Elektronok | 1. előadás

Miért lehet a Coulomb-köh.-t elhagyni? (fémekben)

↳ kis e⁻-e⁻ távnál a Pauli-elv miatt a kin. energia dominál.

↳ sűrűségfluktuációk (plazma) energiája arányos a sűrűséggel.

(a nagy sűrűségű e⁻-gáz ebből a nempontból összenyomhatatlan folyadék)

$$H = \sum_{i=1}^{N_e}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2\right) + \underbrace{\sum_{i=1}^{N_e} V_{ion}(r_i)}_{\text{külső pot.}} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j \\ i\neq j}} u(r_i - r_j)$$

$$\text{Tfh. } u(\ldots) = u(|r_i - r_j|) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{|r_i - r_j|} \equiv \frac{\tilde{e}^2}{|r_i - r_j|}$$

Sch.: $H\Psi = E\Psi$, ezt kell megoldani.

Közelítő, feltevés: a sokrészecske Ψ egyrészecske Ψ-k kombinációja.

(Egyelőre az ionokat, mélyen ülő törzselektronokat elhagyjuk. De pl ritkaföldfémeknél nem hagyhatók el.)

$\Phi_i(x)$ egyrészecske h. fv. $(x = r, \underbrace{s}_{\text{spin}})$

N részecske: Slaterdet $(\Phi_i(x))$

$$n(r) := \sum_{i=1}^{N_e} \delta(r - r_i)$$

$n(r)$: e⁻-sűrűség

$$\sum_{i=1}^{N_e} V_{ion}(r) = \int dr\, V_{ion}(r)\, n(r)$$

↳ Fourier

$$V_{ion}(r) = \frac{1}{V}\sum_q V_{ion}(q)\, e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

$$n(q) = \int dr\, n(r)\, e^{-iqr} = \sum_{i=1} e^{-iqr_i}$$

ezzel:

$$\sum_{i=1}^{N_e} V_{ion}(r_i) = \frac{1}{V}\sum_q V_{ion}(q)\, n(-q)$$

Hasonlóan:

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j \\ i\neq j}} v(r_i - r_j) = \frac{1}{2}\int dr \int dr'\, u(r-r')\, n(r)\, n(r') -$$

$$- N_e v(0)$$

← végtelen, de ez ion-járulék mindig kiesik. ?

1 önmagával ne hasson kölcsön.

↓ Fourier

$u \leftrightarrow v$!

$$\frac{1}{2}\frac{1}{V}\sum_q v(q)\left[n(q)\, n(-q) - N_e\right]$$

$$u(q) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2} = \frac{4\pi \tilde{e}^2}{q^2}$$

Betöltési szám repr.:

$$c^+_{k_1\sigma_1} c^+_{k_2\sigma_2} \dots c^+_{k_{Ne}\sigma_{Ne}} |0\rangle \leftarrow \text{vákuum.}$$

keltők. Vion egyrészecske, U kétrészecske - operátor.

Hamilton: $$H = \sum_{kl\sigma} h_{kl\sigma} c^+_{k\sigma} c_{l\sigma} + \frac{1}{2} \sum u_{klmn} \cdot c^+_{k\sigma} c^+_{l\sigma'} c_{n\sigma'} c_{m\sigma} \leftarrow \text{③ nem felcserélve!}$$

$$\cancel{h_{k,\sigma} \text{ és } h_{k,l,\sigma} = \int}$$

$$h_{kl,\sigma} = \int dr\, \Phi^*_{k\sigma}(r) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ion}(r) \right] \Phi_{l\sigma}(r)$$

$$u_{klmn} = \int dr \int dr'\, \Phi^*_{k\sigma}(r) \Phi^*_{l\sigma'}(r') U(r-r') \Phi_{m\sigma'}(r') \Phi_{n\sigma}(r)$$

Részecske-téroperátorok:

$$\hat{\Psi}^+_\sigma(r) = \sum \Phi^*_{k\sigma}(r) c^+_{k\sigma} \eta^+_\sigma \leftarrow \text{spinoperátor}$$

$$\boxed{\eta_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \eta_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}$$

↓ ezzel a H...

$$H = \sum_\sigma \int dr\, \hat{\Psi}^+_\sigma(r) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ion}(r) \right] \hat{\Psi}_\sigma(r) +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \int dr \int dr'\, \hat{\Psi}^+_\sigma(r) \Psi^+_{\sigma'}(r') U(r-r') \hat{\Psi}_{\sigma'}(r') \hat{\Psi}_\sigma(r)$$

$V_{ion}(r) = V_0$ (const) ← egyenletes háttérbe pot.

