# BÖLÜM 3

# SONLU SICAKLIKTA GREEN FONKSİYONLARI

Deneyler sonlu sıcaklıklarda yapıldığından dolayı, bunları açıklamak için teorileri sonlu sıcaklıklara geliştiririz. Bu ilk defa Matsubara tarafından yapıldı. "0" sıcaklık sonuçları bu teoride T=0 konularak elde edilir.

T_sonlu ısı banyosu ile etkileşen (fonon, elektron, spin) gibi parçacıklardan oluşan sist.

ort. E enerjili!

bununla ilişkili ola sıcaklık.

Böylece, Green fonk.unu tanımladığımız zaman, sist.in tüm mümkün konfigürasyonları üzerinden ortalama almalıyız.

Elektron için mümkün Green fonk.u,

$$\frac{Tr\left[ e^{-\beta H} C_p(t) C_p^{+}(t') \right]}{Tr\left[ e^{-\beta H} \right]} \quad ; \; C_p(t) = e^{itH} C_p e^{-itH}$$

$Tr \equiv \sum_n \langle n | \ldots | n \rangle$ durumların $\underline{\underline{\text{tam}}}$ kümesi

Genellikle, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$ şeklinde bir Hamiltoniyen yazarız. V farklı iki yerde belirir: 1.) $e^{\pm it\mathcal{H}}$ de ki bu S-matrisi cinsinden açılabilir 2.) $e^{-\beta\mathcal{H}}$ de belirir. Böylece, bu termodinamik ağırlık faktöründe de bir pertürbasyon açılımı yapmalıyız. Hamiltoniyen exp. faktördeki her terimde belirdiğinden $\beta = 1/k_B T$'yi kompleks bir zaman olarak düşünebiliriz. t ve $\beta$ kompleks bir değişkenin reel ve imajiner kısımları olarak işlenir ki buna sadece S-matrisi açılımında ihtiyaç duyarız.

Matsubara yöntemi için bir diğer motivasyon bozonlar için $(e^{\beta\omega_q}-1)^{-1}$ ve fermiyonlar için $(e^{\beta\xi_q}+1)^{-1}$ termal işgal sayılarını incelemek ile sağlanır. Bunların herbiri seriye açılabilir.

$\xi = \varepsilon_p - \mu$

(her meromorfik fonk. polleri ve bu pollerdeki rezidüleri cinsinden bir toplam ile ifade edilebilir. teorem!)

$$n_F(\xi_p) = \frac{1}{e^{\beta\xi_p}+1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2n+1)i\pi/\beta - \xi_p}$$

$$n_B(\omega_q) = \frac{1}{e^{\beta\omega_q}-1} = \frac{-1}{2} + \frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2ni\pi/\beta - \omega_q}$$

BS K

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (\text{FRMY})$$

poller

$$\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta} \quad (\text{BZN})$$

$$n_F(\xi_p) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum \frac{1}{i\omega_n - \xi_p}$$

$$n_B(\omega_q) = -\frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum \frac{1}{i\omega_n - \omega_q}$$

GF.'u tipi var!

Matsubara yönt. deki pertürbe olmamış GF'lar!

---

Bu yöntemde zaman $\tau = it$ olarak adlandırılan kompleks bir nicelik haline gelir. Böylece GF'lar,

$$-\beta \leq \tau \leq +\beta$$

aralığında $\tau$'nun fonk. larıdır. Bir $f(\tau)$ fonkunun FT.u

$$f(\tau) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ a_n \cos\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right) \right]$$

$$a_n = \frac{1}{\beta} \int_{-\beta}^{+\beta} d\tau\, f(\tau) \cos\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right)$$

$$b_n = \frac{1}{\beta} \int_{-\beta}^{+\beta} d\tau\, f(\tau) \sin\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right)$$

BS K

ya da, $f(i\omega_n) = \dfrac{\beta(a_n + i b_n)}{2}$

$$f(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-in\pi\tau/\beta} f(i\omega_n)$$

$$f(i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{+\beta} d\tau\, f(\tau)\, e^{in\pi\tau/\beta}$$

$0 < \tau + \beta < \beta$

BOZON: $f(\tau) = f(\tau + \beta)$ olduğundan $-\beta < \tau < 0$ sonra ispat edilecek.

$$\Rightarrow f(i\omega_n) = \frac{1}{2}\left[ \int_0^{\beta} d\tau\, f(\tau)\, e^{in\pi\tau/\beta} + \int_{-\beta}^{0} d\tau\, f(\tau)\, e^{in\pi\tau/\beta} \right]$$

bunu kullanarak, $f(i\omega_n) = \frac{1}{2}(1 + e^{in\pi}) \int_0^{\beta} d\tau\, f(\tau)\, e^{in\pi\tau/\beta}$

$n$ tek $\Rightarrow f(i\omega_n) = 0$

$$\left. \begin{aligned} f(i\omega_n) &= \int_0^{\beta} d\tau\, f(\tau)\, e^{i\omega_n\tau} \\ f(\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n\tau} f(i\omega_n) \end{aligned} \right\} \text{BZN'lar.}$$

$$\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta}$$

FERMİYON: $f(\tau) = -f(\tau + \beta) \quad -\beta < \tau < 0$

$$f(i\omega_n) = \frac{1}{2}(1 - e^{in\pi}) \int_0^{\beta} d\tau\, e^{in\pi\tau/\beta} f(\tau)$$

$f(i\omega_n) = 0 \Leftarrow n$ çift

BS K

$$f(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, f(\tau)\, e^{i\omega_n \tau}$$

$$f(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} f(i\omega_n)$$

FRMYN'lar

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$$

## 3.2. Matsubara Green Fonksiyonları

○ Elektron Green fonksiyonu,

$$\mathcal{G}(p, \tau-\tau') = -\langle T_\tau\, C_p(\tau) C_p^\dagger(\tau') \rangle$$

$$= \mathrm{Tr}\{ e^{-\beta(H-\mu N-\Omega)}\, T_\tau\, e^{\tau(H-\mu N)} C_p\, e^{-(\tau-\tau')(H-\mu N)}$$

$$\times\, C_p^\dagger\, e^{-\tau'(H-\mu N)} \}$$

○

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

1) $\langle \dots \rangle$ 'ın anlamı, ~~yukarıdakinde~~ önemli

$\langle o \rangle$ : term. ort. yapılıyor. GCA

2) $H \rightarrow H - \mu N$ poz. sayı. op.

↑ kim. pot.

BS K

Green fonk.unun bu tanımı bir çok parçacık sist.ine uygulanabilir. Boş bir band'daki tek bir parçacık için de kullanılabileceğini göreceğiz. Bu durumda son analitik sürekliliği

$$i\omega_n \to E+\mu+i\delta$$

olarak alacağız ve tüm ifadelerde kim. pot → 0 olacaktır. Çok elektron sisteminde $i\omega_n \to E+i\delta$ alınır ve enerji $\mu$ den ($\varepsilon_F$) den ölçülür:

* $T_\tau$ : bir $\tau$ düzenleme op.'dür (en yakın olanından → $-\beta$'ya) sağa. (en küçük olan sağa) $-\beta<\tau<0$ { FPMZ, BZN

* $\mu$ : term. pot. : term. ort. için bilinen normalizasyon faktörü.

* $\mathcal{G}$ : Matrubara fonk.u. (kompleks zaman, kompleks frekans)

$$\mathcal{G}(p,\tau-\tau') = -\langle T_\tau\, C_p(\tau)\, C_p^\dagger(\tau')\rangle$$

$\tau-\tau'$ nün farkı olarak yazılabilir, ama sağ taraf açık olarak bu farkın fonk.u değildir! (İspatlanacak) GF'ün $\tau>\tau'$ ve $\tau<\tau'$ için yazacağız:

$$K = H-\mu N$$

BS K

$$\mathcal{G}(p,\tau-\tau') = -\Theta(\tau-\tau')\,\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(K-\Omega)}e^{\tau K}c_p e^{-K(\tau-\tau')} c_p^{+} e^{-\tau' K}\right)$$

$$+\Theta(\tau'-\tau)\,\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(K-\Omega)}e^{\tau' K}c_p^{+} e^{-K(\tau-\tau')} c_p e^{-\tau K}\right)$$

$$\mathrm{Tr}(AB\ldots Z) = \mathrm{Tr}(ZBC\ldots YZA)$$

$$\Rightarrow \mathcal{G}(p,\tau-\tau') = -\Theta(\tau-\tau')\,\mathrm{Tr}\left(e^{-\tau' K}e^{-\beta(K-\Omega)}e^{\tau K}c_p e^{-K(\tau-\tau')} c_p^{+}\right)$$

$$+\Theta(\tau'-\tau)\,\mathrm{Tr}\left(e^{-\tau K}e^{-\beta(K-\Omega)}e^{\tau' K}c_p^{+} e^{-K(\tau-\tau')} c_p\right)$$

$$e^{-\tau' K}e^{-\beta(K-\Omega)} = e^{-\beta(K-\Omega)}e^{-\tau' K}$$

$\Omega(\beta,\mu)$ skaler.

$$\mathcal{G}(p,\tau-\tau') = -\Theta(\tau-\tau')\,\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(K-\Omega)}e^{K(\tau-\tau')}c_p e^{-K(\tau-\tau')} c_p^{+}\right)$$

$$+\Theta(\tau'-\tau)\,\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(K-\Omega)}e^{K(\tau-\tau')}c_p^{+} e^{-K(\tau'-\tau)} c_p\right)$$

RHS', $\tau-\tau'$ nin kombinasyonu fonk.u $\tau-\tau' \to \tau$ koyarsak,

$$\mathcal{G}(p,\tau) = -\langle T_\tau\, c_p(\tau)\, c_p^{+}(0)\rangle$$

$$= -\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(K-\Omega)}\,T_\tau\left(e^{\tau K}c_p e^{-\tau K} c_p^{+}\right)\right]$$

BS K

$\tau<0$ için: $(f(\tau)=-f(\tau+\beta))$ özelliğini sağlayan GF'ların davranışını incelemek istiyoruz.

$$\tau<0 \quad \mathcal{G}(\underline{p},\tau)=\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(K-\Omega)}C_p^{+}e^{\tau K}C_p e^{-\tau K}\right]$$

$\mathrm{Tr}(AB\ldots Z)=\mathrm{Tr}(ZBC\ldots YZA)$ 'yi uygulayarak,

$$=+\mathrm{Tr}\left[e^{\beta\Omega}e^{\tau K}C_p e^{-\tau K}e^{-\beta K}C_p^{+}\right] \quad e^{\pm\beta K} \text{ ekleyerek}$$

$$=\mathrm{Tr}\left[\underbrace{e^{-\beta(K-\Omega)}e^{(\tau+\beta)K}C_p e^{-(\tau+\beta)K}C_p^{+}}\right]$$

$0<\tau+\beta<\beta$ olduğundan $-\mathcal{G}(\beta,\tau+\beta)$

$$\mathcal{G}(\underline{p},\tau)=-\mathcal{G}(\underline{p},\tau+\beta)$$

$-\beta<\tau<0$

GF.'ların F.S.'ne açılabildiğini biliyoruz:

$$\mathcal{G}(\underline{p},\tau)=\frac{1}{\beta}\sum_n e^{-i\omega_n\tau}\mathcal{G}(p,i\omega_n)$$

$$\mathcal{G}(\underline{p},i\omega_n)=\int_0^\beta d\tau\,\mathcal{G}(\underline{p},\tau)e^{i\tau\omega_n}$$

$\omega_n$ : $\frac{\pi}{\beta}$'nın tek katı (FERMI)

pertürbe olmamış GF'u $H_0=\sum_{\underline{p}}\varepsilon_{\underline{p}}C_{\underline{p}}^{+}C_{\underline{p}}$ 'den bulunur.

BS K

$$K_0 = H_0 - \mu N = \sum_p (\varepsilon_p - \mu) C_p^\dagger C_p = \sum_{\underline{p}} \xi_{\underline{p}} C_p^\dagger C_p$$ ne op. len

$\tau$ hafimuli...;

$$\begin{cases} C_{\underline{p}}(\tau) = e^{\tau K_0} C_{\underline{p}} e^{-\tau K_0} = e^{-\tau \xi_{\underline{p}}} C_{\underline{p}} \\ C_p^\dagger(\tau) = e^{\tau K_0} C_p^\dagger e^{-\tau K_0} = e^{\tau \xi_{\underline{p}}} C_{\underline{p}}^\dagger \end{cases}$$

$$e^{A} C e^{-A} = C + [A, C] + \frac{1}{2!}[A,[A,C]] + \cdots \quad \text{BCH}$$

$\Downarrow$

$$\mathcal{G}^{(0)}(\underline{p}, \tau) = -\Theta(\tau) e^{-\tau \xi_{\underline{p}}} \langle C_p C_p^\dagger \rangle + \Theta(-\tau) e^{-\tau \xi_p} \langle C_p^\dagger C_p \rangle$$

za da

$$\mathcal{G}^{(0)}(\underline{p}, \tau) = -e^{-\tau \xi_{\underline{p}}} \left[ \Theta(\tau)(1 - n_F) - (1 - \Theta(\tau)) n_F \right]$$

$$= -e^{-\tau \xi_{\underline{p}}} \left[ \Theta(\tau) - n_F(\xi_p) \right]$$

$$n_F = \frac{1}{e^{\beta \xi_p} + 1}$$

$$\mathcal{G}^{(0)}(\underline{p}, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}^{(0)}(\underline{p}, \tau)$$

$$= -(1 - n_F) \int_0^\beta d\tau\, e^{\tau(i\omega_n - \xi_p)} \longrightarrow$$

BS K

$$= \frac{-\left((1-n_F)\left(e^{\beta(i\omega_n-\xi_p)}-1\right)\right)}{i\omega_n-\xi_{\underline{p}}} \qquad \begin{cases} \beta i\omega_n = i(2n+1)\pi \\ e^{\beta i\omega_n} = -1 \end{cases}$$

$$= \frac{(1-n_F)\left(e^{-\beta\xi_p}+1\right)}{i\omega_n-\xi_{\underline{p}}}$$

$$1-n_F = \frac{1}{e^{-\beta\xi_p}+1}$$

$$\Rightarrow \boxed{\mathcal{G}^{(0)}(\underline{p}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n-\xi_p}}$$

FONONLAR :

foton + fonon GF lar özdeş.

$-\beta \leq \tau \leq +\beta$ için fonon durumlarına bakıyoruz

$$D(\underline{q}, \tau-\tau') = -\langle T_\tau A(\underline{q},\tau) A(-\underline{q},\tau') \rangle$$

$$A(\underline{q},\tau) = e^{\tau H}\left(a_q + a^\dagger_{-q}\right)e^{-\tau H}$$

$$\langle \dots \rangle = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-\mu)} \dots\right)$$

BS K

Fononlar kim. pot. e sahip değildirler çünkü rastgele sayıda alınabilirler., ve $\tau$ bağımlılığı Hamiltonyen ile içerilir. D'nin RHS'ini sadece $\tau-\tau'$ nün fonk.u olduğu gösterilebilir.

$\tau-\tau' \to \tau$

$$D(q,\tau) = -\langle T_\tau A(q,\tau) A(-q,0)\rangle$$

$\tau<0$: $$D(q,\tau) = -\langle A(-q,0) A(q,\tau)\rangle$$

$$= -\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(H-\Omega)} A(-q,0)\, e^{\tau H} A(q,0)\, e^{-\tau H}\right]$$

$\tau<0$: $$D(q,\tau) = -\mathrm{Tr}\left[e^{\beta\Omega} e^{\tau H} A(q,0)\, e^{-\tau H} e^{-\beta H} A(-q,0)\right]$$

$$= -\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(H-\Omega)} e^{H(\tau+\beta)} A(q,0)\, e^{-H(\tau+\beta)} \times A(-q,0)\right]$$

$-\beta<\tau<0$ $\quad D(q,\tau) = D(q,\tau+\beta)$ ✓

FT.'u $\quad D(q,\tau) = \dfrac{1}{\beta}\sum e^{-i\omega_n\tau} D(q,i\omega_n)$

$$\omega_n = \frac{2\pi n}{\beta}$$

$D(q,i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau} D(q,\tau)$ $\quad$ Frekans bağımlı Green Fonk.u.

