

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ФИЗИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Мастер теза

Утицај магнетног поља на проводност
у Хабардовом моделу

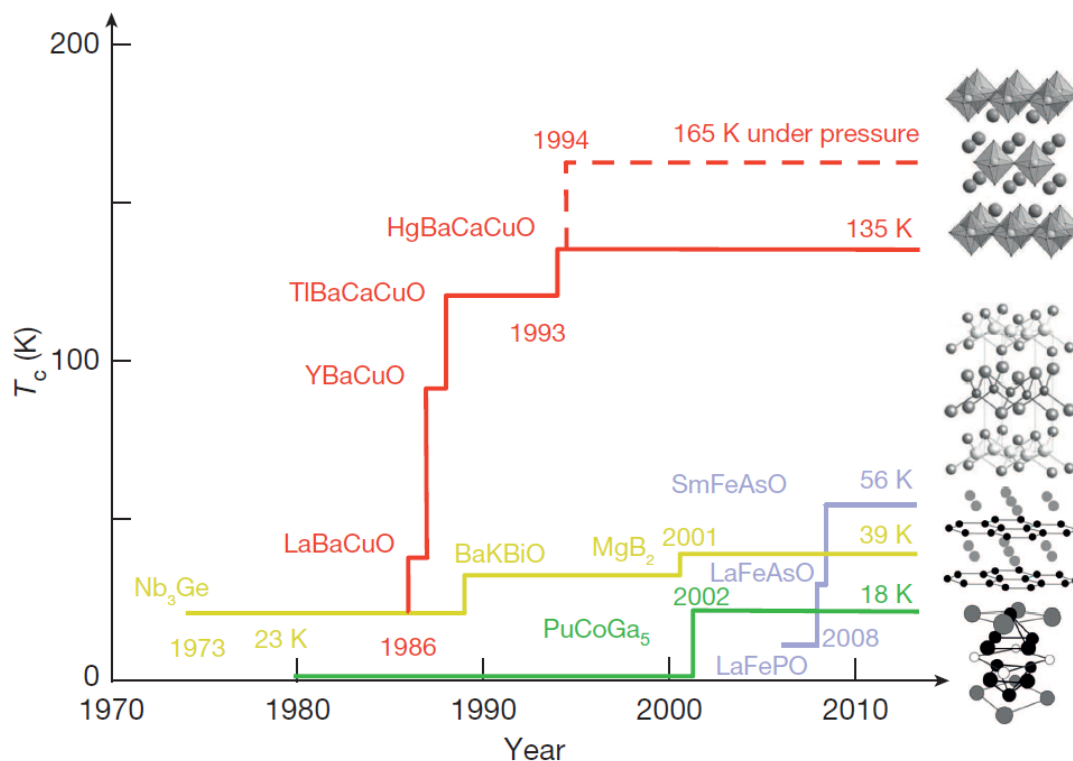
студент Павле Стипсић
ментор др Јакша Вучичевић
24. септембар 2020.

Садржај

1	Увод	2
2	Модел и формализам	7
3	Методи	11
3.1	Неинтерагујући случај	11
3.2	Први ред пертурбације	11
3.3	Други ред пертурбације	13
3.4	Алгоритми и нумеричке апроксимације	15
4	Провера метода	19
5	Резултати	24
6	Закључак	32
7	Додаци	33
7.1	Хабардов атом у магнетном пољу	33
7.2	Проводност	36
7.3	Дискретна Фуријеова трансформација	43
7.4	Фуријеова трансформација Лорановог реда	47
7.5	Биномни развој Фуријеове трансформације Лорановог реда	57
7.6	Стирлингови бројеви прве врсте	60
7.7	Стирлингови бројеви друге врсте	61
7.8	Идентитети проистекли из Фуријеове трансформације за Стирлингове бројеве друге врсте	62
7.9	Дискретна трансформација	67
7.10	Идентитети проистекли из Фуријеове трансформације за Стирлингове бројеве прве врсте	73
7.11	Апроксимација Лоренцијаном	74
8	Литература	76

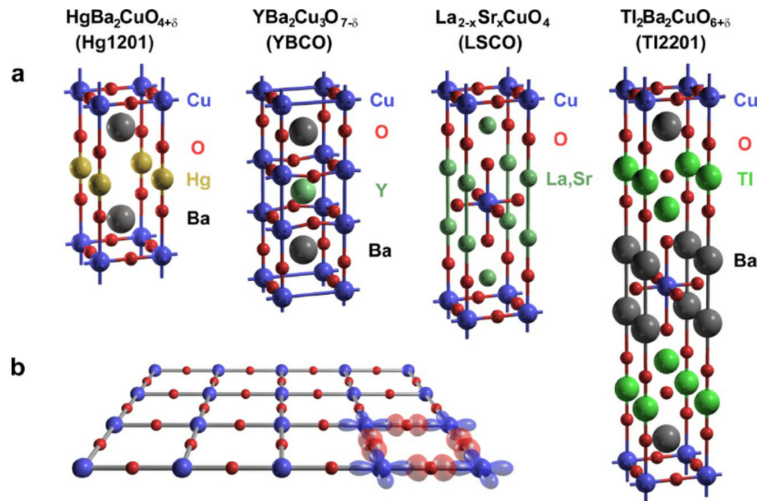
1 Увод

У кристалним материјалима се електрони понашају као интерагујуће квантне честице. У највећем броју случајева Кулонова интеракција је екранирана и не доводи до драстичних ефеката. Међутим, у неким случајевима интеракције могу довести до разних облика уређења и колективних фаза материје, које испољавају егзотичне, макроскопске квантне феномене. Такви материјали спадају у јако корелисане електронске системе. Један од јако корелисаних феномена је неконвенционална (високотемпературна) суперпроводност која је изазвала велико интересовање за јако корелисане материјале (и феномене уопште) у последњих тридесетак година. Феномен високотемпературне суперпроводности је први пут откривен 1986. Прелаз у суперпроводну фазу тада посматраног материјала $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ се дешава при температурама од око 30 К. Каснијим експериментима је потврђено да широка класа материјала заснованих на оксиду бабра, тзв. купрати поседују сличне квалитативне особине. Критична температура фазног прелаза у суперпроводну фазу неких материјала из ове класе премашују 130 К. Осим купрата, откривени су и неконвенционални суперпроводници на бази гвожђа, као и капа органици. (слика 1)



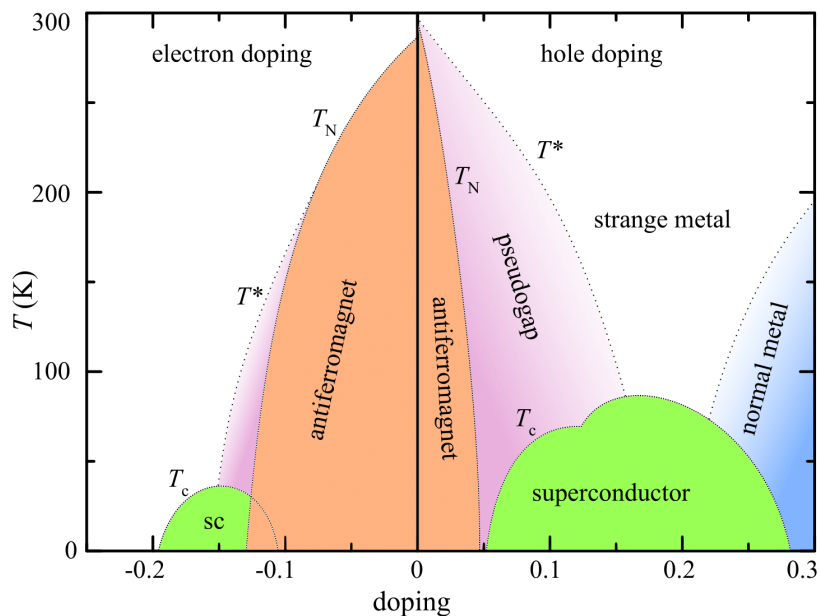
Слика 1: Рекордна критична температура за различите класе материјала током последњих 50 година [1]

Геометријска структура купрата је слојевита, састављена од неколико типова слојева који се наизменично смењују. (слика 2) Први слој формирају оксиди бабра. У том слоју живе стања најнижих енергија, то јест стања блиска Фермијевом нивоу. То су



Слика 2: а) Јединична ћелија купрата; б) Квадратна решетка слоја бабра и кисеоника [2]

стања која имају примарну улогу у транспортним особинама, па се зато теоријски опис често фокусира само на овај слој, и систем се може сматрати квази-дводимензионалним. Атоми бабра су распоређени у теменима квадратне решетке окружени атомима кисеоника дуж два главна правца решетке. Између слојева бакар оксида налазе се други слојеви, углавном сачињени од атома баријума, калцијума и др. Универзални фазни дијаграм који одговара великом броју материјала из ове класе је сачињен од пет великих области: антиферромагнетно уређена фаза, „pseudogap” фаза, „strange metal” фаза, фаза Фермијеве течности и суперпроводна фаза. (слика 3)



Слика 3: Фазни дијаграм купрата [3]

Антиферромагнетно уређење је присутно на температурама до 300 К у случају слабог допирања. То је дугодометно уређење где је густина спина модулисана у простору, тако да имамо локалну магнетизацију чији се смер мења наизменично између чворова решетке, тако да формира шаблон шаховске табле. Постепеним допирањем се из ове фазе прелази у „pseudogap” фазу.

„Pseudogap” фаза још увек није потпуно истражена. Карактерише се недостатком стања на деловима Фермијеве површи у правцу вектора кристалне решетке. Фермијева површ се тада састоји од неповезаних лукова.

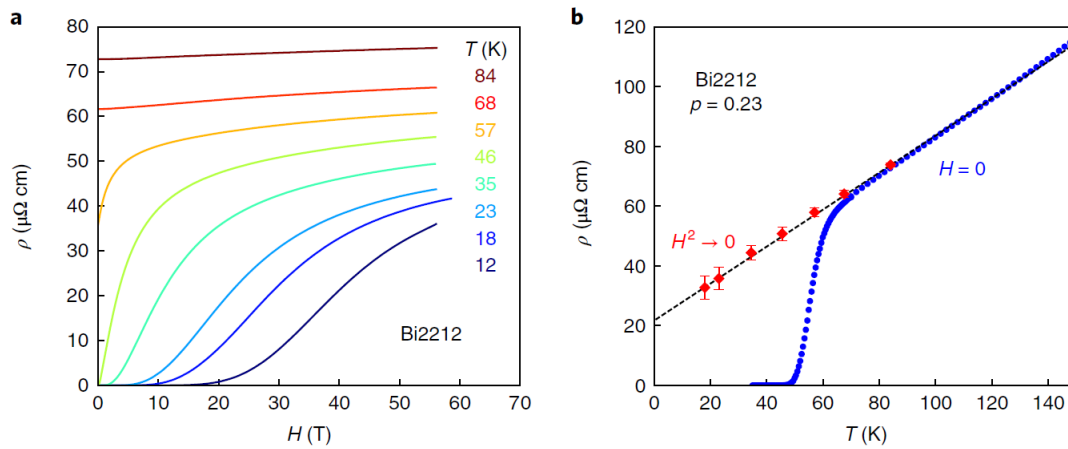
На нижим температурама систем прелази у суперпроводну фазу. Ова суперпроводност се назива високотемпературном због високе температуре фазног прелаза, али такође и неконвенционалном због самог механизма настајања. Сматра се да је узрокује одбојна Кулонова интеракција, а не фонони, што је случај код конвенционалних суперпроводника. Због велике ефективне јачине Кулонове интеракције у овим материјалима, сматра се да се суперпроводност код купрата не може описати теоријом средњег поља као што је BCS теорија (Bardeen-Cooper-Schrieffer theory), већ су неопходне и динамичке корекције (уопштења теорије динамичког средњег поља, cluster dynamical mean field theory [4][5][6], или теорија трипут иредуцибилног динамичког вертекса TRILEX [7]).

Даљим порастом допирања се на нижим температурама још неко време задржава суперпроводна фаза, док на вишим температурама систем прелази у чудни метал („strange metal”) фазу. Ову фазу карактерише линеарна зависност отпорности од температуре. Ова фаза се назива још и лош метал („bad metal”), због јако високе отпроности. Овакво понашање се не може описати Болцмановом семи-класичном теоријом проводности, јер би средњи слободни пут електрона морао да прекрши Mott-Ioffe-Regel лимит, тј. морао би бити мањи од константе решетке. [8][9] Постоје мишљења да се дубоко у суперпроводној фази налази критична тачка на нултој температури из које извире ова фаза као квантно критични режим [1], што је данас активна област истраживања. [8][10][11][12]

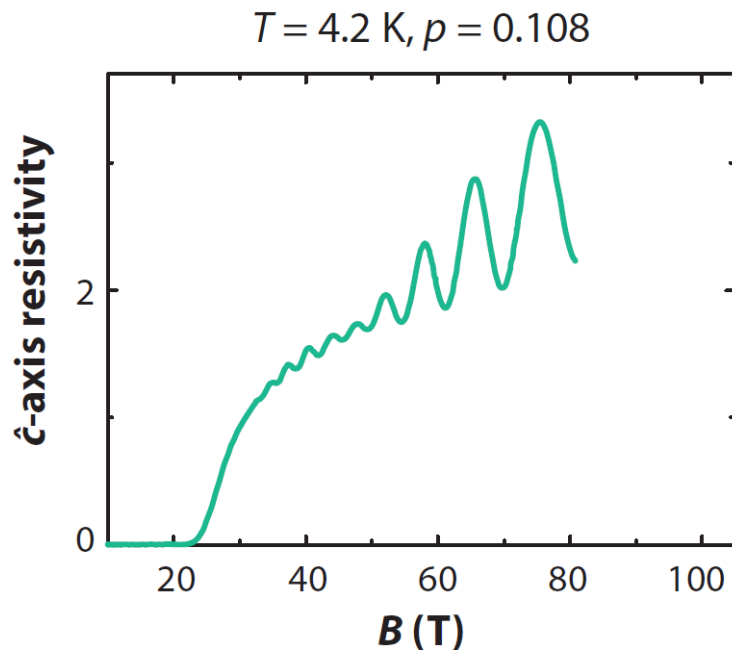
На крају, када је систем довољно допиран, суперпроводност нестаје, као и чудни метал фаза и систем прелази у фазу Фермијеве течности. У овој фази отпорност расте пропорционално квадрату температуре као код конвенционалних метала.

Од нарочитог интереса нам је разумевање понашања купрата у присуству спољашњег магнетног поља. Применом магнетног поља се може потиснути суперпроводна фаза, што може дати увид у нискотемпературне особине чудног метала које су иначе заклоњене суперпроводном фазом. Управо са тим циљем, извршен је скорашњи експеримент А. Legros et al. [13]. Проводност је мерена у зависности од температуре за различите вредности магнетног поља, све до преласка у суперпроводну фазу, а потом су ти резултати екстраполирани за нулто магнетно поље. (слика 4) Експеримент [13] се може радити и на ниској температури где долази до ефекта квантних осцилација као последице спаривања орбиталног момента импулса са магнетним пољем. (слика 5)

Циљ овог истраживања је разумевање утицаја магнетног поља на проводност у Хабардовом моделу, за који се сматра да добро описује нискоенергетску физику купрата. Истраживање вршимо у сарадњи са Роком Житком (Институт Јозеф Стефан, Љубљана) и посматрамо Хабардов модел у широком опсегу параметара. У оквиру ове тезе,



Слика 4: Отпорност добијена у експерименту [13]



Слика 5: Осцилације отпорности које су последица спаривања орбиталног момента импулса електрона са магнетним пољем [14]

ограничићемо се на режим слабих интеракција и урачунаћемо само спаривање спина електрона са магнетним пољем, тј. Земанов ефекат (другим речима, занемарићемо спаривање импулса електрона са спољашњим магнетним пољем). Овај режим није нарочито релевантан за купрате, код којих се сматра да је ефективна интеракција јака, али може бити релевантан за квантне симулације Хабардовога модела, нпр. у експериментима са хладним атомима на оптичкој решетки. [15][16][17][18] Применићемо метод пертурбације другог реда, што је оправдано у режиму слабих интеракција.

У току истраживања успешно је описана зависност отпорности од магнетног поља, при чему је покривен велики број тачака фазног дијаграма за различите вредности параметра електрон-електрон интеракције и попуњености система. Осим овог резултата, израчуната је аналитичка формула инверзне Фуријеове трансформације Лорановог реда негативног степена на имагинарној фреквентној оси. (Додатак 7.4) Ова формула је примењена за израчунавање Фуријеове трансформације Гринових функција, а у пуној општости ће се користити у линији рада везаној за дијаграматски Монте Карло [19], што је ван оквира ове тезе. (Додатак 7.5)

2 Модел и формализам

Хабардов модел се често сматра минималним нискоенергетским моделом купратних једињења. [20] Пруближни прорачуни у оквиру овог модела квалитативно репродукују фазни дијаграм купрата. [4][5][6][21] У овом истраживању ћемо користити Хабардов модел на квадратној дводимензионалној решетке где је дозвољен прелаз са једног чвора решетке само на суседне чворове при чему је амплитуда прелаза t , док је електрон-електрон интеракција, константе интеракције U , локална, то јест остварује се када су два електрона на истом чвору решетке. У сваком чвору је постављена само једна орбитала, па се у њој могу наћи само два електрона супротних спинова. Ово имплицира да само електрони различитих спинова могу међусобно на интерагују. Чворови решетке примарно одговарају полупопуњеним d-орбиталама бакра. Овакво свођење зонске структуре купрата се оправдава тиме што су орбитале кисеоника у околини Фермијевог нивоа скоро попуњене и не доприносе динамичким корелацијама Р. Hansmann et al. [22] У раду ћемо користити операторски формализам. Хамилтонијан Хабардовог модела у присуству спољашњег магнетног поља \vec{B} се може написати помоћу креационих c^\dagger и анхилационих c оператора.

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -t \sum_{\sigma, \vec{n}, i} \left(e^{i \frac{ea}{\hbar} A_i(a\vec{n})} c_{\sigma, \vec{n}}^\dagger c_{\sigma, \vec{n} + \vec{e}_i} + e^{-i \frac{ea}{\hbar} A_i(a\vec{n})} c_{\sigma, \vec{n} + \vec{e}_i}^\dagger c_{\sigma, \vec{n}} \right) \\ & - \mu \sum_{\sigma, \vec{n}} c_{\sigma, \vec{n}}^\dagger c_{\sigma, \vec{n}} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma, \vec{n}} c_{\sigma, \vec{n}}^\dagger c_{\sigma, \vec{n}} c_{\bar{\sigma}, \vec{n}}^\dagger c_{\bar{\sigma}, \vec{n}} + \sum_{\vec{n}} g \mu_B \vec{B} \cdot \vec{S}_{\vec{n}} \end{aligned} \quad (2.0.1)$$

Оператор спина на чвору решетке можемо дефинисати:

$$\vec{S}_{\vec{n}} = \sum_{\sigma, \sigma', i} \frac{1}{2} \sigma_{\sigma \sigma' i} c_{\sigma, \vec{n}}^\dagger c_{\sigma', \vec{n}} \vec{e}_i = \sum_{\sigma, \sigma'} \vec{s}_{\sigma \sigma'} c_{\sigma, \vec{n}}^\dagger c_{\sigma', \vec{n}} \quad (2.0.2)$$

Ознаке величина коришћених у претходним дефиницијама су μ за хемијски потенцијал, i означава редни број вектора решетке а \vec{n} је вектор положаја чвора решетке, \vec{e} је јединични вектор правца, а σ пребројава спин електрона ($\sigma(\uparrow) = 0, \sigma(\downarrow) = 1$). $\sigma_{\sigma \sigma' i}$ су елементи i -те Паулијеве матрице. g је жиромагнетни однос за електрон, а μ_B је Боров магнетон. Бирамо координатни систем у ком се оса квантовања спина поклапа са правцем деловања магнетног поља. A_i је i -та компонента векторског потенцијала електромагнетног поља, а a је корак решетке. Разматраћемо само случај у којем је магнетно поље нормално на раван решетке, па је и оса квантовања ортогонална на раван решетке.

Пошто се у раду ограничавамо само на Земанов ефекат, одбацићемо фазни помак који потиче од спаривања магнетног поља са орбиталним моментом импулса:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -t \sum_{\sigma, \vec{n}, i} \left(c_{\sigma, \vec{n}}^\dagger c_{\sigma, \vec{n} + \vec{e}_i} + c_{\sigma, \vec{n} + \vec{e}_i}^\dagger c_{\sigma, \vec{n}} \right) - \mu \sum_{\sigma, \vec{n}} c_{\sigma, \vec{n}}^\dagger c_{\sigma, \vec{n}} \\ & + \frac{U}{2} \sum_{\sigma, \vec{n}} c_{\sigma, \vec{n}}^\dagger c_{\sigma, \vec{n}} c_{\bar{\sigma}, \vec{n}}^\dagger c_{\bar{\sigma}, \vec{n}} - \sum_{\sigma, \vec{n}} h_\sigma c_{\sigma, \vec{n}}^\dagger c_{\sigma, \vec{n}} \end{aligned} \quad (2.0.3)$$

На нивоу овог модела где изостају калибрационо поље као и спин-орбит интеракције, конкретан правац поља не игра улогу. Уводимо ознаку h_σ која у себи садржи начин на који магнетно поље делује на електроне спина σ , па је $h_\sigma = g\mu_B \vec{B} \cdot \vec{s}_{\sigma\sigma} = g\mu_B B_z s_{z\sigma\sigma} = (-1)^\sigma h$. Магнетно поље у овом случају мења хемијски потенцијал за h са различитим знаком за различите пројекције спина. Наши креациони и анхилациони оператори су фермионског типа, јер су електрони фермиони, па самим тим задовољавају Клифордову алгебру:

$$\{c_{\sigma,\vec{n}}^\dagger, c_{\sigma',\vec{n}'}\} = c_{\sigma,\vec{n}}^\dagger c_{\sigma',\vec{n}'} + c_{\sigma',\vec{n}'} c_{\sigma,\vec{n}}^\dagger = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\vec{n},\vec{n}'} \quad (2.0.4)$$

$$\{c_{\sigma,\vec{n}}^\dagger, c_{\sigma',\vec{n}'}^\dagger\} = \{c_{\sigma,\vec{n}}, c_{\sigma',\vec{n}'}\} = 0 \quad (2.0.5)$$

Операторе ћемо писати у Хајзенберговој слици и користићемо везу између имагинарног времена $\tau = it$ и реципрочне температуре, која се може успоставити у случају термодинамичке равнотеже, како бисмо дефинисали ове операторе на коначној температури у великом канонском ансамблу. Партициона функција у овом формализму је:

$$Z = \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right) \quad (2.0.6)$$

Оператор у Хајзенберговој слици се добија деловањем еволуционог оператора дуж имагинарног времена:

$$\hat{O}(\tau) = \hat{U}(\tau) \hat{O}(0) \hat{U}(-\tau) = e^{\tau \hat{H}} \hat{O} e^{-\tau \hat{H}} \quad (2.0.7)$$

Двотачкаста Гринова функција у овом формализму је:

$$G(\tau_1, \tau_2) = -\langle T(c(\tau_1) c^\dagger(\tau_2)) \rangle = \langle T(c^\dagger(\tau_2) c(\tau_1)) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(T(c^\dagger(\tau_2) c(\tau_1)) e^{-\beta \hat{H}} \right) \quad (2.0.8)$$

Ова дефиниција важи уопштено за све вредности просторних и спинских индекса. Цикличним пермутацијама под трагом, уз примену антикомутационих релација добија се:

$$\begin{aligned} G(\tau_1, \tau_2) &= -\frac{1}{Z} \theta(\tau_1 - \tau_2) \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} e^{(\tau_1 - \tau_2) \hat{H}} c e^{-(\tau_1 - \tau_2) \hat{H}} c^\dagger \right) \\ &\quad + \frac{1}{Z} \theta(\tau_2 - \tau_1) \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} e^{(\tau_2 - \tau_1) \hat{H}} c^\dagger e^{-(\tau_2 - \tau_1) \hat{H}} c \right) \end{aligned} \quad (2.0.9)$$

Видимо да важи релација $G(\tau_1, \tau_2) = -G(\tau_1 - \beta, \tau_2)$. Ова функција зависи само од разлике два времена, тако да се може увести $\tau = \tau_1 - \tau_2$. Оваква зависност је последица тога што је Хамилтонијан временски независан, па је време хомогено. Гринова функција је претходном дефиницијом дефинисана на интервалу $(-\beta, \beta)$, али се може периодично проширити. У случају фермиона је на основном периоду 2β ова функција антипериодична са периодом β , док би у случају бозона, креациони и анхилациони оператори задовољавали идентичне комутационе релације као (2.0.4) и (2.0.5), само са комутаторима уместо антикомутатора, па би функција била периодична са периодом β . Периодичним проширењем области дефинисаности, спектар Гринева функције на

имагинарној оси постаје дискретан:

$$G(i\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega\tau} G(\tau) d\tau = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{2i\omega\beta n} \int_{-\beta}^{\beta} e^{i\omega\tau} G(\tau) d\tau = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{2i\omega\beta n} (1 + \eta e^{-i\omega\beta}) \int_0^{\beta} e^{i\omega\tau} G(\tau) d\tau \quad (2.0.10)$$

Касније ће бити доказан идентитет (Додатак 7.4):

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{2i\omega\beta n} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta\left(\omega - \frac{n\pi}{\beta}\right) \quad (2.0.11)$$

Вредност параметра η у једначини (2.0.10) зависи од типа честице. У случају бозона има вредност +1 а у случају фермиона -1. Производ Дираковог чешља и ове заграде је једнак нули за парне вредности бројача у суми. Аналогно би у случају бозонске Грине функције овај производ био једнак нули за непарне вредности бројача. У даљем раду ћемо под имагинарним фреквенцама $i\omega$ подразумевати само фермионске фреквенце, а под $i\nu$ подразумевати само бозонске фреквенце дате са:

$$\omega_n = \frac{(2n+1)2\pi}{2\beta} = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (2.0.12)$$

$$\nu_n = \frac{2n\pi}{\beta} \quad (2.0.13)$$

Следећа величина од интереса је сопствена енергија електрона. На имагинарној оси сопствена енергија се може дефинисати као разлика инверза непертурбоване и целе Грине функције:

$$\Sigma(i\omega) = (G^{(0)})^{-1}(i\omega) - G^{-1}(i\omega) \quad (2.0.14)$$

Оператор струје добијамо из чињенице да је интеракциони члан електромагнетног поља у Хамилтонијану који зависи од густине струје:

$$\hat{H}_{int} = -a^3 \sum_{\vec{n}} \vec{j}_0(\vec{n}) \cdot \vec{A}(\vec{n}) \implies \vec{j}_0(\vec{n}) = -\frac{1}{a^3} \frac{\partial \hat{H}_{int}}{\partial \vec{A}(\vec{n})} \quad (2.0.15)$$

На основу једначине (2.0.1) диференцирањем и накнадним одбацивањем фазе, добијамо оператор струје:

$$\vec{j}_0(\vec{n}) = -\frac{1}{a^3} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{A}(\vec{n})} = ie \frac{t}{a^2 \hbar} \sum_{\sigma} \left(e^{i \frac{ea}{\hbar} A_{\vec{z}}(a\vec{n})} c_{\sigma, \vec{n}}^{\dagger} c_{\sigma, \vec{n}-\vec{e}} - e^{-i \frac{ea}{\hbar} A_{\vec{z}}(a\vec{n})} c_{\sigma, \vec{n}-\vec{e}}^{\dagger} c_{\sigma, \vec{n}} \right) \vec{e} \quad (2.0.16)$$

$$\vec{j}_0(\vec{n}) = ie \frac{t}{a^2 \hbar} \sum_{\sigma} \left(c_{\sigma, \vec{n}}^{\dagger} c_{\sigma, \vec{n}-\vec{e}} - c_{\sigma, \vec{n}-\vec{e}}^{\dagger} c_{\sigma, \vec{n}} \right) \vec{e} \quad (2.0.17)$$

Ово је парамагнетни део струје. Касније ће бити показано да је средња вредност дијамагнетног члана једнака (Додатак 7.2):

$$\langle \vec{j}_d(x) \rangle = -\frac{ne^2}{m} \vec{A}(x) \quad (2.0.18)$$

Коначно, циљ истраживања је одређивање тензора проводности у режиму линеарног одзива, који ћемо дефинисати као:

$$\sigma_{i,j} = \left. \frac{\partial j_i}{\partial E_j} \right|_{\vec{E}=0} \quad (2.0.19)$$

где су j_i и E_j компоненте двовектора густине струје и јачине електричног поља. У овом режиму се проводност може добро описати Кубоовом формулом која ће касније бити изведена и продужена на реалну осу:

$$\sigma_{ij}(i\nu, \vec{q}) = \frac{\Lambda_{ij}(0) - \Lambda_{ij}(i\nu, \vec{q})}{\hbar\nu} \quad (2.0.20)$$

Функције $\Lambda_{ij}(i\nu, \vec{q})$ су корелационе функције између i -те и j -те компоненте струја имагинарне фреквенције ν и импулса \vec{q} :

$$\Lambda_{ij}(i\nu, \vec{q}) = \langle j_{0i}(i\nu, \vec{q}) j_{0j}(-i\nu, -\vec{q}) \rangle \quad (2.0.21)$$

Дијагонални елемент неповезаног дела проводности по квадрату за једносмерну струју танког филма одређујемо на основу израза који је изведен у додатку 7.2:

$$\sigma_{ii}^{\text{DC}} = -\frac{4e^2 t^2}{\pi \hbar^3 N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}} \sin^2(k_i) \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\text{Im} G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) \right)^2 \frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi} d\xi \quad (2.0.22)$$

3 Методи

Решаваћемо Хабардов модел теоријом другог реда пертурбације и рачунаћемо проводност Кубоовом формулом.