Az a szerepe, hogy az e^--ok töltését semlegesítse. (jellium model)

$$H = H_0 + H_{kölcs}^{e^- - e^-}$$

elvileg meg lehet oldani.

A ∇^2-es rész megoldásai síkhullámok.

$$H_0 = \int h_0(r)\, n(r)\, dr \longrightarrow \psi_{k\sigma}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \eta_\sigma(s)$$

↓ bet. rep.-ben...

$$H_0 = \sum \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \quad , \quad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

$$H_{e-e} = \frac{1}{2V} \sum U(q)\, c_{k+q,\sigma}^+ c_{k'-q,\sigma'}^+ c_{k'\sigma'} c_{k\sigma}$$

$$U(q) := \frac{4\pi e^2}{q^2}(1 - \delta_{q0})$$

a $q = 0$-t kihagytuk.

Legyenek a hullámfv-ek a Bloch-bázis!

kvantumszámok: k, spin, sáv (n)

$\psi_{k,n,\sigma}(r)$, $c_{k,n,\sigma}^+$, $c_{k,n,\sigma}$ ← ezekkel kell felírogatni...

$$H_0 = \sum_{n,k,\sigma} \varepsilon_{nk}\, c_{knσ}^+ c_{knσ}$$

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum U_{\sigma\sigma'}(n_1, k_1, \dots)\, c_{k_1 n_1 \sigma}^+ c_{k_2 n_2 \sigma'}^+ c_{k_3 n_3 \sigma'} c_{k_4 n_4 \sigma}$$

$$U_{\sigma\sigma'}(\ldots) = \int dr \int dr' \, \psi^+_{k_1 n_1 \sigma}(r_1) \, \psi^+_{k_2 n_2 \sigma'}(r_1') \, U(r_2 - r') \cdot$$

$$\cdot \, \psi_{k_3 n_3 \sigma'}(r') \, \psi_{k_4 n_4 \sigma}(r).$$

Általánosan reménytelen megoldani.

Egy sáv: (sáv modell) → fémeknél ok, félvezetőkre nem jó.

↳ az n index nem számít.

kvázimpulzus-megm. miatt: $\vec{k}_1 + \ldots + \vec{k}_N = \vec{G}$

r, r' helyére $\vec{r} = \vec{R}_m + \vec{\tilde{r}}_m$

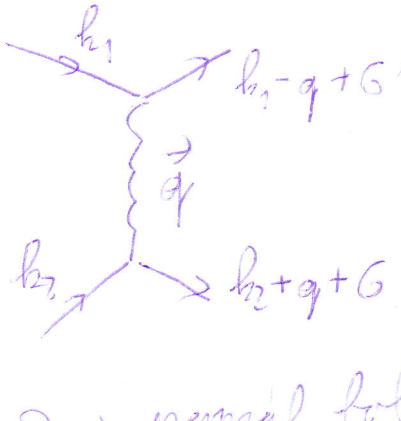
↳ ez az elemi cellán belül van.

Bloch-fv.-ekre: $\psi_{k\sigma}(R_m + \tilde{r}) = e^{ikR_m} \psi_{k,\sigma}(\tilde{r})$

Emiatt adott r-re 3 szorzatalakból jön járulék ③ G és G' 2 rec. vec.

$$V_{\sigma\sigma'}(k_1, k_2, k_1', k_2') = \frac{1}{V} \sum_{q} \sum_{G,G'} U(q) \, I_{\sigma\sigma'}(k_1, k_2, k_1', k_2', G, G')$$

↑ a Dirac-δ-k miatt az I belében lévő ívekből csak 2 marad.



$G = G' = 0$ → normál folyamat

$G \vee G' \neq 0$ → umklapp folyamat.

Wannier-bázis: atomokhoz lokalizált állapotok.

$$\Phi_n(r, \vec{R}_j) := \sum_k e^{-ikR_j} \psi_{nk}(r)$$

rácspont

Bloch-fv.

$$H_0 = \sum_{n,\sigma} \sum_{i,j} t_{nij} c^+_{nj\sigma} c_{ni\sigma}$$

transzfer-integrál

$i \to j$ átmenet

$$t_{nij} = \int \Phi^*_n(r - R_j) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ion}(r) \right] \Phi_n(r - R_i) \, dr$$

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum U^{mn, m'n'}_{ij j'i'} c^+_{mi\sigma} c^+_{nj\sigma'} c_{n'j'\sigma'} c_{m'i'\sigma}$$

$$U^{mn, m'n'}_{ij, j'i'} = \int dr \int dr' \, \Phi^*_m(r - R_i) \, \Phi^*_n(r' - R_j) \cdot$$

$$U(r - r') \, \Phi_{n'}(r' - R_{j'}) \, \Phi_{m'}(r - \vec{R}_{i'})$$

Coulomb

i, j és $i' j'$ közti átfedés.