BS K

Fononlar için pertürbe olmamış Green fonk.,

$$H_0 = \sum_{\underline{q}} \omega_{\underline{q}}\, a^{\dagger}_{\underline{q}} a_{\underline{q}}$$

alınarak bulunur.

$$e^{\tau H_0} a_q e^{-\tau H_0} = e^{-\tau \omega_q} a_q$$

$$e^{\tau H_0} a_q^{\dagger} e^{-\tau H_0} = e^{\tau \omega_q} a_q^{\dagger}$$

$$D^0(\underline{q}, \tau) = -\Theta(\tau) \langle (a_q e^{-\tau\omega_q} + a^{\dagger}_{-q} e^{\tau\omega_q})(a_{-q} + a_q^{\dagger})$$

$$-\Theta(-\tau) \langle (a_{-q} + a_q^{\dagger})(a_q e^{-\tau\omega_q} + a^{\dagger}_{-q} e^{\tau\omega_q})\rangle$$

$$= -\Theta(\tau)\{ e^{-\tau\omega_q} \langle a_q a_q^{\dagger}\rangle + e^{\tau\omega_q} \langle a^{\dagger}_{-q} a_{-q}\rangle\}$$

$$-\Theta(-\tau)\{ e^{-\tau\omega_q} \langle a_q^{\dagger} a_q\rangle + e^{\tau\omega_q} \langle a_{-q} a^{\dagger}_{-q}\rangle\}$$

$$N_q = \langle a_q^{\dagger} a_q\rangle \qquad N_q + 1 = \langle a_q a_q^{\dagger}\rangle$$

$$= \frac{1}{e^{\beta\omega_q} - 1} = N_{-q} = n_B(\omega_q) \qquad \omega_{\underline{q}} = \omega_{-\underline{q}}$$

BS K

$$D^0(q,\tau) = -\Theta(\tau)\left[(N_q+1)e^{-\tau\omega_q} + N_q e^{\tau\omega_q}\right]$$
$$-\Theta(-\tau)\left[N_q e^{-\tau\omega_q} + (N_q+1)e^{\tau\omega_q}\right]$$

$$= -\left[e^{-|\tau|\omega_q} + 2N_q \operatorname{Ch}(\omega_q\tau)\right]$$

$$\begin{cases} N_q\left(e^{\tau\omega_q} + e^{-\tau\omega_q}\right) + e^{-\tau\omega_q} = 2N_q \operatorname{Ch}\tau\omega_q + e^{-\tau\omega_q} & \tau>0 \\ N_q\left(e^{\tau\omega_q} + e^{-\tau\omega_q}\right) + e^{+\tau\omega_q} = 2N_q \operatorname{Ch}\tau\omega_q + e^{\tau\omega_q} & \tau<0 \end{cases}$$

Frekans Green fonk.

$$D^0(q,i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau} D^0(q,\tau)$$

$$= -\left\{\frac{(N_q+1)\left[e^{\beta(i\omega_n-\omega_q)}-1\right]}{i\omega_n-\omega_q} + \frac{N_q\left(e^{\beta(i\omega_n+\omega_q)}-1\right)}{i\omega_n+\omega_q}\right\}$$

$e^{i\omega_n\beta}=1$ BZN

$$= -\left\{\frac{(N_q+1)\left(e^{-\beta\omega_q}-1\right)}{i\omega_n-\omega_q} + \frac{N_q\left(e^{\beta\omega_q}-1\right)}{i\omega_n+\omega_q}\right\}$$

$$N_q+1 = 1+\frac{1}{e^{\beta\omega_q}-1} = \frac{e^{\beta\omega_q}\cancel{-1}\cancel{+1}}{e^{\beta\omega_q}-1} = e^{\beta\omega_q}N_q$$

$$e^{-\beta\omega_q} = \frac{N_q}{N_q+1} \qquad e^{-\beta\omega_q}-1 = \frac{N_q}{N_q+1}-1 = \frac{\cancel{N_q}-\cancel{N_q}-1}{N_q+1} = \frac{-1}{N_q+1}$$ $= -1$

BS K

$$D^{(0)}(\underset{\sim}{q}, i\omega_n) = -\left\{ \frac{-1}{i\omega_n - \omega_q} + \frac{1}{i\omega_n + \omega_q} \right\}$$

$$= \frac{2\omega_q}{(i\omega_n)^2 - \omega_q^2} = -\frac{2\omega_q}{\omega_n^2 + \omega_q^2}$$

Hemen hemen 0-sıcaklık sonucunun özdeşi, fark reel frekans yerine kompleks frekans kullanılması.

FOTONLAR : Bu da kompleks frekans hariç sıfır-sıcaklık durumunun özdeşidir.

$$D_{\mu\nu}(\underset{\sim}{k}, \tau) = -\langle T_\tau A_\mu(\underset{\sim}{k}, \tau) A_\nu(-k, 0) \rangle$$

$$A_\mu(k, \tau) = e^{\tau H} \sum_{k\mu} \left( \frac{2\pi}{\omega_k} \right)^{1/2} (a_{k\mu} + a^{\dagger}_{-k\mu})\, e^{-\tau H}$$

vektör pot.

serbest foton Green fonk.

$$D^{(0)}_{\mu\nu}(k, i\omega_n) = \frac{4\pi(\delta_{\mu\nu} - k_\mu k_\nu / k^2)}{\omega_n^2 - \omega_k^2}$$

$$\mathcal{G}(p, ip_n) = \mathcal{G}(p, ip) \equiv \mathcal{G}(p)$$

$$D(q, i\omega_n) = D(q, i\omega) = D(q) \qquad p \equiv (p, ip) \text{ gösterimi}$$

BS K

## 3.3. Gecikmiş ve İlerlemiş Green Fonksiyonları

"deneyle ölçülemez. Fakat S-matrisi kompleks hale geldiğinde ve açık bir Wick teoremine uymadığından doğrudan elde edilemezler"

Gecikmiş olanları hem 0- ve hem de sonlu sıcaklıklarda tanımlanabilirler. $p$-durumundaki bir elektron için gecikmiş GF

$$G_{ret}(p, t-t') = -i\,\Theta(t-t') \langle \{ C_p(t) C_p^{\dagger}(t') + C_p^{\dagger}(t') C_p(t) \} \rangle$$

$$= -i\,\Theta(t-t')\, \mathrm{Tr} \left\{ e^{-\beta(K-\Omega)} \left[ C_p(t) C_p^{\dagger}(t') + C_p^{\dagger}(t') C_p(t) \right] \right\}$$

$$K = H - \mu N \qquad C_p(t) = e^{itK} C_p e^{-itK}$$

Zamanları eşit hale geldiği limitte antikomütatör

$$\lim_{t \to t'} [\underbrace{C_p(t) C_p^{\dagger}(t') + C_p^{\dagger}(t') C_p(t)}_{\text{terimler anti komütatör}}] = 1$$

Fononlar için gecikmiş GF

$$D_{ret}(q, t-t') = -i\,\Theta(t-t') \langle [ A(q,t) A(-q,t') - A(-q,t') A(q,t) ] \rangle$$

$$= -i\,\Theta(t-t') \langle [A(q,t), A(-q,t')]_c \rangle$$

BS-K

$$U = \sum_{ij} n_{ij} \underbrace{c_i^+ c_j}$$

BZN özelliği taşıyanlar

$$V = \sum_{ijn} M_{ijn} c_i^+ c_j c_n$$ tek sayıda FMY op.

operatörlerini tanımlarız. $U$ için gecikmiş GF, $\bar{U}$

$$\bar{U}_{ret}(t-t') = -i\,\Theta(t-t')\langle [U(t)U^+(t') - U^+(t')U(t)]\rangle$$

$V$ gibi bir op. tek sayıda FMY'ların çarpımından oluşuyor ⇒ FMYN olarak görünür bunu. Bunun gecikmiş GF'ını

$$\bar{V}_{ret}(t-t') = -i\,\Theta(t-t')\langle [V(t)V^+(t') + V^+(t')V(t)]\rangle$$

Tüm bu GF'ların Fourier dön.üne sahiptir.

$$G_{ret}(\underline{p}, E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{-i(t-t')E}\, G_{ret}(\underline{p}, t-t')$$

$$D_{ret}(\underline{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega(t-t')}\, D_{ret}(\underline{q}, t-t')$$

BS K

İlerlemiş GF'ları

$$G_{adv}(p, t-t') = i\,\Theta(t'-t)\langle[C_p(t)C_p^{\dagger}(t') + C_p^{\dagger}(t')C_p(t)]\rangle$$

$$D_{adv}(q, t-t') = i\,\Theta(t'-t)\langle[A(q,t)A(-q,t') - A(-q,t')A(q,t)]\rangle$$

$$\bar{U}_{adv}(t-t') = i\,\Theta(t-t')\langle[U(t)U^{\dagger}(t') - U^{\dagger}(t')U(t)]\rangle$$

Önerdiğimiz ilerlemiş GF'ları geçikmiş karşılık gelen tam kompleks eşlenikler olarak işleme fazı tutulabilirler.

<u>İspat:</u>

$$\bar{U}_{adv}(t'-t)^{\dagger} = U_{ret}(t-t')$$

$$\bar{U}_{ret}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega(t-t')}\,\bar{U}_{adv}(\underbrace{t'-t}_{t_1})^{\dagger}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1\, e^{-i\omega t_1}\,\bar{U}_{adv}(t_1)^{\dagger}$$

$$\bar{U}_{ret}(\omega) = \bar{U}_{adv}(\omega)^{*}$$

Şimdi bu Green Fonk ları için Sınıl bir temsil ortaya koyacağız. Bu temsil $K = H - \mu N$ 'nin $\underset{\text{exact}}{\underline{\underline{\text{tam}}}}$ özdurumlarının olan larını durumların $\underset{\text{complete}}{\underline{\text{tam}}}$ kümesi kullanılır.

BS K

$K|n\rangle = E_n|n\rangle$

$$\bar{U}_{ret}(t-t') = -i\Theta(t-t')\, e^{\beta\Omega}\sum_n \langle n|e^{-\beta K}[U(t), U^\dagger(t') - U^\dagger(t')U(t)]|n\rangle$$

Trace → n üzerinden toplam $\quad 1 = \sum |m\rangle\langle m|$

$$= -i\Theta(t-t')\, e^{\beta\Omega}\sum_{nm} e^{-\beta E_n}[\langle n|U(t)|m\rangle\langle m|U^\dagger(t')|n\rangle - \langle n|U^\dagger(t')|m\rangle\langle m|U(t)|n\rangle]$$

$$\langle n|U(t)|m\rangle = \langle n|e^{itK}Ue^{-itK}|m\rangle$$

$$= e^{it(E_n-E_m)}\langle n|U|m\rangle$$

$$= -i\Theta(t-t')\, e^{\beta\Omega}\sum_{nm} e^{-\beta E_n}\{e^{i(t-t')(E_n-E_m)}|\langle n|U|m\rangle|^2 - \underbrace{e^{-i(t-t')(E_n-E_m)}|\langle m|U|n\rangle|^2}_{m\leftrightarrow n}\}$$

$$= -i\Theta(t-t')\, e^{\beta\Omega}\sum_{mn}|\langle n|U|m\rangle|^2 e^{i(E_n-E_m)(t-t')}(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})$$

BS K

Fourier transformu,

$$\mathcal{U}_{ret}(\omega) = -i\int_0^\infty dt\, e^{i(\omega+i\delta)t}\, e^{\beta\Omega}\sum_{nm}|\langle n|U|m\rangle|^2 e^{it(E_n-E_m)}$$

$$\times\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)$$

$$= e^{\beta\Omega}\sum_{nm}|\langle n|U|m\rangle|^2\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)\frac{1}{\omega+E_n-E_m+i\delta}$$

Eşdeğer Matsubara fonk.'u $U$ operatörü için bir skript sembolü ile tanımlanır.

$$\mathcal{U}(\tau) = -\langle T_\tau\, U(\tau) U^\dagger(0)\rangle$$

$$\mathcal{U}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau}\, \mathcal{U}(\tau)$$

bildiğimiz tanımı tekniğimizi bunlara uygularsak

$$\tau>0 \qquad \mathcal{U}(\tau) = e^{-\beta\Omega}\sum_{nm}\langle n|e^{\beta K}U(\tau)|m\rangle\langle m|U^\dagger(0)|n\rangle$$

FT.'u

$$\mathcal{U}(i\omega_n) = -e^{-\beta\Omega}\sum_{nm}|\langle n|U|m\rangle|^2 e^{-\beta E_n}\int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau}e^{\tau(E_n-E_m)}$$

---

$$= -e^{-\beta\Omega}\sum_{nm}|\langle n|U|m\rangle|^2 e^{-\beta E_n}\int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau}e^{\tau(E_n-E_m)}$$

$$= e^{\beta\Omega}\sum_{nm}|\quad|^2\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)\frac{1}{i\omega_n+E_n-E_m}$$

Burada BZN'ler için $\exp(i\beta\omega_n)=1$ kullanıldı.

BS K

Böylelikle, Matsubara fonk.unun geciktirilmiş olanına çeviririz.

$$\underset{i\omega_n \to \omega + i\delta}{\text{Change}} \quad \mathcal{U}(i\omega_n) = \bar{U}_{ret}(\omega)$$

bu adım analitik süreklilik olarak adlandırılır. Aynı method, diğer GF ları için aynı özdeşliği göstermek için kullanılabilir:

$$\underset{i\omega_n \to \omega + i\delta}{\text{Change}} \begin{cases} \mathcal{G}(\underline{p}, i\omega_n) = G_{ret}(\underline{p}, \omega) \\ \mathcal{D}(\underline{q}, i\omega_n) = D_{ret}(\underline{q}, \omega) \end{cases}$$

İlerlemiş fonk. Geciktirilmişin kompleks eşleniği olduğundan $i\omega_n \to \omega - i\delta$ konularak elde edilir.

## Spektral Yoğunluk Fonksiyonu:

$-2$ ile çarpılmış herhangi bir geciktirilmiş fonk.unun imajiner kısmıdır.

Örn

$$\begin{cases} R(\omega) = -2\,\mathrm{Im}\,\bar{U}_{ret}(\omega) \\ B(\underline{q}, \omega) = -2\,\mathrm{Im}\,D_{ret}(\underline{q}, \omega) \\ A(\underline{p}, \omega) = -2\,\mathrm{Im}\,G_{ret}(\underline{p}, \omega) \end{cases}$$

$$\frac{1}{\omega + E_n - E_m + i\delta} = \mathcal{P}\,\frac{1}{\omega + E_n - E_m} - i\pi\,\delta(\omega + E_n - E_m)$$

$$R(\omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{nm} |\langle n|U|m\rangle|^2 \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)$$

$$\times 2\pi\, \delta(\omega + E_n - E_m)$$

$$= 2\pi\left(1 - e^{-\beta\omega}\right) e^{\beta\Omega} \sum_{nm} |\langle n|U|m\rangle|^2 e^{-\beta E_n}$$

$$\times\, \delta(\omega + E_n - E_m)$$

Şimdi, gecikmiş ya da Matsubara fonk.larını integraller olarak yazmak mümkündür:

$$\begin{cases} U_{ret}(\omega) = \dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \dfrac{d\omega' R(\omega')}{\omega - \omega' + i\delta} \\[2ex] U(i\omega_n) = \dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \dfrac{d\omega' R(\omega')}{i\omega_n - \omega} \end{cases}$$

$$G_{ret}(p,\omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{nm} |\langle n|C_p|m\rangle|^2 \frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{\omega + E_n - E_m + i\delta}$$

$$A(p,\omega) = 2\pi e^{\beta\Omega} \sum_{nm} |\langle n|C_p|m\rangle|^2 \left(e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}\right) \delta(\omega + E_n - E_m)$$

$$A(p,\omega) \geq 0$$

Önemli çünkü bir yeni olasılık fonksiyonu olarak yorumlanacaktır. BZN'ler bu uymazlar, ama gösterilebilir ki $\omega > 0$ için $(+)$, $\omega < 0$ için $(-)$, dır.

