n_{i\uparrow}-n_{i\downarrow})}$$

$$\cdot\, e^{-\sum_i \int_0^\beta \frac{d\tau U}{2}\,(n_{i\uparrow}+n_{i\downarrow})}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\{S_i(\tau)=\pm 1\}} \cdot\, e^{\sum_i \int_0^\beta d\tau\, c_{i\uparrow}^+ \left(\lambda S_i - \frac{U}{2}\right) c_{i\uparrow}}$$

$$\cdot\, e^{\sum_i \int_0^\beta d\tau\, c_{i\downarrow}^+ \left(-\lambda S_i - \frac{U}{2}\right) c_{i\downarrow}}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\{S_i(\tau)=\pm 1\}} e^{-\sum_{i\sigma} \int_0^\beta d\tau\, c_{i\sigma}^+ \left(\frac{U}{2} - \sigma\lambda S_i(\tau)\right) c_{i\sigma}}$$

Dermed blir partisjons-funksjonen:

$$Z = \sum_{\{S_i(\tau)=\pm 1\}} \int Dc^+ Dc\; e^{-\sum_{ij\sigma} \int_0^\beta d\tau\, c_{i\sigma}^+ \left[\left(\partial_\tau + \frac{U}{2} - \lambda\sigma S_i\right)\delta_{ij} + t_{ij}\right] c_{j\sigma}}$$

Nå kan vi utføre fermion-integralet eksakt.

Nå kan fermion-integralet utføres. Da blir partisjons-funksjonen

$$Z = \sum_{\{S_i(\tau)=\pm 1\}} e^{\mathrm{Tr}\ln A(\{S_i(\tau)\})}$$

Summasjon over Ising-variable!

$$A = \left(\partial_\tau + \frac{U}{2} - \lambda\sigma\, S_i(\tau)\right)\delta_{ij} + t_{ij}$$

$$e^{\frac{U}{2}} = \cosh(\lambda)$$

$\mathrm{Tr}\ln A$

$$= \sum_{i,j,\sigma} \int_0^\beta d\tau \ln\left[\left(\partial_\tau + \frac{U}{2} - \lambda\sigma\, S_i(\tau)\right)\delta_{ij} + t_{ij}\right]$$

$$\lambda = \cosh^{-1}\left(e^{\frac{U}{2}}\right) = \underline{\underline{\cosh^{-1}\left(e^{\frac{U}{2}}\right)}}$$

$S_i(\tau) = \pm 1$: Klassiske „spinn" (Ising-spinn) variable.

„Spinnet" lever på et $d+1$-dimensjonalt gitter, dersom den opprinnelige Hubbard-modellen er definert på et d-dimensjonalt gitter.

Den kvantemekaniske Hubbard modellen er altså transformert til en klassisk spin-modell i en ekstra dimensjon.

Legg merke til at ettersom alle spin-variablene $S_i(\tau)$ inngår inne i ln-faktoren, får vi multi-spin v.v. til forskjell fra den vanlige Ising-modellen, hvor bare spin-par vekselvirker.

Den to-dimensjonale Hubbard-modellen svarer derfor til en komplisert 3-dimensjonal Ising-spin modell (klassisk). ($T=0 \Rightarrow \beta=\infty$)

Ved $T>0$ svarer Hubbard modellen til en klassisk spin-modell av Ising-type, definert i en slab-geometri.

Denne omskrivningen av modellen brukes ofte til å utføre kvante-Monte-Carlo simuleringer av Hubbard-modellen.

Vi kan altså skrive

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right)$$

hvor det summes over kvantiske variable.

$$\langle O \rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left(\hat{O}\, e^{-\beta H}\right)}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right)}$$

H er definert ved, i dette tilfellet:

$$H = -\frac{1}{\beta} \sum_{ij\sigma} \int_0^\beta d\tau \, \ln\left[\left(\partial_\tau + \frac{u}{2} - \lambda_\sigma s_i\right)\delta_{ij} + t_{ij}\right]$$

$$= -\frac{1}{\beta}\, \mathrm{Tr} \ln A$$

Husk:

Fric Boson : $Z = (\det A)^{-1}$

$$= \int D a^+ D a \, e^{-\sum_{ij} a_i^+ A_{ij} a_j}$$

Fric fermion: $Z = \det A$

$$= \int D c^+ D c \, e^{-\sum_{ij} c_i^+ A_{ij} c_j}$$

Dette illustrerer et viktig poeng:

For bosoner er A positiv definit.
Det trenger ikke A være for fermioner!

Dette leder til store forskjeller
nå vi gjør Monte-Carlo simuleringer
for boson- og fermion-systemer.