3.1 Неинтерагујући случај

Неинтерагујући случај је аналитички решив. Пребацићемо Хамилтонијан из просторних координата у импулсне, а оператор извода по имагинарном времену, заменићемо множењем имагинарном фреквенцијом и тако прећи у фреквентни домен. Шредингерова једначина електрона у неинтерагујућем случају се у овом простору може записати на еквивалентан начин:

$$i\omega c_{\sigma, \vec{k}}^\dagger c_{\sigma, \vec{k}} = (-h_\sigma - 2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) - \mu) c_{\sigma, \vec{k}}^\dagger c_{\sigma, \vec{k}} \quad (3.1.1)$$

У даљем раду ћемо користити ознаку $\varepsilon_{\vec{k}}$ уместо кинетичке енергије електрона која је:

$$\varepsilon_{\vec{k}} = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) \quad (3.1.2)$$

Гринова функција ове једначине је очигледно:

$$G_{\sigma, \vec{k}}^{(0)}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu + h_\sigma - \varepsilon_{\vec{k}}} \quad (3.1.3)$$

3.2 Први ред пертурбације

Проблем настаје када покушамо да препишемо интеракциони члан у импулсни простор, јер интеракциони члан у импулсном простору престаје да буде дијагоналан:

$$\frac{U}{2} \sum_{\sigma, \vec{n}} c_{\sigma, \vec{n}}^\dagger c_{\sigma, \vec{n}} c_{\sigma, \vec{n}}^\dagger c_{\sigma, \vec{n}} = \frac{U}{2N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} c_{\sigma, \vec{k}}^\dagger c_{\sigma, \vec{k}'} c_{\sigma, \vec{k}''}^\dagger c_{\sigma, \vec{k}} c_{\sigma, \vec{k}'} - \vec{k}'' + \vec{k}' \quad (3.2.1)$$

У првом реду пертурбације тражимо допринос сопственој енергији који потиче од једне интеракције. То значи да је сопствена енергија у првом реду пертурбације:

$$\Sigma_{\sigma, \vec{k}}^{(1)}(i\omega) = U \langle n_{\sigma} \rangle^{(0)} \quad (3.2.2)$$

Непертурбовану концентрацију електрона појединачног спина добијамо из израза:

$$\begin{aligned} \langle n_\sigma \rangle^{(0)} &= \frac{1}{N_{\vec{k}}} \sum_{\vec{k}} \langle n_{\sigma, \vec{k}} \rangle^{(0)} = \frac{1}{N_{\vec{k}}} \sum_{\vec{k}} G_{\sigma, \vec{k}}^{(0)}(\tau \rightarrow 0_-) = \frac{1}{N_{\vec{k}}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega} \frac{1}{i\omega + \mu + h_\sigma - \varepsilon_{\vec{k}}} \\ &= \frac{1}{N_{\vec{k}}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu - h_\sigma)\beta} + 1} = \frac{1}{N_{\vec{k}}} \sum_{\vec{k}} n_F(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu - h_\sigma) \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

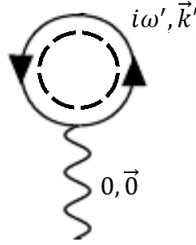
Увођењем функције густине стања по енергији, ову концентрацију можемо записати и преко интеграла:

$$\frac{1}{N_{\vec{k}}} \sum_{\vec{k}} n_F(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu - h_\sigma) = \int \rho(\varepsilon) n_F(\varepsilon - \mu - h_\sigma) d\varepsilon \quad (3.2.4)$$

Рачунаћемо самоусаглашени први ред пертурбације, тако да је сопствена енергија једнака Хартријевом изменском члану. (дијаграм 1)

$$\Sigma_{\sigma, \vec{k}}^{(1)}(i\omega) = U \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle^{(1)} = \frac{1}{N_{\vec{k}'}} \sum_{\vec{k}'} G_{\sigma, \vec{k}'}^{(1)}(\tau \rightarrow 0_-) \quad (3.2.5)$$

Овај сабирак је фреквентно и импулсно независан.



Дијаграм 1: Сопствена енергија у самоусаглашеном првом реду пертурбације

Гринова функција у првом реду пертурбације се на основу једначине (2.0.14) може добити познавањем сопствене енергије у првом реду. Зарад поједностављења записа, увешћемо величину $\tilde{\mu}_{\sigma} = \mu + h_{\sigma} - U \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle^{(1)}$, па се Гринове функције у фреквентном домену и временском домену на интервалу $(0, \beta)$ могу записати као:

$$G_{\sigma, \vec{k}}^{(1)}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + \tilde{\mu}_{\sigma} - \varepsilon_{\vec{k}}} \quad (3.2.6)$$

$$G_{\sigma, \vec{k}}^{(1)}(\tau) = -e^{(\varepsilon_{\vec{k}} - \tilde{\mu}_{\sigma})(\beta - \tau)} n_F(\varepsilon_{\vec{k}} - \tilde{\mu}_{\sigma}) \quad (3.2.7)$$

Концентрација електрона појединачног спина је у првом реду пертурбације:

$$\langle n_{\sigma, \vec{k}} \rangle^{(1)} = n_F(\varepsilon_{\vec{k}} - \tilde{\mu}_{\sigma}) \quad (3.2.8)$$

Аналогно претходном примеру, укупна концентрација електрона је:

$$\langle n \rangle^{(1)} = \int \rho(\varepsilon) (n_F(\varepsilon - \tilde{\mu}_{\sigma}) + n_F(\varepsilon - \tilde{\mu}_{\bar{\sigma}})) d\varepsilon \quad (3.2.9)$$

Примећујемо да је укупна концентрација функција $\tilde{\mu}_{\sigma}$ и $\tilde{\mu}_{\bar{\sigma}}$. У колико желимо да фиксирамо концентрацију као параметар, онда је потребно одредити зависност $\tilde{\mu}_{\bar{\sigma}}(\tilde{\mu}_{\sigma})$, односно криву у $\tilde{\mu}_{\sigma}, \tilde{\mu}_{\bar{\sigma}}$ равни дуж које је концентрација константна. Из дефиниције ових величина се могу изразити хемијски потенцијал и магнетизација:

$$\mu = \frac{1}{2} (\tilde{\mu}_{\sigma} + \tilde{\mu}_{\bar{\sigma}} + U \langle n_{\sigma} + n_{\bar{\sigma}} \rangle^{(1)}) = \frac{1}{2} (\tilde{\mu}_{\sigma} + \tilde{\mu}_{\bar{\sigma}} + U \langle n \rangle^{(1)}) \quad (3.2.10)$$

$$M = \langle n_{\uparrow} - n_{\downarrow} \rangle^{(1)} = \frac{1}{U} (\tilde{\mu}_{\uparrow} - \tilde{\mu}_{\downarrow} - 2h) \quad (3.2.11)$$

Посматрањем интеракционог члана хамилтонијана закључујемо да је средња вредност енергије интеракције између електрона пропорционална корелацији концентрација електрона супротних спинова на истом чвору решетке:

$$U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle = \frac{1}{\beta N_{\vec{k}}} \sum_{i\omega, \vec{k}} G_{\sigma, \vec{k}}(i\omega) \Sigma_{\sigma, \vec{k}}(i\omega) \quad (3.2.12)$$

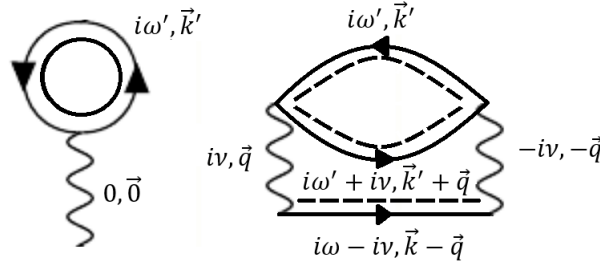
У првом реду пертурбације се добија:

$$\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle^{(1)} = \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle^{(1)} \frac{1}{\beta N_{\vec{k}}} \sum_{i\omega, \vec{k}} G_{\sigma, \vec{k}}^{(1)}(i\omega) = \langle n_{\uparrow} \rangle^{(1)} \langle n_{\downarrow} \rangle^{(1)} \quad (3.2.13)$$

3.3 Други ред пертурбације

У другом реду пертурбације се сопствена енергија електрона састоји од два сабирка. (дијаграм 2) Први је поправљена концентрација електрона супротног спина помножена са U , док је други сабирак (ознака d) дат са:

$$\Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(i\omega) = -\frac{U^2}{\beta^2 N_{\vec{k}}^2} \sum_{\vec{k}', \vec{q}, i\omega', i\nu} G_{\sigma, \vec{k}-\vec{q}}^{(1')}(i\omega - i\nu) G_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}^{(1')}(i\omega') G_{\bar{\sigma}, \vec{k}'+\vec{q}}^{(1')}(i\omega' + i\nu) \quad (3.3.1)$$



Дијаграм 2: Први и други сабирак Сопствене енергије у другом реду пертурбације

Гринове функције које користимо ће уместо непертурбованих бити функције добијене у првом реду пертурбације. Такође ћемо и овде захтевати самоусаглашеност концентрације.

$$G_{\sigma, \vec{k}}^{(1')}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu + h_{\sigma} - \varepsilon_{\vec{k}} - U \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle^{(2)}} \quad (3.3.2)$$

Гринова функција у другом реду пертурбације је:

$$G_{\sigma, \vec{k}}^{(2)}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu + h_{\sigma} - \varepsilon_{\vec{k}} - U \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle^{(2)} - \Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(i\omega)} \quad (3.3.3)$$

Циљ нам је да одредимо Гринову функцију на реалној оси. Да бисмо то извели, потребно

је да знамо сопствену енергију електрона на реалној оси. Сопствена енергија у временском домену на имагинарној оси је:

$$\Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(\tau) = \frac{U^2}{N_{\vec{k}}^2} \sum_{\vec{k}', \vec{q}} G_{\sigma, \vec{k} - \vec{q}}^{(1')}(\tau) G_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}^{(1')}(-\tau) G_{\bar{\sigma}, \vec{k}' + \vec{q}}^{(1')}(\tau) \quad (3.3.4)$$

Да би смо поједноставили записе израза, уводимо ознаку $\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k}}$ уместо разлике $\varepsilon_{\vec{k}}$ и $\tilde{\mu}_{\sigma}$. Преласком у фреквентни домен, добијамо израз:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(i\omega) &= -\frac{U^2}{N_{\vec{k}}^2} \int_0^\beta \sum_{\vec{k}', \vec{q}} e^{(\beta-\tau)\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}} e^{(\beta-\tau)\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}' - \vec{q}}} e^{\tau\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}} e^{i\omega\tau} d\tau \\ & n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}\right) n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}' - \vec{q}}\right) n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}\right) \\ &= \frac{U^2}{N_{\vec{k}}^2} \sum_{\vec{k}', \vec{q}} \frac{e^{\beta\left(\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}} + \varepsilon_{\bar{\sigma}, \vec{k}' - \vec{q}}\right)} + e^{\beta\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}}}{i\omega - \left(\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}} + \tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}' - \vec{q}} - \tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}\right)} n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}\right) n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}' - \vec{q}}\right) n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}\right) \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

Такође можемо приметити да важи:

$$e^x n_F(x) = n_F(-x) \quad (3.3.6)$$

Сада је други сабирак сопствене енергије:

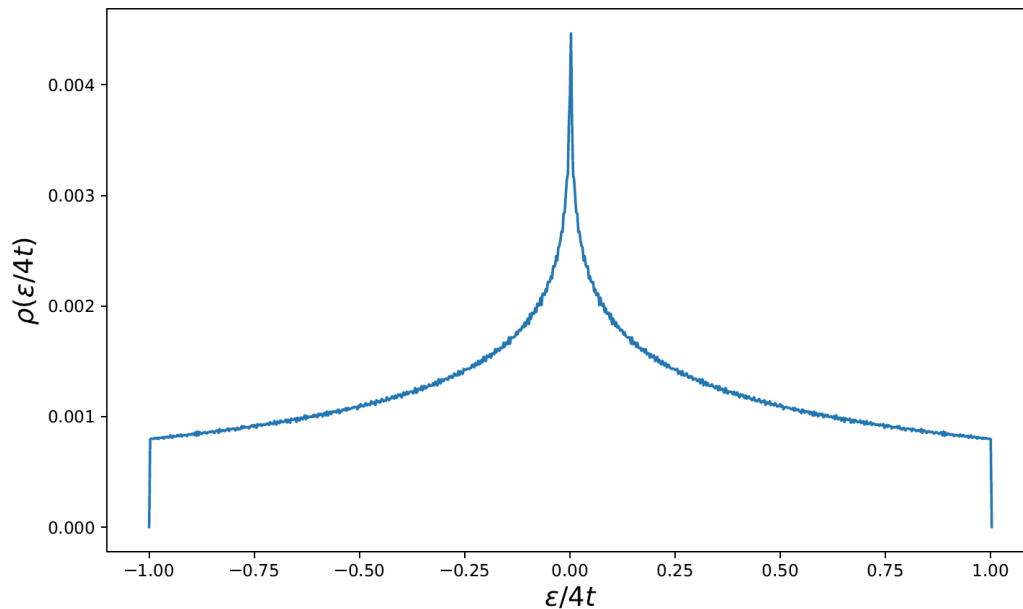
$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(i\omega) &= \\ & \frac{U^2}{N_{\vec{k}}^2} \sum_{\vec{k}', \vec{q}} \frac{n_F\left(-\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}\right) n_F\left(-\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}' - \vec{q}}\right) n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}\right) + n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}\right) n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}' - \vec{q}}\right) n_F\left(-\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}\right)}{i\omega - \left(\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}} + \tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}' - \vec{q}} - \tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}\right)} \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

Аналитичко продужење овог израза се добија брисањем имагинарне јединице која стоји уз ω . На реалној оси је сопствена енергија сингуларна, па се ретардована и адвансирана Гринова функција добијају коришћењем ретардоване или адвансиране сопствене енергије. Ретардована сопствена енергија је тада:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(\omega) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0_+} \\ & \frac{U^2}{N_{\vec{k}}^2} \sum_{\vec{k}', \vec{q}} \frac{n_F\left(-\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}\right) n_F\left(-\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}' - \vec{q}}\right) n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}\right) + n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}\right) n_F\left(\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}' - \vec{q}}\right) n_F\left(-\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}\right)}{\omega + i\epsilon - \left(\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}} + \tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}' - \vec{q}} - \tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'}\right)} \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

3.4 Алгоритми и нумеричке апроксимације

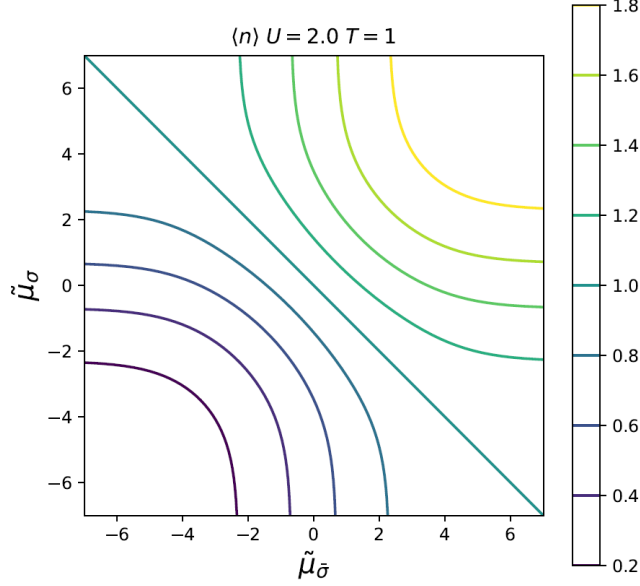
Приликом нумеричког израчунавања величина као што су густина стања, Фуријеове трансформације или сопствене енергије, потребно је направити неке нумеричке апроксимације. У случају рачунања концентрације, направљена је функција густине стања на квадратној решетки, (слика 6) пребројавана су стања унутар малих енергетских опсега и интеграл у једначини (3.2.4) је апроксимиран сумом. Да би се стања унутар малих енергетских опсега пребројала, реципрчни простор је дискретизован, чиме је бесконачна решетка замењена коначном и број чворова решетке је постао укупан број стања. Приликом израчунавања је коришћена коначна квадратна решетка димензија 32 пута 32 чвора. Број чворова је један од контролних нумеричких параметара. У будућности је у ширем свеобухватном истраживању потребно испитати утицај величине овог параметра на добијене резултате.



Слика 6: Густина стања на квадратној решетки

Алгоритам за одређивање самоусаглашених Гринних функција се заснива на формирању контура у $\tilde{\mu}_\sigma, \tilde{\mu}_{\bar{\sigma}}$ равни за константну концентрацију. (слика 7) Ове криве се потом интерполирају одговарајућим бројем тачака како би се повећала резолуција осталих величина које су рачунате дуж њих. Овај поступак примењујемо како бисмо избегли самоусаглашено решавање једначина и тиме уштедели време. Концентрација на овај начин постаје параметар који фиксирамо.

Приликом пребацивања Гринних функција из фреквентног у временски домен, понашање функције на високим фреквенцијама је апроксимирано сабирцима Лорановог реда негативног експонента. Апроксимирани делови функције су аналитички рачунати, док је остатак добијен дискретном Фуријеовом трансформацијом над коначним опсегом фреквенција. Овај поступак је описан у додатку 7.3. Ово пребацивање из временског у



Слика 7: Контуре константне концентрације

Фреквентни домен и натраг вршимо приликом израчунавања самоусаглашене концентрације у другом реду пертурбације, Односно првог сабирка сопствене енергије. Тада рачунамо Гринуову функцију на имагинарној оси у временском домену и концентрацију добијамо у лимесу $\tau \rightarrow 0_-$.

На основу једначине (3.3.8), други сабирак ретардоване сопствене енергије електрона је представљен сумом полова првог реда инфинитезимално померених испод реалне осе у комплексној равни. Амплитуда полова је дата функцијом A :

$$\begin{aligned}
 A_{\sigma, \vec{k}}(\varepsilon) = & \frac{U^2}{N_{\vec{k}}^2} \sum_{\vec{k}', \vec{q}} \left(n_F \left(-\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k}+\vec{q}} \right) n_F \left(-\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'-\vec{q}} \right) n_F \left(\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'} \right) \right. \\
 & \left. + n_F \left(\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k}+\vec{q}} \right) n_F \left(\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'-\vec{q}} \right) n_F \left(-\tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'} \right) \right) \delta \left(\varepsilon - \left(\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k}+\vec{q}} + \tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'-\vec{q}} - \tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'} \right) \right)
 \end{aligned} \tag{3.4.1}$$

Диракову делту ћемо у нумеричком прорачуну апроксимирати приближном Кронекеровом делтом. Ова делта је једнака реципрочной вредности корака нумеричке интеграције по ε у случају да је апсолутна вредност разлике $\varepsilon - \left(\tilde{\varepsilon}_{\sigma, \vec{k}+\vec{q}} + \tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'-\vec{q}} - \tilde{\varepsilon}_{\bar{\sigma}, \vec{k}'} \right)$ мања од половине корака интеграције. Корак нумеричке интеграције представља још један контролни нумерички параметар чији је утицај на тачност резултата у будућности потребно испитати. Сопствена енергија постаје:

$$\Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A_{\sigma, \vec{k}}(\varepsilon)}{\omega + i\epsilon - \varepsilon} d\varepsilon \tag{3.4.2}$$

Функција A је на реалној оси строго реална функција која не садржи полове, стога је и њен интеграл по реалној оси реална функција. Претходни интеграл међутим није строго реалан јер пол прве врсте који потиче од имениоца подинтегралне функције генерише

имагинарни део при интеграцији око сингуларитета. Због тога ћемо интеграл поделити на два дела:

$$\Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A_{\sigma, \vec{k}}(\varepsilon) - A_{\sigma, \vec{k}}(\omega)}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon} d\varepsilon + A_{\sigma, \vec{k}}(\omega) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon} d\varepsilon \quad (3.4.3)$$

Сингуларитет у подинтегралној функцији првог сабирка је отклоњив, па први сабирак остаје строго реалан, док је други сабирак строго имагинаран, па је ово уједно и разлагање на реални и имагинарни део другог дела сопствене енергије.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon} d\varepsilon = -i\pi \quad (3.4.4)$$

$$\Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A_{\sigma, \vec{k}}(\varepsilon) - A_{\sigma, \vec{k}}(\omega)}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon} d\varepsilon - i\pi A_{\sigma, \vec{k}}(\omega) \quad (3.4.5)$$

$$\text{Re} \Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A_{\sigma, \vec{k}}(\varepsilon) - A_{\sigma, \vec{k}}(\omega)}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon} d\varepsilon \quad (3.4.6)$$

$$\text{Im} \Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(\omega) = -\pi A_{\sigma, \vec{k}}(\omega) \quad (3.4.7)$$

У посматраном случају функција A је ненулта само на интервалу $(\varepsilon_{min}, \varepsilon_{max})$, због чега се реални део може изразити као:

$$\begin{aligned} \text{Re} \Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A_{\sigma, \vec{k}}(\varepsilon) - A_{\sigma, \vec{k}}(\omega)}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon} d\varepsilon = \int_{\varepsilon_{min}}^{\varepsilon_{max}} \frac{A_{\sigma, \vec{k}}(\varepsilon) - A_{\sigma, \vec{k}}(\omega)}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon} d\varepsilon \\ &- A_{\sigma, \vec{k}}(\omega) \lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \left(\int_{-\alpha}^{\varepsilon_{min}} \frac{1}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon} d\varepsilon + \int_{\varepsilon_{max}}^{\alpha} \frac{1}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon} d\varepsilon \right) \\ &= \int_{\varepsilon_{min}}^{\varepsilon_{max}} \frac{A_{\sigma, \vec{k}}(\varepsilon) - A_{\sigma, \vec{k}}(\omega)}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon} d\varepsilon - A_{\sigma, \vec{k}}(\omega) \lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \left(-\ln \left(\frac{\varepsilon_{min} - \omega}{-\alpha - \omega} \right) - \ln \left(\frac{\alpha - \omega}{\varepsilon_{max} - \omega} \right) \right) \\ &= \int_{\varepsilon_{min}}^{\varepsilon_{max}} \frac{A_{\sigma, \vec{k}}(\varepsilon) - A_{\sigma, \vec{k}}(\omega)}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon} d\varepsilon + A_{\sigma, \vec{k}}(\omega) \ln \left(\frac{\omega - \varepsilon_{min}}{\varepsilon_{max} - \omega} \right) \end{aligned} \quad (3.4.8)$$

Најзад можемо добити Гринову функцију на реалној оси јер су познати сви њени чиниоци:

$$G_{\sigma, \vec{k}}^{(2)}(\omega) = \frac{1}{\omega + i\varepsilon + \mu + h_\sigma - \varepsilon_{\vec{k}} - U \langle n_{\vec{\sigma}} \rangle^{(2)} - \Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(\omega)} \quad (3.4.9)$$

Пошто је имагинарни део сопствене енергије ненулта у тачкама када реални део имениоца Гринева функције пролази кроз нулу, ретардована Гринева функција се добија коришћењем ретардоване сопствене енергије електрона, а члан $i\varepsilon$ се може уклонити из имениоца. Приликом нумеричког израчунавања Гринева функције, видели смо да су имагинарни делови функције веома оштри и великог интензитета у тачкама где реални део имениоца пролази кроз нулу. Тада смо именилац интерполирали у околини те тачке и описивали Гринову функцију великим бројем тачака у тој малој околини. Нумеричку грешку овог поступка смо проценили на примеру Лоренцијана на

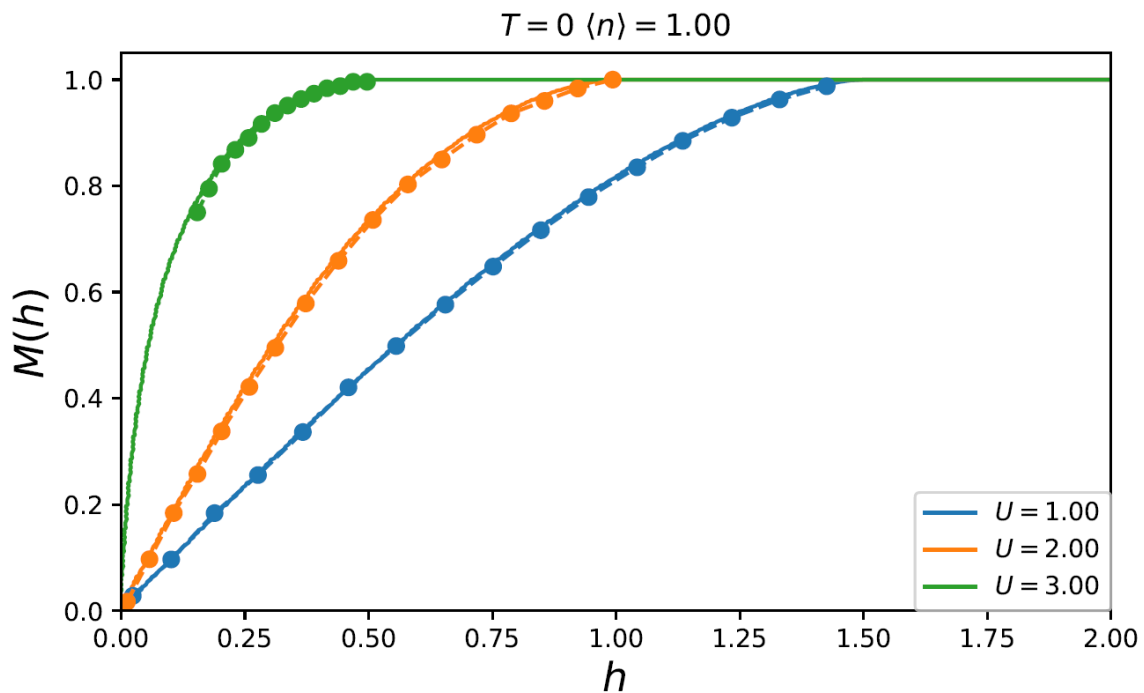
који се своди Гринова функција у случају фреквентно независне сопствене енергије. Ова апроксимација је оправдана због чињенице да сопствена енергија углавном јесте споропроменљива у малој околини ових посматраних тачака. Формуле за процену грешке су изведене у додатку 7.11.

4 Провера метода

Да би смо се уверили да код ради исправно, проверили смо резултате добијене у првом реду пертурбације са резултатима из рада W. Zhu et al. [23] и установили смо да се резултати добро поклапају. У наведеном раду је рачуната магнетизација у Хабардовом моделу Bethe решетке са бесконачним координационим бројем на апсолутној нули. Густина стања електрона на овој решетки је:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{t^*\pi} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{2t^*}\right)^2} \quad (4.0.1)$$

Параметар t^* је једнак t/\sqrt{z} где је z координациони број.



Слика 8: Упоредба добијених резултата у првом реду пертурбације са резултатима из литературе

Подаци означени тачкама на графику на слици 8 су подаци преузети из рада [23], док је пуна линија добијена израчунавањем.