BS K

Elektron SF'nin önemli bir diğer özelliği, tüm frekanslar üzerinde integre edilerek bulunur;

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(p,\omega)$$

<u>İspat</u>

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} A(p,\omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{nm} |\langle n|c_p|m\rangle|^2 \left(e^{-\beta K_n} - e^{-\beta K_m}\right)$$

$$= e^{\beta\Omega} \sum_{nm} e^{-\beta K_n} \Big( \langle n|c_p|m\rangle\langle m|c_p^\dagger|n\rangle + \langle n|c_p^\dagger|m\rangle\langle m|c_p|n\rangle \Big)$$

$$\langle n| c_p \underbrace{c_p^\dagger + c_p^\dagger c_p}_{1} |n\rangle$$

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

Serbest elektron gazı ya da pertürbe olmamış alan için spektral fonk.'u:

$$K_0 = H_0 - \mu N \qquad c_p(t) = e^{-\xi_p t} c_p$$

$$G^{(0)}_{ret}(p, t-t') = -i\,\theta(t-t')\, e^{-i\xi_p (t-t')} \langle (c_p c_p^\dagger + c_p^\dagger c_p) \rangle$$

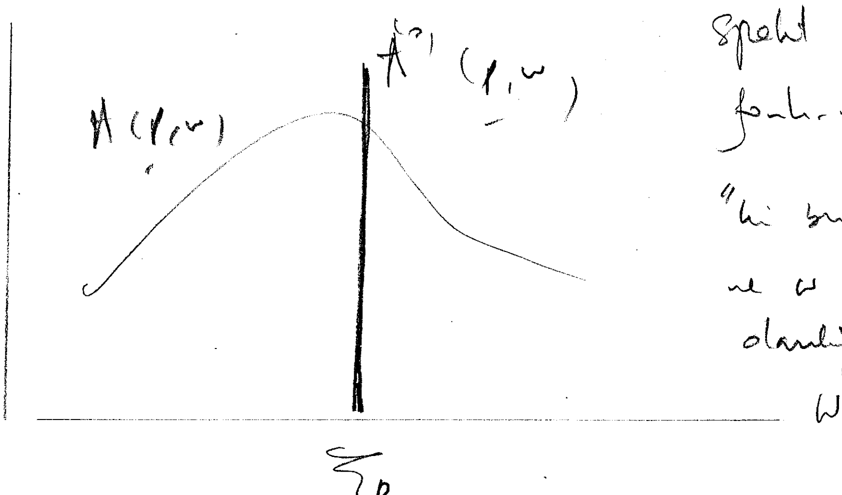
$$= -i\,\theta(t-t')\, e^{-\xi_p (t-t')}$$

$\Downarrow$

$$G^{(0)}_{ret}(p, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_p + i\delta}$$

$\delta$ her zaman $> 0$

$$A^{(0)}(p,\omega) = 2\pi\,\delta(\omega - \xi_p) \quad \left( = -2\,\mathrm{Im}\, G^{(0)}_{ret}(p,\omega) \right)$$




spekt. fonk.u olasılık fonk.u olarak yorumlanabilir "ki bu bir elektron p-mom. ve ω enerjisine sahip olma olasılığıdır" Serbest bir parçacık için her bir $\xi_p$ değeri için yalnızca bir ω değeri vardır.

Hesaplanması gereken bir diğer nicelik etkileşen bir elektron sistemi için bir p-durumundaki elektronların sayısıdır:

$$n_p = \langle c_p^\dagger c_p \rangle$$

etkileşmeyen elektron sistemi için bu,

$$n_F(\xi_p) = \frac{1}{e^{\beta \xi_p}+1}$$

etkileşen sistemde yine aynı temsili kullanırız:

$$n_p = e^{\beta\Omega} \sum_n \sum_m \langle m | e^{-\beta K} c_p^\dagger |n\rangle\langle n| c_p |m\rangle$$

$$= e^{\beta\Omega} \sum_{nm} |\langle n | c_p | m\rangle|^2 e^{-\beta E_m}$$

Bu sonuç aşağıdaki integral ile kıyaslanmalıdır:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{e^{\beta\omega}+1} A(p,\omega) = \underbrace{e^{\beta\Omega} \sum_{nm} |\langle n | c_p | m\rangle|^2 e^{-\beta E_m}}_{n_p}$$

$$n_p = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n_F(\omega) A(p,\omega)$$

Bir p-durumundaki parçacık sayısı, temel işgal sayısı $n_F(\omega)$ ile A'nın çarpıp tüm frekanslar üzerinden integre edilerek bulunur.

Fononlar için,

$$N_q = \langle a_q^\dagger a_q \rangle$$

$$\frac{1}{e^{\beta\omega}-1}$$

$$2N_q+1 = \langle A_q^\dagger A_q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, n_B(\omega)\, B(q,\omega)$$

her zaman $>0$

Pertürbe olmamış fonon spektral fonk.u,

$$B^{(0)}(q,\omega) = 2\pi\left[\delta(\omega-\omega_q) - \delta(\omega+\omega_q)\right]$$

Önümüzdeki kesimde göreceğimiz gibi,

$$\mathcal{G}(p,i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_p - \Sigma(p,i\omega_n)}$$

$$\mathcal{D}(q,i\omega_n) = \frac{1}{\omega_n^{2} \mp \omega_q^{2} \mp 2\omega_q P(q,i\omega_n)}$$

tipli Dyson denklemine sahiptirler.

$i\omega_n \to \omega + i\delta$ koyarak gecikmiş fonk.lar için Dyson denklemi elde edilir.

Gecikmiş self enerjiler cinsinden elektronlar için spektral fonk.

$$A(p,\omega) = \frac{-2\,\mathrm{Im}\,\Sigma_{ret}(p,\omega)}{\left[\omega - \xi_p - \mathrm{Re}\,\Sigma_{ret}(p,\omega)\right]^2 + \left[\mathrm{Im}\,\Sigma_{ret}(p,\omega)\right]^2}$$

$<0$ iken $A>0$

BS K

Spektral fonk.u elde etmenin bir yolu self enerjileri hesaplamaktır. Örneğin,

$$\Sigma(p,z) = C\ln[f(p)-z]$$

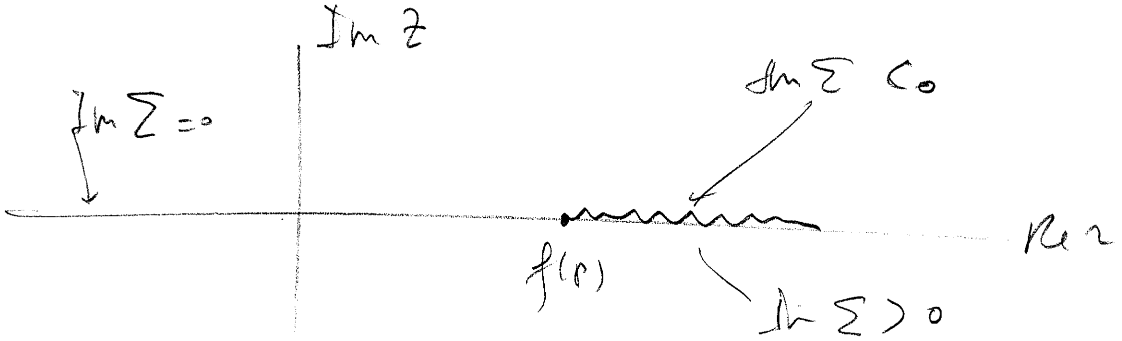
fonksiyonel formuna sahip bir self enerji op.nü gözönüne alalım. Z - kompleks frekans olsun. f(p) de p nin herhangi bir fonk.u. $Z = ip_n$ olsun ve analitik süreklilik $ip_n \to \omega \pm i\delta$ reel eksene. Geciktirilmiş self enerji,

$$\Sigma(p,ip_n) = C\ln[f(p)-ip_n]$$

$$\Sigma_{ret}(p,\overset{E}{\omega}) = C\ln|f(p)-\omega| - i\pi C\,\Theta[\omega-f(p)]$$

$$\Sigma_{adv}(p,\overset{E}{\omega}) = C\ln|f(p)-\omega| + i\pi C\,\Theta[\omega-f(p)]$$

$$\Sigma_{ret}(p,\omega) = C\ln(f(p)-\omega-i\delta)$$




$$\Sigma_{adv}^{*} = \Sigma_{ret}$$

Bu iki GF $\omega > f(p)$ bölgesinde farklıdırlar. Im. kısımları ($\pm$) işareti taşıyorlar. Bu bizim genel teoremimiz ile uyumlu: $G_{adv}(p,\omega) = G^{*}_{ret}(p,\omega)$

$\omega > f(p)$ için şekilde de görüldüğü gibi reel eksende bir branş kesim noktası vardır. Bu branş kesimi bize $(f - Z)$'in $\omega > f$ için reel ekseni kesen $Z$'nin sürekli bir fonksiyonu olmadığını söyler. Çünkü im. kısım işaret değiştirir.

Diğer bir örnek, $\Sigma(p,z) = C\,[f(p) - Z]^{1/2}$

burada da $\omega > f(p)$ için bir branş kesimi vardır. Gerçekte bir branş kesimi $\mathrm{Im}\,\Sigma \neq 0$ olduğunda gerekli bir özelliktir ki

$$\Sigma(p, \omega + i\delta) \neq \Sigma(p, \omega - i\delta)$$

bu analitik fonk da branş kesimini gerektirir.

Ne zaman bir branş kesimi belirlenir ve $\mathrm{Im}\,\Sigma \neq 0$'dır o zaman

$$A(p,\omega) = \frac{-2\,\mathrm{Im}\,\Sigma_{ret}}{[\quad]^2 + [\mathrm{Im}\,\Sigma\,]^2}$$

$\mathrm{Im}\,\Sigma = 0$ olduğu bölgede branş kesimi yoktur ve

$$A(p,\omega) = 2\pi\,\delta\{\omega - \xi_p - \mathrm{Re}\,\Sigma(p,\omega)\}$$
(eğer $\mathrm{Im}\,\Sigma = 0$)

$$\omega = \xi_p + \mathrm{Re}\,\Sigma(p,\omega) = E_p - \mu \text{ olsun}$$
$$= \xi_p + \mathrm{Re}\,[\Sigma(p, E_p - \mu)]$$

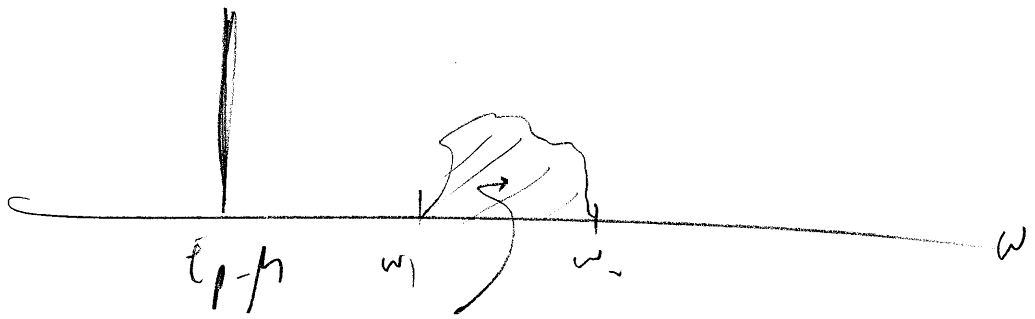
BS K

$$\delta[g(x)] = \frac{\delta(x-x_0)}{|g'(x_0)|}$$

$$A(p,\omega) = 2\pi\,\delta(\omega - \xi_p + \mu)\,Z(p)$$

$$Z(p) = \frac{\phantom{1}}{\left|1 - \frac{\partial}{\partial\omega}\mathrm{Re}[\Sigma(p,\omega)]\right|_{\omega=\xi_p-\mu}}$$

renormalizációs faktor.




$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(p,\omega) = 1 \quad \text{oldalunk} \quad Z(p) \leq 1$$

$\omega$ van elég kicsi impulzusokra: $\quad E_p$ kvadratikus diszperzió

$$E_p = E_0 + \frac{p^2}{2m^*} + O(p^3) \qquad \xi_p = \frac{p^2}{2m} - \mu$$

$$\frac{m}{m^*} = \frac{\partial E_p}{\partial \xi_p}$$

BS K

$$\frac{\partial E_p}{\partial \varepsilon_p} = \lim_{\varepsilon_p \to 0} \left( 1 + \left\{ \frac{\partial}{\partial \varepsilon_p} \mathrm{Re}\left[ \Sigma(p,\omega) \right] \right\} + \frac{\partial}{\partial \omega} \mathrm{Re}\left[ \Sigma(p,\omega) \right] \frac{\partial \omega}{\partial \varepsilon_p} \right)_{\omega = \varepsilon_p - \mu}$$

$$\omega = \varepsilon_p - \mu$$

$$= \frac{m}{m^*} = \left\{ \frac{1 + \frac{\partial}{\partial \varepsilon_p} \mathrm{Re}\, \Sigma(p, \varepsilon_0 - \mu)}{1 - \frac{\partial}{\partial \varepsilon_0} \mathrm{Re}\, \Sigma(p, \varepsilon_0 - \mu)} \right\}_{\varepsilon_p \to 0,\ \tilde{p} \to 0}$$

## 3.4. Dyson Denklemi

Matsubara GF ları için DD tekrar türetilecek. Öncelikle örnek olarak elektron GF nı ele alalım:

$$\mathcal{G}(p,\tau) = -e^{-\beta\Omega}\, \mathrm{Tr}\left[ e^{-\beta K}\, T_\tau \left( e^{\tau K} c_p e^{-\tau K} c_p^\dagger \right) \right]$$

$$e^{-\beta\Omega} = \mathrm{Tr}\left( e^{-\beta K} \right)$$

$$K = K_0 + V = H_0 - \mu N + V$$

$H_0$ tam olarak çözülebilir (özdeğer durumlarını tam biliyoruz.)

Büyük Hamiltonyenin genellikle, $[H_0, N] = 0$, $[H, N] = 0$ böylelikle hem $H_0$ ve $N$'nin ve hem de $H$ ve $N$'nin eşzamanlı özdurumlarını tanımlayabiliriz.