<u>Bosoner:</u>

$\det A > 0 \Rightarrow \mathrm{Tr} \ln A$ reell $= H$

Monte-Carlo move:

$\underline{S_i(\tau) \to -S_i(\tau)}$ (Transformert Hubbard modell)

$H \to H + \Delta H$

ΔH reell; bosoner.

$\Delta H < 0$: Aksepter forsøk

$\Delta H > 0$

Velg et tilfeldig tall $p \in [0,1]$

Aksepter forsøk hvis $p < e^{-\beta \Delta H}$

Avvis — " — $p > e^{-\beta \Delta H}$

For fermioner, er dette mer problematisk, fordi:

$\det A$ trenger ikke være positiv definit $\Rightarrow \mathrm{Tr} \ln A$ kan være <u>imaginær</u>. $\Rightarrow$

ΔH kan være imaginær. $\Rightarrow$

$e^{-\beta \Delta H}$ kan bli <u>negativ</u>.

En negativ $e^{-\beta\Delta H}$ kan ikke tolkes som en overgangs-sannsynlighet, slik vi ønsker, og slik vi har klassisk og for bosoner.

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{Tr\left(\hat{O}\, e^{-\beta H}\right)}{Tr\left(e^{-\beta H}\right)}$$

$$= \frac{Tr\left(\hat{O}\ \mathrm{sign}\left(e^{-\beta H}\right)\ \left|e^{-\beta H}\right|\right)}{Tr\left(\mathrm{sign}\left(e^{-\beta H}\right)\ \left|e^{-\beta H}\right|\right)}$$

$$= \frac{\langle \hat{O}\ \mathrm{sign} \rangle}{\langle \mathrm{sign} \rangle} \quad ; \ \mathrm{sign} = \mathrm{sign}\left(e^{-\beta H}\right)$$

hvor vi nå har definert middelverdien m.h.p. sannsynlighets-fordelingen

$$\left|e^{-\beta H}\right| > 0$$

Dersom $\langle \mathrm{sign} \rangle$ blir veldig liten, blir forventningsverdiene som beregnes usikre. Problemet kalles "fermion-sign" problemet, og har sitt opphav i hvordan man opprinnelig definerte en overgangssannsynlighet fra en tilstand til en annen.

E. Lagnam
2/12–9.8

Underlying model: $H = -t \sum_{ij\sigma} c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$

$\tau \in [0, \beta]$

$\vec{x} \in Z^2$ Lattice $\quad x = (\tau, \vec{x})$

$\phi_0(x)$, $\vec{\varphi}(x)$

Charge $\quad$ Vector-spin

$$Z = \int \mathcal{D}[\varphi_0]\, \mathcal{D}[\vec{\varphi}]\, e^{-S[\varphi_0, \vec{\varphi}]}$$

$$S[\varphi] = \int_0^\beta d\tau \sum_{\alpha, \vec{x}} \left\{ \frac{\phi_\alpha^2(x)}{U} - \mathrm{Tr} \log\left(G_0^{-1} - i\varphi_0 \vec{\tau} - i\vec{\varphi}\cdot\vec{\sigma}\right) \right\}$$

Free fermions coupled to charge and spin-excitation

Fixed background: Free fermions in some background

$\varphi_0(x) = r$ $\quad$ Homogeneous charge

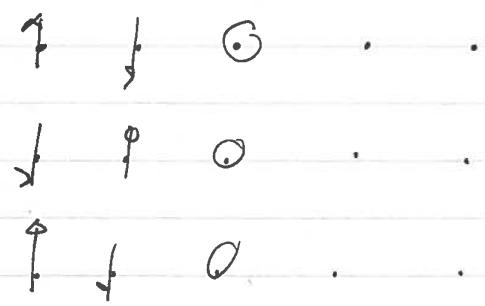
$\vec{\varphi}(x) = \vec{e} \cdot s(-1)^{x_1 + x_2}$ $\quad$ Staggered spin

<u>Try:</u>

$\varphi_0(x) = r(x)$

$\vec{\varphi}(x) = \vec{e} \cdot s(x)\, (-1)^{x_1 + x_2}$

More refined:
More relevant Ansatz (for domain-wall(s))



$$\varphi_0(x) = r(x)$$

$$\vec{\varphi}(x) = s(x)$$

$$\rho(x) = \begin{cases} +1 ; & p \\ -1 ; & d \\ 0 ; & 0 \end{cases}$$

$$\varphi_0(x) = \begin{cases} r_0 & \rho(x) = 0 \\ r & \rho(x) = \pm 1 \end{cases}$$

$$\vec{\varphi}(x) = s\,\rho(x)$$

(r, r_0, s) Three parameters specifying the state

A config. is specified by specifying $\rho(x)$ to each space-time lattice point.