На коначној решетки Гринове функције и сопствена енергија електрона имају дискретан спектар на реалној оси. Пошто у термодинамичком лимесу желимо да посматрамо бесконачну решетку, код које је сопствена енергија електрона континуална величина, укрупнићемо поделу фреквентне осе и усредњити сопствену енергију у околини нових тачака. На овај начин постижемо да сопствена енергија постане глатка функција фреквенције. Пошто се укрупњавањем уноси додатна нумеричка грешка, крајњи резултати који би требало да поштују одређене симетрије, имаће мала одступања. Ове симетрије се могу уочити у зависности имагинарног дела сопствене енергије електрона од фреквенције и спољашњег магнетног поља у тачкама високе симетрије Брилуенове зоне. Посматране тачке су темена иредуцибилне компоненте, као и тачка $(\pi/2, \pi/2)$ приказане на слици 15 у поглављу о резултатима. Прва симетрија о којој смо већ раније говорили је симетрија промене знака пројекције спина и смера магнетног поља. Она се уочава у свим ситуацијама независно од допирања и положаја у реципрочном простору. Друга симетрија, о којој смо такође говорили је симетрија између електрона и шупљина. Овде се манифестује тако што сопствена енергија електрона позитивне пројекције спина у тачки $(0, 0)$ у првој Брилуеновој зони при допирању n , одговара сопственој енергији електрона негативне пројекције спина у тачки (π, π) у првој Брилуеновој зони на фреквенцији супротног знака при допирању $2 - n$. Сличне симетрије постоје и у преостале две посматране тачке у Брилуеновој зони, с том разликом што се оне међусобно не мешају, већ сопствена енергија електрона позитивне пројекције спина при истим условима одговара сопственој енергији електрона негативне пројекције спина у истој тачки Брилуенове зоне. Ове симетрије је могуће изразити помоћу следеће четири једначине:

$$\text{Im } \Sigma_{\vec{k}, \sigma}(\omega, h, n) = \text{Im } \Sigma_{\vec{k}, \bar{\sigma}}(\omega, -h, n) \quad (4.0.2)$$

$$\text{Im } \Sigma_{(0,0), \sigma}(\omega, h, n) = \text{Im } \Sigma_{(\pi, \pi), \sigma}(-\omega, -h, 2 - n) \quad (4.0.3)$$

$$\text{Im } \Sigma_{(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}), \sigma}(\omega, h, n) = \text{Im } \Sigma_{(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}), \sigma}(-\omega, -h, 2 - n) \quad (4.0.4)$$

$$\text{Im } \Sigma_{(0, \pi), \sigma}(\omega, h, n) = \text{Im } \Sigma_{(0, \pi), \sigma}(-\omega, -h, 2 - n) \quad (4.0.5)$$

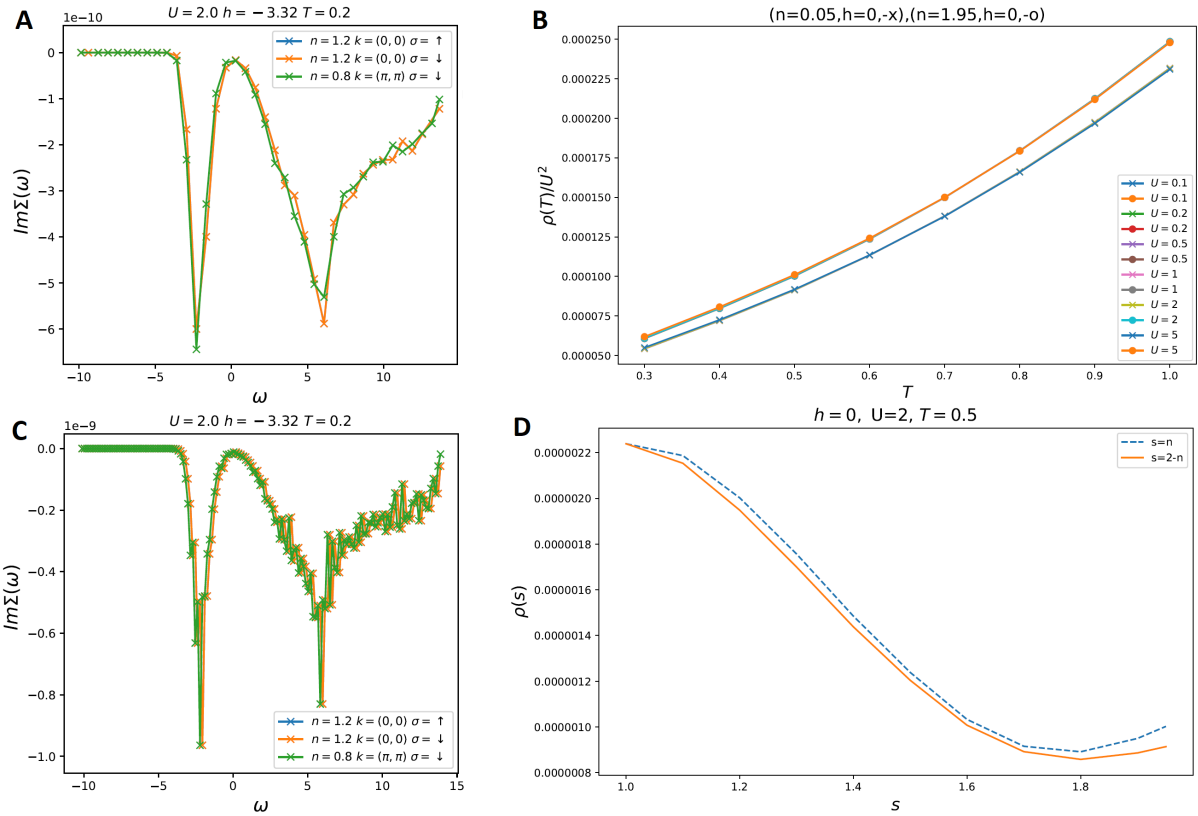
Симетрија између електрона и шупљина у Хабардовом моделу на квадратној решетки постоји само када је дозвољен прескок само између суседних чворова решетке. Специјални случајеви те симетрије су описани у једначинама (4.0.3)-(4.0.5) и могу се изразити:

$$\text{Im } \Sigma_{\vec{k}, \sigma}(\omega, h, n) = \text{Im } \Sigma_{(\pi, \pi) - \vec{k}, \sigma}(-\omega, -h, 2 - n) \quad (4.0.6)$$

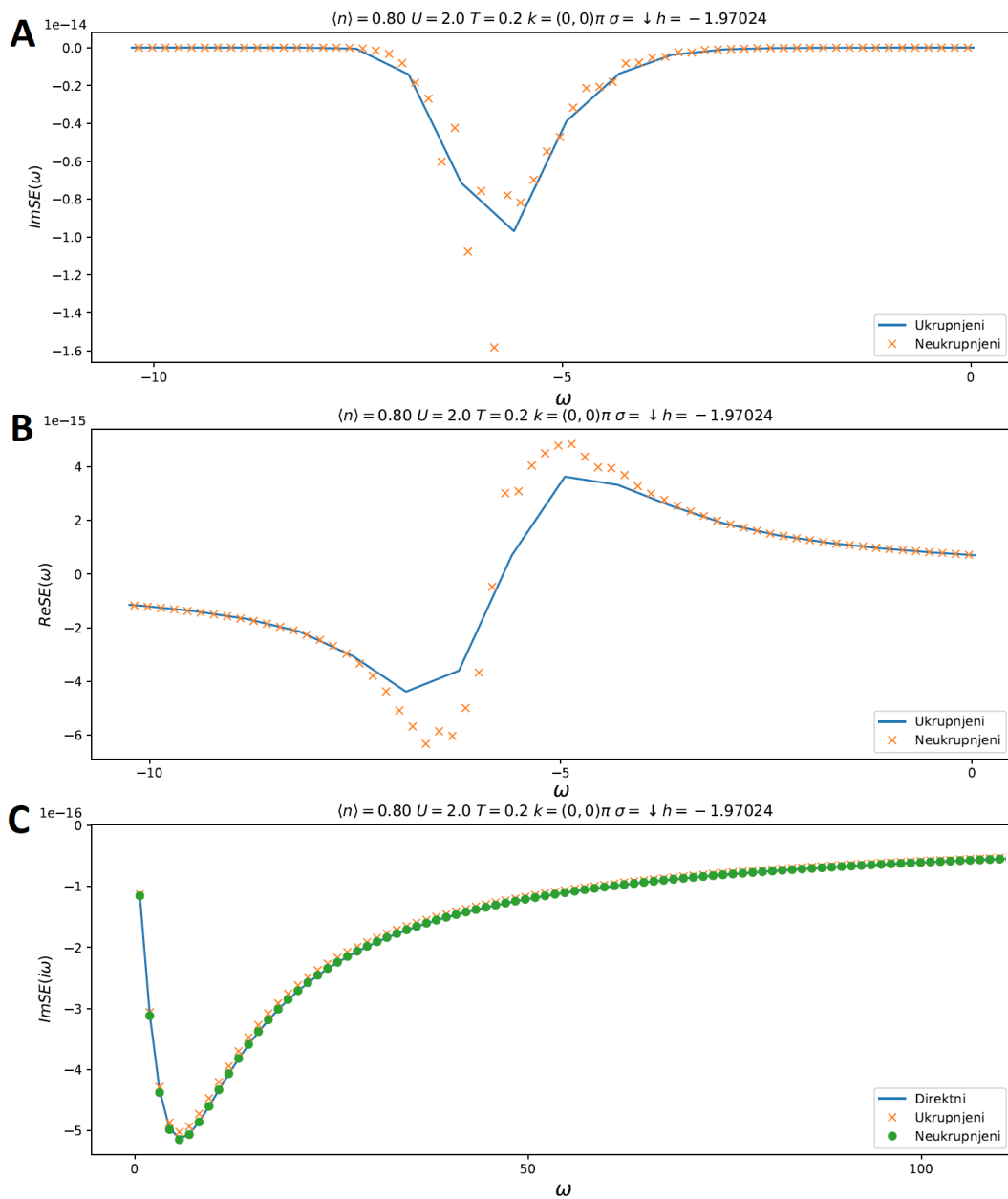
На основу ових одступања је могуће проценити грешку метода. (слика 9)

На слици 10 је приказана сопствена енергија електрона пре и након укрупњавања поделе фреквентне осе, као и имагинарни део сопствене енергије на имагинарној оси. На имагинарној оси је имагинарни део сопствене енергије рачунат на два начина, директно применом формуле (3.3.6) и аналитичким продужењем резултата добијених помоћу (3.4.7) на имагинарну осу.

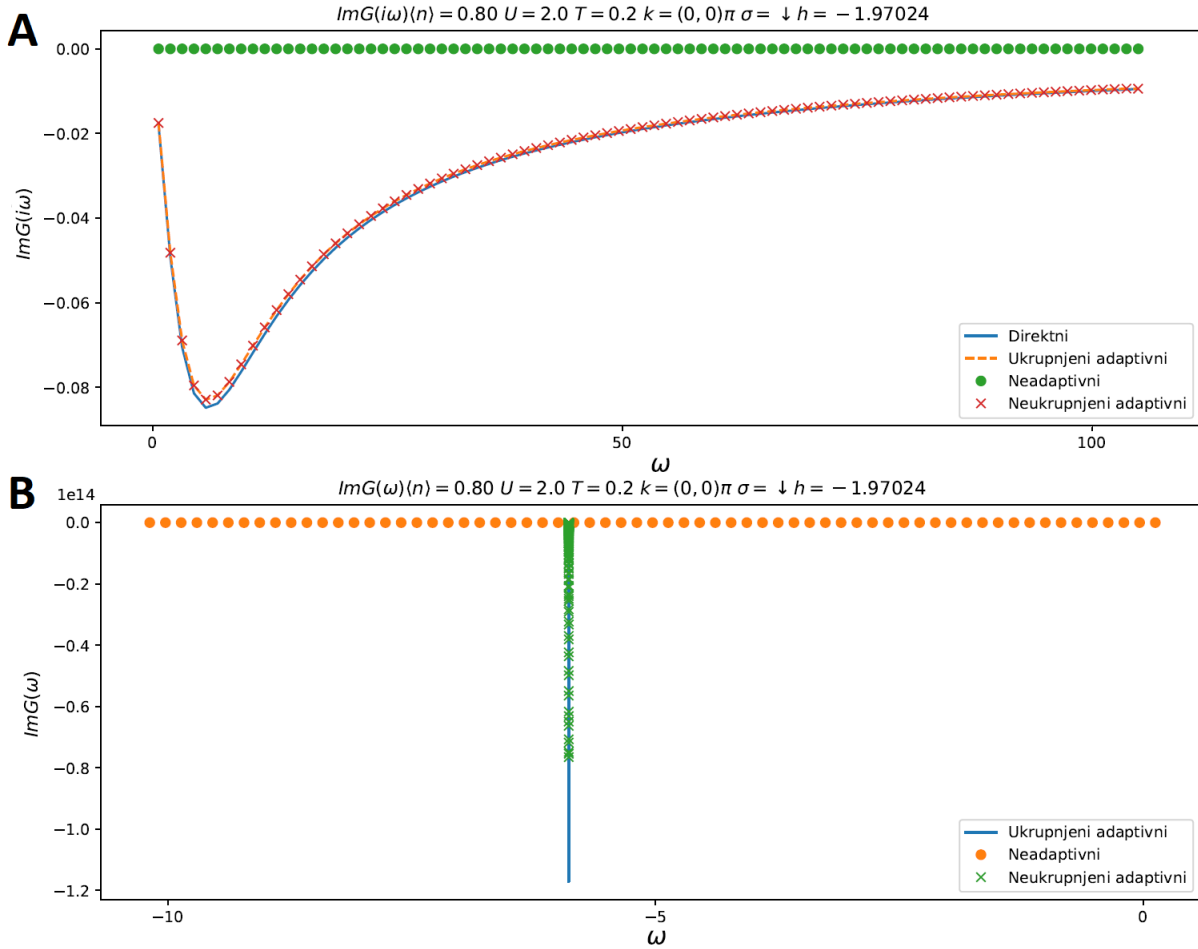
Гринове функције се у случају укрупњене и неукрупњене поделе фреквентне осе такође разликују, међутим, на реалној оси имагинарни делови ових функција имају велики скок у тренутку када им реални део пролази кроз нулу, о чему смо говорили на крају



Слика 9: А Нарушавање симетрије сопствене енергије електрона укрупњавањем поделе фреквентне осе; В Нарушење симетрије отпорности у зависности од врсте допирања на различитим температурама; С Симетрија сопствене енергије електрона пре укрупњавања поделе фреквентне осе; Д Нарушење симетрије отпорности у зависности од допирања за различите вредности допирања;



Слика 10: Реални A и имагинарни B део сопствене енергије на укрупњеној и неукрупњеној подели фреквентне осе; C Имагинарни део сопствене енергије електрона на имагинарној оси добијен помоћу две методе;



Слика 11: *A* Имагинарни део Грине функције на имагинарној оси; *B* Имагинарни део Грине функције на реалној оси добијен помоћу две методе;

поглавља 3.4. Добијене резултате смо проверили упоређивањем имагинарних делова Грине функције на имагинарној оси добијених директно на основу једначине (3.3.3) и аналитичким продужењем резултата добијених на реалној оси и са и без примене апроксимације Лоренцијаном, односно адаптирањем опсега фреквентне осе. Ови резултати су приказани на слици 11 А. На слици 11 В је илустровано одступање, па чак и недостатак оштрог дела Грине функције на реалној оси у поменутиим случајевима.

5 Резултати

Рачунали смо зависност отпорности од магнетног поља на температурама у опсегу од $0.2t$ до $1t$ и константом електрон-електрон интеракције у опсегу од $0.1t$ до $5t$ у јединицама параметра скока t и проверавали да ли добијени резултати задовољавају симетрије модела и решетке. Тачност добијених резултата директно зависи од избора контролних параметара величине решетке и корака дискретизације фреквентне осе. Симетрије Хабардовог модела се директно виде у добијеним резултатима. Проводност за једносмерну струју, која је израчуната, не зависи од знака магнетног поља јер промену знака магнетног поља прати промена знака пројекције спина електрона на правац магнетног поља, а како је Хабардов модел симетричан по спину електрона, резултат остаје непромењен (слика 12 А,В,С). Друга симетрија отпорности је симетрија у односу на врсту допирања (слика 12 А). Ова симетрија је последица тога што су одговарајуће транспортне особине електрона и шупљина су изједначене. На основу слика 12 А,С,Д закључујемо да у недопираном случају ($n = 1$) магнетно поље не смањује отпорност до нуле у лимиту бесконачног поља, као у допираном случају, али да повећање магнетног поља за овај избор параметара глобално доводи до смањења отпорности. Ово можемо објаснити тиме што у недопираном случају постоји симетрија између електрона различите пројекције спина, онда важи:

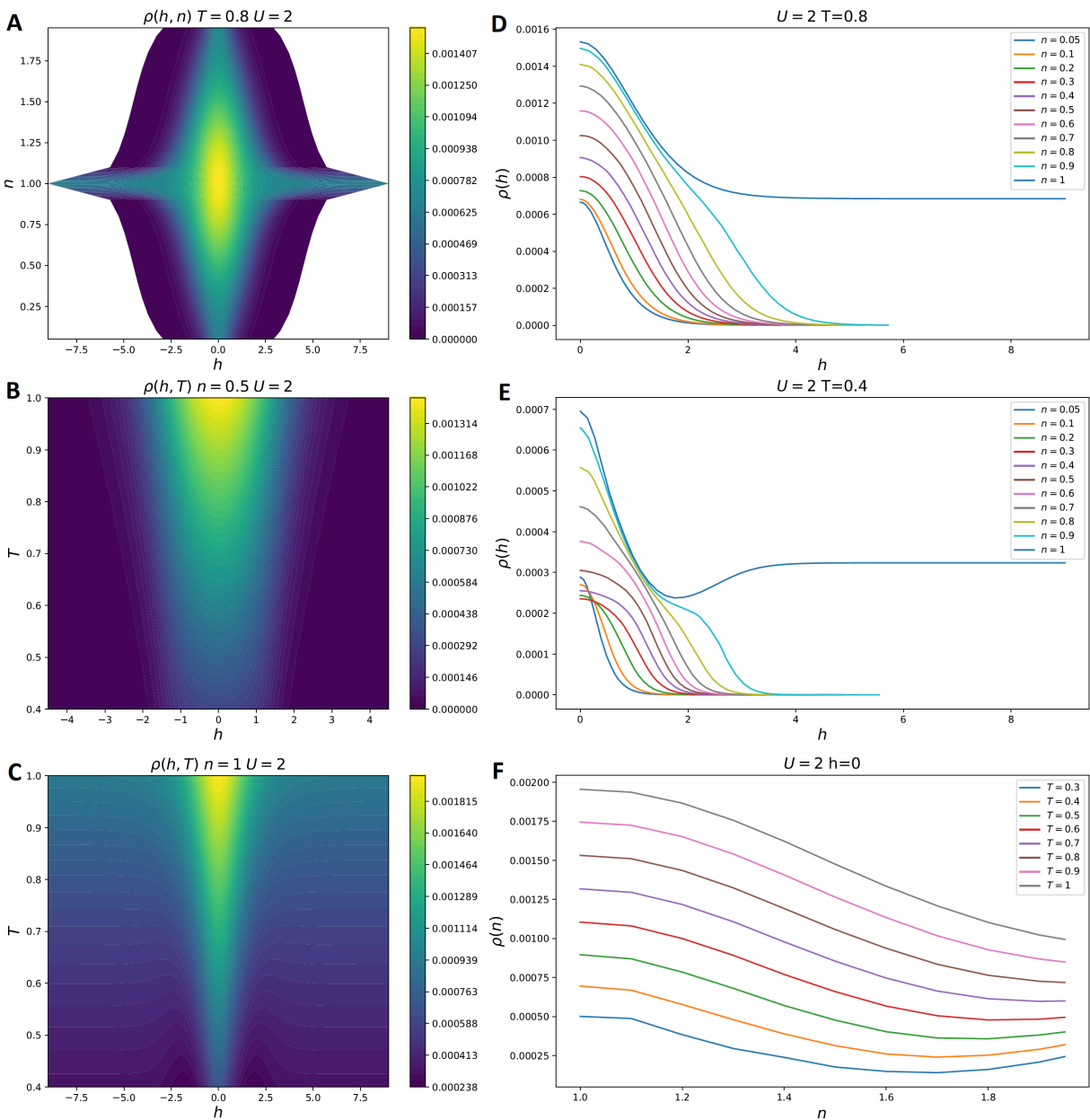
$$\tilde{\mu}_\sigma = -\tilde{\mu}_{\bar{\sigma}} = \mu + h_\sigma - Un_{\bar{\sigma}} = -\mu - h_{\bar{\sigma}} + Un_\sigma \implies 2\mu + h_\sigma + h_{\bar{\sigma}} = Un = U = 2\mu \quad (5.0.1)$$

На основу једначине (7.11.6) из додатка 7.11, једначине (3.3.6) и једначине (2.0.22) на основу које рачунамо проводност, закључујемо да је отпорност у недопираном случају у лимесу јаког поља, као и у лимесу великог допирања при нултом сољашњем пољу (слика 13 Е) ненулта и пропорционална температури:

$$\begin{aligned} \rho &\sim - \lim_{h \rightarrow \infty} \frac{n_F^2(h)n_F(-h) + n_F^2(-h)n_F(h)}{\left. \frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi} \right|_{\xi \rightarrow h}} \\ &= \lim_{h \rightarrow \infty} \frac{n_F^2(h)n_F(-h) + n_F^2(-h)n_F(h)}{\beta n_F(h)n_F(-h)} = \lim_{h \rightarrow \infty} \frac{n_F(-h) + n_F(h)}{\beta} = \frac{1}{\beta} = T \quad (5.0.2) \end{aligned}$$

У допираном случају, спољашње магнетно поље повећава и смањује концентрације електрона супротних спинова тако да енергија једних од ове две групе електрона остају у околини Фермијевог нивоа (слика 17), при чему њихова сопствена енергија, па самим тим и отпорност одлази у нулу у лимесу бесконачног поља. (слика 15) Међутим, на основу слика 12 Е,Ф видимо да у зависности од температуре повећање допирања или магнетног поља не доводи увек до смањења отпорности, већ се може уочити локални минимум отпорности у опсегу од 1.6 до 1.8 (као и од 0.2 до 0.4) за дати избор параметара на температурама од 0.3 до 0.6. Ова појава се манифестује пресецањем кривих на слици 13 D. Зависност отпорности од температуре је монотono растућа при овом избору параметара (слика 13 В,С). Са слике 13 D се може закључити да се у недопираном случају ова зависност може сматрати линеарном, а да са порастом допирања зависност прелази у квадратну, па потом поново у линеарну, што је приказано на слици 14.

Повећање константе електрон-електрон интеракције узрокује монотono повећање



Слика 12: А Симетрије отпорности у односу на знак магнетног поља и врсту допирања; В Зависност отпорности од температуре при различитим вредностима магнетног поља у допираном случају; С Зависност отпорности од температуре про различитим вредностима магнетног поља у недопираном случају; Д Зависност отпорности од магнетног поља за различите вредности допирања на вишој температури; Е Зависност отпорности од магнетног поља за различите вредности допирања на нижој температури; Ф Зависност отпорности од допирања на различитим температурама при нултом магнетном пољу;

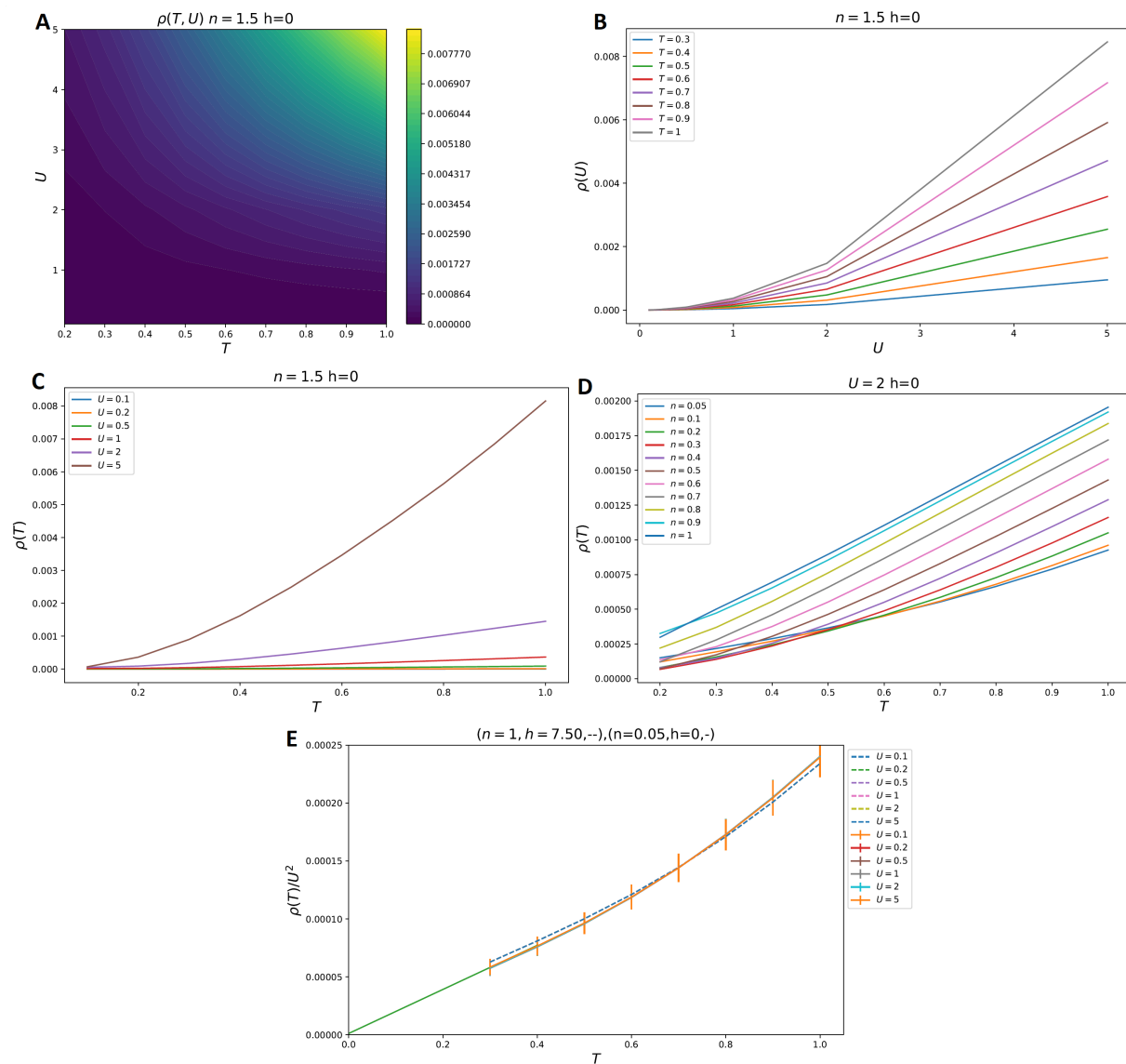
отпорности. Отпорност је апроксимирана законом:

$$\rho = AT^B \quad (5.0.3)$$

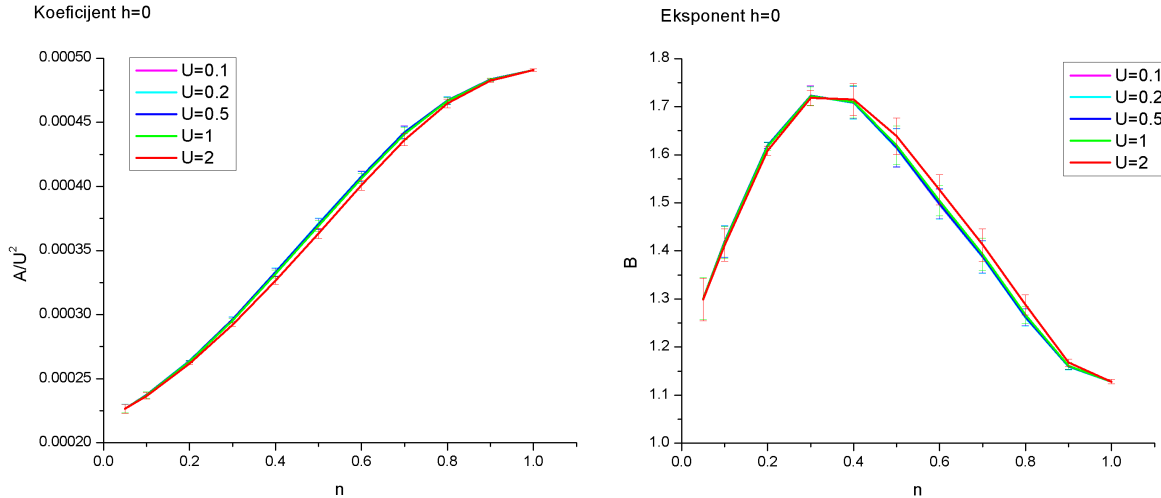
На основу слике 14 видимо да је коефицијент A квадратно зависан од константе електрон-електрон интеракције за мале вредности те константе, као и да експонент зависи само од допирања, док на за веће вредности ове константе долази до одступања при средњим вредностима допирања.

$$A = \alpha U^2 \quad (5.0.4)$$

Грешка ових коефицијената је добијена методом најмањих квадрата. Због дискретизације импулсног простора, односно коначности решетке, ограничени смо на релативно високе температуре, не можемо да дамо одговор на питање шта се дешава када температура тежи нули. У скорашњој литератури је показано да у околини ван Хове сингуларитета постоје значајна одступања зависности отпорности од температуре у односу на T^2 зависност која је карактеристика фазе Фермијеве течности. [25] На температурама преко $0.4t$ и вредностима константе електрон-електрон интеракције око $2t$ свакако очекујемо успоравање раста отпорности са температуром и у одсуству ван Хове сингуларитета. [26] У случају пуне симетрије између електрона и шупљина, физика се додатно компликује на ниским температурама. Спинске флукуације које повезују тачке на Фермијевој површи постају дугодометне и јаче, и у интеракцији са електронима доводе до отварања енергетског процена на Фермијевом нивоу (Слејтеров изолатор). [24][27]



Слика 13: А Зависност отпорности од константе електрон-електрон интеракције и температуре; В Зависност отпорности од константе електрон-електрон интеракције при различитим температурама; С Зависност отпорности од температуре при различитим вредностима електрон-електрон интеракције; D Зависност отпорности од температуре за различите вредности допирања при нултом магнетном пољу; E Симетрија зависности отпорности од температуре при великом допирању и при великом магнетном пољу и линеарна екстраполација ка ниским температурама;

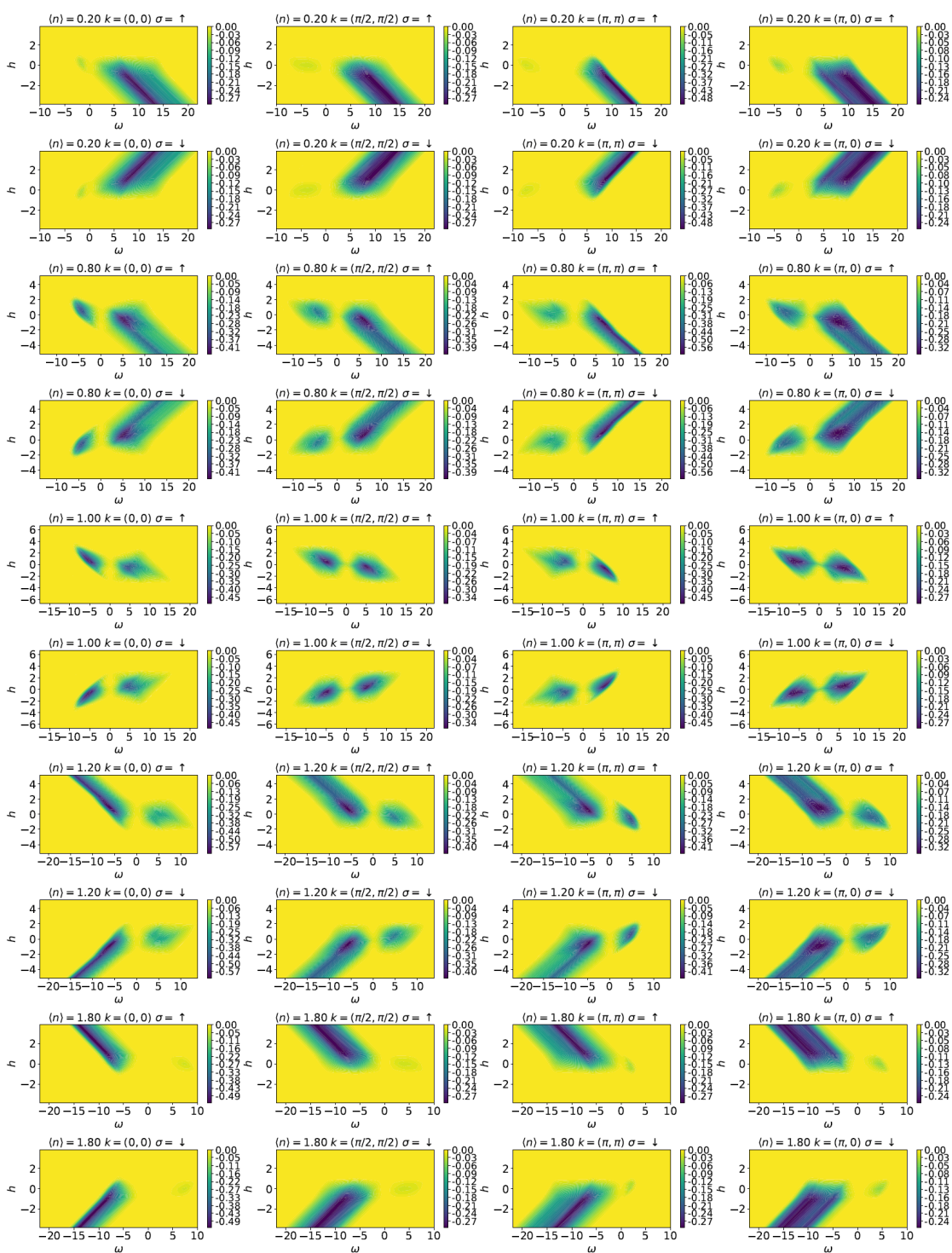


Слика 14: Зависност коефицијента и експонента у феноменолшкој формули за отпорност од допирања

Осим главног резултата, проводности, у току израчунавања су одређиване још две битне величине које описују овај систем. То су сопствена енергија електрона и Гринова функција. Ове величине поседују додатне симетрије које су последица не само Хабардовога модела већ и квадратне решетке. Квадратна решетка има групу симетрије $C_{4v} \wedge T_2$. Транслациона дипериодична група обезбеђује да се реципрочни простор може изделити на Брилуенове зоне, док циклична група обезбеђује да Брилуенове зоне имају иредуцибилну компоненту која захвата осмину њихове површине. У случају прве Брилуенове зоне, за иредуцибилну компоненту се може одабрати троугао одређен тачкама $(0, 0)$, (π, π) и $(0, \pi)$, као и било који троугао добијен његовим пресликавањем елементима цикличне групе C_{4v} .