$H_0$ veya $K_0$'ı pertürbe olmamış problem, $V$'yi etkileşimi hesaplamaya çalışacağımız pertürbasyon olarak adlandırırız.

$$\mathcal{U}(\tau) = e^{\tau K_0} e^{-\tau K}$$

$$U^{-1}(\tau) = e^{\tau K} e^{-\tau K_0}$$

Op. lerini gözönüne alalım. Burada tekrar etkileşim temsilindeyiz, yani,

$$\hat{C}_p(\tau) = e^{\tau K_0} C_p e^{-\tau K_0}$$

Böylece 3.4.1 'n GF'u ($\tau > 0$)

$$\mathcal{G}(p,\tau) = -e^{+\beta\Omega} \mathrm{Tr}\Big[ e^{-\beta K_0} (e^{\beta K_0} e^{-\beta K})(e^{\tau K} e^{-\tau K_0})(e^{\tau K_0} C_p e^{-\tau K_0}) (e^{\tau K_0} e^{-\tau K}) C_p^{\dagger} \Big]$$

$$= \frac{-\mathrm{Tr}\left[ e^{-\beta K_0} U(\beta) U^{-1}(\tau) \hat{C}_p(\tau) U(\tau) \hat{C}_p^{\dagger}(0) \right]}{\mathrm{Tr}\left[ e^{-\beta K_0} U(\beta) \right]}$$

$$e^{-\beta\Omega} = \mathrm{Tr}(e^{-\beta K}) = \mathrm{Tr}\left[ e^{-\beta K_0} (e^{\beta K_0} e^{-\beta K}) \right]$$

$$= \mathrm{Tr}\left[ e^{-\beta K_0} U(\beta) \right]$$

BS K

$U(\tau)$ şu denklemi sağlar:

$$\frac{\partial}{\partial\tau} U(\tau) = e^{\tau K_0}(K_0 - K)\, e^{-\tau K} = -e^{\tau K_0}\, V\, e^{-\tau K}$$

$$= -e^{\tau K_0}\, V\, e^{-\tau K_0}\left(e^{\tau K_0}\, e^{-\tau K}\right)$$

$$= -\hat{V}(\tau)\, U(\tau)$$

$U(\tau)$ için olan bu denklem $U(0)=1$ kullanılarak iterasyon ile çözülebilir

$$U(\tau) = 1 - \int_0^{\tau} d\tau_1\, \hat{V}(\tau_1)\, U(\tau_1)$$

$$= 1 - \int_0^{\tau} d\tau_1\, \hat{V}(\tau_1) + (-1)^2 \int_0^{\tau} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2$$

$$\hat{V}(\tau_1)\, \hat{V}(\tau_2)\, U(\tau_2)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\tau} d\tau_1 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n\, \hat{V}(\tau_1) \cdots \hat{V}(\tau_n)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\tau} d\tau_1 \cdots \int_0^{\tau} d\tau_n \left[ T_\tau\, \hat{V}(\tau_1) \cdots \hat{V}(\tau_n) \right]$$

$$= T_\tau\, e^{-\int_0^{\tau} d\tau_1\, \hat{V}(\tau_1)}$$

BS K

$$S(\tau_1,\tau_2) = T_\tau\, e^{-\int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau\, \hat{V}(\tau)}$$

tanımını gözönüne alalım.

$$S(\tau_1,\tau_2) = S^{-1}(\tau_2,\tau_1)$$

$$S(\tau_1,\tau_2)\, S(\tau_2,\tau_3) = S(\tau_1,\tau_3)$$

$$S(\tau_1,\tau_2) = u(\tau_2)\, u^{-1}(\tau_2)$$

Bu notasyonda $\tau > 0$ için GF ,

$$\mathcal{G}(p,\tau) = \frac{-Tr\left[e^{-\beta K_0}\, S(\beta,\tau)\, \hat{c}_p(\tau)\, S(\tau,0)\, \hat{c}_p^\dagger(0)\right]}{Tr\left[e^{-\beta K_0}\, S(\beta)\right]}$$

$\tau$ düzenleme operatörü kullanılarak

$$= \frac{-Tr\left[e^{-\beta K_0}\, T_\tau\, S(\beta)\, \hat{c}_p(\tau)\, \hat{c}_p^\dagger(0)\right]}{Tr\left[e^{-\beta K_0}\, S(\beta)\right]}$$

Bu noktadan sonra $e^{-\beta K_0}$ üzerinden izi,

$$Tr\left\{e^{-\beta K_0}\, \Theta\right\} = \langle \Theta \rangle_0$$

olarak kullanacağız. Bu durumda,

$$\mathcal{G}(p,\tau) = \frac{-\langle T_\tau \left[S(\beta)\, \hat{c}_p(\tau)\, \hat{c}_p^\dagger(\tau)\right]\rangle_0}{\langle S(\beta)\rangle_0}$$

GF'ları en azından S-matrisini seriye açarak elde edilir.

$$\langle T_\tau S(\beta)\, \hat{C}_p(\tau)\, \hat{C}_p^{+}(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \ldots \int_0^{\beta} d\tau_n$$

$$\langle T_\tau\, \hat{C}_p(\tau)\, \hat{V}(\tau_1) \ldots \hat{V}(\tau_n)\, \hat{C}_p(0)\rangle$$

Böylelikle, önceki gibi Wick teoremi uygulanabilir. Örneğin,

$$\langle T_\tau\, \hat{C}_p(\tau)\, \hat{C}_k^{+}(\tau_1)\, C_{k'}(\tau_1)\, \hat{C}_p^{+}(0)\rangle$$

$$= \delta_{pk}\, \delta_{pk'}\, \mathcal{G}^{(0)}(p, \tau-\tau_1)\, \mathcal{G}^{(0)}(p, \tau_1)$$

$$- \delta_{kk'} n_k\, \mathcal{G}^{(0)}(p, \tau)$$

Wick teoremi sonlu sıcaklıktaki GF'ları için çift anlam taşır.

(i) Çiftleme özelliğidir: $\Sigma$ bir $|\lambda\rangle$ durumu ile işe başlarsak $C_\lambda$ ile bu durumu operasyon yaparak ... tarafından ... ulaşmak için operatörler çarpımında $C_\lambda^{+}$'a ihtiyacımız vardır.

(ii) Termodinamik ort. içermesidir. $\langle \ldots \rangle$ ve genellikle

$$\langle AB\rangle \neq \langle A\rangle \langle B\rangle \text{ dir.}$$

BS K

$$W=\frac{1}{V^2}\langle T_\tau[\sum_{\underline{p}} C_{\underline{p}}^\dagger(\tau)C_{\underline{p}}(\tau)\sum_{\underline{k}} C_k^\dagger(\tau')C_{k}(\tau')]\rangle$$

$$\sum C_p^\dagger C_p=n_p \qquad [H,n_{\underline{p}}]=0 \qquad \tau \text{ bağımlılığı yok.}$$

$p\neq k$ ve $\underline{p}=\underline{k}$ için ayırırız.

$$W=\frac{1}{V^2}\sum_{p\neq k}\langle C_p^\dagger C_p C_k^\dagger C_k\rangle_0+\frac{1}{V^2}\sum_{\underline{p}}\langle C_p^\dagger C_p C_p^\dagger C_p\rangle_0$$

$$n_p=\langle C_p^\dagger C_p\rangle_0$$

olarak tanımlarsak,

$$W=\frac{1}{V^2}\sum_{p\neq k} n_{\underline{p}} n_{\underline{k}}+\frac{1}{V^2}\sum_{p} n_p$$

$$=\left(\frac{1}{V}\sum_p n_p\right)^2+\frac{1}{V^2}\sum_p n_p(1-n_p)$$

Şimdi aynı problemi Wick teoremi ile çözelim

$$W=\frac{1}{V^2}\sum_{pk}[n_p n_k-\delta_{pk}G^{(0)}(p,\tau-\tau')G^{(0)}(p,\tau'-\tau)]$$

$$G^{(0)}(p,\tau)=-e^{-\xi_p\tau}[\Theta(\tau)-n_p]$$

BS K

$$G^{(0)}(p,\tau)\, G^{(0)}(p,-\tau) = [\Theta(\tau) - n_p][\Theta(-\tau) - n_p]$$

$$= -n_p[1-n_p]$$

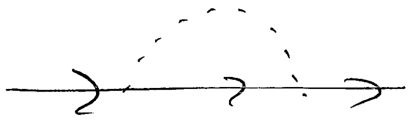
$$W = \frac{1}{V^2}\left(\sum_p n_p\right)^2 + \frac{1}{V^2}\sum_p n_p(1-n_p)$$

$$W = \left(\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} n_p\right)^2 + \frac{1}{V}\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} n_p(1-n_p)$$

$$= n_0^2 + \mathcal{O}(1/V)$$

BS K

Örnek olarak EFE'den elektron self enerjisine gelen katkıya bakalım



$$V = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\underline{q}} M_{\underline{q}} A_{\underline{q}} \sum_{\underline{k}} C^{\dagger}_{\underline{k+q}} C_{\underline{k}}$$

Öyleki S-matrisi açılımındaki n=2 terimi

$$\mathcal{G}_2 = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\underline{q}} \sum_{\underline{q}'} M_{\underline{q}'} M_{\underline{q}} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\beta} d\tau_2$$

$$\times \langle T_\tau \hat{C}_p(\tau) \sum_{\underline{k}} \hat{C}^{\dagger}_{\underline{k+q}}(\tau_1) \hat{C}_k(\tau_1) \sum_{\underline{k}'} \hat{C}^{\dagger}_{\underline{k'+q'}}(\tau_2) \hat{C}_{\underline{k}'}(\tau_2)$$

$$\underbrace{C_p^{\dagger}(0) \rangle_0}\ \underbrace{\langle T_\tau \hat{A}_q(\tau_1) \hat{A}_{q'}(\tau_2) \rangle}_{= -\delta_{\underline{q+q'=0}} D^{(0)}(q,\, \tau_1 - \tau_2)}$$

Wick teoremi elektron braketine uygulandığında 6 terim verir. Ama, sadece bir tane farklı bağlantılı terim vardır ve bunun katkısı da

$$\mathcal{G}_2 = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\underline{qq'}} M_q M_{q'} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\beta} d\tau_2 \langle T_\tau C_p(\tau) \sum_k \hat{C}^{\dagger}_{\underline{k+q}}(\tau_1)$$

$$\hat{C}_k(\tau_1) \sum_{\underline{k}'} \hat{C}^{\dagger}_{\underline{k'+q}}(\tau_2) \hat{C}_{\underline{k}'}(\tau_2) \hat{C}_p^{\dagger}(0) \rangle_0 \langle T_\tau \hat{A}_q(\tau_1) \hat{A}_{q'}(\tau_2) \rangle$$

τ- integrallerini almak yerine, FD'lerini alırız:

$$G_2(\mathbf{p}, ip_n) = \int_0^\beta d\tau \, G_2(\mathbf{p}, \tau) \, e^{ip_n\tau}$$

$$D^{(0)}(\mathbf{q}, \tau_1 - \tau_2) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n(\tau_1-\tau_2)} D^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)$$

$$G^{(0)}(\mathbf{p}, \tau - \tau_1) = \frac{1}{\beta} \sum_{ip_{n'}} e^{-ip_{n'}(\tau-\tau_1)} G^{(0)}(\mathbf{p}, ip_{n'})$$

Böylece $G_2(\mathbf{p}, \tau)$ şu şekilde yazılır:

$$G_2(\mathbf{p}, \tau) = \frac{-1}{V} \sum M_q^2 \frac{1}{\beta^4} \sum_{\substack{n'n'' \\ n''' n}} D^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n) G^{(0)}(\mathbf{p}, ip_{n'})$$

$$\times G^{(0)}(\mathbf{p}-\mathbf{q}, ip_{n''}) G^{(0)}(\mathbf{p}, ip_{n'''})$$

$$\times \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2$$

$$\times \exp\{-i\omega_n(\tau_1-\tau_2) - ip_{n'}(\tau-\tau_1) - ip_{n''}(\tau_1-\tau_2) - ip_{n'''}\tau_2\}$$

Son olarak her iki tarafı $\exp(ip_n\tau)$ ile çarpıp, τ üzerinden integre edersek

$$\mathcal{G}_2(p, ip_n) = \frac{-1}{V} \sum_q M_q^2 \frac{1}{\beta^4} \sum_{\substack{n'n'' \\ n''' m}} \mathcal{D}^{(0)}(q, i\omega_m)$$

$$\times\, \mathcal{G}^{(0)}(p, ip_{n'})\, \mathcal{G}^{(0)}(p-q, ip_{n''})\, \mathcal{G}^{(0)}(p, ip_{n'''})$$

$$\times \exp\{ ip_n\tau - i\omega_m(\tau_1-\tau_2) - ip_{n'}(\tau - \tau_1)$$
$$- ip_{n''}(\tau_1-\tau_2) - ip_{n'''}\tau_2 \}$$

für $\tau$ integrallei,

$$\frac{1}{\beta}\int^\beta d\tau\, e^{i\tau(p_n-p_{n'})} = \frac{1}{i\beta(p_n-p_{n'})}\left(e^{i\beta(p_n-p_{n'})}-1\right)$$

$$= \frac{1}{2\pi i(n-n')}\left(e^{i2\pi(n-n')}-1\right) = \delta_{nn'}$$

7a da

$$\frac{1}{\beta}\int^\beta d\tau\; e^{i\tau(p_n-p_{n'})} = \delta_{p_n p_{n'}}$$

$$\frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\tau_1\; e^{i\tau_1(p_{n'}-p_{n''}-\omega_m)} = \delta_{p_{n'}=p_{n''}+\omega_m}$$

$$\frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\tau_2\; e^{i\tau_2(\omega_m+p_{n''}-p_{n'''})} = \delta_{p_{n'''}=p_{n''}+\omega_m}$$

BS K

$$\mathcal{G}_2(p, ip_n) = -\frac{1}{\beta V}\sum_q M_q^2 \sum_{n'n''n'''m} D^{(0)}(q, i\omega_m)$$

$$\times\, \mathcal{G}^{(0)}(p, ip_{n'})\, \mathcal{G}^{(0)}(p-q, ip_{n''})\, \mathcal{G}^{(0)}(p, ip_{n'''})$$

$$\times\, \delta_{p_n=p_{n'}}\, \delta_{p_{n'}=p_{n''}+\omega_m}\, \delta_{p_{n''}=p_{n'''}+\omega_m}$$

$$= \mathcal{G}^{(0)}(p, ip_n)^2\, \Sigma^{(1)}(p, ip_n)$$

$$= -\frac{1}{\beta V}\sum_q \sum_{i\omega_m} M_q^2\, D^{(0)}(q, i\omega_m)\, \mathcal{G}^{(0)}(p-q, ip_n - i\omega_m)$$

Matsubara notasyonu 2.7.4 deki ile sadece tek fark reel olanın yerine complex frekans kullanılmalıdır. Bu ifadede de frekans korunumu vardır. elektron $ip_n$ frekansı ile gelir, $i\omega_n$ frekanslı bir fonon soğurur ya da salar $(ip_n \pm i\omega_n)$.

Toplam, iç değişkenler üzerinden alınır $(q$ ve $i\omega_n)$

Matsubara GF'larını elde etmek için aşağıdaki kurallara sahip Feynman diyagramlarını çizeriz:

BS K

1. Her bir elektron çizgisi ~~ile~~ $\mathcal{G}^{(0)}(p, ip_n)$ niceliği ~~olur.~~ eşlikide $\mathcal{G}^{0}$

2. fonon $M_q^2 D^{(0)}(q, i\omega_n)$ "

3. Coulomb $V_q = 4\pi e^2/q^2$

4. Mom. ve kompleks frekans, her bir verteks de korunur.

Fermiyon frek. $(2n+1)\pi/\beta$ tek

Bozon " $2n\pi/\beta$ çift tamsayılardır.