Hartree-Fock: Time indep.

$$\rho(\tau, \vec{x}) = \vec{\rho}(\vec{x})$$

(r, r_0, s) are <u>not</u> allowed to

fluctuate wildly.

All static domain-wall configurations are of order. $\underline{\underline{0.001\,\phi}}$

Fluctuations involving changes in the shape of domain-walls should be taken into account.

Cannot neglect fluctuations that change the shape

$$Z = \sum_{\substack{\text{domain} \\ \text{wall} \\ \text{config.} \\ \{\varphi(x)\}}} e^{-\underline{\underline{S[\varphi]}}}$$

C.F. taken into account

Need an approx. for $S[\varphi]$

Need approx. for

$$\mathrm{Tr}\,\log\left(G_0^{-1} - i\varphi_0\tau - i\vec{\varphi}\cdot\vec{\sigma}\right)$$

$\Delta\tau$ - discretization in β-direction.

Hirsch-algorithm:

$\uparrow, \downarrow, 0$

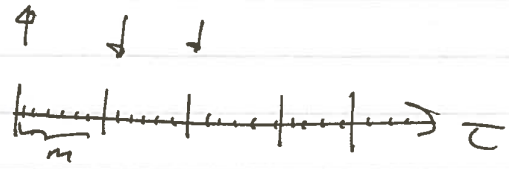
But the above formulation avoids the minus-sign!

NB!! They have avoided fermion-sign problem

Fermion-sign problem:

$\frac{\partial}{\partial \tau}$ $\Rightarrow$ Trotter-decomposition (Hirsch)

$\Rightarrow$ the No freedom in how to treat $\frac{\partial}{\partial \tau}$ time-lattice derivative.



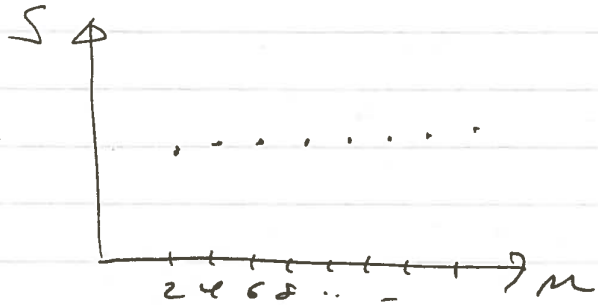
Two time-splitting parameters

$N_{0,\tau}$: Time over which conf = const

$N_\tau = m \, N_{0,\tau}$

Even subsequence = o.k.

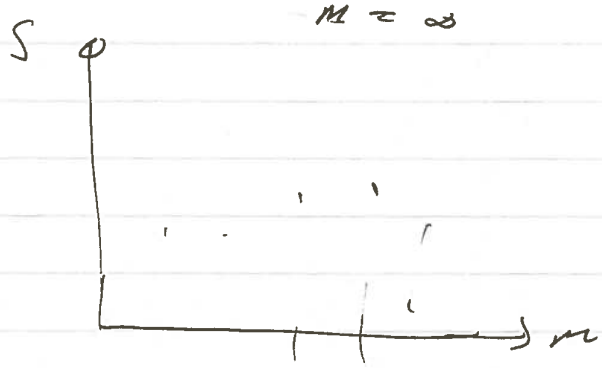
Convergence



Wert

H.F: $N_{0,\tau} = 1$

$m = \infty$



Random!

Bad convergence as $m \to \infty$.

So: Fix N_0, τ
$m \to \infty$. Look at
even subsequence.

Why is odd sequence ill-behaved.

$m = \infty$: Claim no sign-problem

$\boxed{\text{Construction of difficulty: Where did sign-problem go?}}$

Fixed configuration: Assign $\rho(x)$

$$\mathcal{J} = \{\rho(x)\}$$

$\mathcal{J}_{AF}$: $S_{AF} = \{S, 1, \mathcal{D}\}_{AF}$
for Determin $S, 1, \mathcal{D}$ for fixed configuration $\rho(x)$

$\mathcal{J}_F$: $S_F = \{S, 1, \mathcal{D}\}_F$
Different. conf.

$$S[\mathcal{J}_{AF}, S_{AF}] < S[\mathcal{J}_F, S_F]$$

Ref: W v.d. Linden
Phys. Rep. 220, 53 (1992)
„A Quantum Monte Carlo Approach to Many-Body Physics".