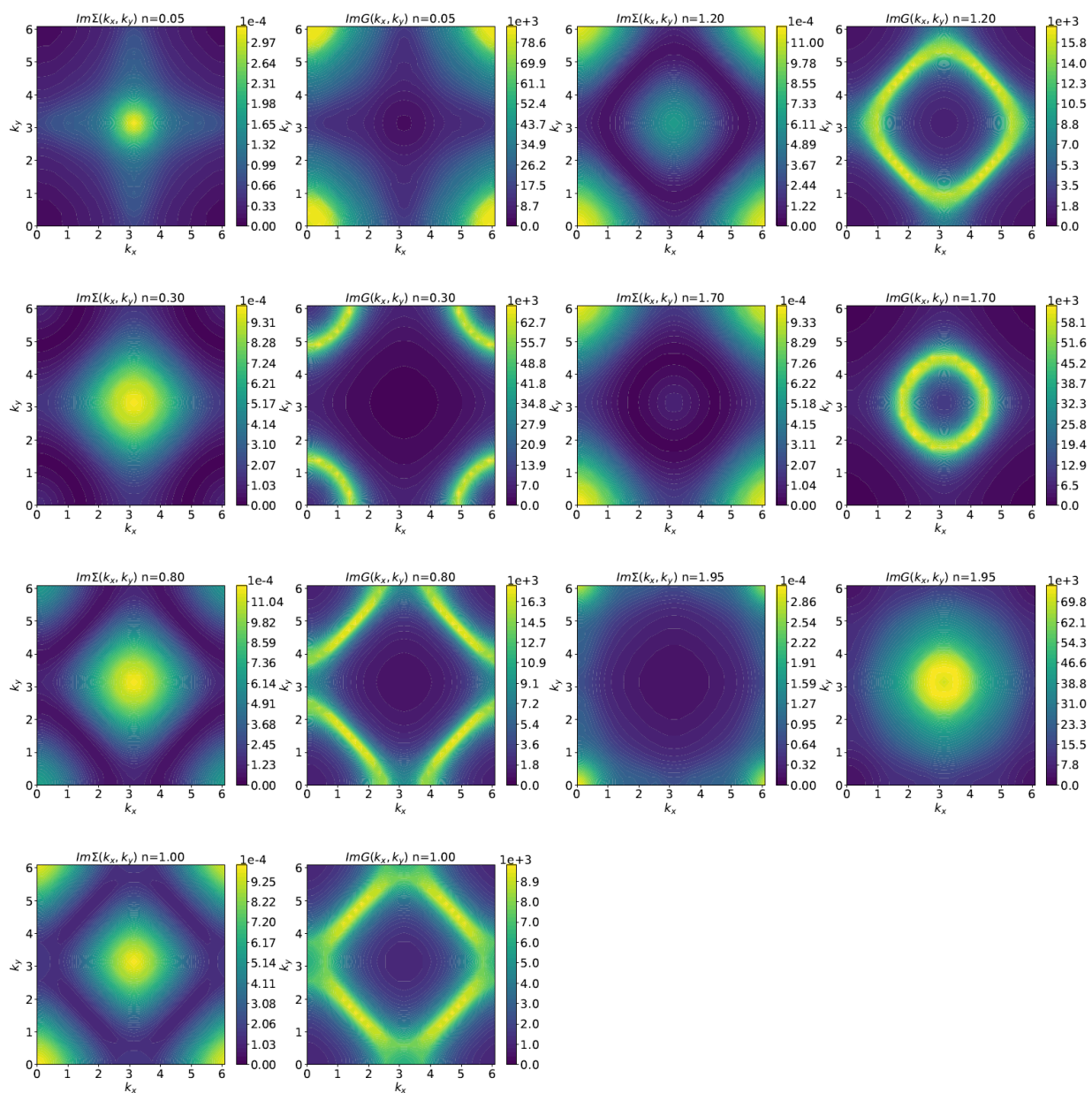
На коначној температури, Фермијева површ није добро дефинисана, јер добија ширину у облику приказаном на слици 16. На овој слици је осим симетрије саме Брилуенове зоне приказана зависност положаја Фермијеве површи у реципрочном простору од допирања, као и зависност имагинарног дела сопствене енергије електрона од положаја у Брилуеновој зони на тим допирањима. Ове две величине су међусобно у реципрочном односу. Допирањем система, се Фермијева површ смањује око тачке $(0, 0)$ у случају допирања шупљинама или (π, π) у случају допирања електронима. У случају ненулног спољашњег магнетног поља, електрони различите пројекције спина на правац магнетног поља имају различиту вредност сопствене енергије и различите Фермијеве површи јер се њихови ефективни хемијски потенцијали разликују за $2h$.

Утицај спољашњег магнетног поља на раздвајање ових енергија и Фермијевих површи за различите пројекције спина приказан је на слици 17. Енергетски процеп између њих је на фраквентној оси једнак двоструком интензитету магнетног поља израженом у јединицама t . Тачка означена са \times представља најкохерентније стање на слици.



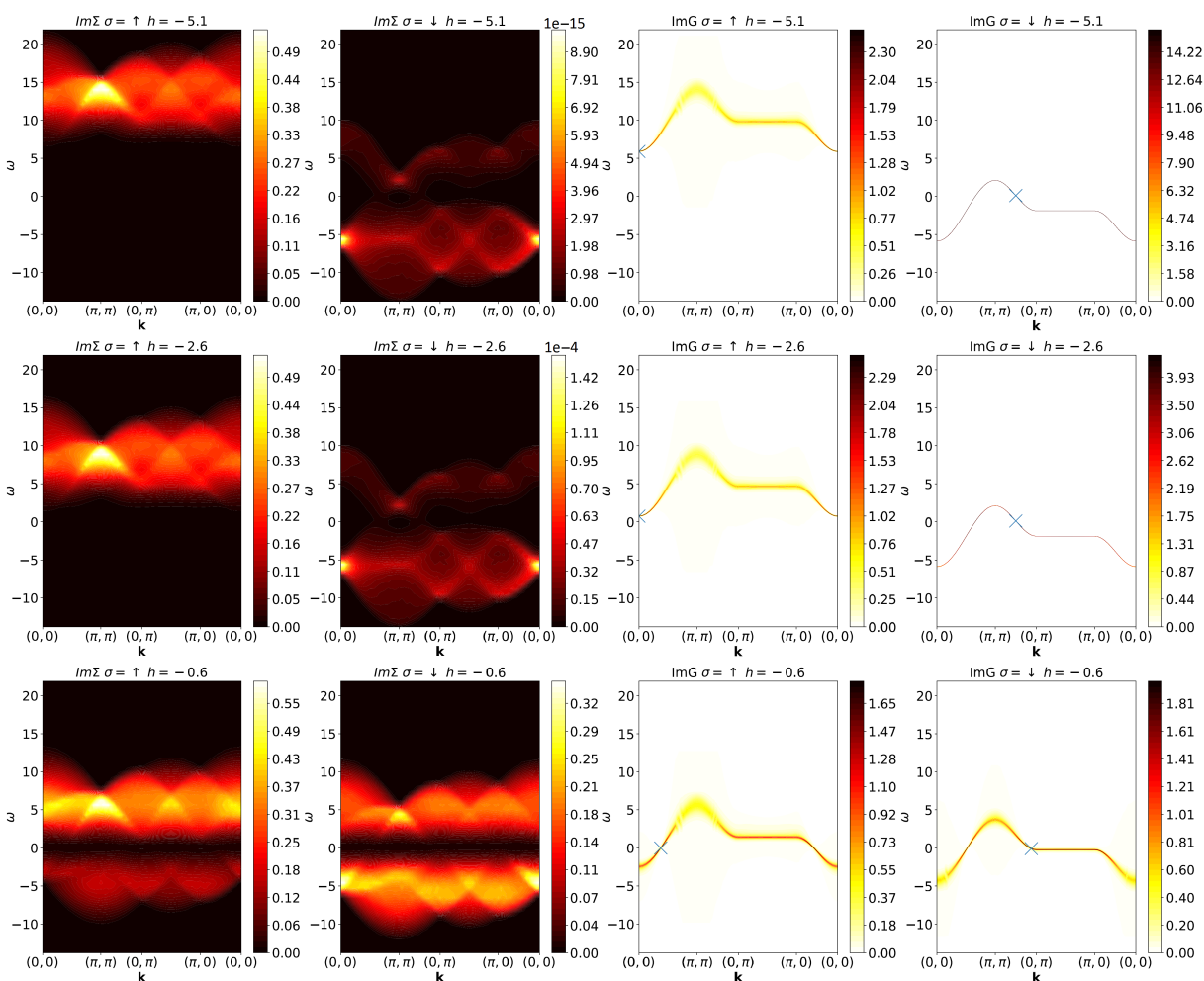
Слика 15: Симетрије сопствене енергије електрона у фреквентном домену у зависности од магнетног поља при различитим допирањима за обе пројекције спина у тачкама високе симетрије прве Брилуенове зоне

$$\sigma = \uparrow T=0.2 U=2.0 h=0$$



Слика 16: Имагинарни делови сопствене енергије електрона и гринове функције у првој Брилуеновој зони и облик Фермијеве површи у зависности од допирања при нултом магнетном пољу

$(n) = 0.80 \quad U = 2.0 \quad T = 0.2$



Слика 17: Раздвајање сопствене енергије електрона и делова Фермијеве површи за различите вредности пројекције спина у фреквентном домену дуж границе иредуцибилне компоненте прве Брилуенове зоне

6 Закључак

Испитали смо утицај магнетног поља на проводност и једночестични спектар у Хабардовом моделу, у режиму слабих интеракција. Налазимо да магнетно поље има драстично различит ефекат у случајевима полупопуњене енергетске зоне и коначне допираности. У случају полупопуњености, отпорност је немонотона функција магнетног поља и конвергира ка коначној вредности у лимесу јаког поља. У допираном случају, на температурама које смо посматрали, отпорност је монотono опадајућа функција јачине магнетног поља и тежи нули у лимесу бесконачног поља. Ово опажање је у контрасту са експерименталним мерењима на купратном једињењу Bi2212 из референце [13] где магнетно поље иницијално доводи до повећања отпорности. Ова разлика се може приписати или ефектима јаким интеракција које су у том систему присутне, али и ниској температури, која је у експерименту значајно нижа од температура посматраних у нашем раду.

Од нарочитог интереса нам је била и температурна зависност отпора. Налазимо у свим случајевима да се отпор може добро описати степеном функцијом температуре. Експонент у степеној зависности је јако зависан од магнетног поља и попуњености. На нултом пољу, експонент је близу јединице (линеарна зависност) у околини полупопуњености и у случају великог допирања, док је између ова два случаја експонент близу два. У околини полупопуњености, Фермијев ниво се налази у близини ван Хове сингуларитета у густини стања. Линеарна зависност отпора од температуре коју опажамо у том режиму је у складу са резултатима прошлогodiшње студије [25] и представља одступање од понашања конвенционалне Фермијеве течности. На температурама које посматрамо, међутим, слабљење квадратне зависности се очекује и само услед термалних флукуација. Наши нумерички резултати не могу дати коначан одговор у вези са понашањем у лимесу ниских температура. С друге стране, налазимо симетрију у понашању између јако допираног случаја у нултом пољу, и полупопуњеног случаја у јаком пољу. Ова симетрија се опажа у нумеричким резултатима, а може се показати и аналитички. Из аналитичког прорачуна може се закључити да у овим режимима отпорност прилази линеарној зависности са смањењем температуре и повећањем допирања, односно магнетног поља, а такво понашање се назире и из нумеричких резултата.

У даљем раду, потребно је испитати зависност резултата од контролних нумеричких параметара (величина решетке, резолуција енергије) и утврдити понашање на ниским температурама. За ово ће такође бити потребно испитати зависност учестаности расејања од параметара модела, те употребити поједностављења у прорачуну отпорности које произлазе из високе кохеренције електрона на Фермијевој површи на ниским температурама.

У току истраживања су добијени аналитички резултати Фуријеове трансформације Лорановог реда о којима је било речи у поглављу 3 и додацима 7.4 и 7.5, али су из ових резултата добијене и релације између Стирлингових бројева прве и друге врсте (додатак 7.8 и 7.10), као и дискретна трансформација која их генерише (додатак 7.9). Имајући у виду комбинаторички смисао Стирлингових бројева, ови резултати могу имати даљу примену у комбинаторици и теорији вероватноће.

7 Додаци

7.1 Хабардов атом у магнетном пољу

Хамилтонијан атома је састављен од три члана: хемијског потенцијала, електрон-електрон интеракције и интеракције са спољашњим пољем:

$$\hat{H} = -\mu \sum_{\sigma} a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma} + U a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\uparrow} a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\downarrow} + h \sum_{\sigma} (-1)^{\delta_{\sigma, \uparrow}} a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma} \quad (7.1.1)$$

Матрични облик хамилтонијана у базису $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ и $|\uparrow\downarrow\rangle$ је:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mu + h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mu - h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\mu + U \end{bmatrix} \quad (7.1.2)$$

Партициона функција је:

$$Z = \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right) = 1 + 2e^{\mu\beta} \text{ch}(h\beta) + e^{(2\mu-U)\beta} \quad (7.1.3)$$

Оператори креације и анхилације у матричном облику су:

$$\begin{aligned} a_{\uparrow}^{\dagger} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} & a_{\downarrow}^{\dagger} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ a_{\uparrow} &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & a_{\downarrow} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (7.1.4)$$

Двотачкаста Гринова функција је:

$$G_{\sigma}(\tau) = -\frac{1}{Z} \left(e^{\tau(\mu+h_{\sigma})} + e^{\beta(\mu-h_{\sigma})+\tau(\mu+h_{\sigma}-U)} \right) \quad (7.1.5)$$

Окупираност $\langle n_{\sigma} \rangle$ једнака вредности гринове функције тренутку $\tau = 0_{-}$:

$$\langle n_{\sigma} \rangle = \frac{1}{Z} \left(e^{\beta(\mu+h_{\sigma})} + e^{\beta(2\mu-U)} \right) \quad (7.1.6)$$

Двострука окупираност је једнака:

$$\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle = \frac{1}{Z} e^{\beta(2\mu-U)} \quad (7.1.7)$$

Гринова функција у фреквентном домену је представљена амплитудом која стоји уз Дираков чешаљ. Из једначине (7.1.5) се интеграцијом добија:

$$G_{\sigma}(i\omega) = \int_0^{\beta} e^{i\omega\tau} G_{\sigma}(\tau) d\tau = \frac{1 + e^{\beta(\mu+h_{\sigma})}}{Z(i\omega + \mu + h_{\sigma})} + \frac{e^{\beta(\mu-h_{\sigma})} + e^{\beta(2\mu-U)}}{Z(i\omega + \mu + h_{\sigma} - U)} \quad (7.1.8)$$

Такође се резултат може записати и преко окупираности:

$$G_\sigma(i\omega) = \frac{1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{i\omega + \mu + h_\sigma} + \frac{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{i\omega + \mu + h_\sigma - U} \quad (7.1.9)$$

Аналитичко продужење на реалну осу се добија заменом $i\omega$ са ω . Притом је важно водити рачуна о томе да пол Гринево функције буде са одговарајуће стране реалне осе како би добили ретардовану или адвансирану Гринуову функцију. Ретардована функција је:

$$G_\sigma(\omega) = \frac{1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega + i\varepsilon + \mu + h_\sigma} + \frac{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega + i\varepsilon + \mu + h_\sigma - U} \quad (7.1.10)$$

У неинтерагујућем случају се израз поједностављује:

$$G_\sigma^{(0)}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu + h_\sigma} \quad (7.1.11)$$

Помоћу ових функција можемо да одредимо сопствену енергију електрона:

$$\Sigma_\sigma(i\omega) = (G_\sigma^{(0)})^{-1}(i\omega) - G_\sigma^{-1}(i\omega) \quad (7.1.12)$$

$$\Sigma_\sigma(i\omega) = i\omega + \mu + h_\sigma - \frac{(i\omega + \mu + h_\sigma - U)(i\omega + \mu + h_\sigma)}{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle (i\omega + \mu + h_\sigma) + (1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle)(i\omega + \mu + h_\sigma - U)} \quad (7.1.13)$$

У случају нултог магнетног поља, функције не зависе од спина и свде се на:

$$G(\tau) = -\frac{1}{Z} (e^{\tau\mu} + e^{\beta\mu + \tau(\mu - U)}) \quad (7.1.14)$$

$$\langle n_\uparrow \rangle = \langle n_\downarrow \rangle = \frac{1}{Z} (e^{\beta\mu} + e^{\beta(2\mu - U)}) \quad (7.1.15)$$

$$G(i\omega) = \frac{1 - \langle n \rangle}{i\omega + \mu} + \frac{\langle n \rangle}{i\omega + \mu - U} \quad (7.1.16)$$

$$G(\omega) = \frac{1 - \langle n \rangle}{\omega + i\varepsilon + \mu} + \frac{\langle n \rangle}{\omega + i\varepsilon + \mu - U} \quad (7.1.17)$$

$$G^{(0)}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu} \quad (7.1.18)$$

$$\Sigma(i\omega) = \mu + i\omega - \frac{i\omega + (\mu - U)(i\omega + \mu)}{\langle n \rangle (i\omega + \mu) + (1 - \langle n \rangle)(i\omega + \mu - U)} \quad (7.1.19)$$

Специјално у случају када је $\mu = \frac{U}{2}$:

$$Z = 2 \left(1 + e^{\frac{\beta U}{2}} \right) \quad (7.1.20)$$

$$G(\tau) = -\frac{1}{Z} \left(e^{\frac{U\tau}{2}} + e^{\frac{(\beta - \tau)U}{2}} \right) \quad (7.1.21)$$

$$\langle n_\uparrow \rangle = \langle n_\downarrow \rangle = \frac{1}{2} \quad (7.1.22)$$

$$G(i\omega) = \frac{1}{2i\omega + U} + \frac{1}{2i\omega - U} \quad (7.1.23)$$

$$G(\omega) = \frac{1}{2\omega + i\varepsilon + U} + \frac{1}{2\omega + i\varepsilon - U} \quad (7.1.24)$$

$$G^{(0)}(i\omega) = \frac{1}{i\omega} \quad (7.1.25)$$

$$\Sigma(i\omega) = \frac{U}{2} + \frac{U^2}{4i\omega} \quad (7.1.26)$$

7.2 Проводност

Циљ нам је да добијемо Кубоову формулу за проводност. Она је резултат читавог низа апроксимација и претпоставки, чији је коначан циљ добијање израза облика:

$$\vec{j}(q) = \sigma(q) \vec{E}(q) \quad (7.2.1)$$

У овом запису подразумевамо да је q таласни четворовектор $q = (\nu, \vec{q})^T$ и да је производ четворовектора са метриком простора Минковског $g = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$. Користимо и Ајнштајнову сумациону конвенцију по поновљеним индексима. \vec{E} и \vec{j} су вектори електричног поља и густине струје, а σ је проводност. Састављањем једначине континуитета из Шредингерове једначине добијамо израз за густину струје. Једначина континуитета и Шредингерова једначина су:

$$\partial_\mu j^\mu(x) = 0 \quad (7.2.2)$$

$$\psi^*(x) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \psi^*(x) \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - e \vec{A}(x) \right)^2 \psi(x) + e\phi(x) \psi^*(x) \psi(x) \quad (7.2.3)$$

ψ је таласна функција. Координата x је такође четворовектор, $x = (t, \vec{x})^T$ док су \vec{A} и ϕ векторски и скаларни потенцијал, односно просторни и временски део четворовектора потенцијала спољашњег ЕМ поља. Четворовектор густине струје у једначини (7.2.2) је $j = (\rho, \vec{j})^T$ и једнак је производу четворовектора густине струје вероватноће и елементарног наелектрисања e . Множењем једначине (7.2.3) разликом јединичног и оператора комплексне коњугације, добија се једначина континуитета из које је лако прочитати струју:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(x) \psi(x) = i\hbar \nabla \cdot \left(\frac{i\hbar}{2m} (\psi^*(x) \nabla \psi(x) - \psi(x) \nabla \psi^*(x)) + \frac{e}{m} \vec{A}(x) \psi^*(x) \psi(x) \right) \quad (7.2.4)$$

$$\vec{j}(x) = -\frac{i\hbar e}{2m} (\psi^*(x) \nabla \psi(x) - \psi(x) \nabla \psi^*(x)) - \frac{e^2}{m} \vec{A}(x) \psi^*(x) \psi(x) \quad (7.2.5)$$

$$\vec{j}(x) = \vec{j}_0(x) - \frac{e^2}{m} \vec{A}(x) \rho(x) \quad (7.2.6)$$

Видимо да се струја састоји од два сабирка, први је парамагнетни, а други дијамагнетни. Сада усредњимо једначину (7.2.6) по ансамблу:

$$\langle \vec{j}(x) \rangle = \langle \vec{j}_0(x) \rangle - \frac{ne^2}{m} \vec{A}(x) \quad (7.2.7)$$

Сматраћемо да је систем у режиму линеарног одзива. Део струје који већ није линеаран по спољашњем потенцијалу је у том случају:

$$\langle \vec{j}_0(x) \rangle = \langle \vec{j}_0(x) \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(x_0 - x'_0) \langle [\vec{j}_0(x), H_{int}(x'_0)] \rangle dx'_0 \quad (7.2.8)$$

Пошто сматрамо да не постоји перманентна струја без присуства спољашњег потенцијала, први сабирак изједначавамо с нулом. Густина интеракционог Хамилтонијана је:

$$\mathcal{H}_{int}(x) = j_\mu(x) A^\mu(x) \quad (7.2.9)$$

Наредна апроксимација је та да се H_{int} састоји само од скаларног производа $\vec{j}_0(x) \cdot \vec{A}(x)$. То је еквивалентно тврђењу да је скаларни потенцијал константа, па као такав не утиче на динамику система већ само помера спектар енергија.

$$H_{int}(x_0) = - \int \vec{j}_0(x) \cdot \vec{A}(x) d^3x_i \quad (7.2.10)$$

$$\langle \vec{j}_0(x) \rangle = \frac{i}{\hbar} \int \theta(x_0 - x'_0) \langle [\vec{j}_0(x), j_{0i}(x')] \rangle A_i(x') d^4x' \quad (7.2.11)$$

Разумна претпоставка је да нам је систем који посматрамо инваријантан на просторне и временске транслације, тако да језгро интеграције зависи само од разлике координата x и x' . Овај закључак имплицира да и Фуријеова трансформација језгра зависи од само једног таласног вектора:

$$\begin{aligned} \langle [\vec{j}_0(q), j_{0i}(q')] \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^4} \iint \theta(x_0 - x'_0) e^{-i(qx+q'x')} \langle [\vec{j}_0(x), j_{0i}(x')] \rangle d^4x d^4x' \\ &= \frac{1}{(2\pi)^4} \iint \theta(y_0) e^{-i(qy+(q+q')x')} \langle [\vec{j}_0(y), j_{0i}(0)] \rangle d^4y d^4x' \\ &= \int \theta(y_0) e^{-iqy} \langle [\vec{j}_0(y), j_{0i}(0)] \rangle d^4y \delta(q' + q) \\ &= \langle [\vec{j}_0(q), j_{0i}(-q)] \rangle \delta(q + q') \end{aligned} \quad (7.2.12)$$

У експоненту Фуријеове трансформације смо под qx подразумевали $q_\mu x^\mu$ ради једноставнијег записа. Једначина (7.2.11) је у реципрчном простору дата изразом:

$$\begin{aligned} \langle \vec{j}_0(q) \rangle &= \frac{i}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^4} \iiint \langle [\vec{j}_0(q), j_{0i}(q')] \rangle e^{ix(q'+q'')} A_i(q'') d^4x d^4q' d^4q'' \\ &= \frac{i}{\hbar} \iint \langle [\vec{j}_0(q), j_{0i}(q')] \rangle \delta(q' + q'') A_i(q'') d^4q' d^4q'' \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \langle [\vec{j}_0(q), j_{0i}(q')] \rangle A_i(-q') d^4q' \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle [\vec{j}_0(q), j_{0i}(-q)] \rangle A_i(q) \end{aligned} \quad (7.2.13)$$

У околини $q = 0$ једначина (7.2.13) постаје:

$$\begin{aligned} \langle \vec{j}_0(0) \rangle &= \lim_{q \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \langle [\vec{j}_0(q), j_{0i}(-q)] \rangle A_i(0) \\ &= - \lim_{q \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \langle [j_{0i}(-q), \vec{j}_0(q)] \rangle A_i(0) = - \frac{i \hbar e^2}{\hbar} n \vec{A}(0) = \frac{ne^2}{m} \vec{A}(0) \end{aligned} \quad (7.2.14)$$

Последица апроксимације да је скаларни потенцијал спољашњег поља константан је да електрично потиче само од негативног извода векторског потенцијала по времену:

$$\vec{E}(x) = - \frac{\partial}{\partial x_0} \vec{A}(x) - \nabla \phi(x) = - \frac{\partial}{\partial x_0} \vec{A}(x) \implies \vec{E}(\nu, \vec{q}) = i\nu \vec{A}(\nu, \vec{q}) \quad (7.2.15)$$

То значи да у Кулоновој калибрацији имамо само трансферзалну компоненту струје. Кубоова формула за проводност је у том случају:

$$\langle j_i(\nu, \vec{q}) \rangle = \frac{\frac{i}{\hbar} \langle [j_{0j}(-\epsilon), j_{0i}(\epsilon)] \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle [j_{0j}(-\nu, -\vec{q}), j_{0i}(\nu, \vec{q})] \rangle}{i\nu} E_j(\nu, \vec{q}) \quad (7.2.16)$$

При преласку на имагинарну осу, $i \langle [A, B] \rangle$ прелази у $\langle T(A, B) \rangle$. Временско уређење се из овог израза може изоставити јер се при супротном уређењу добија резултат нула, а сами оператори струја међусобно комутирају јер су састављени од производа парног броја креационих или анхилационих оператора. Због тога на имагинарној оси једначина (7.2.16) изгледа:

$$\langle j_i(i\nu, \vec{q}) \rangle = \frac{\langle j_{0i}(\epsilon) j_{0j}(-\epsilon) \rangle - \langle j_{0i}(i\nu, \vec{q}) j_{0j}(-i\nu, -\vec{q}) \rangle}{\hbar\nu} E_j(i\nu, \vec{q}) \quad (7.2.17)$$

Ради поједностављења записа, увешћемо посебну ознаку за корелацију две струје:

$$\Lambda_{ij}(i\nu, \vec{q}) = \langle j_{0i}(i\nu, \vec{q}) j_{0j}(-i\nu, -\vec{q}) \rangle \quad (7.2.18)$$

Сада је проводност:

$$\sigma_{ij}(i\nu, \vec{q}) = \frac{\Lambda_{ij}(0) - \Lambda_{ij}(i\nu, \vec{q})}{\hbar\nu} \quad (7.2.19)$$

Желимо да израчунамо проводност у Хабардовом моделу. Због тога је потребно да одредимо струју у том моделу. На квадратној решетки се оператор струје може записати преко креационих и анхилационих оператора:

$$\vec{j}_0(t, \vec{n}) = ie \frac{t}{a^2 \hbar} \sum_{\sigma} \left(c_{\sigma, \vec{n}}^{\dagger} c_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}} - c_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}}^{\dagger} c_{\sigma, \vec{n}} \right) \vec{e} \quad (7.2.20)$$

Сада рачунамо корелациону функцију између две струје на имагинарној оси. Касније ћемо тај резултат аналитички продужити на реалну осу.

$$\begin{aligned} \Lambda_{ij}(i\nu, \vec{q}) &= -\frac{e^2 t^2}{a^4 \hbar^2} \sum_{\sigma, \sigma', \vec{n}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{n}} \int_0^{\beta} e^{i\nu\tau} \\ &\left\langle \left(c_{\sigma, \vec{n}}^{\dagger}(\tau) c_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i}(\tau) - c_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i}^{\dagger}(\tau) c_{\sigma, \vec{n}}(\tau) \right) \left(c_{\sigma', \vec{0}}^{\dagger}(0) c_{\sigma', \vec{0} - \vec{e}_j}(0) - c_{\sigma', \vec{0} - \vec{e}_j}^{\dagger}(0) c_{\sigma', \vec{0}}(0) \right) \right\rangle d\tau \end{aligned} \quad (7.2.21)$$

Рачунаћемо само неповезани део корелације:

$$\begin{aligned} \Lambda_{ij}^d(i\nu, \vec{q}) &= -\frac{e^2 t^2}{a^4 \hbar^2} \sum_{\sigma, \sigma', \vec{n}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{n}} \int_0^{\beta} e^{i\nu\tau} \\ &\left(\left\langle \left(c_{\sigma, \vec{n}}^{\dagger}(\tau) c_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i}(\tau) - c_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i}^{\dagger}(\tau) c_{\sigma, \vec{n}}(\tau) \right) \right\rangle \left\langle \left(c_{\sigma', \vec{0}}^{\dagger}(0) c_{\sigma', \vec{0} - \vec{e}_j}(0) - c_{\sigma', \vec{0} - \vec{e}_j}^{\dagger}(0) c_{\sigma', \vec{0}}(0) \right) \right\rangle \right. \\ &- \left\langle c_{\sigma, \vec{n}}^{\dagger}(\tau) c_{\sigma', \vec{0} - \vec{e}_j}(0) \right\rangle \left\langle c_{\sigma', \vec{0}}^{\dagger}(0) c_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i}(\tau) \right\rangle - \left\langle c_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i}^{\dagger}(\tau) c_{\sigma', \vec{0}}(0) \right\rangle \left\langle c_{\sigma', \vec{0} - \vec{e}_j}^{\dagger}(0) c_{\sigma, \vec{n}}(\tau) \right\rangle \\ &+ \left. \left\langle c_{\sigma, \vec{n}}^{\dagger}(\tau) c_{\sigma', \vec{0}}(0) \right\rangle \left\langle c_{\sigma', \vec{0} - \vec{e}_j}^{\dagger}(0) c_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i}(\tau) \right\rangle + \left\langle c_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i}^{\dagger}(\tau) c_{\sigma', \vec{0} - \vec{e}_j}(0) \right\rangle \left\langle c_{\sigma', \vec{0}}^{\dagger}(0) c_{\sigma, \vec{n}}(\tau) \right\rangle \right) d\tau \end{aligned} \quad (7.2.22)$$