5. Tüm iç serbestlik dereceleri üzerinde topla.

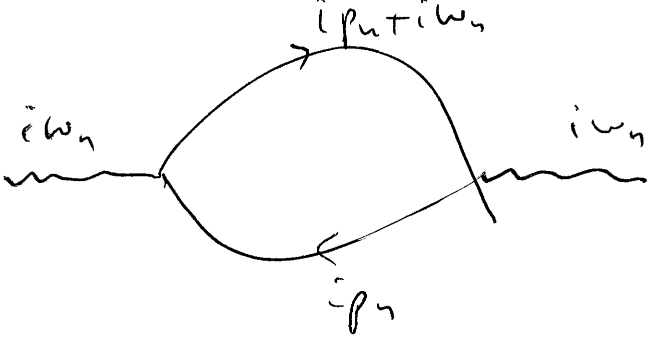
6. İfade

$$\frac{(-1)^{m+F}(2s+1)^{F}}{(V\beta)^{m}}$$

kapalı fermiyon looplar

diyagram mertebesi

ile çarpılır

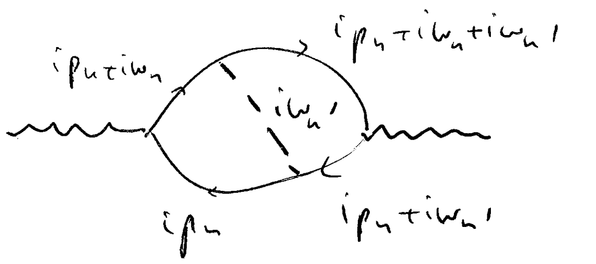



$m=1$, $F=1$, $s=1/2$

Bu şekildeki Fermiyon looplar hem fonon self enerjisinde ve hem de Coulomb self enerjisinde gelirler.

$$D^{(1)}(q, i\omega_n) = \frac{1}{\beta V}\sum_{ip_n}\sum_{p} \mathcal{G}^{(0)}(p, ip_n)\, \mathcal{G}^{(0)}(p+q, ip_n + i\omega_n)$$

BS K




$F=1$, $m=2$

$$P^{(2)}(\underline{q},i\omega_n) = \frac{-2}{(\beta V)^2}\sum_{qk} M_k^2 \sum_{\substack{i\omega_{n'} \\ ip_n}} G^{(0)}(p,ip_n)\, G^{(0)}(\underline{p+q},\, ip_n+i\omega_n)$$

$$D^{(0)}(\underline{k},i\omega_{n'})\, G^{(0)}(\underline{p+k+q},\, ip_n+i\omega_n+i\omega_{n'})\, G^{(0)}(p+k,\, ip_n+i\omega_{n'})$$

Frekans toplamları:

İlk olarak sık sık ifadelerde gelen kombinasyonlar için sonuçları vereceğiz ve sonra bunları nasıl türettiğimizi açıklayacağız.

$$-\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n} D^{(0)}(q,i\omega_n)\, G^{(0)}(p, ip_n+i\omega_n) = \frac{N_q+n_F(\xi_p)}{ip_n+\omega_q-\xi_p} + \frac{N_q+1-n_F(\xi_p)}{ip_n-\omega_q-\xi_p}$$

(GFE de electron self enerjisinde gelecek.)

$$\frac{1}{\beta}\sum_{ip_n} G^{(0)}(p,ip_n)\, G^{(0)}(k, ip_n+i\omega_n) = \frac{n_F(\xi_p)-n_F(\xi_k)}{i\omega_n+\xi_p-\xi_k}$$

temel pol. diyagram.

$$-\frac{1}{\beta}\sum_{ip_n} G^{(0)}(p,ip_n)\, G^{(0)}(\underline{k}, i\omega_n-ip_n) = \frac{1-n_F(\xi_p)-n_F(\xi_k)}{i\omega_n-\xi_p-\xi_k}$$

$$\frac{1}{\beta}\sum_{ip_n} G^{(0)}(p,ip_n) = n_F(\xi_p)$$

Burada

$$N_q = \frac{1}{e^{\beta w_q}-1} \qquad n_F(\xi) = \frac{1}{e^{\beta \xi}+1}$$

$\omega_n = 2n\pi/\beta$ ile 1. denklemi göz önüne alalım.

$$S = \frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{2\omega_q}{\omega_n^2+\omega_q^2} \times \frac{1}{ip_n+i\omega_n-\xi_p}$$

$$= \frac{-1}{\beta}\sum_n f(i\omega_n)$$

kontur int. ile bulunacak toplam.

$$I = \lim_{R\to\infty} \oint \frac{dz}{2\pi i} f(z)\, n_B(z)$$

biçimli bir integralimiz olsun. $n_B(z) = \frac{1}{e^{\beta z}-1}$

$$I = \lim_{R\to\infty} \oint \frac{dz}{2\pi i} \frac{2w_q}{z^2-w_q^2} \frac{1}{z+ip_n-\xi_p} \frac{1}{e^{\beta z}-1}$$

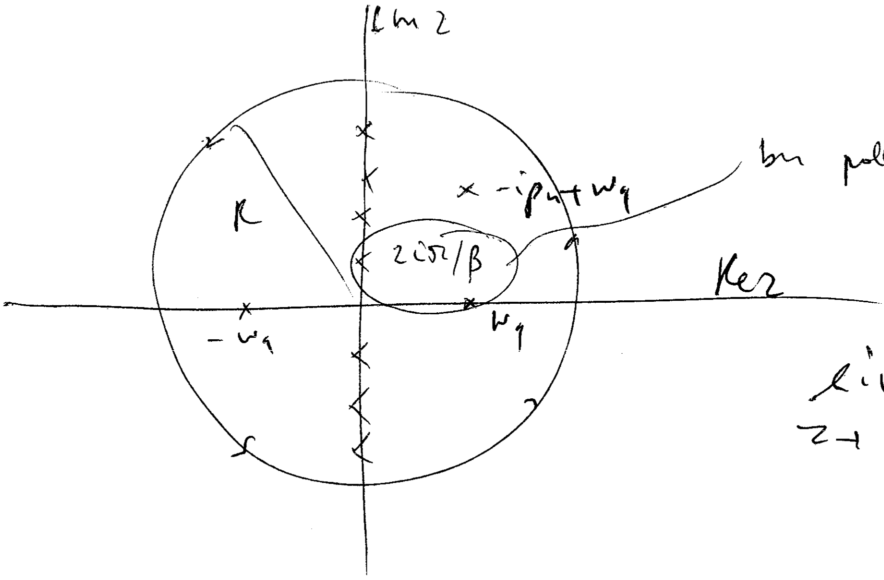
Bu durumda integral $z_i = \frac{2in\pi}{\beta}$ $\quad z_1 = w_q \quad z_2 = -w_q$

$n = 0, \pm\infty$

ve $z_3 = \xi_p - ip_n$

kutuplarına sahiptir. integral bu kutuplardaki rezidülere eşittir.

BS K




bei Polordnung Res. $= \frac{1}{\beta}$

$$\lim_{z\to z_i} \frac{z-z_i}{e^{\beta z}-1} = \frac{1}{\beta}$$

$$I = 2\pi i \sum \frac{\text{Res}}{2\pi i}$$

$$R_i = \sum_i \frac{2\omega_q}{z_i^2-\omega_q^2}\cdot\frac{1}{z_i+ip_n-\xi_p}\cdot\frac{1}{\beta}$$

$$(z_i-\omega_q)(z_i+\omega_q)$$

$$= \frac{1}{\beta}\sum_n f(i\omega_n)$$

$z_1, z_2, z_3$ alle Residuen

$$R_1 = \frac{\cancel{2\omega_q}\,1}{\cancel{\omega_q+\omega_q}}\cdot\frac{1}{\omega_q+ip_n-\xi_p}\cdot\frac{1}{e^{\beta\omega_q}-1} = \frac{N_q}{ip_n+\omega_q-\xi_p}$$

$$R_2 = \frac{2\omega_q}{-\omega_q-\omega_q}\cdot\frac{1}{-\omega_q+ip_n-\xi_p}\cdot\frac{1}{e^{-\beta\omega_q}-1} = \frac{N_q+1}{ip_n-\omega_q-\xi_p}$$

$$R_3 = \frac{-2\omega_q}{e^{\beta\xi_p}+1}\cdot\frac{1}{(\xi_p-ip_n)^2-\omega_q^2} = -\frac{n_F(\xi_p)\,2\omega_q}{(ip_n-\xi_p)^2-\omega_q^2}$$

BS K

$$I = \frac{1}{\beta} \sum_n f(i\omega_n) + \frac{N_q}{ip_n + \omega_q - \xi_p} + \frac{N_q + 1}{ip_n - \omega_q - \xi_p}$$

$$- \frac{n_F(\xi_p)\, 2\omega_q}{(ip_n - \xi_p)^2 - \omega_q^2}$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_n f + \frac{N_q}{\qquad} + \frac{N_q + 1}{\qquad} + \frac{n_F(\xi_p)}{ip_n + \omega_q - \xi_p} - \frac{n_F(\xi_p)}{ip_n - \omega_q - \xi_p}$$

$\beta \to \infty$ limitinde integral 0 dır.

$$S = \frac{-1}{\beta} \sum_n f(i\omega_n) = \frac{N_q + n_F(\xi_p)}{ip_n - \xi_p + \omega_q} + \frac{N_q + 1 - n_F(\xi_p)}{ip_n - \xi_p - \omega_q}$$

Böylece bu bozon serilerini hesaplamamız çok basittir:

$$S = \frac{-1}{\beta} \sum f(i\omega_n)$$

gibi bir seriyi hesaplamak için $f(z)$'nin tüm basit polleri bulunur, bu $z_j$ pollerindeki $f(z)$'nin $r_j$ rezidüleri bulunur ve

$$S = \sum_j R_j \qquad R_j = r_j\, n_B(z_j)$$

olarak değerlendirilir. Aynı prosedürü fermiyon serilerini hesaplamakta da kullanırız.

BS K

Böylelikle toplam

$$S = \frac{-1}{\beta} \sum_{ip_n} f(ip_n)$$

biçimlidir. $p_n = (2n+1)\pi/\beta$ tek tamsayılar ihtiva eder.

3.5.6 daki kontur integrali $n_F(z)$'nin $ip_n$ noktalarında pollere sahip olmasının dışında aynı şekilde kurulabilir

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

burada rezidü bu noktalarda $-1/\beta$'dır. İntegral yine 0'ı bulurız. Öyleki

$$S = -\sum_i R_i \qquad R_i = r_i\, n_F(z_i)$$

Fermiyon serisine örnek olarak aynı toplamı tekrar yaparız.

7.5.1.' toplam değişkeni $p_n' = p_n + \omega_n$ olacak şekilde değiştirir isek,

$$S = \frac{-1}{\beta} \sum_{p_n'} D^{(0)}(q, ip_n - ip_n')\, \mathcal{G}^{(0)}(p, ip_n')$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{n'} \frac{2\omega_q}{(p_n' - p_n)^2 + \omega_q^2}\, \frac{1}{ip_n' - \xi_p}$$

$p_n$ bir fermiyon frekansı olduğundan tektir. Böylece,

$$f(z) = \frac{2\omega_q}{(z-ip_n)^2-\omega_q^2} \cdot \frac{1}{z-\xi_p}$$

ki bu aşağıdaki pollere ve residülere sahiptir:

$$z_1 = \xi_p \qquad R_1 = \frac{n_F(\xi_p)\, 2\omega_q}{(\xi_p-ip_n)^2-\omega_q^2} = n_F(\xi_p)\left[\frac{1}{ip_n-\xi_p-\omega_q} - \frac{1}{ip_n-\xi_p+\omega_q}\right]$$

$$z_2 = ip_n-\omega_q \qquad R_2 = \frac{n_F(ip_n-\omega_q)}{ip_n-\xi_p-\omega_q}$$

$$z_3 = ip_n+\omega_q \qquad R_3 = \frac{n_F(ip_n+\omega_q)}{ip_n+\omega_q-\xi_p}$$

$$n_F(ip_n-\omega_q) = \frac{1}{e^{\beta(ip_n-\omega_q)}+1} = \frac{1}{1-e^{-\beta\omega_q}} = N_q+1$$

$$n_F(ip_n+\omega_q) = -N_q$$

$$\Rightarrow S = \frac{N_q+n_F(\xi_p)}{ip_n-\xi_p+\omega_q} + \frac{N_q+1-n_F(\xi_p)}{ip_n-\xi_p-\omega_q}$$

BS K

Son yapıntıya bakalım:

$$\frac{1}{\beta}\sum_{ip_n} \mathcal{G}^{(0)}(p, ip_n) = n_F(\xi_p)$$

Bunun sol tarafı Matsubara GF'nun FT'u:

$$\mathcal{G}^{(0)}(p,\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{ip_n} e^{-ip_n\tau}\mathcal{G}^{(0)}(p, ip_n)$$

$$= -\langle T_\tau\, c_p(\tau)\, c_p^{\dagger}(0)\rangle$$

$\tau \to 0$ limitinde (1.5.4.) e eşit.

$$\mathcal{G}^{(0)}(p, \tau = 0^+) = -\langle c_p c_p^{\dagger}\rangle = -(1 - n_F(\xi_p))$$

$$\mathcal{G}^{(0)}(p, \tau = 0^-) = \langle c_p^{\dagger} c_p\rangle = n_F(\xi_p)$$ ← bu uygundur.

konvensiyon şöyle idi: aynı zamanlı iki op. var

ise $-\langle T_\tau\, c_p(\tau) c_p^{\dagger}(\tau)\rangle = \langle c_p^{\dagger} c_p\rangle$ idi.

$\mathcal{G}^{(0)}$ yerine $\mathcal{G}$ ler olsa idi

poller " "branch cut" lar olacaktı.

ÖRNEK:

İmpurity ihtiva eden bir kristaldeki bir elektron için $\Sigma^{(1)}$ polaron self enerjisini hesaplamanın örneği. Varsayalım ki

$$\mathcal{G}(p, ip_n) = \frac{1}{ip - \xi_p - \Sigma_i(p, ip_n)}$$

GF nun veren, impurity saçılmasından $\Sigma$ self enerjisi hesaplanmış olsun. İmpurity saçılmasının varlığında en düşük polaron self enerjisi,

$$\Sigma^{(1)}(p, ip) = \frac{-1}{\beta} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} M_q^2 \sum_{i\omega_n} \mathcal{D}^{(0)}(q, i\omega_n)$$

$$\times\ \mathcal{G}(p+q, ip_n + i\omega_n)$$

Böylece,

$$S = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{2\omega_q}{\omega_n^2 + \omega_q^2} \frac{1}{ip_n + i\omega_n - \xi_{p+q} - \Sigma_i(p+q, ip_n + i\omega_n)}$$

toplamını hesaplamak istiyoruz.

$$S = \frac{-1}{\beta} \sum_{i\omega_n} f(i\omega_n)$$

$$f(z) = \frac{2\omega_q}{z^2 - \omega_q^2} \cdot \frac{1}{ip_n + z - \xi_{p+q} - \Sigma_i(\underline{p}+\underline{q}, ip_n + z)}$$

Bozon serisi kullandığımızdan dolayı, kontur integrali,

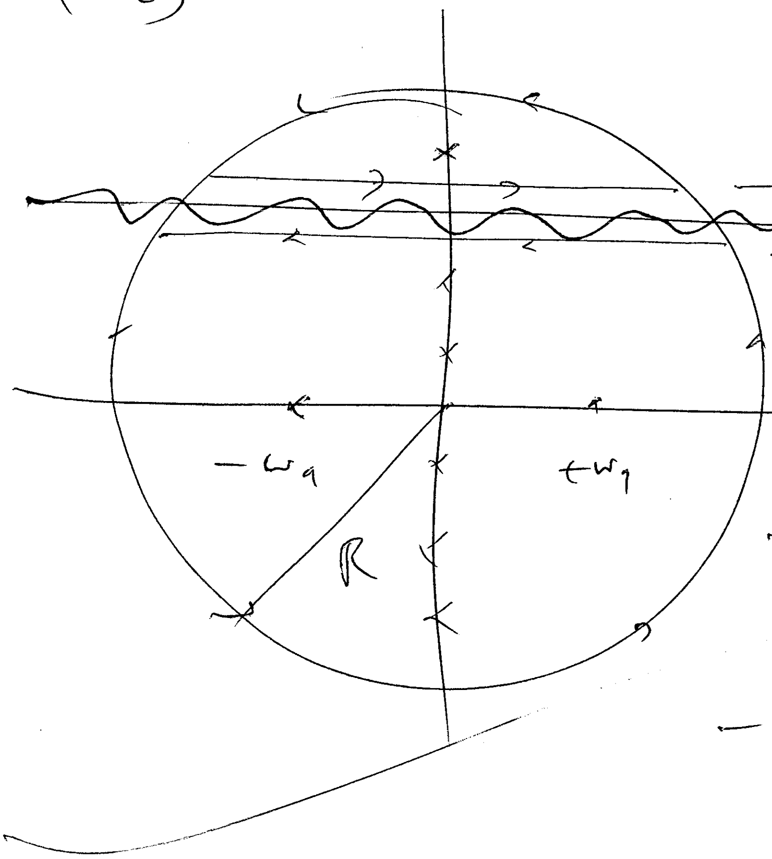
$$I = \oint_\Gamma \frac{dz}{2\pi i} n_B(z) f(z)$$

$$\frac{1}{z + ip_n - \xi_{p+q} - Re\Sigma_i - i Im \Sigma_i} = \frac{1}{z + i(p_n - Im\Sigma_i) - \xi_{p+q} - Re\Sigma_i}$$

$\Sigma$ - selfenerji fonk.u $ip_n + z = \varepsilon$ de kimliği bir branch-cut'a sahip.
(BC)

$$P\left(\frac{1}{\quad}\right) - i\delta(\quad)$$

$p_n \to Im \Sigma_i$



$\delta$

$z = \Sigma - ip_n$

– BC $Im\Sigma \neq 0$ olduğu bölgede uzanır.

– $R \to \infty$ iken dairesel ______ sıfır verir.

ama şimdilik bunu ekseni kenara olarak ortaya koyalım.

Bizim konturumuzun içerisinde, $Im\Sigma = 0 \Rightarrow \rightleftarrows$ kısımları birbirini götürür. $I_{R\to\infty} \to 0$ bu tamamı BC boyunca katkıya eşittir.