Усредњавањем добијамо Гринове функције:

$$\begin{aligned}
\Lambda_{ij}^d(i\nu, \vec{q}) &= -\frac{e^2 t^2}{a^4 \hbar^2} \sum_{\sigma, \sigma', \vec{n}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{n}} \int_0^\beta e^{i\nu\tau} \\
&\quad \left((G_{\sigma, -\vec{e}_i}(0^-) - G_{\sigma, \vec{e}_i}(0^-)) (G_{\sigma', -\vec{e}_j}(0^-) - G_{\sigma', \vec{e}_j}(0^-)) \right. \\
&\quad - G_{\sigma, -\vec{n} - \vec{e}_j}(-\tau) G_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i}(\tau) \delta_{\sigma, \sigma'} - G_{\sigma, -\vec{n} + \vec{e}_i}(-\tau) G_{\sigma, \vec{n} + \vec{e}_j}(\tau) \delta_{\sigma, \sigma'} \\
&\quad \left. G_{\sigma, -\vec{n}}(-\tau) G_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i + \vec{e}_j}(\tau) \delta_{\sigma, \sigma'} + G_{\sigma, -\vec{n} + \vec{e}_i - \vec{e}_j}(-\tau) G_{\sigma, \vec{n}}(\tau) \delta_{\sigma, \sigma'} \right) d\tau
\end{aligned} \tag{7.2.23}$$

Пошто је добијена Гринова функција за непертурбован систем, она има симетрију просторне инверзије. Користећи ту симетрију добијамо да је први сабирак једнак нули.

$$\begin{aligned}
\Lambda_{ij}^d(i\nu, \vec{q}) &= -\frac{e^2 t^2}{a^4 \hbar^2} \sum_{\sigma, \vec{n}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{n}} \int_0^\beta e^{i\nu\tau} \\
&\quad \left(-G_{\sigma, -\vec{n} - \vec{e}_j}(-\tau) G_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i}(\tau) - G_{\sigma, -\vec{n} + \vec{e}_i}(-\tau) G_{\sigma, \vec{n} + \vec{e}_j}(\tau) \right. \\
&\quad \left. + G_{\sigma, -\vec{n}}(-\tau) G_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i + \vec{e}_j}(\tau) + G_{\sigma, -\vec{n} + \vec{e}_i - \vec{e}_j}(-\tau) G_{\sigma, \vec{n}}(\tau) \right) d\tau
\end{aligned} \tag{7.2.24}$$

У следећем кораку ћемо трансформацију производа по времену претворити у конволуцију по фреквенцама:

$$\begin{aligned}
\Lambda_{ij}^d(i\nu, \vec{q}) &= -\frac{e^2 t^2}{a^4 \hbar^2 \beta} \sum_{\sigma, \vec{n}, \omega} e^{i\vec{q} \cdot \vec{n}} \\
&\quad \left(-G_{\sigma, -\vec{n} - \vec{e}_j}(i\omega) G_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i}(i\nu + i\omega) - G_{\sigma, -\vec{n} + \vec{e}_i}(i\omega) G_{\sigma, \vec{n} + \vec{e}_j}(i\omega + i\nu) \right. \\
&\quad \left. + G_{\sigma, -\vec{n}}(i\omega) G_{\sigma, \vec{n} - \vec{e}_i + \vec{e}_j}(i\omega + i\nu) + G_{\sigma, -\vec{n} + \vec{e}_i - \vec{e}_j}(i\omega) G_{\sigma, \vec{n}}(i\nu + i\omega) \right)
\end{aligned} \tag{7.2.25}$$

Померањем индекса по ком се сумира у лево или у десно за један и заменом трансформације производа по координати конволуцијом по таласном вектору добијамо поједностављен израз:

$$\begin{aligned}
\Lambda_{ij}^d(i\nu, \vec{k}) &= -\frac{e^2 t^2}{a \hbar^2 \beta N_{\vec{q}}} \sum_{\sigma, \vec{k}, \omega} e^{i\vec{q} \cdot \vec{n}} \\
&\quad \left(-G_{\sigma, \vec{k}}(i\omega) G_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}(i\nu + i\omega) e^{i\vec{q} \cdot \vec{e}_i + i\vec{k} \cdot (\vec{e}_i + \vec{e}_j)} - G_{\sigma, \vec{k}}(i\omega) G_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}(i\omega + i\nu) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{e}_j - i\vec{k} \cdot (\vec{e}_i + \vec{e}_j)} \right. \\
&\quad \left. + G_{\sigma, \vec{k}}(i\omega) G_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}(i\omega + i\nu) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{e}_i - \vec{e}_j) + i\vec{k} \cdot (\vec{e}_i - \vec{e}_j)} + G_{\sigma, \vec{k}}(i\omega) G_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}(i\nu + i\omega) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{e}_i - \vec{e}_j)} \right) \\
&= \frac{e^2 t^2}{\hbar^2 \beta N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}, \omega} G_{\sigma, \vec{k}}(i\omega) G_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}(i\nu + i\omega) \\
&\quad \left(e^{i\vec{q} \cdot \vec{e}_i + i\vec{k} \cdot (\vec{e}_i + \vec{e}_j)} + e^{-i\vec{q} \cdot \vec{e}_j - i\vec{k} \cdot (\vec{e}_i + \vec{e}_j)} - e^{i\vec{q} \cdot (\vec{e}_i - \vec{e}_j) + i\vec{k} \cdot (\vec{e}_i - \vec{e}_j)} - e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{e}_i - \vec{e}_j)} \right)
\end{aligned} \tag{7.2.26}$$

Сређивањем дела израза у загради добијамо:

$$\begin{aligned}
S_{ij}(\vec{q}, \vec{k}) &= \left(e^{i\vec{q}\cdot\vec{e}_i+i\vec{k}\cdot(\vec{e}_i+\vec{e}_j)} + e^{-i\vec{q}\cdot\vec{e}_j-i\vec{k}\cdot(\vec{e}_i+\vec{e}_j)} - e^{i\vec{q}\cdot(\vec{e}_i-\vec{e}_j)+i\vec{k}\cdot(\vec{e}_i-\vec{e}_j)} - e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{e}_i-\vec{e}_j)} \right) \\
&= e^{i\frac{q_i-q_j}{2}} \left(e^{i\frac{q_i+q_j}{2}+i(k_i+k_j)} + e^{-i\frac{q_i+q_j}{2}-i(k_i+k_j)} - e^{i\frac{q_i-q_j}{2}+i(k_i-k_j)} - e^{-i\frac{q_i-q_j}{2}-i(k_i-k_j)} \right) \\
&= e^{i\frac{q_i-q_j}{2}} \left(e^{i\frac{q_i}{2}+ik_i} - e^{-i\frac{q_i}{2}-ik_i} \right) \left(e^{i\frac{q_j}{2}+ik_j} - e^{-i\frac{q_j}{2}-ik_j} \right) \\
&= -4e^{i\frac{q_i-q_j}{2}} \sin\left(\frac{q_i}{2} + k_i\right) \sin\left(\frac{q_j}{2} + k_j\right)
\end{aligned} \tag{7.2.27}$$

Овиме смо одредили корелацију струја на имагинарној оси:

$$\Lambda_{ij}^d(i\nu, \vec{q}) = \frac{e^2 t^2}{a\hbar^2 \beta N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}, \omega} G_{\sigma, \vec{k}}(i\omega) G_{\sigma, \vec{k}+\vec{q}}(i\nu + i\omega) S_{ij}(\vec{q}, \vec{k}) \tag{7.2.28}$$

Продужење на реалну осу добијамо применом Крамерс-Крониг релације:

$$\begin{aligned}
\Lambda_{ij}^d(i\nu, \vec{q}) &= \frac{e^2 t^2}{a\pi^2 \hbar^2 \beta N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}, \omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi') \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}+\vec{q}}(\xi)}{i\omega - \xi'} \frac{1}{i\omega + i\nu - \xi} S_{ij}(\vec{q}, \vec{k}) d\xi d\xi' \\
&= \frac{e^2 t^2}{a\pi^2 \hbar^2 N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}} S_{ij}(\vec{q}, \vec{k}) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi') \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}+\vec{q}}(\xi) \frac{n_f(\xi) - n_f(\xi')}{\xi - \xi' - i\nu} d\xi d\xi'
\end{aligned} \tag{7.2.29}$$

$$\begin{aligned}
\Lambda_{ij}^d(\nu, \vec{q}) &= \frac{e^2 t^2}{a\pi^2 \hbar^2 N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}} S_{ij}(\vec{q}, \vec{k}) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi') \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}+\vec{q}}(\xi) \frac{n_f(\xi) - n_f(\xi')}{\xi - \xi' - \nu} d\xi d\xi' \\
&= \frac{e^2 t^2}{a\pi^2 \hbar^2 N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}} S_{ij}(\vec{q}, \vec{k}) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}+\vec{q}}(\xi + \nu) \frac{n_f(\xi + \nu) - n_f(\xi')}{\xi - \xi'} d\xi \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi') d\xi' \\
&+ i \frac{e^2 t^2}{a\pi \hbar^2 N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}} S_{ij}(\vec{q}, \vec{k}) \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}+\vec{q}}(\xi + \nu) (n_f(\xi + \nu) - n_f(\xi)) d\xi \\
&= \frac{e^2 t^2}{a\pi^2 \hbar^2 N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}} S_{ij}(\vec{q}, \vec{k}) D_{\sigma}(\vec{q}, \vec{k}, \nu)
\end{aligned} \tag{7.2.30}$$

У случају проводности за једносмерну струју, $\nu=0$ и $\vec{q}=0$, па једначина (7.2.19) на реалној оси постаје извод по фреквенцији:

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \sigma_{ij}^d(\nu, \vec{0}) = \frac{1}{i\hbar} \lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{\partial \Lambda_{ij}^d(\nu, \vec{0})}{\partial \nu} = \frac{e^2 t^2}{ia\pi^2 \hbar^3 N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}} S_{ij}(\vec{0}, \vec{k}) \lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{\partial D_{\sigma}(\vec{0}, \vec{k}, \nu)}{\partial \nu} \tag{7.2.31}$$

$$S_{ij}(\vec{0}, \vec{k}) = -4 \sin(k_i) \sin(k_j) \tag{7.2.32}$$

$$\begin{aligned}
& \lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{\partial D_\sigma(\vec{0}, \vec{k}, \nu)}{\partial \nu} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi')}{\xi - \xi'} d\xi' \frac{\partial n_f(\xi)}{\partial \xi} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) d\xi \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi') (n_f(\xi) - n_f(\xi'))}{\xi - \xi'} d\xi' \frac{\partial \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi)}{\partial \xi} d\xi \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi')}{\xi - \xi'} d\xi' \frac{\partial n_f(\xi)}{\partial \xi} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) d\xi \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi') \left(\frac{\partial n_f(\xi')}{\partial \xi'} - \frac{\partial n_f(\xi)}{\partial \xi} \right)}{\xi - \xi'} d\xi' \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) d\xi \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi')}{\xi - \xi'} \frac{\partial n_f(\xi')}{\partial \xi'} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) d\xi d\xi' = \pi \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) \frac{\partial n_f(\xi)}{\partial \xi} G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) d\xi
\end{aligned} \tag{7.2.33}$$

Из једначине (7.2.30) видимо да је реални део корелације између струја одређен интегралом:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k} + \vec{q}}(\xi + \nu) \frac{n_f(\xi + \nu) - n_f(\xi')}{\xi - \xi'} d\xi \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi') d\xi' \tag{7.2.34}$$

Када је $\vec{q} = 0$, интеграл постаје парна функција фреквенције ν :

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi - \nu) \frac{n_f(\xi - \nu) - n_f(\xi')}{\xi - \xi'} d\xi \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi') d\xi' \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) \frac{n_f(\xi) - n_f(\xi')}{\xi - \xi' + \nu} d\xi \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi') d\xi' \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) \frac{n_f(\xi) - n_f(\xi' + \nu)}{\xi - \xi'} d\xi \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi' + \nu) d\xi' \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi' + \nu) \frac{n_f(\xi' + \nu) - n_f(\xi)}{\xi' - \xi} d\xi' \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) d\xi \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi + \nu) \frac{n_f(\xi + \nu) - n_f(\xi')}{\xi - \xi'} d\xi \text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi') d\xi'
\end{aligned} \tag{7.2.35}$$

Због тога је извод реалног дела корелационе функције у тачки $\nu = 0$ једнак нули, па је на основу једначине (7.2.31) имагинарни део проводности за једносмерну струју једнак нули. Проводност за једносмерну струју је:

$$\sigma_{ij}^d(\nu = 0) = -\frac{4e^2 t^2}{a\pi \hbar^3 N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}} \sin(k_i) \sin(k_j) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\text{Im } G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) \right)^2 \frac{\partial n_f(\xi)}{\partial \xi} d\xi \tag{7.2.36}$$

Холова проводност ($i \neq j$) за једносмерну струју је због C_{4v} симетрије Брилуенове зоне једнака нули, јер је $\text{Im } G_{\sigma, (k_i, k_j)} = \text{Im } G_{\sigma, (k_i, 2\pi - k_j)}$, а $\sin(k_i) \sin(k_j) = -\sin(k_i) \sin(2\pi - k_j)$,

па се сви сабирци у суми у једначини (7.2.36) међусобно потиру.

У дводимензионалним системима се може дефинисати проводност по квадрату. Ово је проводност танког филма која не зависи од његове величине, већ само од односа ширине и дужине, односно са колико се квадрата чија је ивица једнака ширини филма може прекрити филм. Ову величину добијамо множењем специфичне проводности дебљином филма која је у претходном случају једнака кораку решетке a :

$$\sigma_{ii}^{\text{DC}} = -\frac{4e^2t^2}{\pi\hbar^3N_{\vec{k}}} \sum_{\sigma, \vec{k}} \sin^2(k_i) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\text{Im} G_{\sigma, \vec{k}}(\xi) \right)^2 \frac{\partial n_f(\xi)}{\partial \xi} d\xi \quad (7.2.37)$$

7.3 Дискретна Фуријеова трансформација

Мотивација за увођење дискретне Фуријеове трансформације јесте дискретизација функција при нумеричким израчунавањима. Периодичност Гринево функције узрокује да њен спектар буде дискретан, додатно, дискретизација саме функције ће изазвати да спектар постане периодичан са периодом броја дискретних тачака. У континуалном лимесу, период спектра тежи бесконачности. Очекивано је да ће се спектри дискретизоване и оригиналне функције поклапати на малим фреквенцијама, а повећањем броја тачака је то поклапање све боље и на већим учестаностима. Ако је број тачака довољно велики да основни период обухвати по модулу све половине Гринево функције, онда се у близини границе основног периода функција може апроксимирати коначним бројем сабирака Лорановог реда негативног експонента на најудаљенијој области конвергенције ка бесконачности. Прво ћемо размотрити дискретну трансформацију из временског у фреквентни домен. Корак дискретизације ће бити $\beta/2M$. На интервалу основног периода 2β ћемо функцију дискретизовати са $2M$ тачака.

$$A_k = \frac{2\beta}{2M} \sum_{n=0}^{2M-1} a_n e^{2\pi i \frac{nk}{2M}} = \frac{\beta}{M} \sum_{n=0}^{2M-1} a_n e^{\pi i \frac{nk}{M}} \quad (7.3.1)$$

У колико је на основном периоду функција периодична са периодом β , коефицијенти непарног индекса k ће бити једнаки нули:

$$a_n = a_{n+M} \implies A_k = \frac{\beta}{M} \sum_{n=0}^{M-1} a_n \left(e^{\pi i \frac{nk}{M}} + e^{\pi i \frac{(n+M)k}{M}} \right) = \frac{\beta}{M} \sum_{n=0}^{M-1} a_n e^{\pi i \frac{nk}{M}} (1 + e^{\pi i k}) \quad (7.3.2)$$

$$A_{2k'} = \frac{2\beta}{M} \sum_{n=0}^{M-1} a_n e^{2\pi i \frac{nk'}{M}} \quad (7.3.3)$$

Ово значи да имамо дупло мањи број тачака у фреквентном домену од полазног. Можемо приметити да важи:

$$A_{-2k'} = \frac{2\beta}{M} \sum_{n=0}^{M-1} a_n e^{-2\pi i \frac{nk'}{M}} = A_{2k'}^* \quad (7.3.4)$$

Ако је функција антипериодична на основном периоду са периодом β , онда ће коефицијенти парног индекса бити једнаки нули. Осим овог, важе и аналогни закључци:

$$a_n = -a_{n+M} \implies A_k = \frac{\beta}{M} \sum_{n=0}^{M-1} a_n \left(e^{\pi i \frac{nk}{M}} - e^{\pi i \frac{(n+M)k}{M}} \right) = \frac{\beta}{M} \sum_{n=0}^{M-1} a_n e^{\pi i \frac{nk}{M}} (1 - e^{\pi i k}) \quad (7.3.5)$$

$$A_{2k'+1} = \frac{2\beta}{M} \sum_{n=0}^{M-1} a_n e^{\pi i \frac{n(2k'+1)}{M}} \quad (7.3.6)$$

$$A_{-2k'-1} = \frac{2\beta}{M} \sum_{n=0}^{M-1} a_n e^{-\pi i \frac{n(2k'+1)}{M}} = A_{2k'+1}^* \quad (7.3.7)$$

Инверзна трансформација је у општем случају са основним периодом 2β :

$$a_n = \frac{1}{2\beta} \sum_{k=0}^{2M-1} A_k e^{-2\pi i \frac{nk}{2M}} = \frac{1}{2\beta} \sum_{k=0}^{2M-1} A_k e^{-\pi i \frac{nk}{M}} \quad (7.3.8)$$

Ово се лако може показати:

$$a_n = \frac{1}{2\beta} \sum_{k=0}^{2M-1} A_k e^{-\pi i \frac{nk}{M}} = \frac{1}{2\beta} \sum_{k=0}^{2M-1} \frac{\beta}{M} \sum_{n'=0}^{2M-1} a_{n'} e^{\pi i \frac{n'k}{M}} e^{-\pi i \frac{nk}{M}} = \frac{1}{2M} \sum_{n'=0}^{2M-1} a_{n'} \sum_{k=0}^{2M-1} e^{\pi i \frac{k(n-n')}{M}} \quad (7.3.9)$$

Применом методе за сумацију геометријског реда добијамо да важи:

$$\sum_{k=0}^{2M-1} e^{\pi i \frac{k(n-n')}{M}} = \frac{1 - e^{2\pi i(n-n')}}{1 - e^{\pi i \frac{n-n'}{M}}} \quad (7.3.10)$$

Овај израз је једнак нули у целобројним тачкама изузев када је $n - n'$ једнак цело број пута $2M$, што је у случају када су n и n' ненегативни цели бројеви мањи од $2M$ испуњено само ако је $n = n'$. Тада развојем у ред по $n - n'$ до линеарног члана добијамо да је вредност израза:

$$\lim_{n-n' \rightarrow 0} \frac{1 - e^{2\pi i(n-n')}}{1 - e^{\pi i \frac{n-n'}{M}}} = \frac{2\pi i(n-n')}{\pi i \frac{n-n'}{M}} = 2M \quad (7.3.11)$$

Коначно закључујемо да је:

$$\sum_{k=0}^{2M-1} e^{\pi i \frac{k(n-n')}{M}} = 2M \delta_{n,n'} \quad (7.3.12)$$

Овиме смо показали да је инверзна трансформација добро дефинисана, јер је:

$$\frac{1}{2M} \sum_{n'=0}^{2M-1} a_{n'} \sum_{k=0}^{2M-1} e^{\pi i \frac{k(n-n')}{M}} = \sum_{n'=0}^{2M-1} a_{n'} \delta_{n,n'} = a_n \quad (7.3.13)$$

У континуалном случају је инверзна трансформација добијена на исти начин, коришћењем периодичности и пуштањем лимеса да M тежи бесконачности:

$$a(\tau) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{2\beta} \sum_{k=-M}^{M-1} A_k e^{-2\pi i \frac{k\tau}{\beta}} = \frac{1}{2\beta} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} A_k e^{-i\omega_k \tau} \quad (7.3.14)$$

Да нисмо искористили услов периодичности и поставили нулту фреквенцију између M зависних граница, након лимеса би коњуговани сабирци остали неурачунати јер лимес нарушава периодичност спектра. У случају када на основном периоду постоји додатна периодичност или антипериодичност, инверзна трансформација ће и даље бити иста, али ће моћи да се запише у компактнијој форми. Користећи ту периодичност или антипериодичност можемо да дефинишемо директну трансформацију на интервалу од 0 до β , а функцију ћемо дискретизовати са M тачака. Тада је директна трансформација:

$$A_k = \int_0^\beta a(\tau) e^{i\omega_k \tau} d\tau \quad (7.3.15)$$

$$A_k = \frac{\beta}{M} \sum_{n=0}^{M-1} a_n e^{i\omega_k \frac{n\beta}{M}} \quad (7.3.16)$$

Водећи рачуна о томе да су фреквенције ω_k бозонске или фермионске у зависности од перионичности или антипериодичности.

$$\omega_k = \frac{2k\pi}{\beta} \quad (7.3.17)$$

$$\omega_k = \frac{(2k+1)\pi}{\beta} \quad (7.3.18)$$

Инверзна трансформација је тада:

$$a(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} A_k e^{-i\omega_k \tau} \quad (7.3.19)$$

$$a_n = \frac{1}{\beta} \sum_{k=0}^{M-1} A_k e^{-i\omega_k \frac{n\beta}{M}} \quad (7.3.20)$$

Апроксимацију функције у фреквентном домену Лорановим редом вршимо тако што реални део описујемо парним, а имагинарни непарним експонентима $i\omega$. На основу вредности A_k у левој околини $M/2$ решимо два система N и R једначина пребројаних са $n \in \{0, \dots, N-1\}$ и $r \in \{0, \dots, R-1\}$, али тако да је R једнако N или $N+1$, јер не желимо да прескочимо неки од степена у развоју:

$$\sum_{j=1}^N C_{2j}(\omega_{k+n}^{-2j}) = \text{Re } A_{k+n} \quad (7.3.21)$$

$$\sum_{j=1}^{R-1} C_{2j-1}^I(\omega_{k+r}^{-2j+1}) = \text{Im } A_{k+r} \quad (7.3.22)$$

Решење ова два система једначина даје асимптотско понашање у бесконачности у фреквентном домену.

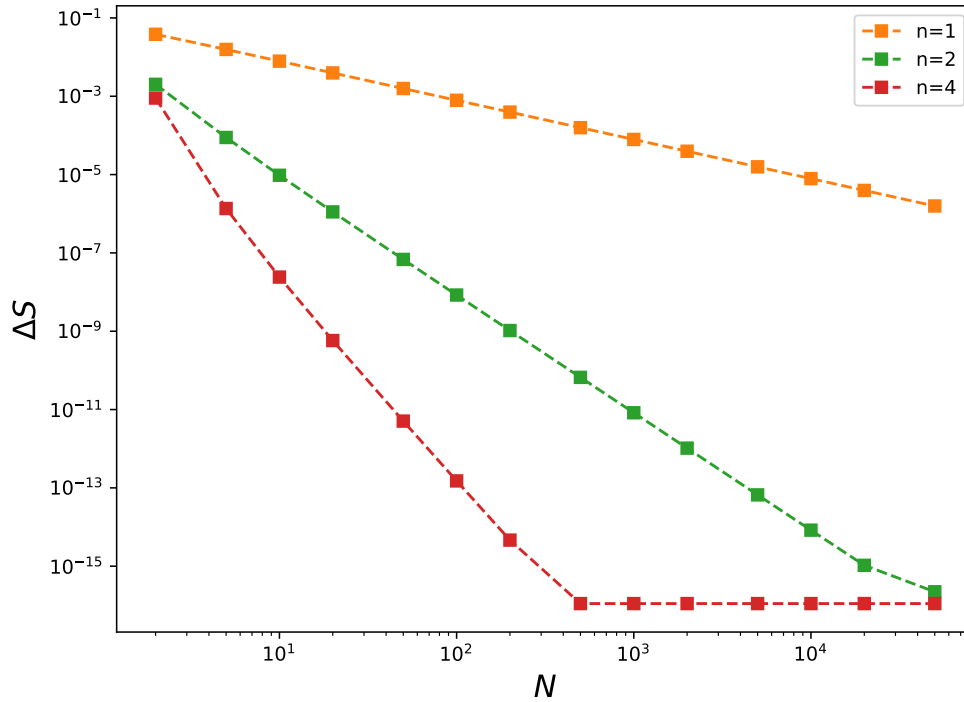
$$S(i\omega) = \sum_{j=1}^{N+R} \frac{C_j}{(i\omega)^j} \quad (7.3.23)$$

Инверзна трансформација коју ћемо користити ће због тога бити:

$$a_n = \frac{1}{\beta} \sum_{k=0}^{M-1} (A_k - S(i\omega_k)) e^{-i\omega_k \frac{n\beta}{M}} + \frac{1}{\beta} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} S(i\omega_k) e^{-i\omega_k \frac{n\beta}{M}} \quad (7.3.24)$$

Први сабирак је коначна сума и њу није тешко одредити, међутим, други сабирак треба аналитички израчунати. Због тога је битно да одредимо инверзну трансформацију појединачног сабирка:

$$S_j(\tau) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(i\omega_k)^j} e^{-i\omega_k \tau} \quad (7.3.25)$$



Слика 18: Брзина конвергенције дискретне Фуријеове трансформације при апроксимацији Лорановим редом различитих негативних степена

Осим што је асимптотско понашање могуће реконструисати на основу система једначина (7.3.21) и (7.3.22) и аналитички трансформисати, овим поступком је значајно убрзана конвергенција прве суме у једначини (7.3.24). На слици 18 је приказана брзина конвергенције дискретне Фуријеове трансформације величине S за различит негативан степен n Лорановог реда којим се апроксимира асимптотско понашање.

7.4 Фуријеова трансформација Лорановог реда

Посматрамо општи члан Лорановог реда негативног степена и тражимо његову инверзну дискретну Фуријеову трансформацију:

$$F(A, \beta, \xi, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)^A} \quad (7.4.1)$$

Пошто је разломак сабирак из Лорановог реда, знамо да је A природан број. Због тога ћемо га записати преко вишеструког интеграла:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)^A} = \frac{1}{\beta} e^{-\xi \tau} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{\xi \tau - i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)^A} = \frac{1}{\beta} e^{-\xi \tau} (-1)^A \underbrace{\int \dots \int_{-\infty}^{\tau_i}}_A \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{\xi \tau - i\omega_n \tau} d^A \tau \quad (7.4.2)$$

Посматрана функција је аналитичка по променљивој ξ у целој комплексној равни, међутим, у поступку се ограничавамо полураван позитивног реалног дела, а потом добијени резултат аналитички продужавамо на целу комплексну раван. У зависности од типа честице, фреквенције су парне или непарне. Уводимо нови параметар η који узима вредности $+1$ за парне (бозонске) и -1 за непарне (фермионске) фреквенције. Због тога можемо да запишемо експоненцијални део на следећи начин:

$$e^{\xi \tau - i\omega_n \tau} = \frac{1}{2} e^{\xi \tau} \left((1 - \eta) e^{-\frac{i\pi \tau}{\beta}} + (1 + \eta) \right) e^{-\frac{2\pi i n}{\beta} \tau} \quad (7.4.3)$$

Убацавањем израза натраг у претходну једначину, остаје да одредимо суму:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\pi i n}{\beta} \tau} = \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\frac{2\pi i n}{\beta} \tau} + \sum_{n=0}^{+\infty} e^{\frac{2\pi i n}{\beta} \tau} - 1 \quad (7.4.4)$$

Да би смо обезбедили конвергенцију сваке суме, експоненту ћемо додати мали негативан реалан део $-\epsilon$:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\pi i}{\beta} \tau} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\sum_{n=0}^{+\infty} \left(e^{-\epsilon - \frac{2\pi i}{\beta} \tau} \right)^n + \sum_{n=0}^{+\infty} \left(e^{-\epsilon + \frac{2\pi i}{\beta} \tau} \right)^n - 1 \right) \quad (7.4.5)$$

Применом методе сумације геометријског реда, вредност суме је једнака лимесу:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\pi i}{\beta} \tau} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{1 - e^{-\epsilon - \frac{2\pi i}{\beta} \tau}} + \frac{1}{1 - e^{-\epsilon + \frac{2\pi i}{\beta} \tau}} - 1 \right) \quad (7.4.6)$$

Посматрањем израза можемо издвојити две ситуације. Прву, када није $\tau = n\beta$ и другу, када ово јесте испуњено. У првој ситуацији је решење лимеса тривијално:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{1 - e^{-\epsilon - \frac{2\pi i}{\beta} \tau}} + \frac{1}{1 - e^{-\epsilon + \frac{2\pi i}{\beta} \tau}} - 1 \right) = \frac{e^{\frac{\pi i}{\beta} \tau}}{e^{\frac{\pi i}{\beta} \tau} - e^{-\frac{\pi i}{\beta} \tau}} + \frac{e^{-\frac{\pi i}{\beta} \tau}}{e^{-\frac{\pi i}{\beta} \tau} - e^{\frac{\pi i}{\beta} \tau}} - 1 = 0 \quad (7.4.7)$$

У другој ситуацији вредност лimesа тежи плус бесконачности:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{1 - e^{-\epsilon}} + \frac{1}{1 - e^{-\epsilon}} - 1 \right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1 + e^{-\epsilon}}{1 - e^{-\epsilon}} \rightarrow +\infty \quad (7.4.8)$$

Сада проверавамо интеграбилност ове бесконачности. У колико је интеграбилна, лimes се може представити Дираковим чешљем. Интеграбилност проверавамо у самој околини сингуларитета, па се подинтегрална функција може развити у ред. Границе интеграције су од $-\delta$ до δ , при чему водимо рачуна да је околина довољно велика да лimes по ϵ конвергира. То значи да количник ϵ/δ тежи нули.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\delta}^{\delta} \left(\frac{1}{1 - e^{-\epsilon - \frac{2\pi i}{\beta} \tau}} + \frac{1}{1 - e^{-\epsilon + \frac{2\pi i}{\beta} \tau}} - 1 \right) d\tau = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\delta}^{\delta} \left(\frac{1}{\epsilon + \frac{2\pi i}{\beta} \tau} + \frac{1}{\epsilon - \frac{2\pi i}{\beta} \tau} \right) d\tau - 2\delta \quad (7.4.9)$$

Након додатног лimesа да је δ мала околина сингуларитета остаје само први интеграл. Увођењем смене $x = \frac{2\pi \tau}{\beta \epsilon}$, подинтегрална функција престаје да зависи од ϵ , док границе одлазе у бесконачност:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\delta}^{\delta} \left(\frac{1}{\epsilon + \frac{2\pi i}{\beta} \tau} + \frac{1}{\epsilon - \frac{2\pi i}{\beta} \tau} \right) d\tau = \frac{\beta}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{1 + x^2} dx = \beta \quad (7.4.10)$$

Коначно закључујемо да сума конвергира у смислу расподеле ка Дираковом чешљу:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\pi i n}{\beta} \tau} = \beta \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(\tau - n\beta) \quad (7.4.11)$$

Сада се враћамо у полазну једначину:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)^A} = e^{-\xi \tau} (-1)^A \underbrace{\int \dots \int_{-\infty}^{\tau_i}}_A \frac{e^{\xi \tau} \left((1 - \eta) e^{-\frac{i\pi \tau}{\beta}} + (1 + \eta) \right)}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(\tau - n\beta) d^A \tau \quad (7.4.12)$$

Решавањем једног интеграла по τ , добијамо:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)^A} = e^{-\xi \tau} (-1)^A \underbrace{\int \dots \int_{-\infty}^{\tau_i}}_{A-1} \sum_{n=-\infty}^{\left[\frac{\tau_i}{\beta} \right]} e^{n\xi\beta} \frac{\left((1 - \eta) e^{-i\pi n} + (1 + \eta) \right)}{2} d^{A-1} \tau \quad (7.4.13)$$

У даљем раду користићемо ознаку $[a]$ за цео део броја a и ознаку $\{a\}$ за разлику $a - [a]$. Вредност разломка под интегралом се може поједноставити у зависности од вредности параметра η . Ако је $\eta = 1$ разломак је једнак јединици, у супротном је вредност разломка минус један за непарне и један за парне сабирке суме. Ово се може записати и као η^n :

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)^A} = e^{-\xi \tau} (-1)^A \underbrace{\int \dots \int_{-\infty}^{\tau_i}}_{A-1} \sum_{n=-\infty}^{\left[\frac{\tau_i}{\beta} \right]} (\eta e^{\xi\beta})^n d^{A-1} \tau \quad (7.4.14)$$

Добијена сума се рачуна методом сумације геометријског реда:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)^A} = e^{-\xi \tau} (-1)^A \underbrace{\int \dots \int_{-\infty}^{\tau_i}}_{A-1} \frac{(\eta e^{\xi \beta})^{\lceil \frac{\tau_i}{\beta} \rceil}}{1 - \eta e^{-\xi \beta}} d^{A-1} \tau \quad (7.4.15)$$

Зарад боље прегледности, коначан резултат ћемо записати у другачијој форми:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)^A} = e^{\xi(\beta - \tau)} \frac{1}{e^{\xi \beta} - \eta} (-1)^A \underbrace{\int \dots \int_{-\infty}^{\tau_i}}_{A-1} (\eta e^{\xi \beta})^{\lceil \frac{\tau_i}{\beta} \rceil} d^{A-1} \tau \quad (7.4.16)$$

Решићемо првих неколико вредности A :

$A = 1$:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)} = -e^{\xi \beta (1 - \{\frac{\tau}{\beta}\})} \frac{1}{e^{\xi \beta} - \eta} \eta^{\lceil \frac{\tau}{\beta} \rceil} \quad (7.4.17)$$

$A = 2$:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)^2} = e^{\xi \beta (1 - \{\frac{\tau}{\beta}\})} \frac{\beta}{e^{\xi \beta} - \eta} \eta^{\lceil \frac{\tau}{\beta} \rceil} \left(\frac{\eta}{e^{\xi \beta} - \eta} + \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\} \right) \quad (7.4.18)$$

Примећујемо да се општи облик инверзне трансформације може записати као:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)^A} = -e^{\xi \beta (1 - \{\frac{\tau}{\beta}\})} \frac{1}{e^{\xi \beta} - \eta} \eta^{\lceil \frac{\tau}{\beta} \rceil} (-\beta)^{A-1} P_{A-1}^{\xi \beta, \eta} \left(\left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\} \right) \quad (7.4.19)$$

Где је $P_{A-1}^{\xi \beta, \eta}$ полином $A - 1$ степена. Овај полином рачунамо рекурзивно. Решавањем k -тог интеграла у претходној дефиницији добија се једначина облика:

$$\underbrace{\int \dots \int_{-\infty}^{\tau_i}}_{A-1-k} (\eta e^{\xi \beta})^{\lceil \frac{\tau_k}{\beta} \rceil} P_k^{\xi \beta, \eta} \left(\left\{ \frac{\tau_k}{\beta} \right\} \right) d^{A-1-k} \tau = \underbrace{\int \dots \int_{-\infty}^{\tau_i}}_{A-2-k} (\eta e^{\xi \beta})^{\lceil \frac{\tau_{k+1}}{\beta} \rceil} P_{k+1}^{\xi \beta, \eta} \left(\left\{ \frac{\tau_{k+1}}{\beta} \right\} \right) d^{A-2-k} \tau \quad (7.4.20)$$

Пошто је полином коначног степена, представићемо га коначном сумом и одредићемо рекурентне релације његових коефицијената. Пошто су $\xi \beta$ и η константе током нашег рачунања, нећемо оптерећивати ознаку полинома њима, па је:

$$P_k(x) = \sum_{n=0}^k A_n^k x^n \quad (7.4.21)$$

Решавањем једначине (7.4.20) добијамо везу између полинома k -тог и $k + 1$ степена:

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\int \dots \int_{-\infty}^{\tau_i}}_{A-1-k} (\eta e^{\xi\beta})^{\left[\frac{\tau_k}{\beta}\right]} \sum_{n=0}^k A_n^k \left\{ \frac{\tau_k}{\beta} \right\}^n d^{A-1-k} \tau \\
&= \underbrace{\int \dots \int_{-\infty}^{\tau_i}}_{A-2-k} (\eta e^{\xi\beta})^{\left[\frac{\tau_{k+1}}{\beta}\right]} \sum_{n=0}^k \frac{A_n^k}{n+1} \left(\left\{ \frac{\tau_{k+1}}{\beta} \right\}^{n+1} + \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} \right) d^{A-2-k} \tau \\
&= \underbrace{\int \dots \int_{-\infty}^{\tau_i}}_{A-2-k} (\eta e^{\xi\beta})^{\left[\frac{\tau_{k+1}}{\beta}\right]} \sum_{n=0}^{k+1} A_n^{k+1} \left\{ \frac{\tau_{k+1}}{\beta} \right\}^n d^{A-2-k} \tau \tag{7.4.22}
\end{aligned}$$

Из претходног израза видимо да важе следеће рекурентне релације:

$$A_{n+1}^{k+1} = \frac{A_n^k}{n+1} \tag{7.4.23}$$

$$A_0^{k+1} = \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} \sum_{n=0}^k \frac{A_n^k}{n+1} + \delta_{k+1,0} \tag{7.4.24}$$

Решење једначине (7.4.23) је једноставно. Њеним враћањем у једначину (7.4.24) добија се:

$$A_n^k = \frac{A_0^{k-n}}{n!} \tag{7.4.25}$$

$$A_0^k = \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} \sum_{n=1}^k \frac{A_0^{k-n}}{n!} + \delta_{k,0} = \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} \sum_{n=0}^{k-1} \frac{A_0^n}{(k-n)!} + \delta_{k,0} \tag{7.4.26}$$

Видимо да је проблем одредити коефицијенте A_0^k . Приликом нумеричких израчунавања коришћена је рекурентна процедура за њихово одређивање заснована управо на једначинама (7.4.25) и (7.4.26). За аналитичо израчунавање је потребно решити једначину (7.4.26). Применићемо \mathcal{Z} трансформацију чија је област конвергенције у околини нуле:

$$X(z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_0^n z^n \tag{7.4.27}$$

$$A_0^n = \frac{1}{2\pi i} \oint_{z \rightarrow 0} \frac{X(z)}{z^{n+1}} dz = \frac{1}{n!} \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\partial^n}{\partial z^n} X(z) \tag{7.4.28}$$

Трансформација једначине (7.4.26) нам даје:

$$\begin{aligned}
X(z) &= \sum_{k=-\infty}^{+\infty} A_0^k z^k = \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{k-1} \frac{A_0^n}{(k-n)!} z^k + \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \delta_{k,0} z^k \\
&= \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} \sum_{k=1}^{+\infty} \sum_{n=0}^{k-1} \frac{A_0^n}{(k-n)!} z^k + 1 \\
&= \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} \sum_{k=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^k \frac{A_0^{n-1}}{(k-n+1)!} z^k + 1 \\
&= \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} \sum_{n=1}^{+\infty} A_0^{n-1} \sum_{k=n}^{+\infty} \frac{z^k}{(k-n+1)!} + 1 \\
&= \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} \sum_{n=1}^{+\infty} A_0^{n-1} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{z^{k+n}}{(k+1)!} + 1 \\
&= \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} \sum_{n=1}^{+\infty} A_0^{n-1} z^{n-1} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{z^{k+1}}{(k+1)!} + 1 \\
&= \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} \sum_{n=1}^{+\infty} A_0^{n-1} z^{n-1} (e^z - 1) + 1 \\
&= \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} (e^z - 1) \sum_{n=0}^{+\infty} A_0^n z^n + 1
\end{aligned} \tag{7.4.29}$$

Пошто је за негативне вредности индекса n коефицијент једнак нули, онда важи:

$$\sum_{n=0}^{+\infty} A_0^n z^n = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_0^n z^n = X(z) \tag{7.4.30}$$

Када ово уврстимо у једначину (7.4.29) добијамо чему је једака трансформација:

$$X(z) = \frac{\eta}{e^{\xi\beta} - \eta} (e^z - 1) X(z) + 1 \tag{7.4.31}$$

$$X(z) = \frac{e^{\xi\beta} - \eta}{e^{\xi\beta} - \eta e^z} \tag{7.4.32}$$

На крају добијамо коефицијенте изражене диференцијалном једначином у околини нуле:

$$A_0^k = \frac{1}{k!} \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\partial^k}{\partial z^k} \frac{e^{\xi\beta} - \eta}{e^{\xi\beta} - \eta e^z} \tag{7.4.33}$$

Диференцирањем разломка добијамо сабирке који су облика:

$$C_n^k \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - e^z} \right)^{n+1} e^{nz} \tag{7.4.34}$$

Овде је лимес $z \rightarrow 0$ добро дефинисан, па закључујемо да се коефицијент може записати у облику:

$$A_0^k = \delta_{k,0} + \frac{1}{k!} \sum_{n=1}^k C_n^k \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^n \quad (7.4.35)$$

Дакле коефицијент A_0^k је полином k -тог степена по $(\eta e^{\xi\beta} - 1)^{-1}$. Из једначине (7.4.33) је једноставно уочити да је $C_1^k = 1$. На основу исте те једначине је поново могуће саставити рекурентне релације:

$$\sum_{n=1}^{k+1} C_n^{k+1} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^n = \sum_{n=1}^k n C_n^k \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^n + \sum_{n=1}^k (n+1) C_n^k \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{n+1} \quad (7.4.36)$$

Закључујемо да је тражена рекурентна релација:

$$C_n^k = n (C_n^{k-1} + C_{n-1}^{k-1}) + \delta_{k,1} \delta_{n,1} \quad (7.4.37)$$

На основу ове једначине је направљена рекурзивна процедура која рачуна коефицијенте у ситуацијама у којима је било потребе за одређивањем развоја у ред по концентрацији. За даљи аналитички прорачун, потражићемо \mathcal{Z} трансформацију претходне једначине по оба индекса:

$$S(x, y) = \sum_{k=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^k C_n^k x^n y^k \quad (7.4.38)$$

Уочимо на почетку да је $S(0, y) = 0$. Ово запажање ће бити важно за одређивање граничних услова. \mathcal{Z} трансформација једначине (7.4.37) нам даје:

$$S(x, y) = xy \frac{\partial}{\partial x} S(x, y) + xy S(x, y) + yx^2 \frac{\partial}{\partial x} S(x, y) + xy \quad (7.4.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} S(x, y) + \frac{xy-1}{xy(1+x)} S(x, y) + \frac{1}{1+x} = 0 \quad (7.4.40)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(S(x, y) e^{\int \frac{xy-1}{xy(1+x)} dx} \right) + \frac{1}{1+x} e^{\int \frac{xy-1}{xy(1+x)} dx} = 0 \quad (7.4.41)$$

Границе интеграције у експоненту не утичу на вредност $S(x, y)$ јер делују као множење константом читаве једначине која је хомогена. Међутим, приликом интеграције читаве једначине по x у циљу уклањања извода, доња граница интеграције нам даје почетни услов, а како знамо да важи $S(0, y) = 0$, закључујемо да је доња граница баш 0.

$$S(x, y) = -e^{-\int \frac{xy-1}{xy(1+x)} dx} \int_0^x \frac{e^{\int \frac{x'y-1}{x'y(1+x')} dx'}}{1+x'} dx' \quad (7.4.42)$$

Интеграл у експоненту је једнак:

$$\int \frac{xy-1}{xy(1+x)} dx = \int \left(\frac{1}{1+x} - \frac{1}{y} \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{1+x} \right) \right) dx = \ln(1+x) + \frac{1}{y} \ln \left(\frac{1+x}{x} \right) + c \quad (7.4.43)$$

Заменом у једначину (7.4.42) добијамо:

$$S(x, y) = -\frac{1}{1+x} \left(\frac{x}{1+x} \right)^{\frac{1}{y}} \int_0^x \left(\frac{1+x'}{x'} \right)^{\frac{1}{y}} dx' \quad (7.4.44)$$

Сада решавамо одређени интеграл. Претпоставићемо облик решења без умањења општости и саставити диференцијалну једначину:

$$\int_0^x \left(\frac{1+x'}{x'} \right)^{\frac{1}{y}} dx' = \frac{1}{1-\frac{1}{y}} \int_0^x d \left(x^{1-\frac{1}{y}} (1+x)^{1+\frac{1}{y}} f(x') \right) \quad (7.4.45)$$

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{1}{y} \right) x^{-\frac{1}{y}} (1+x)^{1+\frac{1}{y}} f(x) + x^{1-\frac{1}{y}} \left(1 + \frac{1}{y} \right) (1+x)^{\frac{1}{y}} f(x) \\ + x^{1-\frac{1}{y}} (1+x)^{1+\frac{1}{y}} \frac{\partial}{\partial x} f(x) = x^{-\frac{1}{y}} (1+x)^{\frac{1}{y}} \end{aligned} \quad (7.4.46)$$

$$\left(1 - \frac{1}{y} + 2x \right) f(x) + x(1+x) \frac{\partial}{\partial x} f(x) = 1 \quad (7.4.47)$$

Развићемо ову функцију у ред. Једначина је таква да се поново добија рекурентна једначина:

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \left(\left(1 - \frac{1}{y} \right) c_n + 2c_{n-1} + nc_n + (n-1)c_{n-1} \right) x^n = 1 \quad (7.4.48)$$

$$\left(1 - \frac{1}{y} \right) c_n + 2c_{n-1} + nc_n + (n-1)c_{n-1} = \delta_{n,0} \quad (7.4.49)$$

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{\delta_{n,0}}{n+1-\frac{1}{y}} - \frac{n+1}{n+1+\frac{1}{y}} c_{n-1} (1-\delta_{n,0}) = \\ &= (-1)^n \frac{1^{(n)} 2^{(n)}}{n! \left(2 - \frac{1}{y} \right)^{(n)}} (1-\delta_{n,0}) c_0 + \frac{\delta_{n,0}}{1-\frac{1}{y}} = \frac{1}{1-\frac{1}{y}} (-1)^n \frac{1^{(n)} 2^{(n)}}{n! \left(2 - \frac{1}{y} \right)^{(n)}} \end{aligned} \quad (7.4.50)$$

$$f(x) = -\frac{y}{1-y} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1^{(n)} 2^{(n)}}{n! \left(2 - \frac{1}{y} \right)^{(n)}} (-x)^n = -\frac{y}{1-y} {}_2F_1 \left(1, 2; 2 - \frac{1}{y}; -x \right) \quad (7.4.51)$$

Добили смо развој ${}_2F_1 \left(1, 2; 2 - \frac{1}{y}; -x \right)$ функције. Добијамо да је решење интеграла:

$$\int_0^x \left(\frac{1+x'}{x'} \right)^{\frac{1}{y}} dx' = -\frac{y}{1-y} x^{1-\frac{1}{y}} (1+x)^{1+\frac{1}{y}} {}_2F_1 \left(1, 2; 2 - \frac{1}{y}; -x \right) \quad (7.4.52)$$

Док је вредност \mathcal{Z} трансформације:

$$S(x, y) = \frac{xy}{1-y} {}_2F_1 \left(1, 2; 2 - \frac{1}{y}; -x \right) \quad (7.4.53)$$

Инверзну трансформацију по x је сада лако одредити:

$$S(x, y) = \sum_{n=1}^{+\infty} S_n(y)x^n = \frac{y}{1-y} \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{(1)^{(n)}(2)^{(n)}}{n! \left(2 - \frac{1}{y}\right)^{(n)}} x^{n+1} \quad (7.4.54)$$

$$S_n(y) = (-1)^n \frac{n!}{\left(1 - \frac{1}{y}\right)^{(n)}} = (-1)^n n! \prod_{l=1}^n \left(l - \frac{1}{y}\right)^{-1} = n! y^n \prod_{l=1}^n (1 - ly)^{-1} \quad (7.4.55)$$

Инверзну трансформацију по y рачунамо по дефиницији:

$$C_n^k = \frac{1}{k!} \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\partial^k}{\partial y^k} S_n(y) = \frac{n!}{k!} \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\partial^k}{\partial y^k} y^n \prod_{l=1}^n (1 - ly)^{-1} \quad (7.4.56)$$

Анализом претходног израза видимо да је коефицијент ненулта само у случају када је $k > n$ и то када је y^n издиференцирано до $n!$

$$C_n^k = \frac{n!}{(k-n)!} \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\partial^{k-n}}{\partial y^{k-n}} \prod_{l=1}^n (1 - ly)^{-1} \quad (7.4.57)$$

Да би смо одредили овај извод, претворићемо производ у збир, због тога што је овај производ сума полова првог реда:

$$\prod_{l=1}^n (1 - ly)^{-1} = \sum_{l=1}^n \frac{c_l}{1 - ly} \quad (7.4.58)$$

Коефицијент c_l рачунамо из лимеса:

$$c_l = \lim_{y \rightarrow \frac{1}{l}} (1 - yl) \prod_{m=1}^n (1 - my)^{-1} = \prod_{m=1, m \neq l}^n \frac{l}{l - m} = \frac{l^{n-1} (-1)^{n-l}}{(l-1)! (n-l)!} = \frac{l^n (-1)^{n-l}}{l! (n-l)!} \quad (7.4.59)$$

Враћањем овог резултата у једначину (7.4.57) можемо да одредимо тражени лимес:

$$C_n^k = \frac{n!}{(k-n)!} \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\partial^{k-n}}{\partial y^{k-n}} \sum_{l=1}^n \frac{l^n (-1)^{n-l}}{l! (n-l)!} \frac{1}{1 - ly} = \frac{n!}{(k-n)!} \sum_{l=1}^n \frac{l^n (-1)^{n-l}}{l! (n-l)!} l^{k-n} (k-n)! \quad (7.4.60)$$

$$C_n^k = \sum_{l=1}^n (-1)^{n-l} \binom{n}{l} l^k = \sum_{l=0}^n (-1)^{n-l} \binom{n}{l} l^k = n! \left\{ \begin{matrix} k \\ n \end{matrix} \right\} \quad (7.4.61)$$

Израз $\left\{ \begin{matrix} k \\ n \end{matrix} \right\}$ означава Стирлингов број друге врсте, који је добро дефинисан и у случају када су индекси k или n једнаки нули и то на начин који је у сагласности са почетним условом за коефицијент C_n^k . Аналитички израз за коефицијент A_0^k је:

$$A_0^k = \frac{1}{k!} \sum_{n=0}^k n! \left\{ \begin{matrix} k \\ n \end{matrix} \right\} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi \beta} - 1} \right)^n \quad (7.4.62)$$

Почетни полином P_k се може записати само преко A_0^k коефицијената коришћењем једначине (7.4.25):

$$P_k(x) = \sum_{n=0}^k \frac{A_0^{k-n}}{n!} x^n \quad (7.4.63)$$

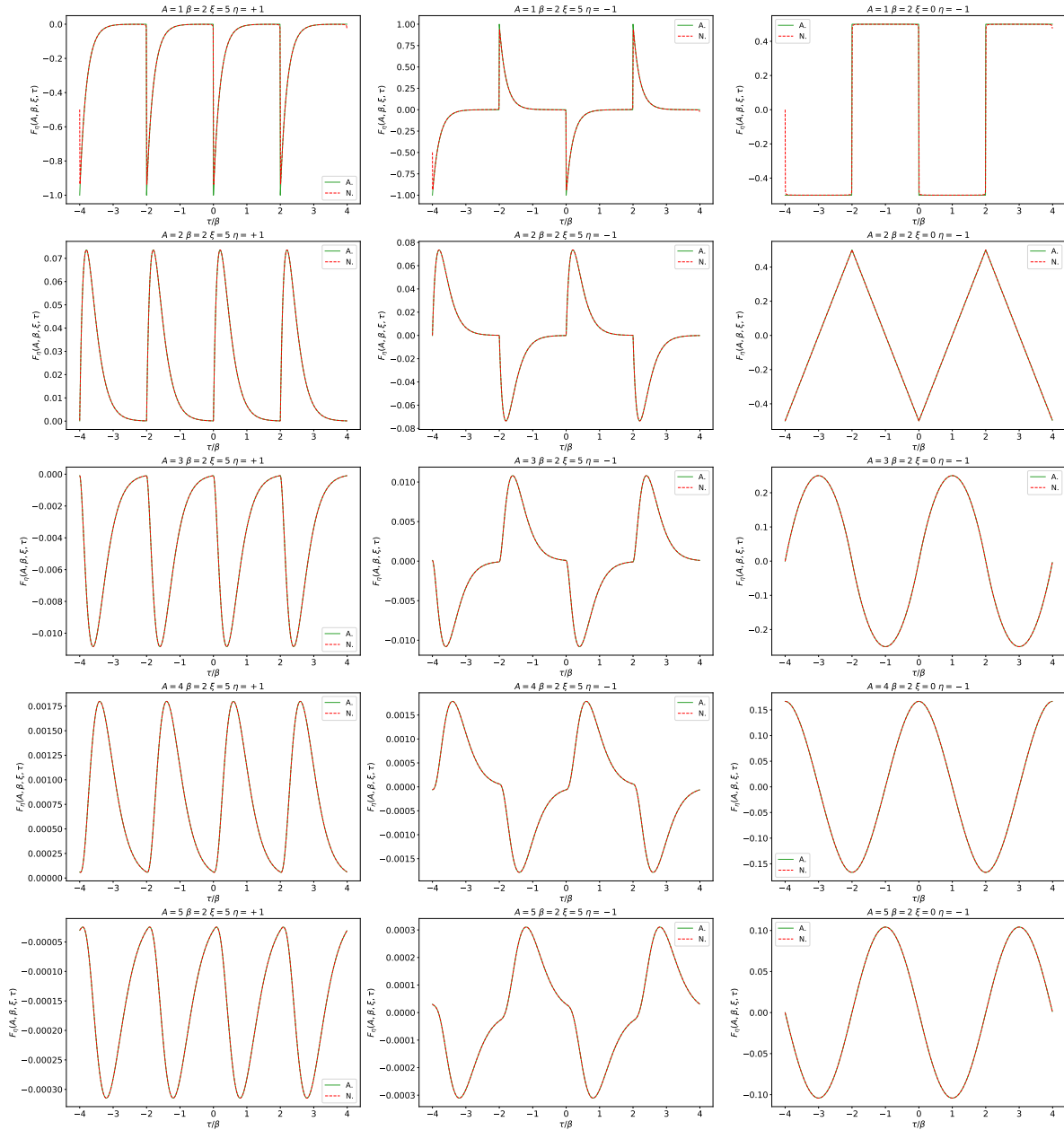
Коначно, обједињавањем израза (7.4.62) и (7.4.63) добијамо тражени полином:

$$P_k^{\xi\beta,\eta}(x) = \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^{k-m} \frac{n!}{(k-m)!m!} \left\{ \begin{matrix} k-m \\ n \end{matrix} \right\} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^n x^m \quad (7.4.64)$$

На крају можемо да запишемо аналитички израз тражене суме из једначине (7.4.1):

$$F_\eta(A, \beta, \xi, \tau) = e^{\xi\beta(1-\{\frac{\tau}{\beta}\})} \eta^{\lceil \frac{\tau}{\beta} \rceil + 1} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \frac{n!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{n+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^m \quad (7.4.65)$$

Добијена функција је аналитичка у целој комплексној равни, па резултат важи за све вредности параметра ξ . На слици 19 су приказане ове функције за вредности експонента $A \in \{1, \dots, 5\}$ и обе вредности параметра η добијене и аналитички (7.4.65) и нумерички узимањем првих хиљаду сабирка у суми (7.4.1) симетрично око нуле.