BS K

BC boyunca integrasyon,

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi i}\, n_B(\varepsilon - ip_n)\, \mathcal{D}^{(0)}(q, \varepsilon - ip_n)\, \mathcal{G}(p+q, \varepsilon + i\delta)$$

$$+ \int_{\infty}^{-\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi i}\, n_B(\varepsilon - ip_n)\, \mathcal{D}^{(0)}(q, \varepsilon - ip_n)\, \mathcal{G}(p+q, \varepsilon - i\delta)$$

$ip_n + i\omega_n = \varepsilon + i\delta$ dahi RC üzerindeki integral

$\varepsilon - i\delta$ " " altındaki " .

$$n_B(\varepsilon - ip_n) = -n_F(\varepsilon)$$

$$\mathcal{G}(p+q, \varepsilon + i\delta) = G_{ret}(p+q, \varepsilon)$$

$$\mathcal{G}(p+q, \varepsilon - i\delta) = G_{adv}(p+q, \varepsilon)$$

$$I = -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi i}\, n_F(\varepsilon)\, \mathcal{D}^{0}(q, \varepsilon - ip_n)\, [\, G_{ret}(p+q, \varepsilon) - G_{adv}(p+q, \varepsilon)\,]$$

ilerleyen olan gecikmeli'nin komp. eşleniği olduğundan

$$G_{ret} - G_{adv} = 2i\, \mathrm{Im}\, G_{ret}(p+q, \varepsilon) = -iA(p+q, \varepsilon)$$

SF

BS K

$$I = -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi}\, n_F(\varepsilon)\, A(p+q, \varepsilon)\, \frac{2\omega_q}{(ip_n - \varepsilon)^2 - \omega_q^2}$$

$\int$ kontur içindeki pollerin rezidülerinin toplamına eşittir. Bunlar, $z = \pm\omega_q$ de fonon polleri, $z = i2n\pi/\beta$ da termal poller vardır. Pollerden hiçbiri BC üzerinde yer almaz. Çünkü BC $z = -ip_n + \varepsilon$ da olur. Öyleki kompleks değerleri $\pi i/\beta$'nın tek katlarıdır, oysa termal poller $\pi i/\beta$'nın çift katlarıdır.

BC'nin termal $i\omega_n$ pollerinden birine düştüğünü varsayalım. Bu $G(p+q, ip+i\omega)$ bir bozon parçacık tarif ediyor ise (Fonon) ortaya çıkar. O zaman $ip_n$ de bir bozon frekansıdır.

$$J = -S + \frac{N_q}{ip_n + \omega_q - \xi_{\underline{p}+\underline{q}} - \Sigma_i(\underline{p}+\underline{q}, ip_n+\omega_q)}$$

$$+ \frac{N_q+1}{ip_n - \omega_q - \xi_{\underline{p}+\underline{q}} - \Sigma_i(\underline{p}+\underline{q}, ip_n-\omega_q)}$$

$J$ için bulunan ilk sonuç esitlersek

$$S = N_q\, \mathcal{G}(\underline{p}+\underline{q}, ip_n+\omega_q) + (N_q+1)\, \mathcal{G}(\underline{p}+\underline{q}, ip_n-\omega_q)$$

$$- \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi}\, n_F(\varepsilon)\, A(\underline{p}+\underline{q}, \varepsilon)\, \mathcal{D}^{(0)}(\underline{q}, \varepsilon - ip_n)$$

Bundan sonraki kalan adım $\Sigma_i$'nin biçimini bilmektir, $\Sigma_i \to 0$ limitinde spektral fonk.'u

$$\lim_{\Sigma_i \to 0} A(\underline{p}+\underline{q}, \varepsilon) = A^{(0)}(\underline{p}+\underline{q}, \varepsilon) = 2\pi\, \delta(\varepsilon - \xi_{\underline{p}+\underline{q}})$$

0-sıcaklıkta, toplam sürekli bir integral ile değiştirilir.

$$\lim_{T\to 0} S = \lim_{T \to 0} \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} f(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(i\omega)$$

Şimdi bu da kontur int. ile hesaplanabilir.

BS K

Matsubara frekansları üzerinden bir toplam hesap edildiği vakit en genel olasılık tamamen giydirilmiş tüm GF ların alınmaktır. Bundan sonra, tüm GF ları Lehmann temsilinde ifade edecek işleme tabi tutmak kolaydır. Örneğin,

$$S = -\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} D(\underline{q}, i\omega_n)\, \mathcal{G}(\underline{p}+\underline{q}, ip+i\omega_n)$$

yi hesaplamak istiyorsak, o zaman her bir GF'nin kendi karşılık gelen spektral fonk.u üzerinden bir frekans integrali olarak ifade ederiz:

$$D(\underline{q}, i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{B(\underline{q}, \omega')}{i\omega_n - \omega'}$$

$$\mathcal{G}(p+q, ip+i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{A(\underline{p}+\underline{q}, \varepsilon')}{ip+i\omega_n - \varepsilon'}$$

$$\Rightarrow \quad S = \int \frac{d\omega'}{2\pi} B(\underline{q}, \omega') \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} A(p+q, \varepsilon')\, S_0(\omega', \varepsilon')$$

$$S_0 = -\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{i\omega_n - \omega'} \frac{1}{ip+i\omega_n - \varepsilon'} = \frac{n_B(\omega') + n_F(\varepsilon')}{ip+\omega'-\varepsilon'}$$

etkileşmeyen GF üzerinden toplam.

serbest parçacık GF'una dönersek, $A \to A^0$, $B \to B^0$ yazarız:

$$A^0(p+q, \varepsilon') = 2\pi\, \delta(\varepsilon' - \xi_{p+q})$$

$$B^0(q, \omega') = 2\pi \left[ \delta(\omega' - \omega_q) - \delta(\omega' + \omega_q) \right]$$

$$\Rightarrow S = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \left[ \delta(\omega' - \omega_q) - \delta(\omega' + \omega_q) \right] \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon' \delta(\varepsilon' - \xi_{p+q}) \frac{n_B(\omega') + n_F(\varepsilon')}{ip + \omega' - \varepsilon'}}_{\frac{n_B(\omega') + n_F(\xi_{p+q})}{ip + \omega' - \xi_{p+q}}}$$

$$= \frac{\overset{N_q}{n_B(\omega_q)} + n_F(\xi_{p+q})}{ip + \omega_q - \xi_{p+q}} - \frac{\underset{-(1+N_q)}{n_B(-\omega_q)} + n_F(\xi_{p+q})}{ip - \omega_q - \xi_{p+q}}$$

$= 3.216.$

Bu toplam EFE'den kaynaklanır ve elektron self-enerjisine bir fonon katkısıdır. Diyagram kurallarında elektronun tek fonon self enerjisi:

$$\Sigma^1(p, ip_n) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_q M_q^2 \left\{ \frac{N_q + n_F(\xi_{p+q})}{ip_n + \omega_q - \xi_{p+q}} + \frac{(N_q + 1) - n_F(\xi_{p+q})}{ip_n - \omega_q - \xi_{p+q}} \right\}$$

2. derece pert. teorisinden elde edilen ile aynıdır:

$$\Delta E^{(2)} = \sum_I \frac{|\langle I | H_{ep} | i \rangle|^2}{E_i - E_I}$$

BS K

$$M_q \, c^{\dagger}_{p+q} \, c_p \, a^{\dagger}_{-q}$$

is the probability that $p+q$ is empty

$$\frac{1}{V} \sum_q M_q^2 \, \frac{(N_q+1)\left[1 - n_F(\xi_{p+q})\right]}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \omega_q}$$

$$M_q \, C^{\dagger}_{p+q} \, C_p \, a_q \rightarrow \frac{1}{V} \sum_q M_q^2 \, \frac{N_q\left[1 - n_F(\xi_{p+q})\right]}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} + \omega_q}$$

$$a^{\dagger}_{-q} | n_{-q} \rangle = \sqrt{n_{-q}+1} \; | n_{-q}+1 \rangle$$

$$a_q | n_q \rangle = \sqrt{n_q} \; | n_q - 1 \rangle$$

Diğer iki prosesi yap ve bu yukarıdaki 2 terimden çıkar

$\Sigma^{(1)}$'i bul. $\Delta E^{(1)}$

ancak şu değişikliklerle.

## 3.6. Bağlantılı küme açılımları :

### A. Termodinamik potansiyel

$$e^{-\beta\Omega} = Tr\left(e^{-\beta K}\right) = Tr\left(e^{-\beta K_0} S(\beta)\right)$$

$$S(\beta) = e^{\beta K_0} e^{-\beta K}$$

ile verilir. $\Omega$ bulunursa

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

$$\frac{\partial(\beta\Omega)}{\partial\beta} = \langle H-\mu N\rangle = U-\mu\bar{N} = \Omega + TS = \Omega + \beta\frac{S}{\beta^2}$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial m} = \frac{1}{m}\left\langle \sum_i \frac{p_i^2}{2m}\right\rangle = \frac{1}{m}\sum_p n_p \frac{p^2}{2m}$$

nicelikleri hesaplanabilir. $n_p$ : p-mom.lu elektronların sayısını verir. $V=0$ etk. yoksa. :

$$H = H_0 + V$$

$$K = K_0 + V = (H_0 - \mu N) + V$$

$$e^{-\beta\Omega_0} = Tr\, e^{-\beta K_0}$$

BS K

Elektron ve fononların bir sistemi için

$$K_0 = \sum_{p\sigma} \xi_p \, c^\dagger_{p\sigma} c_{p\sigma} + \sum_q \omega_q \left(a_q^\dagger a_q + \frac{1}{2}\right)$$

$$e^{-\beta\Omega_0} = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta K_0} = \sum_{n_1^F \ldots n_j^F} \;\sum_{n_1^B \ldots n_i^B}$$

$$\times \left\langle n_1^F n_1^B \ldots n_j^F n_i^B \right| e^{-\beta K_0} \left| n_1^F n_1^B \ldots n_j^F n_i^B \right\rangle$$

$$= \sum_{n_1^F} \left\langle n_1^F \right| e^{-\beta \sum_\sigma \left(\xi_1 c^\dagger_{1\sigma} c_{1\sigma} \cancel{+\mu c^\dagger_{1\sigma} c_{1\sigma}}\right)} \left| n_1^F \right\rangle \ldots$$

$$\sum_{n_j^F} \left\langle n_j^F \right| e^{-\beta \sum_j \left(\xi_j c^\dagger_{j\sigma} c_{j\sigma} - \mu c^\dagger_{j\sigma} c_{j\sigma}\right)} \left| n_j^F \right\rangle$$

$$\times \sum_{n_1^B} \left\langle n_1^B \right| e^{-\beta\left(\omega_1 a_1^\dagger a_1 + \frac{1}{2}\omega_1\right)} \left| n_1^B \right\rangle \ldots$$

$$= \prod_p \sum_{n_{p\sigma}=0}^{1} \left( e^{-\beta(\xi_p - \mu) n_{p\sigma}} \right)^{2} \prod_q \sum_{n_q^B} e^{-\beta\omega_q \left(n_q^B + \frac{1}{2}\right)}$$

spin

$$= \prod_p \left(1 + e^{-\beta(\xi_p - \mu)}\right) \prod_q \frac{e^{-\beta\omega_q/2}}{1 - e^{-\beta\omega_q}}$$

$$\left(1 + e^{(\xi_p)}\right)^2 ?$$

$$\frac{1}{1-x} = \sum_n x^n$$

BS K

Her iki tarafın log. alınır ise

$$\beta\Omega_0 = -2\sum_p \ln\left(1+e^{-\beta(T_p-\mu)}\right)$$

$$+\sum_q\left[\ln\left(1-e^{-\beta\omega_q}\right)+\frac{1}{2}\beta\omega_q\right]$$

toplamları integrale döndürür isek,

$$\Omega_0 = -\frac{2V}{\beta}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\ln\left(1+e^{-\beta(T_p-\mu)}\right)$$

$$+V\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left[\frac{1}{2}\omega_q+\frac{1}{\beta}\ln\left(1-e^{-\beta\omega_q}\right)\right]$$

Sist. in toplam hacim ile orantılıdır. Şimdiki amacımız $\Omega$'yı $S(\beta)$ ya da ilerecek şekilde hesaplamaktır. $V$ etkileşmesi $\Omega_0$'a bazı düzeltme terimleri ilave edecektir. İşe $S$-matrisinin açılımını kullanarak başlarız:

$$e^{-\beta\Omega} = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\Omega_0}S(\beta)\right)$$

$$= e^{-\beta\Omega_0}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta d\tau_1\ldots\int_0^\beta d\tau_n\,\langle T_\tau\,\hat{V}(\tau_1)\ldots\hat{V}(\tau_n)\rangle$$

BS K

## Principal value

$$\int_{-a}^{b} \frac{dx}{x} = \ln x \Big|_{-a}^{b} = \ln \frac{b}{-a} \quad ! \quad b, a > 0$$

$$\longrightarrow -\infty$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \left[ \int_{-a}^{-\epsilon} \frac{dx}{x} + \int_{\epsilon}^{b} \frac{dx}{x} \right]$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \left[ \ln \frac{\epsilon}{a} + \ln \frac{b}{\epsilon} \right] = \ln \frac{b}{a}$$

$$P \int_{-a}^{b} \frac{dx}{x} = \ln \frac{b}{a}$$

**Example:**

$$\ln|x|' = ?$$

$$\langle \ln|x|', \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \ln|x|' \, \varphi(x) \, dx$$

$$\langle f', \varphi \rangle = - \langle f, \varphi' \rangle \stackrel{?}{=} \int \underbrace{f'}_{dv} \underbrace{\varphi}_{u} \, dx$$

$$= \cancel{f\varphi}^{\,0} - \int f \varphi' \, dx = - \langle f, \varphi \rangle$$

BS K

Örnek :

$$\frac{d}{dx}\lim_{y\to 0}(x+iy) = \frac{d}{dx}(x+i0)$$

$$\ln z = |z| + i\arg z$$

$$\lim_{y\to 0}\ln(x+iy) = \begin{cases}\ln|x| & x>0\\ \ln|x|+i\pi & x<0\end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\lim_{y\to 0}\ln(x+iy) = \ln|x| + i\pi\,(1-\Theta)$$

$$\frac{d}{dx}\lim_{y\to 0}\ln(x+iy) = \frac{d}{dx}\ln(x+i0)$$

$$= \frac{1}{x+i0} = (\ln|x|)' - i\pi\delta$$

$$\frac{1}{x\mp i0} = P\left(\frac{1}{x}\right) \pm i\pi\delta$$

BS K

RHS'i hesaplarken tüm bağlantılı, bağlantısız diyagramları ele almalıyız. Çünkü burada bağlantısızları götürecek bir çeviri yok! Temel olarak, S-matrisinde ortaya çıkacak terimleri incelemeyi, ve bunların tekrar toplanmasının uygun bir yolunu bulmayı umuyoruz. → bağlantılı küme açılımı.

$$e^{-\beta\Omega} = e^{-\beta\Omega_0}\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n W_n$$

$$W_n = \frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau \hat{V}(\tau_1)\cdots\hat{V}(\tau_n)\rangle$$

($\lambda = 1$ alınacak!)

temel bağlantılı küme teoremi

$$e^{-\beta\Omega} = e^{-\beta\Omega_0} + \sum_{l=1}^{\infty}\lambda^l U_l$$ farklı bağlantılı diyagramlar

$$U_l = \frac{(-1)^l}{l}\int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_l \langle T_\tau \hat{V}(\tau_1)\cdots\hat{V}(\tau_l)\rangle$$ farklı bağ.

$$\Rightarrow \Omega = \Omega_0 - \frac{1}{\beta}\sum_{l=1}^{\infty} U_l \qquad (\lambda = 1)$$

temel teorem farklı bağlantılı diyagramların toplamının $\Omega$ olduğunu söyler. Aşağıda ispatlanacak

BS K

İspattan evvel FFI'ni örnek olarak verelim.

$$V = \sum_{\underline{q}\underline{k}} \frac{M_q}{\sqrt{v}} A_{\underline{q}} C^{+}_{\underline{k}} C_{\underline{k}+\underline{q}} \qquad A_{\underline{q}} = a_q + a^{+}_{-q}$$

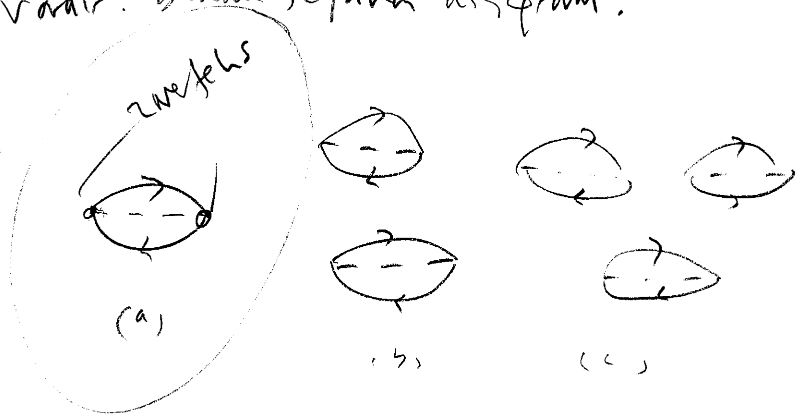
$$A_{\underline{q}}^{n} = \begin{cases} 0 & n \text{ tek} \\ \neq 0 & n \text{ çift} \end{cases}$$

0'dan farklı ilk terim $n=0$

◯ 'dan sonra serideki ilk terim

$$W_2 = U_2 = \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\beta} d\tau_2 \langle T_\tau \hat{V}(\tau_1) \hat{V}(\tau_2) \rangle$$

burada iki electron çizgisi ve bir foton çizgisi ile bağlanan verteksler vardır. bunun Feynman diyagramı:




$n=4$'lü terim

$$W_4 = \frac{1}{4!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_4 \langle T_\tau \hat{V}(\tau_1) \hat{V}(\tau_2) \hat{V}(\tau_3) \hat{V}(\tau_4) \rangle$$

4 elektron + 2 fonon çizgisi bunların sayıları:


(b)deki gibi terimlerde vardır.