Слика 19: Фуријеова трансформација првих пет сабирака негативног експонента Лорановог реда за различите вредности параметра

7.5 Биноми развој Фуријеове трансформације Лорановог реда

Уопштавамо функцију F од τ као функцију разлике τ и τ' при чему $\tau, \tau' \in (0, \beta)$. Први посматрани случај:

$$\tau > \tau' \quad (7.5.1)$$

Дефинишемо:

$$n_\eta(\xi) = \frac{1}{e^{\xi\beta} - \eta} \quad (7.5.2)$$

$$\begin{aligned} F_\eta(A, \beta, \xi, \tau - \tau') &= \\ &= -e^{\xi(\beta - \tau + \tau')} \eta (-\beta)^{A-1} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \frac{n!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} (\eta n_\eta(\xi))^{n+1} \left(\frac{\tau - \tau'}{\beta} \right)^m \\ &= -\eta e^{\xi(\beta - \tau + \tau')} (-\beta)^{A-1} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \sum_{k=0}^m \\ &\quad \frac{n!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} (\eta n_\eta(\xi))^{n+1} \frac{(-1)^{m-k}}{\beta^m} \binom{m}{k} \tau^k \tau'^{m-k} \\ &= -\eta e^{\xi(\beta - \tau + \tau')} (-\beta)^{A-1} \sum_{k=0}^{A-1} \sum_{m=k}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \\ &\quad \frac{n!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} (\eta n_\eta(\xi))^{n+1} \frac{(-1)^{m-k}}{\beta^m} \binom{m}{k} \tau^k \tau'^{m-k} \\ &= -\eta e^{\xi(\beta - \tau + \tau')} (-\beta)^{A-1} \sum_{k=0}^{A-1} \sum_{m=0}^{A-k-1} \sum_{n=0}^{A-m-k-1} \\ &\quad \frac{n!}{(A-m-k-1)!(m+k)!} \left\{ \begin{matrix} A-m-k-1 \\ n \end{matrix} \right\} (\eta n_\eta(\xi))^{n+1} \frac{(-1)^m}{\beta^{m+k}} \binom{m+k}{k} \tau^k \tau'^m \end{aligned} \quad (7.5.3)$$

Добили смо коефицијент:

$$C_{A,k,m}^{FWD}(\beta, \xi) = \sum_{n=0}^{A-m-k-1} \frac{n! (-1)^{A+m-1} (\eta n_\eta(\xi))^n \beta^{A-m-k-1}}{(A-m-k-1)!m!k!} \left\{ \begin{matrix} A-m-k-1 \\ n \end{matrix} \right\} \quad (7.5.4)$$

$$F_\eta(A, \beta, \xi, \tau - \tau') = \eta e^{-\xi(\tau - \tau')} n_\eta(-\xi) \sum_{k=0}^{A-1} \sum_{m=0}^{A-k-1} C_{A,k,m}^{FWD}(\beta, \xi) \tau^k \tau'^m \quad (7.5.5)$$

Други посматрани случај:

$$\tau < \tau' \quad (7.5.6)$$

У овом случају користимо особину:

$$\begin{aligned} F_\eta(A, \beta, \xi, -\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega_n \tau}}{(i\omega_n - \xi)^A} = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(-i\omega_n - \xi)^A} \\ &= (-1)^A \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{(i\omega_n + \xi)^A} = (-1)^A F_\eta(A, \beta, -\xi, \tau) \end{aligned} \quad (7.5.7)$$

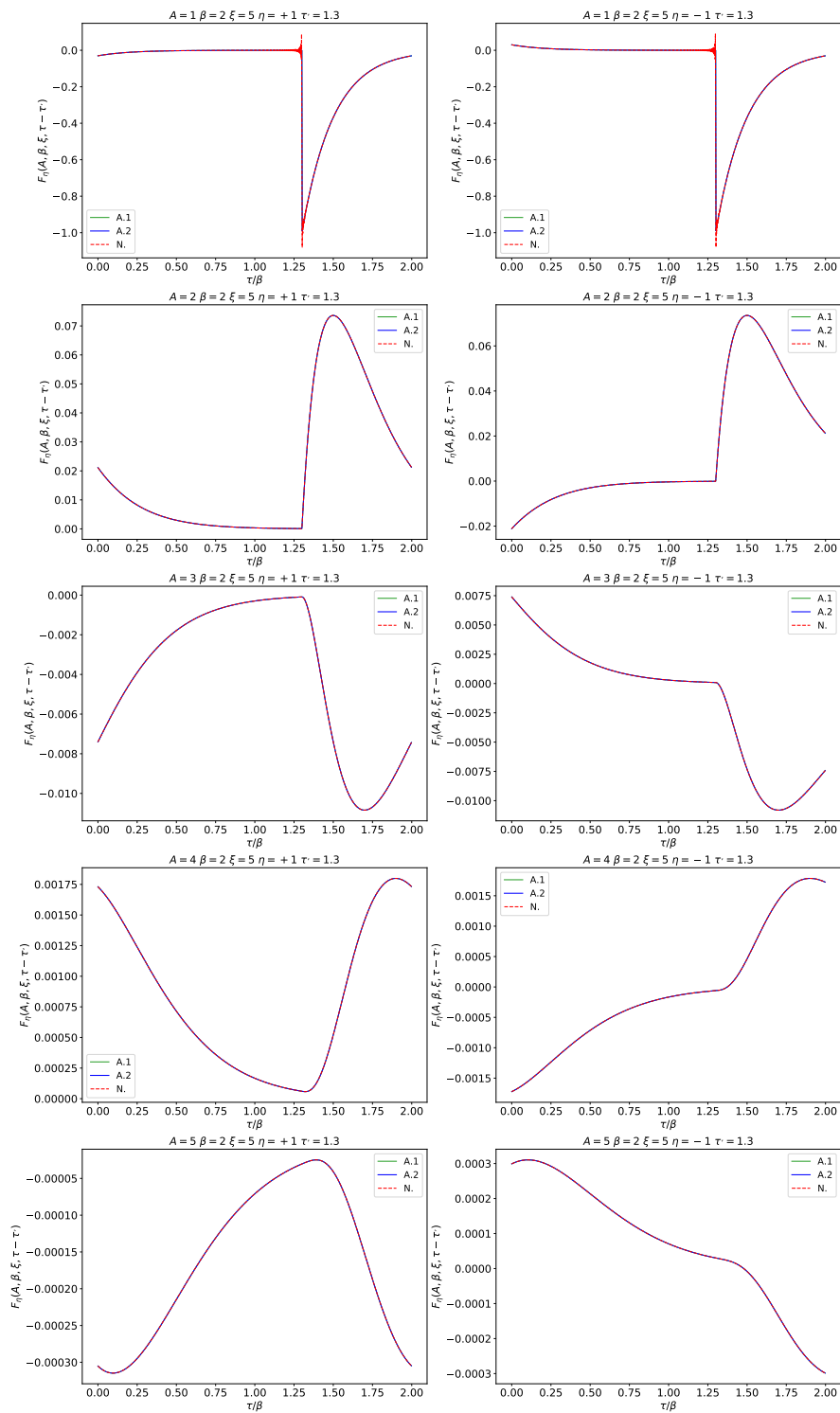
$$\begin{aligned}
F_\eta(A, \beta, \xi, \tau - \tau') &= (-1)^A F_\eta(A, \beta, -\xi, \tau' - \tau) = \\
&= (-1)^A \eta e^{-\xi(\tau - \tau')} n_\eta(\xi) \sum_{k=0}^{A-1} \sum_{m=0}^{A-k-1} C_{A,k,m}^{FWD}(\beta, -\xi) \tau'^k \tau^m \\
&= -\eta e^{-\xi(\tau - \tau')} n_\eta(\xi) \sum_{k=0}^{A-1} \sum_{m=0}^{A-k-1} C_{A,k,m}^{BWD}(\beta, \xi) \tau^k \tau'^m
\end{aligned} \tag{7.5.8}$$

Добили смо коефицијент:

$$\begin{aligned}
C_{A,k,m}^{BWD}(\beta, \xi) &= (-1)^{A-1} C_{A,m,k}^{FWD}(\beta, -\xi) \\
&= \sum_{n=0}^{A-m-k-1} \frac{n! (-1)^k (\eta n_\eta(-\xi))^n \beta^{A-m-k-1}}{(A-m-k-1)! m! k!} \left\{ \begin{matrix} A-m-k-1 \\ n \end{matrix} \right\}
\end{aligned} \tag{7.5.9}$$

$$F_\eta(A, \beta, \xi, \tau - \tau') = -\eta e^{-\xi(\tau - \tau')} n_\eta(\xi) \sum_{k=0}^{A-1} \sum_{m=0}^{A-k-1} C_{A,k,m}^{BWD}(\beta, \xi) \tau^k \tau'^m \tag{7.5.10}$$

На слици 20 су приказане аналитички и нумерички добијене функције F_η . Аналитичка израчунавања су рађена на два начина. Први поступак користи једначине (7.5.5) и (7.5.10), док други користи једначине (7.8.10) и (7.8.18) из додатка 7.8, чиме су индиректно проверени резултати (7.8.20) и (7.8.25) такође из поглавља 7.8.



Слика 20: Фуријеова трансформација првих пет сабирака негативног експонента Лорановог реда за различите вредности параметара

7.6 Стирлингови бројеви прве врсте

Ови бројеви су дефинисани рекурентном релацијом и почетним условима:

$$\begin{bmatrix} k+1 \\ n \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} k \\ n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} k \\ n-1 \end{bmatrix} \quad (7.6.1)$$

$$\begin{bmatrix} k \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ k \end{bmatrix} = \delta_{k,0} \quad (7.6.2)$$

Доказаћемо неколико релевантних особина:

$$\sum_{m=0}^n \begin{bmatrix} n \\ m \end{bmatrix} z^m = \sum_{m=0}^n (n-1) \begin{bmatrix} n-1 \\ m \end{bmatrix} z^m + \sum_{m=0}^n \begin{bmatrix} n-1 \\ m-1 \end{bmatrix} z^m = (z+n-1) \sum_{m=0}^{n-1} \begin{bmatrix} n-1 \\ m-1 \end{bmatrix} z^m = \prod_{i=0}^{n-1} (z+i) \quad (7.6.3)$$

Уводимо дефиницију растућег факторијала:

$$\prod_{i=0}^{n-1} (z+i) = z^{\bar{n}} \quad (7.6.4)$$

Одредићемо генератрису ових бројева:

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} \begin{bmatrix} n \\ m \end{bmatrix} x^m \frac{z^n}{n!} &= \sum_{n=0}^{+\infty} x^{\bar{n}} \frac{z^n}{n!} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\Gamma(x+n)}{\Gamma(x)\Gamma(n+1)} z^n = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\Gamma(1-x)}{\Gamma(1-x-n)\Gamma(n+1)} (-z)^n \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} \binom{-x}{n} (-z)^n = \frac{1}{(1-z)^x} = e^{-x \ln(1-z)} = \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{(-\ln(1-z))^m}{m!} x^m \end{aligned} \quad (7.6.5)$$

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \begin{bmatrix} n \\ m \end{bmatrix} \frac{z^n}{n!} = \frac{(-\ln(1-z))^m}{m!} \quad (7.6.6)$$

Показаћемо како се ови бројеви трансформишу деловањем биномне трансформације на доњи индекс:

$$\begin{aligned} \sum_{p=k}^n \begin{bmatrix} n \\ p \end{bmatrix} \binom{p}{k} &= \lim_{x \rightarrow 1} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k}{\partial x^k} \sum_{p=0}^n \begin{bmatrix} n \\ p \end{bmatrix} x^p = \frac{1}{k!} \lim_{x \rightarrow 1} \frac{\partial^k}{\partial x^k} \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\partial^n}{\partial z^n} \sum_{p=0}^n \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{z^m}{m!} \begin{bmatrix} m \\ p \end{bmatrix} x^p \\ &= \frac{1}{k!} \lim_{x \rightarrow 1} \frac{\partial^k}{\partial x^k} \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\partial^n}{\partial z^n} \frac{1}{(1-z)^x} = \frac{1}{k!} \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\partial^n}{\partial z^n} \frac{(-\ln(1-z))^k}{1-z} \\ &= \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\partial^{n+1}}{\partial z^{n+1}} \frac{(-\ln(1-z))^{k+1}}{(k+1)!} = \begin{bmatrix} n+1 \\ k+1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (7.6.7)$$

Пошто је биномна трансформација сама себи инверзна, онда важи:

$$\sum_{p=k}^n \begin{bmatrix} n+1 \\ p+1 \end{bmatrix} \binom{p}{k} (-1)^{k-p} = \begin{bmatrix} n \\ k \end{bmatrix} \quad (7.6.8)$$

7.7 Стирлингови бројеви друге врсте

Доказаћемо неколико особина Стирлингових бројева друге врсте:

$$\left\{ \begin{matrix} n \\ k \end{matrix} \right\} = \frac{1}{k!} \sum_{l=0}^k (-1)^{k-l} \binom{k}{l} l^n = \frac{1}{k!} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n} \sum_{l=0}^k (-1)^{k-l} \binom{k}{l} e^{\alpha l} = \frac{1}{k!} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n} (e^\alpha - 1)^k \quad (7.7.1)$$

У случају када је n мање од k резултат тражења извода је производ полинома n -тог степена по e^α и $(e^\alpha - 1)^{k-n}$:

$$\left\{ \begin{matrix} n \\ k \end{matrix} \right\} = \frac{1}{k!} \lim_{\alpha \rightarrow 0} P_n(e^\alpha) (e^\alpha - 1)^{k-n} = \frac{1}{k!} P_n(1) \lim_{\alpha \rightarrow 0} (e^\alpha - 1)^{k-n} = 0 \quad (7.7.2)$$

Рекурентна релација коју задовољавају стирлингови бројеви друге врсте је слична рекурентној релацији Стирлингових бројева прве врсте:

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{matrix} n+1 \\ k \end{matrix} \right\} &= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{k!} \frac{\partial^{n+1}}{\partial x^{n+1}} (e^x - 1)^k = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{k!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} k e^x (e^x - 1)^{k-1} \\ &= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{k!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} k (e^x - 1)^k + \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{(k-1)!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} (e^x - 1)^{k-1} \\ &= k \left\{ \begin{matrix} n \\ k \end{matrix} \right\} + \left\{ \begin{matrix} n \\ k-1 \end{matrix} \right\} \end{aligned} \quad (7.7.3)$$

Видимо и да се једноставном заменом:

$$\left\{ \begin{matrix} n \\ k \end{matrix} \right\} = \left[\begin{matrix} -k \\ -n \end{matrix} \right] \quad (7.7.4)$$

рекурентна релација Стирлингових бројева друге врсте своди на рекурентну релацију бројева прве врсте, па се на овај начин могу додефинисати ови бројеви и за негативне вредности n и k . Интересује нас да одредимо производе:

$$\begin{aligned} \sum_{k=j}^n (-1)^{j-k} \left\{ \begin{matrix} n \\ k \end{matrix} \right\} \left[\begin{matrix} k \\ j \end{matrix} \right] &= \sum_{k=j}^n (-1)^{n-k} \left[\begin{matrix} n \\ k \end{matrix} \right] \left\{ \begin{matrix} k \\ j \end{matrix} \right\} = \sum_{j=0}^n (-1)^{n-k} \left[\begin{matrix} n \\ k \end{matrix} \right] \sum_{l=0}^j \frac{1}{j!} (-1)^{j-l} \binom{j}{l} l^k \\ &= \sum_{l=0}^j (-l)^{\bar{n}} (-1)^{n+j-l} \binom{j}{l} \frac{1}{j!} = \sum_{l=n}^{j \leq n} \frac{l! (-1)^n}{(l-n)! j!} (-1)^{n+j-l} \binom{j}{l} \\ &= \delta_{n,j} \binom{j}{n} = \delta_{n,j} \end{aligned} \quad (7.7.5)$$

$$\begin{aligned} \sum_{k=m}^n \left\{ \begin{matrix} n+1 \\ k+1 \end{matrix} \right\} \left[\begin{matrix} k \\ m \end{matrix} \right] (-1)^{m-k} &= \sum_{k=m}^n \sum_{p=m}^k \left\{ \begin{matrix} n+1 \\ k+1 \end{matrix} \right\} \left[\begin{matrix} k+1 \\ p+1 \end{matrix} \right] \binom{p}{m} (-1)^{p-k} \\ &= \sum_{p=m}^n \delta_{p,n} (-1)^{n-p} \binom{p}{m} = \binom{n}{m} \end{aligned} \quad (7.7.6)$$

$$\begin{aligned}
\sum_{k=m}^n \begin{Bmatrix} n \\ k \end{Bmatrix} \begin{bmatrix} k+1 \\ m+1 \end{bmatrix} (-1)^{m-k} &= \sum_{k=m}^n \sum_{p=m}^k \begin{Bmatrix} n \\ k \end{Bmatrix} \begin{bmatrix} k \\ p \end{bmatrix} \binom{p}{m} (-1)^{m-k} \\
&= \sum_{p=m}^n \delta_{p,n} (-1)^{m-p} \binom{p}{m} = (-1)^{m-n} \binom{n}{m} \quad (7.7.7)
\end{aligned}$$

7.8 Идентитети проистекли из Фуријеове трансформације за Стирлингове бројеве друге врсте

Полазимо од једначина (7.4.65) и (7.5.7):

$$\begin{aligned}
F_\eta(A, \beta, \xi, \tau) &= \\
e^{\xi\beta(1-\{\frac{\tau}{\beta}\})} \eta^{\lceil \frac{\tau}{\beta} \rceil + 1} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \frac{n!}{(A-m-1)!m!} \begin{Bmatrix} A-m-1 \\ n \end{Bmatrix} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{n+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^m \quad (7.8.1)
\end{aligned}$$

$$F_\eta(A, \beta, \xi, -\tau) = (-1)^A F_\eta(A, \beta, -\xi, \tau) \quad (7.8.2)$$

Приметимо одмах да важи:

$$F_\eta(A, \beta, \xi, \tau) = (-1)^A F_\eta(A, \beta, -\xi, -\tau) \quad (7.8.3)$$

Такође су нам потребна следећа четири идентитета:

$$\left[-\frac{\tau}{\beta} \right] = - \left[\frac{\tau}{\beta} \right] - 1 \quad (7.8.4)$$

$$\left\{ -\frac{\tau}{\beta} \right\} = -\frac{\tau}{\beta} - \left[-\frac{\tau}{\beta} \right] = 1 - \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\} \quad (7.8.5)$$

$$\frac{1}{\eta e^{-\xi\beta} - 1} = -\eta e^{\xi\beta} \frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \quad (7.8.6)$$

$$\frac{1}{\eta e^{-\xi\beta} - 1} = -1 - \frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \quad (7.8.7)$$

Комбиновањем једначина (7.8.6) и (7.8.7) добијамо:

$$\left(\frac{1}{\eta e^{-\xi\beta} - 1} \right)^{n+1} = (-1)^{n+1} \eta e^{\xi\beta} \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{l+1} \quad (7.8.8)$$

Такође из једначине (7.8.5) добијамо:

$$\left\{ -\frac{\tau}{\beta} \right\}^m = \sum_{l=0}^m (-1)^l \binom{m}{l} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^l \quad (7.8.9)$$

Циљ је да добијемо два идентитета на основу једначина (7.8.2) и (7.8.3) и на основу јединствености Тејлоровог полинома (7.8.1). Први добијамо убацивањем једначина (7.8.1), (7.8.8) и (7.8.9) у једначину (7.8.2) и изједначавањем коефицијената у развоју.

$$\begin{aligned}
F_\eta(A, \beta, \xi, -\tau) &= e^{\xi\beta\left\{\frac{\tau}{\beta}\right\}} \eta^{\left[\frac{\tau}{\beta}\right]} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \frac{n!}{(A-m-1)!m!} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1}\right)^{n+1} \\
&\quad \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} \sum_{l=0}^m (-1)^l \binom{m}{l} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^l \\
&= e^{\xi\beta\left\{\frac{\tau}{\beta}\right\}} \eta^{\left[\frac{\tau}{\beta}\right]} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{l=0}^m \sum_{n=0}^{A-m-1} \frac{(-1)^l n!}{(A-m-1)!m!} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1}\right)^{n+1} \\
&\quad \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} \binom{m}{l} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^l \\
&= e^{\xi\beta\left\{\frac{\tau}{\beta}\right\}} \eta^{\left[\frac{\tau}{\beta}\right]} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{l=0}^{A-1} \sum_{m=l}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \frac{(-1)^l n!}{(A-m-1)!m!} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1}\right)^{n+1} \\
&\quad \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} \binom{m}{l} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^l \\
&= e^{\xi\beta\left\{\frac{\tau}{\beta}\right\}} \eta^{\left[\frac{\tau}{\beta}\right]} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{l=0}^{A-1} \sum_{m=0}^{A-l-1} \sum_{n=0}^{A-m-l-1} \frac{(-1)^l n!}{(A-m-l-1)!(m+l)!} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1}\right)^{n+1} \\
&\quad \left\{ \begin{matrix} A-m-l-1 \\ n \end{matrix} \right\} \binom{m+l}{l} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^l \\
&= e^{\xi\beta\left\{\frac{\tau}{\beta}\right\}} \eta^{\left[\frac{\tau}{\beta}\right]} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{l=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-l-1} \sum_{m=0}^{A-n-l-1} \frac{(-1)^l n!}{(A-m-l-1)!m!l!} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1}\right)^{n+1} \\
&\quad \left\{ \begin{matrix} A-m-l-1 \\ n \end{matrix} \right\} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^l \\
&= e^{\xi\beta\left\{\frac{\tau}{\beta}\right\}} \eta^{\left[\frac{\tau}{\beta}\right]} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{l=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-l-1} \frac{(-1)^l n!}{(A-l-1)!l!} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1}\right)^{n+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^l \sum_{m=0}^{A-n-l-1} \\
&\quad \left\{ \begin{matrix} A-m-l-1 \\ n \end{matrix} \right\} \binom{A-l-1}{m}
\end{aligned} \tag{7.8.10}$$

Прво решавамо суму:

$$\sum_{m=0}^{A-n-l-1} \left\{ \begin{matrix} A-m-l-1 \\ n \end{matrix} \right\} \binom{A-l-1}{m} \tag{7.8.11}$$

Због особине (7.7.2) можемо горњу границу суме (7.8.11) померати произвољно на више. Одговара нам да због биномног коефицијента под сумом горња граница буде $A - l - 1$.

$$\begin{aligned}
& \sum_{m=0}^{A-n-l-1} \left\{ \begin{matrix} A-m-l-1 \\ n \end{matrix} \right\} \binom{A-l-1}{m} = \sum_{m=0}^{A-l-1} \left\{ \begin{matrix} A-m-l-1 \\ n \end{matrix} \right\} \binom{A-l-1}{m} \\
&= \sum_{m=0}^{A-l-1} \sum_{k=0}^n \frac{1}{n!} (-1)^{n-k} \binom{n}{k} k^{A-l-m-1} \binom{A-l-1}{m} \\
&= \sum_{k=0}^n \frac{1}{n!} (-1)^{n-k} \binom{n}{k} \sum_{m=0}^{A-l-1} k^{A-l-m-1} \binom{A-l-1}{m} \\
&= \sum_{k=0}^n \frac{1}{n!} (-1)^{n-k} \binom{n}{k} (k+1)^{A-l-1} = \sum_{k=0}^n \frac{1}{(n+1)!} (-1)^{n+1-k-1} \binom{n+1}{k+1} (k+1)^{A-l} \\
&= \sum_{k=1}^{n+1} \frac{(-1)^{n+1-k}}{(n+1)!} \binom{n+1}{k} k^{A-l} = \sum_{k=0}^{n+1} \frac{(-1)^{n+1-k}}{(n+1)!} \binom{n+1}{k} k^{A-l} - \frac{(-1)^{n+1}}{(n+1)!} \binom{n+1}{0} \lim_{k \rightarrow 0} k^{A-l} \\
&= \left\{ \begin{matrix} A-l \\ n+1 \end{matrix} \right\} - \frac{(-1)^{n+1}}{(n+1)!} \lim_{k \rightarrow 0} k^{A-l}
\end{aligned} \tag{7.8.12}$$

Пошто горња граница у суми сигурно није негативна, $A - l$ је позитиван број, па је $\lim_{k \rightarrow 0} k^{A-l} = 0$.

$$\sum_{m=0}^{A-n-l-1} \left\{ \begin{matrix} A-m-l-1 \\ n \end{matrix} \right\} \binom{A-l-1}{m} = \left\{ \begin{matrix} A-l \\ n+1 \end{matrix} \right\} \tag{7.8.13}$$

Одатле добијамо да је:

$$F_{\eta}(A, \beta, \xi, -\tau) = e^{\xi\beta \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}} \eta^{\left[\frac{\tau}{\beta} \right]} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{l=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-l-1} \frac{(-1)^l n!}{(A-l-1)! l!} \left\{ \begin{matrix} A-l \\ n+1 \end{matrix} \right\} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{n+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^l \tag{7.8.14}$$

Ради лакшег праћења резултата индекс l ћемо преименовати у m .

$$F_{\eta}(A, \beta, \xi, -\tau) = e^{\xi\beta \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}} \eta^{\left[\frac{\tau}{\beta} \right]} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \frac{(-1)^m n!}{(A-m-1)! m!} \left\{ \begin{matrix} A-m \\ n+1 \end{matrix} \right\} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{n+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^m \tag{7.8.15}$$

Сада одређујемо десну страну једначине (7.8.2):

$$\begin{aligned}
& (-1)^A F_\eta(A, \beta, -\xi, \tau) \\
&= e^{-\xi\beta(1-\{\frac{\tau}{\beta}\})} \eta^{\lceil\frac{\tau}{\beta}\rceil+1} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \frac{(-1)^A n!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} \left(\frac{1}{\eta e^{-\xi\beta} - 1} \right)^{n+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^m \\
&= e^{\xi\beta\{\frac{\tau}{\beta}\}} \eta^{\lceil\frac{\tau}{\beta}\rceil} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \frac{(-1)^{A-n-1} n!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{l+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^m \\
&= e^{\xi\beta\{\frac{\tau}{\beta}\}} \eta^{\lceil\frac{\tau}{\beta}\rceil} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{l=0}^{A-m-1} \sum_{n=l}^{A-m-1} \frac{(-1)^{A-n-1} n!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} \binom{n}{l} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{l+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^m
\end{aligned} \tag{7.8.16}$$

Поново ћемо зарад лакшег праћења променити називе индекса. Овог пута индекс l ћемо преименовати у n , а индекс n у l .

$$\begin{aligned}
& (-1)^A F_\eta(A, \beta, -\xi, \tau) = \\
& e^{\xi\beta\{\frac{\tau}{\beta}\}} \eta^{\lceil\frac{\tau}{\beta}\rceil} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{l=0}^{A-m-1} \sum_{l=n}^{A-m-1} \frac{(-1)^{A-l-1} l!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ l \end{matrix} \right\} \binom{l}{n} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{n+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^m
\end{aligned} \tag{7.8.17}$$

Изједначавањем једначина (7.8.15) и (7.8.17), односно коефицијената у развоју, добијамо прву тражену релацију:

$$\sum_{l=n}^{A-m-1} \frac{(-1)^{A-l-1} l!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ l \end{matrix} \right\} \binom{l}{n} = \frac{(-1)^m n!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m \\ n+1 \end{matrix} \right\} \tag{7.8.18}$$

$$\sum_{l=n}^{A-m-1} (-1)^{A-l-m-1} (l-n)! \binom{l}{n}^2 \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ l \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} A-m \\ n+1 \end{matrix} \right\} \tag{7.8.19}$$

Увођењем смене $D = A - m - 1$:

$$\sum_{l=n}^D (-1)^{D-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 \left\{ \begin{matrix} D \\ l \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} D+1 \\ n+1 \end{matrix} \right\} \tag{7.8.20}$$

За одређивање другог идентитета, потребно је прво израчунати десну страну једначине (7.8.3):

$$\begin{aligned}
& (-1)^A F_\eta(A, \beta, -\xi, -\tau) \\
&= e^{\xi\beta(1-\{\frac{\tau}{\beta}\})} \eta^{\lceil\frac{\tau}{\beta}\rceil+1} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \frac{(-1)^{A-m-n-1} n!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m \\ n+1 \end{matrix} \right\} \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{l+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^m \\
&= e^{\xi\beta(1-\{\frac{\tau}{\beta}\})} \eta^{\lceil\frac{\tau}{\beta}\rceil+1} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{l=0}^{A-m-1} \sum_{n=l}^{A-m-1} \frac{(-1)^{A-m-n-1} n!}{(A-m-1)!m!} \left\{ \begin{matrix} A-m \\ n+1 \end{matrix} \right\} \binom{n}{l} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{l+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^m
\end{aligned} \tag{7.8.21}$$

Поново преименујемо индексе сума на исти начин:

$$\begin{aligned}
& (-1)^A F_\eta(A, \beta, -\xi, -\tau) = \\
& e^{\xi\beta(1-\{\frac{\tau}{\beta}\})} \eta^{[\frac{\tau}{\beta}]+1} \frac{(-\beta)^A}{\beta} \sum_{m=0}^{A-1} \sum_{n=0}^{A-m-1} \sum_{l=n}^{A-m-1} \frac{(-1)^{A-m-l-1} l!}{(A-m-1)! m!} \left\{ \begin{matrix} A-m \\ l+1 \end{matrix} \right\} \binom{l}{n} \left(\frac{1}{\eta e^{\xi\beta} - 1} \right)^{n+1} \left\{ \frac{\tau}{\beta} \right\}^m
\end{aligned} \tag{7.8.22}$$

Изједначавањем коефицијената у развоју у једначунама (7.8.1) и (7.8.22) на основу једначине (7.8.3) добијамо другу тражену релацију:

$$\sum_{l=n}^{A-m-1} \frac{(-1)^{A-m-l-1} l!}{(A-m-1)! m!} \left\{ \begin{matrix} A-m \\ l+1 \end{matrix} \right\} \binom{l}{n} = \frac{n!}{(A-m-1)! m!} \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} \tag{7.8.23}$$

$$\sum_{l=n}^{A-m-1} (-1)^{A-m-l-1} (l-n)! \binom{l}{n}^2 \left\{ \begin{matrix} A-m \\ l+1 \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} A-m-1 \\ n \end{matrix} \right\} \tag{7.8.24}$$

Увођењем исте смене као у једначини (7.8.20):

$$\sum_{l=n}^D (-1)^{D-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 \left\{ \begin{matrix} D+1 \\ l+1 \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} D \\ n \end{matrix} \right\} \tag{7.8.25}$$

Једначина (7.8.15) се може трансформисати:

$$\sum_{m=0}^{D-n} \left\{ \begin{matrix} D-m \\ n \end{matrix} \right\} \binom{D}{m} = \sum_{m=n}^D \left\{ \begin{matrix} m \\ n \end{matrix} \right\} \binom{D}{m} = \left\{ \begin{matrix} D+1 \\ n+1 \end{matrix} \right\} \tag{7.8.26}$$

Комбиновањем једначина (7.8.23) и (7.8.25) добијамо:

$$\begin{aligned}
\sum_{l=n}^D (-1)^{D-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 \sum_{m=l}^D \left\{ \begin{matrix} m \\ l \end{matrix} \right\} \binom{D}{m} &= \sum_{m=n}^D \sum_{l=n}^m (-1)^{D-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 \left\{ \begin{matrix} m \\ l \end{matrix} \right\} \binom{D}{m} \\
&= \sum_{m=n}^D (-1)^{D-m} \left\{ \begin{matrix} m+1 \\ n+1 \end{matrix} \right\} \binom{D}{m} = \left\{ \begin{matrix} D \\ n \end{matrix} \right\}
\end{aligned} \tag{7.8.27}$$

Овиме смо показали на који се начин Стирлингови бројеви друге врсте трансформишу при деловању биномне трансформације на горњи индекс. Такође смо добили идентитете (7.8.20) и (7.8.25) на основу којих ћемо формулисати другу дискретну трансформацију којом ће се Стирлингови бројеви друге врсте трансформисати по доњем индексу, а Стирлингови бројеви прве врсте по горњем индексу.