$W_4$ de bağlantısız balon çiftlerine sahip 3 ayrı öndeş terim vardır. (Eğer $\tau_1$ balonun bir vertekni olarak seçilirse, ayrı balonun diğer $\tau$ değişkeni $\tau_2, \tau_3$ veya $\tau_4$ olabilir. bu tüm 3 seçim vardır)

$$\frac{3}{4!}\int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \langle T_\tau \hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_2)\rangle$$

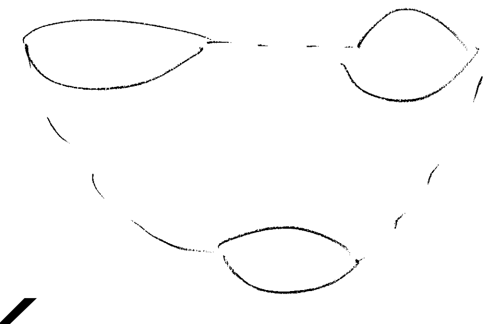
$$\times\int_0^\beta d\tau_3 \int_0^\beta d\tau_4 \langle T_\tau \hat{V}(\tau_3)\hat{V}(\tau_4)\rangle$$

$$= \frac{1}{2}(U_2)^2$$

benzer şekilde, (d) deki herbir bağlantılı diyagram 6 kez belirir (6 - sessiz değişkeni farklı yollarda kaydırmaya karşılık gelir)

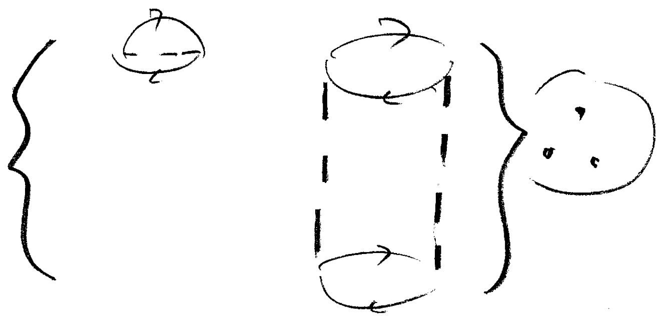
$$\therefore \quad W_4 = \frac{1}{2}(U_2)^2 + U_4$$

$n=6 \rightarrow$ 6 elektron çizgisi + 3 fonon içeren birçok bağlantılı diyagram olacaktır



(c) deki gibi 3 balonu ihtiva eden bağlantısız diyagramlarda olacaktır. 15'i birbirine eşit. (d) deki gibi bu 4 çizgi terimini içeren diyagramlar da olacaktır :

BS K

$U_2 U_4$ 

$$W_6 = \frac{1}{3!}(U_2)^3 + U_2 U_4 + U_6$$

Tüm bu terimleri dikkate alırsak,

$$1 + U_2 + \frac{1}{2!}(U_2)^2 + \frac{1}{3!}(U_2)^3 + \dots = e^{U_2}$$

n çift olduğunda $(= 2m$ olsun$)$ m adet bağ vardır. Bu m bağın elde etmenin kaç farklı yolu vardır bunu tanımlayalım.

$$U_2 = \frac{1}{2} \sum_{qp} M_q^2 \int^{\beta} d\tau_1 \int^{\beta} d\tau_j \, G^{(0)}(p, \tau_1 - \tau_j)$$

$$+ \, G^{(0)}(p+q, \tau_j - \tau_1) \, D^{0}(q, \tau_1 - \tau_j)$$

2m−1 değişkenden herhangi birini. $\tau_1$ ve $\tau_j$ çiftlendikten sonra kalan 2m−2'den birini alalım: $\tau_s$. Bunu kalan 2m−3 ile çiftleyebiliriz. Böylece farklı düzenlemelerin sayısı:

$$(2m-1)(2m-3)\dots 5.3.1 = \frac{2m!}{m!\,2^m}$$

BS K

Böylece çiftlenmiş alanlar için

$$W_m = \frac{\cancel{2m!}}{m!\, 2^m}\,\frac{1}{\cancel{m!}}\left[\int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_j \langle T_\tau \hat V(\tau_1)\hat V(\tau_j)\rangle\right]^m$$

$$= \frac{1}{m!}\, U_2^m$$

Bu $e^{U_2}$ için istenilen sonuçtur. Şimdi de diğer özdeşliği ispat edelim.

$$U_\ell = \frac{(-1)^\ell}{\ell!}\int_0^\beta d\tau_1 \int \cdots \int_0^\beta d\tau_\ell \langle T_\tau \hat V(\tau_1)\cdots \hat V(\tau_\ell)\rangle_{\text{bağlan.}}$$

$$= \frac{1}{\ell}\int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_\ell \langle T_\tau \hat V(\tau_1)\cdots \hat V(\tau_\ell)\rangle_{\text{Farklı bğ.}}$$

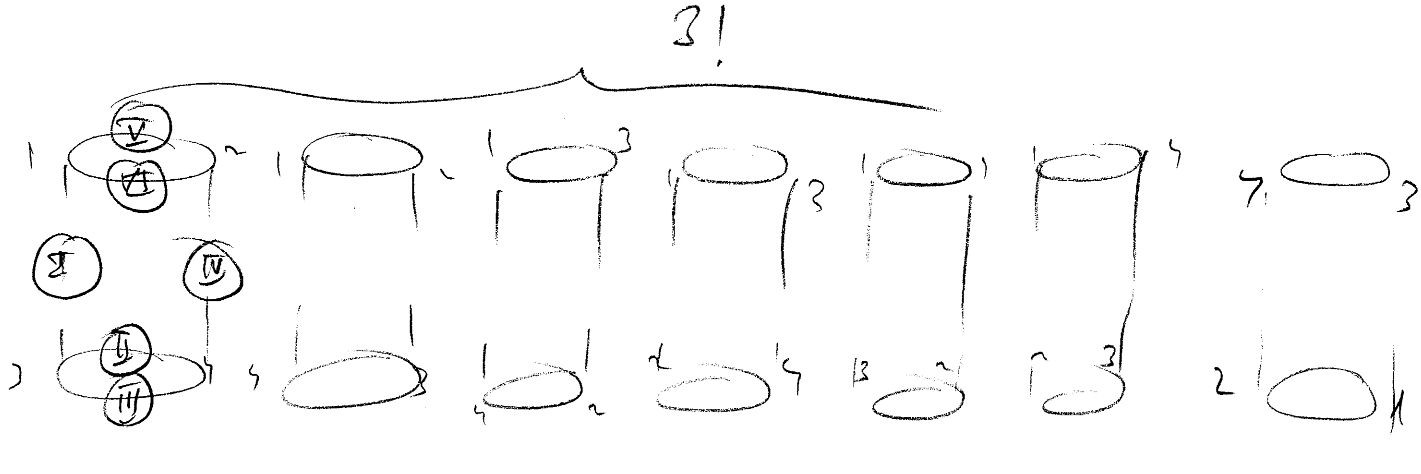
(FB)

Her bir $\ell$ terimi için $(\ell-1)!$ benzer terim gelmektedir; Şöyleki FB diyagramların sayısını bölecek çarpanı

$$\frac{(\ell-1)!}{\ell!} = \frac{1}{\ell}$$

bunu daha evvel bulmuştuk! bağlantılı alanlar ile kuplar için,

$l=4$ için örnek



(a) (b)

Her iki diyagramda GF cinsinden yazıldığında ifade;

$$\frac{1}{4V^2}\sum_q\sum_{p_1p_2} M_q^4 \int_0^\beta d\tau_1\int_0^\beta d\tau_2\int_0^\beta d\tau_3\int_0^\beta d\tau_4$$

$$\underbrace{D^{(0)}(q,\tau_1-\tau_3)}_{I}\,\underbrace{D^{(0)}(q,\tau_2-\tau_4)}_{IV}\,G^{(0)}\underbrace{(p_1,\tau_1-\tau_2)}_{V}$$

$$G^{(0)}\underbrace{(p_1+q,\tau_2-\tau_1)}_{VI}\,G^{(0)}\underbrace{(p_2,\tau_3-\tau_2)}_{II}\,G^{(0)}\underbrace{(p_2+q,\tau_4-\tau_3)}_{III}$$

Sonra genelleme için; $U_{m_1},\dots U_{m_j}$ mümkün bağlantılı diyagramları gösterirsek ($m_j$ katılımın derecesi, ya da $\lambda$'nın derecesi $m_1\neq\dots\neq m_j$) n dereceli genel S'in terimi açarsak, Her $U_{m_j}$ her bir terimde birden fazla gelebilir. $p_j$, $U_{m_j}$'nin kaç defa geldiğini gösterir.

$$\sum_j p_j m_j = n$$

($m_j$ $p_j$) kümelerin farklı düzenlemelerinin sayısı;

$$\frac{n!}{\prod_j \left[(m_j!)^{p_j} p_j!\right]}$$

Böylelikle genel terim

$$W_n = \sum_{\substack{m_1\ldots \\ p_1\ldots}} (-1)^n \frac{1}{(m_1!)^{p_1}\ldots\, p_1!\ldots}$$

$$\times \left[ \int_0^\beta d\tau_1' \ldots \int_0^\beta d\tau_{m_1}' \langle T_\tau \hat{V}(\tau_1') \ldots V(\tau_{m_1}') \right]^{p_1}$$

$\ldots$

buna uyan her bir $n$ için tüm mümkün farklı kombinasyonlar üzerinden toplam:

$$W_n = \sum_{\substack{m_1 m_2 \cdots \\ p_1 p_2 \cdots}} (-1)^n \frac{1}{p_1!} \left[ \frac{1}{m_1!} \int_0^\beta d\tau_1^{(1)} \cdots \int_0^\beta d\tau_{m_1} \right.$$

$$\left. \langle T_\tau \hat{V}(\tau_1^{(1)}) \cdots \hat{V}(\hat{\tau}_{m_1}^{(1)}) \right]^{p_1} \cdots$$

$$= \sum_{\substack{m_1 m_2 \cdots \\ p_1 p_2 \cdots}} (-1)^n \frac{1}{p_1!} [U_{m_1}]^{p_1} \frac{1}{p_2!} [U_{m_2}]^{p_2} \cdots$$

$$= \sum_{m_j} \sum_{p_j} (-1)^n \left( \prod_j \frac{U_{m_j}^{p_j}}{p_j!} \right)$$

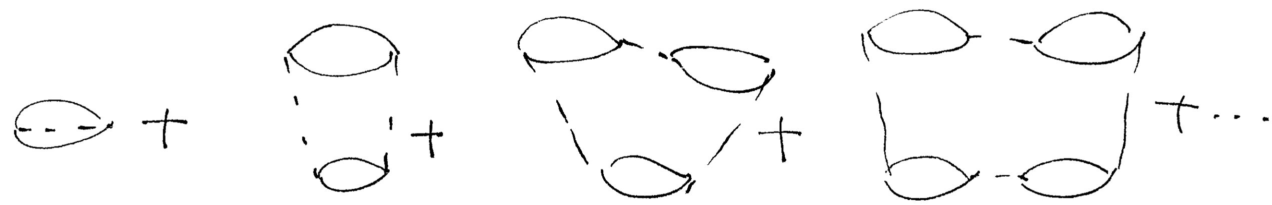
$$\Rightarrow \sum_n \lambda^n W_n = \prod_{m_j} \left( \sum_{p_j=0}^{\infty} \lambda^{m_j p_j} \frac{U_{m_j}^{p_j}}{p_j!} \right)$$

$$= e^{\sum_{m_j} \lambda^{m_j} U_{m_j}}$$

✓

BS K

Aşağıdaki şekilde verilen özel örnek için (EFE) termo-dinamik pot.-i hesaplayalım.



Basit bir cevap bulmak için bunlar toplanabilirler, ancak, balonların iç fonon çizgilerine de sahip olabileceği ek terimler de olabileceğinden tam cevap değildir. 1. balonlu

$$U_2 = \frac{1}{2}\int d\tau_1 \int d\tau_j \, \langle T_\tau \hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_j)\rangle_0$$

$$V = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{qp} M_q A_q C^\dagger_{p+q} C_p$$

$$U_2 = \frac{1}{2V}\int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_j \sum_{qp}\sum_{q'p'} M_q M_{q'} \langle T_\tau \hat{A}_q(\tau_1)\hat{A}_{q'}(\tau_j)\rangle$$

$$\times \langle T_\tau \hat{C}^\dagger_{p+q}(\tau_1)\hat{C}_p(\tau_1)\hat{C}^\dagger_{p'+q'}(\tau_j)\hat{C}_{p'}(\tau_j)\rangle$$

$$\langle T_\tau A_q(\tau_1) A_{q'}(\tau_j)\rangle_0 = -\delta_{q+q'=0}\, D^0(q,\tau_1-\tau_j)$$

$$\langle T_\tau \hat{C}_p(\tau_1) C^\dagger_{p'+q'}(\tau_j)\rangle_0 = -\delta_{p=p'+q'}\, \mathcal{G}^0(p,\tau_1-\tau_j)$$

Wick teoremi

$$\langle T_\tau \hat{c}^\dagger_{p+q}(\tau_1)\, \hat{c}_p(\tau_1)\, \hat{c}^\dagger_{p'+q'}(\tau_j)\, \hat{c}_{p'}(\tau_j) \rangle =$$

$$- \langle T_\tau \hat{c}_p(\tau_1)\, \hat{c}^\dagger_{p'+q'}(\tau_j) \rangle \langle T_\tau \hat{c}_{p'}(\tau_j)\, \hat{c}_{p+q}(\tau_1) \rangle$$

$$= - \delta_{p=p'+q'}\, \mathcal{G}^{(0)}(p, \tau_1 - \tau_j)\, \delta_{p'=p+q}\, \mathcal{G}^{(0)}(p+q, \tau_j - \tau_1)$$

$$U_2 = \frac{1}{2} \sum_{qp} \frac{M_q^2}{(\sqrt{V})^2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_j\, D^0(q, \tau_1 - \tau_j)$$

$$\mathcal{G}^{(0)}(p, \tau_1 - \tau_j)\, \mathcal{G}^{(0)}(p+q, \tau_j - \tau_1)$$

$$D^{(0)}(q, \tau_1 - \tau_j) = \frac{1}{\beta} \sum_{iq_n} e^{-iq_n(\tau_1 - \tau_j)} D^{(0)}(q, iq_n)$$

$$\mathcal{G}^{(0)}(p, \tau_1 - \tau_j) = \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} e^{-ip_n(\tau_1 - \tau_j)} \mathcal{G}^{(0)}(p, ip_n)$$

$$\mathcal{G}^{(0)}(p+q, \tau_j - \tau_1) = \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n'} e^{-ip_n'(\tau_j - \tau_1)} \mathcal{G}^{(0)}(p+q, ip_n')$$

$$U_2 = \frac{1}{2} \sum_{qp} \frac{M_q^2}{V} \frac{1}{\beta^3} \sum_{iq_n\, ip_n\, ip_n'} D^{(0)}(q, iq_n)\, \mathcal{G}^{(0)}(p, ip_n)\, \mathcal{G}^{(0)}(p+q, ip_n')$$

$$\times \int_0^\beta d\tau_1\, e^{i(-q_n - p_n + p_n')\tau_1} \underbrace{\int_0^\beta d\tau_j\, e^{i(q_n + p_n - p_n')\tau_j}}_{\delta_{p_n = p_n' - q_n}}$$

BS K

$$U_2 = \frac{1}{2\beta V} \sum_{\underline{q}\,\underline{p}} M_q^2 \sum_{ip_n} \sum_{iq_n} D^{(0)}(q, iq_n)\, G^{(0)}(p, ip_n)\, G^{(0)}(\underline{p+q}, i(p_n+q_n))$$

bunu şimdi de gösterdiğe olarak 2 ile çarpın.

$$U_2 = \frac{\lambda^2}{2} \sum_{q, iq_n} M_q^2 D^{(0)}(q, iq_n)\, P^1(q, iq_n)$$

$$= \frac{2}{\beta V} \sum_{p, ip_n} G^{(0)}(p, ip_n)\, G^{(0)}(\underline{p+q}, ip_n + iq_n)$$

Şimdi benzer şekilde şekildeki 2. diyagram alırsak:

$$U_4 = \frac{1}{4V^2} \sum_q \sum_{p_1 p_2} M_q^4 \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \int_0^\beta d\tau_3 \int_0^\beta d\tau_4\, D^{(0)}(q, \tau_1 - \tau_3)$$

$$D^{(0)}(q, \tau_2 - \tau_4)\, G^{(0)}(p_1, \tau_1 - \tau_2)\, G^{(0)}(\underline{p_1+q}, \tau_2 - \tau_1)$$

$$G^{(0)}(p_2, \tau_3 - \tau_4)\, G^{(0)}(p_2+q, \tau_4 - \tau_3)$$

FT. nın yine işlemleri tekrarla.

$$U_4 = \frac{\lambda^{\cancel{4}}}{\cancel{4}} \sum_{q, i\hbar} \left[ M_q^2 D^{(0)}(\underline{q}, iq_n)\, P^1(q, iq_n) \right]^{2}$$

$$U_{2n} = \frac{\lambda^{2n}}{2n} \sum_{q, iq_n} \left[ \qquad\qquad \right]^{n}$$

BS K

$$\Omega - \Omega_0 = -\frac{1}{\beta}\sum_{n=1}^{\infty} U_{2n} = \frac{1}{2\beta}\sum_{q}\sum_{iq_n} \ln\left[1-\lambda^2 \Gamma_q^2 D^0(q,iq_n)\, P^1(q,iq_n)\right]$$

T.D.'e dönüşme. $\propto V$

$$\sum_q \sum_0 \to \frac{V}{(2\pi)^3}\int$$

Fonk.la top.ının argümanının içindeki değişen zaman $iq_n$ toplamı uygun değildi. bunu ortadan kaldırmak için $\eta = \lambda^2$ der isek

$$-\ln\left(1-\lambda^2 D^0 P^{(1)} \Gamma_q^2\right)$$

$$= \int_0^{\lambda^2} d\eta \, \frac{\Gamma_q^2 D^0 P^{(1)}}{1-\eta D^0 P^{(1)} \Gamma_q^2}$$

$\lambda = 1$ koyarsak

$$\Omega - \Omega_0 = -\frac{V}{2\beta}\sum_{iq_n}\int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}\int_0^1 d\eta \, \frac{\Gamma_q^2 D^0 P^{(1)}}{1-D^0 \eta \Gamma_q^2 P^{(1)}}$$

Fonon self enerjisini

$$\Pi^{(1)}(\eta, q, iq_n) = \eta M_q^2 P^{(1)}(q, iq_n)$$

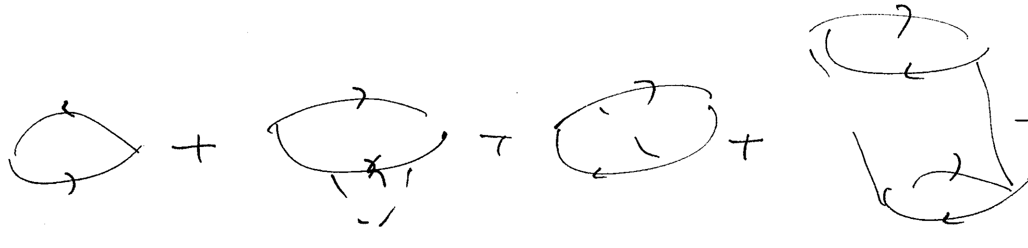
olarak tanımlayalım η kuplaj sbt.i olarak ekilendi. (1) üst indisi yaklaşık self-enerji olduğunu, tek bir elektron balonu içerdiğini gösterir. Fonon GF u

$$\underbrace{D^{(1)}(\eta, q, iq_n)}_{\text{yaklaşık}} = \frac{D^{(0)}}{1 - D^{(0)}\,\Pi^{(1)}}$$

$$\Omega - \Omega_0 = -\frac{V}{2\beta}\sum_{iq_n}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\int_0^1\frac{d\eta}{\eta}\,\Pi(\eta, q, iq_n)\,D(\eta, q, iq_n)$$

(bu teoremin ispatı Abrikosov 1963)

buradaki Π tam fonon self enerjisi

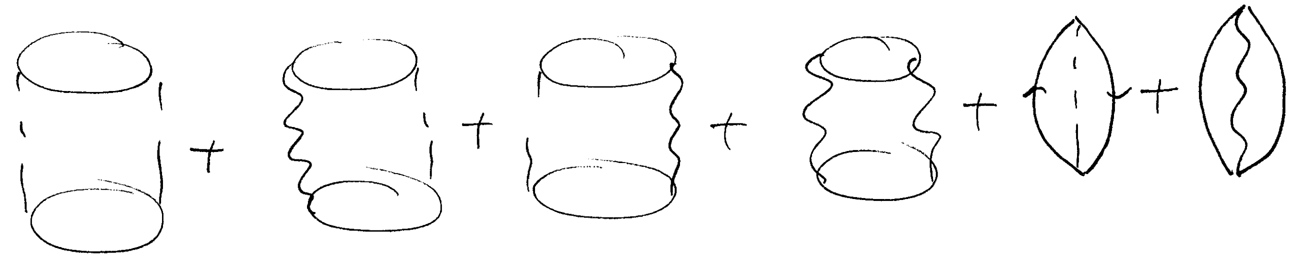
$\Pi =$  $+ \dots$

($\infty$ sayıda self-enerji diyagramı)

Termodinamik potansiyele Coulomb etkileşimi etkilerini de gözönüne almalıyız.

 ve $\Omega - \Omega_0$ için olan teoremler tüm etkileşmeler için geçerlidir.

Fonon ve Coulomb etkileşmelerini şimdi bir yolla birleştirmek mümkün. Elektronları kendileri ile yada hem kendileri ve hem de fononlar aracılığı ile etkileşiyor olduğunu düşünerek her bir tek-baloncuk diyagram için hem yazılabilir: O zaman iki elektron vertexi bir tek Coulomb çizgisi yada bir tek fonon çizgisi ile bağlanabilir.



Böylelikle, bu katkıların toplamı,

$$U_2 = \frac{\xi}{2} \sum_{q\, iq_n} P^{(1)}(q, iq_n) \left[ V_q + M_q^2 D^{(0)}(q, iq_n) \right]$$

$$V_q = \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

Örnek olarak 2 baloncuklu 4-diyagram vardır.

$$U_4 = \frac{\xi^2}{4} \sum_{q\, iq_n} \left\{ P^{(1)}(q, iq_n) \left[ V_q + M_q^2 D^{(0)}(q, iq_n) \right] \right\}^2$$

$$W^{(0)}(q, iq_n) = V_q + M_q^2 D^{(0)}(q, iq_n)$$

bu $$W(q, iq_n) = \frac{W^{(0)}}{1 - W^{(0)} P}$$ Dyson denklemini veriyor.

buradaki $\Pi$ – top. self enerji diyagramı, evvelkinin Coulomb etkilerini de içerecek şekilde genellemesidir.

$$\Omega - \Omega_0 = \frac{-V}{2\beta} \sum_{iq_n} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \int_0^1 \frac{d\eta}{\eta} \Pi(\eta, iq_n, q)$$

$$\times W(\eta, q, iq_n) - \frac{V}{2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \nu_q$$

Termodinamik pot. ın hesabını bant ve $\Im$ nezaketi verelim. Sadece fonon self enerjisinin etkisinin $\omega_q^2$ yerine alınmış frekansların renormalize edilmiş yeni $\Omega_q^2$ kümesine değiştirmekte olduğunu varsayalım.

GF .

$$D = \frac{2\omega_q}{(i\omega_n)^2 - \omega_q^2 - 2\omega_q \Pi(q, i\omega_n)}$$

olduğundan $D(q, i\omega_n) = \dfrac{2\omega_q}{(i\omega_n)^2 - \Omega_q^2}$

olduğunu varsayarız. $\eta$ bağımlı GF nunun seçimini

$$2\omega_q \Pi(\eta, q, i\omega_n) = \eta(\Omega_q^2 - \omega_q^2)$$

ya da $D(\eta, q, i\omega_n) = \dfrac{2\omega_q}{(iq_n)^2 - \omega_q^2 - \eta(\Omega_q^2 - \omega_q^2)}$ olarak yaparız.

BS K

Bu durumda hesaplanacak ifade,

$$\Omega - \Omega_0 = \frac{-1}{2}\frac{1}{\beta}\sum_{q,iq_n}\int_0^1 d\eta \frac{\Omega_q^2-\omega_q^2}{(iq_n)^2-\omega_q^2-\eta(\Omega_q^2-\omega_q^2)}$$

$\Omega_\eta^2 = \omega_q^2+\eta(\Omega_q^2-\omega_q^2) > 0$ niceliğini tanımlayalım.

$$\frac{1}{\beta}\sum_{iq_n}\frac{1}{(iq_n)^2-\Omega_\eta^2} = \frac{1}{2\Omega_\eta}\frac{1}{\beta}\sum_{iq_n}\frac{2\Omega_\eta}{(iq_n)^2-\Omega_\eta^2}$$

$$D(q,\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{iq_n} e^{-iq_n\tau} D(q,iq_n) \quad \text{ile} \quad D(q,iq_n) = \frac{2\Omega_q}{(iq_n)^2-\Omega_q^2}$$

$$\tau=0 \Rightarrow D(q,\tau=0) = \frac{1}{\beta}\sum_{iq_n} D(q,iq_n) = -\langle A(-q,0)A(q,0)\rangle$$
$$= -(2N_B+1)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\beta}\sum_{iq_n}\frac{1}{(iq_n)^2-\Omega_\eta^2} = \frac{1}{2\Omega_\eta}\bar{D}(\Omega_\eta,\tau=0)$$

$$\Omega - \Omega_0 = \frac{1}{2}\sum_q\int_0^1 d\eta\frac{\Omega_q^2-\omega_q^2}{2\Omega_\eta}(2n_B(\Omega_\eta)+1)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_q(\Omega_q^2-\omega_q^2)\int_0^1\frac{d\eta}{\Omega_\eta}\left(1+\frac{2}{e^{\beta\Omega_\eta}-1}\right)$$

$$\Omega_q^2 = \omega_q^2 + \eta\,(\Omega_q^2 - \omega_q^2) = x^2 \quad \begin{cases} \eta = 0 \Rightarrow x = \omega_q \\ \eta = 1 \Rightarrow x = \Omega_q \end{cases}$$

$$2x\,dx = (\Omega_q^2 - \omega_q^2)\,d\eta$$

$$\Omega - \Omega_0 = \frac{1}{2}\sum_q (\Omega_q^2 - \omega_q^2) \int_{\omega_q}^{\Omega_q} \frac{2x\,dx}{(\Omega_q^2 - \omega_q^2)\,2x} \left(1 + \frac{2}{e^{\beta x} - 1}\right)$$

$x = \Omega_q \Rightarrow \quad t = e^{\beta \Omega_q}$

$x = \omega_q \Rightarrow \quad t = e^{\beta \omega_q} \leftarrow \beta x = \ln t$

$$\beta\,dx = \frac{dt}{t} \qquad e^{\ln t} = t \quad \text{[illegible]}$$

$$\Omega - \Omega_0 = \frac{1}{2}\sum_q \frac{1}{\beta} \int_{e^{\beta\omega_q}}^{e^{\beta\Omega_q}} \frac{dt}{t}\left(1 + \frac{2}{t-1}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_q \left\{ \frac{1}{\beta}\int \frac{dt}{t} + \frac{2}{\beta}\int \frac{dt}{t(t-1)} \right\}$$

$$\frac{A}{t} + \frac{B}{t-1} = \frac{1}{t(t-1)} \qquad A(t-1) + Bt = 1 \qquad (A+B)t - A = 1$$

$$A + B = 0 \qquad A = -B$$

$$A = -1 \qquad B = 1$$

BS K

$$\Omega - \Omega_0 = \frac{1}{2}\sum_q \left\{ \frac{1}{\beta}\ln t + \frac{2}{\beta}\left[ -\int \frac{dt}{t} + \int \frac{dt}{t-1} \right] \right\}_{e^{\beta\omega_q}}^{e^{\beta\Omega_q}}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_q \left\{ \frac{1}{\beta}\ln t - \frac{2}{\beta}\ln t + \frac{2}{\beta}\ln(t-1) \right\}_{e^{\beta\omega_q}}^{e^{\beta\Omega_q}}$$

$$= \frac{1}{2\beta}\sum_q \left[ -\ln t + 2\ln(t-1) \right]_{t_1}^{t_2}$$

$$= \frac{1}{2\beta}\sum_q \left[ \ln t_1 - \ln t_2 + 2\ln(t_2 - 1) - 2\ln(t_1 - 1) \right]$$

$$= \frac{1}{2\beta}\sum_q \left[ \ln\left(e^{\beta(\omega_q - \Omega_q)}\right) + 2\ln\left(\frac{e^{\beta\Omega_q}-1}{e^{\beta\omega_q}-1}\right) \right]$$

$$= \frac{1}{2}\sum_q \left[ \omega_q - \Omega_q + \frac{2}{\beta}\ln\left(\frac{e^{\beta\Omega_q}-1}{e^{\beta\omega_q}-1}\right) \right]$$

fonon katkısı.

$$\Omega_0 = -\frac{2V}{\beta}\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\ln\left(1 + e^{-\beta\xi_p}\right) + V\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left[\frac{1}{2}\omega_q + \frac{1}{\beta}\ln\left(1 - e^{-\beta\omega_q}\right)\right]$$

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

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

götürür.

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

$$\Omega = \frac{2V}{\beta} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \ln\left(1 + e^{-\beta \xi_p}\right)$$

$$+ \frac{V}{\beta} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{2}\beta\Omega_q + \ln\left(1 - e^{-\beta \Omega_q}\right)\right]$$

Bara $H = \sum_{p\sigma} \xi_p \, c_{p\sigma}^{\dagger} c_{p\sigma}$

$$+ \sum_q \Omega_q \left(a_q^{\dagger} a_q + 1/2\right)$$

Hamiltonianen är separerad [illegible].