7.9 Дискретна трансформација

Испитујемо особине трансформације описане двама претходно одређеним релацијама:

$$\sum_{l=n}^D (-1)^{D-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 \begin{Bmatrix} D \\ l \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} D+1 \\ n+1 \end{Bmatrix} \quad (7.9.1)$$

$$\sum_{l=n}^D (-1)^{D-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 \begin{Bmatrix} D+1 \\ l+1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} D \\ n \end{Bmatrix} \quad (7.9.2)$$

Нека је низ S_i низ од $D+1$ бројева индексираних од S_0 до S_D . Две узастопне трансформације овог низа ће дати исти низ:

$$\begin{aligned} & \sum_{l=n}^D (-1)^{D-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 \sum_{l'=l}^D (-1)^{D-l'} (l'-l)! \binom{l'}{l}^2 S_{l'} \\ &= \sum_{l'=n}^D \sum_{l=n}^{l'} (-1)^{l'-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 (l'-l)! \binom{l'}{l}^2 S_{l'} \\ &= \sum_{l'=n}^D (-1)^{l'} \frac{(l')^2}{(n!)^2} \sum_{l=n}^{l'} \frac{(-1)^l}{(l-n)!(l'-l)!} S_{l'} \\ &= \sum_{l'=n}^D (-1)^{l'+n} \frac{(l')^2}{(n!)^2} \sum_{l=0}^{l'-n} \frac{(-1)^l}{l!(l'-n-l)!} S_{l'} \\ &= \sum_{l'=n}^D \frac{(-1)^{l'+n}}{(l'-n)!} \frac{(l')^2}{(n!)^2} \sum_{l=0}^{l'-n} (-1)^l \binom{l'-n}{l} S_{l'} \end{aligned} \quad (7.9.3)$$

Посматрамо суму:

$$\sum_{l=0}^{l'-n} (-1)^l \binom{l'-n}{l} \quad (7.9.4)$$

У случају када је горња граница суме ненулта, ова сума је једнака нули:

$$\sum_{l=0}^{l'-n} (-1)^l \binom{l'-n}{l} = (1-1)^{l'-n} = 0 \quad (7.9.5)$$

У случају када је $l' = n$, онда сума има само један сабирак:

$$\sum_{l=0}^0 (-1)^l \binom{0}{l} = (-1)^0 \binom{0}{0} = 1 \quad (7.9.6)$$

Одатле закључујемо да је посматрана сума једнака Кронекерској делти:

$$\sum_{l=0}^{l'-n} (-1)^l \binom{l'-n}{l} = \delta_{l',n} \quad (7.9.7)$$

Такође је и цео коефицијент у суми (7.9.3) једнак Кронекеровој делти:

$$\frac{(-1)^{l'+n} (l')^2}{(l'-n)! (n!)^2} \delta_{l',n} = \frac{(-1)^{2n} (n!)^2}{0! (n!)^2} \delta_{l',n} = \delta_{l',n} \quad (7.9.8)$$

Овиме је показана тврдња да је трансформација сама себи инверзна.

$$\sum_{l=n}^D (-1)^{D-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 \sum_{l'=l}^D (-1)^{D-l'} (l'-l)! \binom{l'}{l}^2 S_{l'} = \sum_{l'=n}^D \delta_{l',n} S_{l'} = S_n \quad (7.9.9)$$

Трансформација је такође линеарна и може се представити у облику горње троугаоне матрице облика $(D+1) \times (D+1)$. У даљем тексту ћемо користити ознаку \hat{T}_D . Сада можемо да пређемо у векторски простор димензије $(D+1)$ са стандардним скаларним производом, где ће нам поменута матрица репрезентовати оператор трансформације, а раније посматрани низови ће постати вектори, у даљем тексту означени са $|S_D\rangle$. За почетак, постављамо својствени проблем овог оператора:

$$\hat{T}_D |S_{D,i}\rangle = t_{D,i} |S_{D,i}\rangle \quad (7.9.10)$$

Коришћењем особине да је трансформација сама себи инверзна, видимо и да су једине дозвољене својствене вредности 1 или -1.

$$|S_{D,i}\rangle = \hat{T}_D \hat{T}_D |S_{D,i}\rangle = \hat{T}_D t_{D,i} |S_{D,i}\rangle = t_{D,i}^2 |S_{D,i}\rangle \quad (7.9.11)$$

$$t_{D,i}^2 = 1 \implies t_{D,i} = \pm 1 \quad (7.9.12)$$

Пошто траг и детерминанта оператора не зависи од избора базиса, а збир својствених вредности је једнак трагу у својственом базису, закључујемо да он мора бити једнак:

$$\sum_{n=0}^D \sum_{l=n}^D (-1)^{D-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 \delta_{n,l} = \sum_{n=0}^D (-1)^{D-n} = \sum_{n=0}^D (-1)^n = 2 \left\{ \frac{D+1}{2} \right\} \quad (7.9.13)$$

$$\det \{ \hat{T}_D \} = \prod_{i=0}^D t_{D,i} = (-1)^{\lfloor \frac{D+1}{2} \rfloor} \quad (7.9.14)$$

Дакле, у случају парне димензије оператор је трага нула, а у случају непарне је трага један. То значи да је простор подељен на два дегенерисана подпростора. Први је разапет над својственим векторима својствене вредности 1, а други над својственим векторима својствене вредности -1. Због вредности трага знамо да је број димензија дегенерисаног подпростора +1 за један већа или једнака димензији подпростора -1. На основу једначина (7.9.1) и (7.9.2) је могуће одредити по један својствени вектор из ових подпростора. Дефинишемо векторе $|A_D\rangle$ и $|B_D\rangle$ на следећи начин:

$$|A_D\rangle = \left(\left\{ \begin{matrix} D \\ 0 \end{matrix} \right\}, \dots, \left\{ \begin{matrix} D \\ D \end{matrix} \right\} \right) \quad (7.9.15)$$

$$|B_D\rangle = \left(\left\{ \begin{matrix} D+1 \\ 1 \end{matrix} \right\}, \dots, \left\{ \begin{matrix} D+1 \\ D+1 \end{matrix} \right\} \right) \quad (7.9.16)$$

Помоћу ових вектора се изрази (7.9.1) и (7.9.2) могу записати:

$$\hat{T}_D|A_D\rangle = |B_D\rangle \quad (7.9.17)$$

$$\hat{T}_D|B_D\rangle = |A_D\rangle \quad (7.9.18)$$

Вектори добијени сабирањем и одузимањем ова два вектора су својствени за посматрану трансформацију и то баш својствених вредности +1 и -1.

$$|S_{D,\pm}\rangle = |A_D\rangle \pm |B_D\rangle = \left(\begin{Bmatrix} D \\ 0 \end{Bmatrix} \pm \begin{Bmatrix} D+1 \\ 1 \end{Bmatrix}, \dots, \begin{Bmatrix} D \\ D \end{Bmatrix} \pm \begin{Bmatrix} D+1 \\ D+1 \end{Bmatrix} \right) \quad (7.9.19)$$

$$\hat{T}_D|S_{D,\pm}\rangle = \hat{T}_D(|A_D\rangle \pm |B_D\rangle) = |B_D\rangle \pm |A_D\rangle = \pm(|A_D\rangle \pm |B_D\rangle) = \pm|S_{D,\pm}\rangle \quad (7.9.20)$$

Видимо да у случају једнодимензионог простора вектор $|S_{0,-}\rangle$ ишчезава:

$$|S_{0,-}\rangle = \left(\begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix} \right) = (1 - 1) = (0) \quad (7.9.21)$$

Један пример својственог базиса може бити генерисан скупом вектора:

$$\{|S_{0,+}\rangle, \dots, |S_{i,+}\rangle, \dots, |S_{D,+}\rangle\} \quad (7.9.22)$$

Ови вектори су линеарно независни јер i -ти вектор има првих $i+1$ ненултих компоненти а осталих $D-i$ су једнаке нули. Својствене вредности ових вектора су:

$$\begin{aligned} \left(\hat{T}_D |S_{i,+}\rangle \right)_n &= \sum_{l=n}^D (-1)^{D-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 |S_{i,+}\rangle_l = (-1)^{D-i} \sum_{l=n}^i (-1)^{i-l} (l-n)! \binom{l}{n}^2 |S_{i,+}\rangle_l \\ &= (-1)^{D-i} \left(\hat{T}_i |S_{i,+}\rangle \right)_n = (-1)^{D-i} |S_{i,+}\rangle_n \end{aligned} \quad (7.9.23)$$

$$t_{D,i} = (-1)^{D-i} \quad (7.9.24)$$

Ова трансформација се може уопштити на бесконачно димензион простор:

$$\hat{T}_{i,j} = (-1)^j (j-i)! \binom{j}{i}^2 \quad (7.9.25)$$

$$\hat{T}_{i,j} |S\rangle_j = \sum_{j=0}^{+\infty} (-1)^j (j-i)! \binom{j}{i}^2 |S\rangle_j \quad (7.9.26)$$

За својствени базис се може изабрати исти скуп вектора, а својствене вредности постају:

$$\{|t_n\rangle = |S_{n,+}\rangle\} \quad (7.9.27)$$

$$t_n = (-1)^n \quad (7.9.28)$$

Пошто трансформација није репрезентована симетричном матрицом, њени својствени вектори нису ортогонални. Ова трансформација се може приказати помоћу оператора пресликавања \hat{P} и дијагоналног оператора \hat{D} :

$$\hat{T} = \hat{P}_T \hat{D} \hat{P}_T^{-1} \quad (7.9.29)$$

Облик ових оператора је:

$$\hat{D}_{ij} = (-1)^i \delta_{ij} \quad (7.9.30)$$

$$\hat{P}_{Tij} = \begin{Bmatrix} j \\ i \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} j+1 \\ i+1 \end{Bmatrix} \quad (7.9.31)$$

Циљ је да одредимо инверзну \hat{P}_T^{-1} трансформацију. Пошто је детерминанта матричне репрезентације овог оператора различита од нуле, знамо да инверз постоји, а како је оператор репрезентован квадратном матрицом, знамо да постоје и леви и десни инверз, као и да морају бити једнаки. У следећем кораку дефинишемо матричне елементе оператора $\hat{\Delta}$:

$$\hat{\Delta}_{Tij} = \frac{(-1)^{i-j}}{2} \left(\begin{Bmatrix} j \\ i \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} j+1 \\ i+1 \end{Bmatrix} \right) \quad (7.9.32)$$

На основу једначина (7.7.5), (7.7.6) и (7.7.7) директним множењем добијамо:

$$\sum_j \hat{\Delta}_{Tkj} \hat{P}_{Tji} = \sum_j \hat{P}_{Tij}^T \hat{\Delta}_{Tjk} = \delta_{ik} + \binom{i}{k} \frac{1 + (-1)^{i-k}}{2} = \hat{P}_{ik} \quad (7.9.33)$$

На овај начин смо направили везу између трансформације и њеног инверза:

$$\hat{P}_{Tij}^{-1} = \sum_k \hat{P}_{ki}^{-1} \hat{\Delta}_{Tkj} = \sum_k \left(\hat{P}^{-1} \right)_{ik}^T \hat{\Delta}_{Tkj} \quad (7.9.34)$$

Сада је потребно још само пронаћи инверз оператора \hat{P} . Директним множењем ћемо доказати да је инверз једнак:

$$\hat{P}_{jk}^{-1} = \binom{j}{k} \sum_{l=0}^{j-k+1} l! (-1)^{j-k+1} \left(\frac{1}{2} \right)^l \begin{Bmatrix} j-k+1 \\ l \end{Bmatrix} \quad (7.9.35)$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=k}^i \hat{P}_{ij} \hat{P}_{jk}^{-1} &= \sum_{j=k}^i \left(\delta_{ij} + \frac{1 + (-1)^{i-j}}{2} \binom{i}{j} \right) \binom{j}{k} \sum_{l=0}^{j-k+1} l! (-1)^{j-k+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^l \left\{ \begin{matrix} j-k+1 \\ l \end{matrix} \right\} \\
&= \binom{i}{k} \sum_{l=0}^{i-k+1} l! (-1)^{i-k+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^l \left\{ \begin{matrix} i-k+1 \\ l \end{matrix} \right\} \\
&+ \binom{i}{k} \sum_{j=k}^i \binom{i-k}{j-k} \sum_{l=0}^{j-k+1} l! (-1)^{j-k+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^{l+1} \left\{ \begin{matrix} j-k+1 \\ l \end{matrix} \right\} \\
&+ \binom{i}{k} \sum_{j=k}^i \binom{i-k}{j-k} \sum_{l=0}^{j-k+1} l! (-1)^{i-k+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^{l+1} \left\{ \begin{matrix} j-k+1 \\ l \end{matrix} \right\} \\
&= \binom{i}{k} \sum_{l=0}^{i-k+1} l! (-1)^{i-k+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^{l+1} \left(2 \left\{ \begin{matrix} i-k+1 \\ l \end{matrix} \right\} + \sum_{j=0}^{i-k} \binom{i-k}{j} \left\{ \begin{matrix} j+1 \\ l \end{matrix} \right\} ((-1)^{j-i+k} + 1) \right) \\
&= \binom{i}{k} \sum_{l=0}^{i-k+1} l! (-1)^{i-k+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^{l+1} \left(2 \left\{ \begin{matrix} i-k+1 \\ l \end{matrix} \right\} + \left\{ \begin{matrix} i-k \\ l-1 \end{matrix} \right\} + l \left\{ \begin{matrix} i-k+1 \\ l+1 \end{matrix} \right\} + \left\{ \begin{matrix} i-k+1 \\ l \end{matrix} \right\} \right) \\
&= \binom{i}{k} \sum_{l=0}^{i-k+1} l! (-1)^{i-k+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^{l+1} \left(4 \left\{ \begin{matrix} i-k+1 \\ l \end{matrix} \right\} + l(l+1) \left\{ \begin{matrix} i-k \\ l+1 \end{matrix} \right\} \right) \\
&= \lim_{x \rightarrow 0} \binom{i}{k} \sum_{l=0}^{i-k+1} l! (-1)^{i-k+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^{l+1} \left(4 \frac{\partial^{i-k+1}}{\partial x^{i-k+1}} \frac{(e^x - 1)^l}{l!} + l(l+1) \frac{\partial^{i-k}}{\partial x^{i-k}} \frac{(e^x - 1)^{l+1}}{(l+1)!} \right) \\
&= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial^{i-k}}{\partial x^{i-k}} \binom{i}{k} \sum_{l=0}^{i-k+1} l! (-1)^{i-k+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^{l+1} (4l(e^x - 1)^{l-1} + l(e^x - 1)^{l-1}(e^{2x} - 2e^x + 1)) \\
&= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial^{i-k}}{\partial x^{i-k}} \binom{i}{k} \frac{(e^x + 1)^2}{2} (-1)^{i-k+1} e^{-x} \frac{\partial}{\partial x} \sum_{l=0}^{i-k+1} \left(\frac{1 - e^x}{2} \right)^l \\
&= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial^{i-k}}{\partial x^{i-k}} \binom{i}{k} (e^x + 1)^2 (-1)^{i-k+1} e^{-x} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1 - \left(\frac{1 - e^x}{2} \right)^{i-k+2}}{1 + e^x} \\
&= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial^{i-k}}{\partial x^{i-k}} \binom{i}{k} (-1)^{i-k+1} \left(\left(\frac{1 - e^x}{2} \right)^{i-k+1} \left((i-k+2)(1 + e^x) + \frac{1 - e^x}{2} \right) - 1 \right)
\end{aligned} \tag{7.9.36}$$

Примећујемо да је први сабирак под лимесом иде у нулу јер уопштено важи:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial^n}{\partial x^n} f(x) \left(\frac{1 - e^x}{2} \right)^{n+k} = \lim_{x \rightarrow 0} g(x) \left(\frac{1 - e^x}{2} \right)^k \tag{7.9.37}$$

У колико је функција $g(x)$ регуларна у нули, и k веће од нуле, овај лимес тежи нули. Пошто су у нашем случају функције под изводом бесконачно пута диференцијабилне у нули, опстаје само други сабирак:

$$\sum_{j=k}^i \hat{P}_{ij} \hat{P}_{jk}^{-1} = - \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial^{i-k}}{\partial x^{i-k}} \binom{i}{k} (-1)^{i-k+1} = -\delta_{i,k} \binom{i}{k} (-1)^{i-k+1} = \delta_{i,k} \tag{7.9.38}$$

Из једначине (7.9.34) следи идентитет:

$$\hat{P}_T \left(\hat{P}^{-1} \right)^T \hat{\Delta}_T = I \quad (7.9.39)$$

Једначина (7.9.39) расписана по компонентама нам даје нови идентитет:

$$\sum_{j=i}^k \sum_{k=0}^m \left(\begin{Bmatrix} j \\ i \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} j+1 \\ i+1 \end{Bmatrix} \right) \binom{k}{j} \sum_{l=0}^{k-j+1} l! (-1)^{m-j+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^{l+1} \begin{Bmatrix} k-j+1 \\ l \end{Bmatrix} \left(\begin{Bmatrix} m \\ k \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} m+1 \\ k+1 \end{Bmatrix} \right) = \delta_{i,m} \quad (7.9.40)$$

Деловањем трансформације \hat{T} с лева, потом и $\hat{\Delta}_T$ поново с лева, добијамо:

$$\hat{\Delta}_T \hat{T} = \hat{\Delta}_T \hat{T} \hat{P}_T \left(\hat{P}^{-1} \right)^T \hat{\Delta}_T = \hat{\Delta}_T \hat{P}_T \hat{D} \left(\hat{P}^{-1} \right)^T \hat{\Delta}_T = \hat{P}^T \hat{D} \left(\hat{P}^{-1} \right)^T \hat{\Delta}_T \quad (7.9.41)$$

Покажимо да за оператор \hat{D} важи:

$$\begin{aligned} \hat{P}^T \hat{D} \left(\hat{P}^{-1} \right)^T &= \hat{P}^{-1} \hat{D} \hat{P} \\ &= \sum_{j=k}^i \left(\delta_{ij} + \frac{1 + (-1)^{i-j}}{2} \binom{j}{i} \right) \binom{k}{j} \sum_{l=0}^{k-j+1} l! (-1)^{-k+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^l \begin{Bmatrix} k-j+1 \\ l \end{Bmatrix} \\ &= (-1)^i \sum_{j=i}^k \left(\delta_{kj} + \frac{1 + (-1)^{k-j}}{2} \binom{k}{j} \right) \binom{j}{i} \sum_{l=0}^{j-i+1} l! (-1)^{j-i+1-l} \left(\frac{1}{2} \right)^l \begin{Bmatrix} j-i+1 \\ l \end{Bmatrix} \\ &= \hat{D} \hat{P}^{-1} \hat{P} = \hat{D} \end{aligned} \quad (7.9.42)$$

Приликом решавања суме је искоришћена смена $j \rightarrow k - j + i$. Враћањем резултата у једначину (7.9.41) видимо да се за леви својствени базис трансформације \hat{T} могу изабрати врсте из матричне репрезентације оператора $\hat{\Delta}_T$:

$$\hat{\Delta}_T \hat{T} = \hat{D} \hat{\Delta}_T \quad (7.9.43)$$

$$\langle \tau_n | i = (-1)^{n-i} \left(\begin{Bmatrix} i \\ n \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} i+1 \\ n+1 \end{Bmatrix} \right) \quad (7.9.44)$$

$$\langle \tau_n | \hat{T} = (-1)^n \langle \tau_n | \quad (7.9.45)$$

$$\sum_{k=0}^{+\infty} (i-k)! \binom{i}{k}^2 (-1)^k \left(\begin{Bmatrix} k \\ n \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} k+1 \\ n+1 \end{Bmatrix} \right) = (-1)^n \left(\begin{Bmatrix} i \\ n \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} i+1 \\ n+1 \end{Bmatrix} \right) \quad (7.9.46)$$

7.10 Идентитети проистекли из Фуријеове трансформације за Стирлингове бројеве прве врсте

Оператор $\hat{\Delta}_T$ из једначине (7.9.32) се може записати као збир:

$$\hat{\Delta}_T = \hat{A} + \hat{B} \quad (7.10.1)$$

$$\hat{A}_{ij} = (-1)^{i-j} \begin{bmatrix} j \\ i \end{bmatrix} \quad \hat{B}_{ij} = (-1)^{i-j} \begin{bmatrix} j+1 \\ i+1 \end{bmatrix} \quad (7.10.2)$$

Директним множењем видимо да важи:

$$\hat{A}\hat{P}_T\hat{D} = \hat{D}\hat{B}\hat{P}_T \quad (7.10.3)$$

$$\left(\hat{A}\hat{P}_T\hat{D}\right)_{ij} = (-1)^j \left(\delta_{ij} + \begin{bmatrix} j \\ i \end{bmatrix}\right) \quad (7.10.4)$$

Оператор \hat{D} је дефинисан једначином (7.9.30). Пошто је оператор \hat{P}_T , дефинисан у једначини (7.9.31) регуларан, множењем једначине (7.10.3) његовим инверзом са десне стране добијамо:

$$\hat{A}\hat{P}_T\hat{D}\hat{P}_T^{-1} = \hat{A}\hat{T} = \hat{D}\hat{B} \quad (7.10.5)$$

Одузимањем једначина (7.9.43) и (7.10.5) добијамо други идентитет:

$$\hat{B}\hat{T} = \hat{D}\hat{A} \quad (7.10.6)$$

Ова два идентитета су аналогна једначинама (7.9.1) и (7.9.2):

$$\sum_{k=n}^i (i-k)! \binom{i}{k}^2 (-1)^{k-n} \begin{bmatrix} k \\ n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i+1 \\ n+1 \end{bmatrix} \quad (7.10.7)$$

$$\sum_{k=n}^i (i-k)! \binom{i}{k}^2 (-1)^{k-n} \begin{bmatrix} k+1 \\ n+1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i \\ n \end{bmatrix} \quad (7.10.8)$$

7.11 Апроксимација Лоренцијаном

При израчунавању Гринове функције се јављају изрази облика:

$$\frac{1}{\omega + \tilde{\mu}_\sigma - \varepsilon_{\vec{k}} - \operatorname{Re} \Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(\omega) - i \operatorname{Im} \Sigma_{\sigma, \vec{k}}^d(\omega)} \quad (7.11.1)$$

Посматрајући израз као функцију од ω сматрајући да је сопствена енергија споропроменљива функција фреквенције, у тачки у којој реални део имениоца пролази кроз нулу се квадрат имагинарног дела Гринове функције може описати Лоренцијаном. Како је за рачунање проводности потребан управо квадрат имагинарног дела ове функције, испитаћемо аналитичке особине оваквих апроксимативних модела.

Посматрамо функцију:

$$f(x) = \operatorname{Im} \frac{1}{x - iy} \quad (7.11.2)$$

$$\begin{aligned} \int_a^a f(x) dx &= \int_a^a \operatorname{Im} \frac{1}{x - iy} dx = \operatorname{Im} \int_a^a \frac{1}{x - iy} dx = \operatorname{Im} (\ln(a - iy) - \ln(-a - iy)) \\ &= \operatorname{Im} (\ln(a - iy) - \ln(a + iy) + i\pi) = \pi - \operatorname{Im} \ln \left(\frac{1 + i\frac{y}{a}}{1 - i\frac{y}{a}} \right) = \pi - 2 \operatorname{arctg} \left(\frac{y}{a} \right) \end{aligned} \quad (7.11.3)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = \pi \quad (7.11.4)$$

$$\begin{aligned} \int_{-a}^a f^2(x) dx &= \frac{1}{y} \int_{-\frac{y}{a}}^{\frac{y}{a}} \frac{dt}{(1+t^2)^2} = \frac{1}{4y} \int_{-\frac{y}{a}}^{\frac{y}{a}} \frac{it-2}{(t+i)^2} dt - \frac{1}{4y} \int_{-\frac{y}{a}}^{\frac{y}{a}} \frac{it+2}{(t-i)^2} dt \\ &= \frac{1}{4y} \int_{-\frac{y}{a}}^{\frac{y}{a}} \frac{i}{t+i} dt - \frac{1}{4y} \int_{-\frac{y}{a}}^{\frac{y}{a}} \frac{1}{(t+i)^2} dt - \frac{1}{4y} \int_{-\frac{y}{a}}^{\frac{y}{a}} \frac{i}{t-i} dt - \frac{1}{4y} \int_{-\frac{y}{a}}^{\frac{y}{a}} \frac{1}{(t-i)^2} dt \\ &= \frac{1}{4t} \int_{-\frac{y}{a}}^{\frac{y}{a}} \frac{2}{t^2+1} dt + \frac{1}{4y} \left(\frac{2t}{t^2+1} \right)_{-\frac{y}{a}}^{\frac{y}{a}} = \frac{1}{y} \operatorname{arctg} \left(\frac{a}{y} \right) + \frac{a}{a^2+y^2} \end{aligned} \quad (7.11.5)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^2(x) dx = \frac{\pi}{2y} \quad (7.11.6)$$

Грешке приликом апроксимирања интеграла на бесконачном интервалу коначним су:

$$\Delta_1 = 2 \operatorname{arctg} \left(\frac{y}{a} \right) \quad (7.11.7)$$

$$\Delta_2 = \frac{1}{y} \left(\frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \left(\frac{a}{y} \right) - \frac{\frac{y}{a}}{\frac{y^2}{a^2} + 1} \right) = \frac{1}{y} \left(\operatorname{arctg} \left(\frac{y}{a} \right) - \frac{\frac{y}{a}}{\left(\frac{y}{a} \right)^2 + 1} \right) \quad (7.11.8)$$

У случају малих вредности количника $\frac{y}{a}$:

$$\Delta_1 = 2 \frac{y}{a} \quad (7.11.9)$$

$$\Delta_2 = \frac{2y^2}{3a^3} \quad (7.11.10)$$

Приликом рачунања проводности грешка коју правимо је описана једначином (7.11.10). Међутим, дискретизацијом функције уносимо још једну грешку. У најгорем случају када се врх Лоренцијана налази тачно на средини између две тачке дискретизације корака $\Delta\omega$. Тада је грешка дискретизације максимално:

$$\Delta_N = \frac{1}{y} \operatorname{arctg} \left(\frac{\Delta\omega}{2y} \right) + \frac{2\Delta\omega}{\Delta\omega^2 + 4y^2} \approx \frac{\Delta\omega}{y^2} = \frac{2a}{(N-1)y^2} \quad (7.11.11)$$

Укупна грешка је збир:

$$\Delta = \frac{2y^2}{3a^3} + \frac{2a}{(N-1)y^2} \quad (7.11.12)$$

У колико фиксирамо број тачака којим описујемо Лоренцијан, минималну грешку правимо када је граница a једнака:

$$a = y\sqrt[4]{N-1} \quad (7.11.13)$$

$$\Delta = \frac{8}{3y(N-1)^{\frac{3}{4}}} \quad (7.11.14)$$

8 Литература

- [1] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, J. Zaanen, From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides, *Nature*, 518, 179-186 (2015)
- [2] N. Barišić, Y. Li, G. Yu, X. Zhao, M. Dressel, A. Smontara, M. Greven, Universal sheet resistance and revised phase diagram of the cuprate high-temperature superconductors, *PNAS*, 110, (30), 12235-12240 (2013)
- [3] https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Cuprates_phasedigagram_en.svg
- [4] A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, Antiferromagnetism and d-wave superconductivity in cuprates: A cluster dynamical mean-field theory, *Phys. Rev. B*, 62, R9283 (2000)
- [5] M. Capone, G. Kotliar, Competition between d-wave superconductivity and antiferromagnetism in the two-dimensional Hubbard model, *Phys. Rev. B*, 74, 054513 (2006)
- [6] L. Fratino, P. Semon, G. Sordi, A.-M. S. Tremblay, An organizing principle for two-dimensional strongly correlated superconductivity, *Scientific Reports*, 6, 22715 (2016)
- [7] J. Vučićević, T. Ayrál, O. Parcollet, TRILEX and GW+EDMFT approach to d-wave superconductivity in the Hubbard model, *Phys. Rev. B*, 96, 104504 (2017)
- [8] J. Vučićević, D. Tanasković, M. J. Rozenberg, V. Dobrosavljević, Bad-Metal Behavior Reveals Mott Quantum Criticality in Doped Hubbard Models, *Phys. Rev. Lett.* 114, 246402 (2015)
- [9] J. Kokalj, Bad-metallic behavior of doped Mott insulators, *Phys. Rev. B*, 95, 041110 (2017)
- [10] S.-X. Yang, H. Fotsó, S.-Q. Su, D. Galanakis, E. Khatami, J.-H. She, J. Moreno, J. Zaanen, M. Jarrell, Proximity of the Superconducting Dome and the Quantum Critical Point in the Two-Dimensional Hubbard Model, *Phys. Rev. Lett.* 106, 047004 (2011)
- [11] G. Sordi, P. Semon, K. Haule, A.-M. S. Tremblay, Strong Coupling Superconductivity, Pseudogap and Mott Transition, *Phys. Rev. Lett.* 108, 216401 (2012)
- [12] J. D. Rameau, T. J. Reber, H.-B. Yang, S. Akhanjee, G. D. Gu, P. D. Johnson, S. Campbell, Nearly perfect fluidity in a high-temperature superconductor, *Phys. Rev. B*, 90, 134509 (2014)
- [13] A. Legros, S. Benhabib, W. Tabis, F. Laliberte, M. Dion, M. Lizaire, B. Vignolle, D. Vignolles, H. Raffy, Z. Z. Li, P. Auban-Senzier, N. Doiron-Lezraud, P. Fournier, D. Colson, L. Taillefer, C. Proust, Universal T-linear resistivity and Planckian dissipation in overdoped cuprates, <https://doi.org/10.1038/s41567-018-0334-2> (2018)

- [14] S. E. Sebastian, C. Proust, Quantum Oscillations in Hole-Doped Cuprates, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 2015. 6:411-30
- [15] P. T. Brown, D. Mitra, E. G.-Sanchez, P. Schaub, S. S. Kondov, E. Khatami, T. Paiva, N. Trivedi, D. A. Huse, W. S. Bakr, Spin-imbalance in a 2D Fermi-Hubbard system, *Science*, 357, 6358 (2017)
- [16] A. Mazurenko, C. S. Chiu, G. Ji, M. F. Parsons, M. K.-Nagy, R. Schmidt, F. Grusdt, E. Demler, D. Greif, M. Greiner, A cold-atom Fermi-Hubbard antiferromagnet, *Nature*, 545, 462-466 (2017)
- [17] P. T. Brown, D. Mitra, E. G.-Sanchez, P. Schaub, R. Nourafkan, A. Reymbaut, C.-D. Hebert, S. Bergeron, A.-M. S. Tremplay, J. Kokalj, D. A. Huse, P. Schaub, W. S. Bakr, Bad metallic transport in a cold atom Fermi-Hubbard system, *Science*, 10.1126/science.aat4134 (2019)
- [18] W. Xu, W. R. McGehee, W. N. Morong, B. DeMarco, Bad-metal relaxation dynamics in a Fermi lattice gas, *Nature Comm.* 10, 1588 (2019)
- [19] J. Vučićević, M. Ferrero, Real-frequency diagrammatic Monte Carlo at finite temperature, *Phys. Rev. B*, 101, 075113 (2020)
- [20] The Hubbard model at half a century, *Nature Phys.* 9, 523 (2019)
- [21] X. Dong, X. Chen, E. Gull, Dynamical charge susceptibility in the Hubbard model, *Phys. Rev. B*, 100, 235107 (2019)
- [22] P. Hansmann, N. Parragh, A. Toschi, G. Sangiovanni, K. Held, Importance of d-p Coulomb interaction for high T_c cuprates and other oxides, *New Journal of Physics*, 16, 033009 (2014)
- [23] W. Zhu, D. N. Sheng, Jian-Xin Zhu, Magnetic field dependent dynamics and field-driven metal-to-insulator transition of the half-filled Hubbard model: A DMFT+DMRG study, *Phys. Rev. B* 96, 085118 (2017)
- [24] M. Klett, N. Wentzell, T. Schafer, F. Simkovic IV, O. Parcollet, S. Andergassen, P. Hansmann, Real-space cluster dynamical mean field theory: Center focused extrapolation on the one- and two particle level, *Phys. Rev. Research*, 2, 033476 (2020)
- [25] F. Herman, J. Buhmann, M. H. Fischer, M. Sgrist, Deviation from Fermi-liquid transport behavior in the vicinity of a Van Hove singularity, *Phys. Rev. B*, 99, 184107 (2019)
- [26] J. Vučićević, H. Terletska, D. Tanasković, V. Dobrosavljević, Finite-temperature crossover and the quantum Widom line near the Mott transition, *Phys. Rev. B*, 88, 075143 (2013)

[27] F. Šimkovic, IV, J. P. F. LeBlanc, A. J. Kim, Y. Deng, N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov, E. Kozik, Phys. Rev. Lett. 124, 017003 (2020)