Akkor van nagy járulék, ha minden index u.az,

minden e^- ugyan azon az atomon van.

(egy centrum - integrál)

$i = i' = j = j' \to$ 2 eset: $n = n'$ és $m = m'$

$n = m'$ és $m = n'$

$c^+_{m,\sigma} c_{m,\sigma} =: n_{mj\sigma}$ (13)

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} U_H \sum n_{mj\sigma} n_{m'j,-\sigma} + \ldots$$

Megkötés adódik σ-ra a Pauli-elv miatt.

$$\ldots + \frac{1}{2}(U_H - J) \sum_{m \neq m'} n_{mj\sigma} n_{m'j\sigma} -$$

$$- \frac{1}{2} J \sum c^+_{m,\sigma} c_{m_j,-\sigma} c^+_{m',-\sigma} c_{m',\sigma}$$

n: egy atomnyi helyen hány nívó van?

Ez bonyolult $\rightarrow$ legyen egyetlen állapot! (egynívó)

3d átmeneti fémekre kb. jó.

$$H = \sum t_{ij} c^+_{i\sigma} c_{j\sigma} + \frac{U_H}{2} \sum n_{i\sigma} n_{i,-\sigma} =$$

$j \to i$ átmenet

$$= \sum t_{ij} c^+_{i\sigma} c_{j\sigma} + U_H \sum n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Hubbard modell.

Még ez is megoldhatatlan.

nem mernek egy helyen lenni.

További tag: szomszédok közti khl.

$$H = \sum t_{ij} c^+_{i\sigma} c_{j\sigma} + U_H \sum n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_{i\sigma} n_{j\sigma}$$

kiterjesztett Hubbard modell.

$$\frac{|t_{ij}|^2}{U} \approx J \leftarrow \text{kicserélődési khat.}$$

Az U-ban magas rendű tagokat elhagyjuk.

$U_H \to \infty$: $t-J$ modell

$$H = \sum t_{ij} c^+_{i\sigma} c_{j\sigma} + J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j$$

0-1 állapotot reprezentálunk spinekkel.

első n.n.

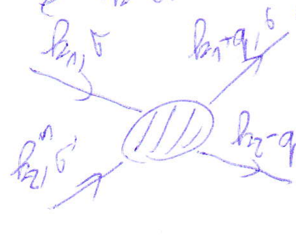
Szigetelőkben t_{ij} nulla, nincs vezetés. (ha félig van betöltés, akkor is...)

A maradék a Heisenberg modell H-ja!

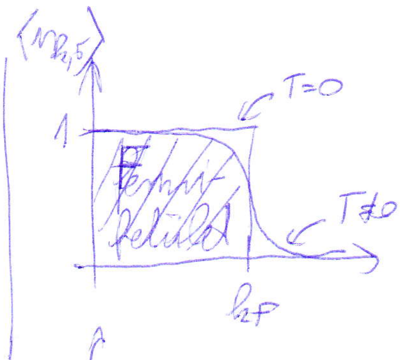
csak He^3-ban okozza a magmágneses mom. a mágnességet! A fémek mágnességét a Coulomb khat okozza (a lokalizált e^--ok utálják egymást)

|2. előadás|

$e^- - e^-$ khat:



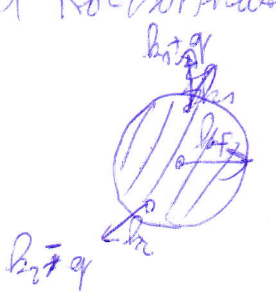
Spint megtartja



nem khtó gáz

$$\frac{1}{2V} \sum_{\substack{k_1,k_2,q \\ \sigma,\sigma'}} U(q)\, c^+_{k_1+q,\sigma} c^+_{k_2-q,\sigma'} c_{k_2\sigma'} c_{k_1\sigma}$$

~~Költ~~ Kölcsönhatás mit okoz $\langle n \rangle$-ben?



$T=0$-ban is megjelenik lyuk a Fermi-felület alatt. → ezt vizsgáljuk.

(elmosódik a felület?)

Számolás: pert. m.

$|FS\rangle = |\Psi_0\rangle$

kezdeti felület

↳ Perturbált: az elírő Hamilton.

$$|\Psi\rangle^{(1)} = |\Psi_0\rangle + \frac{1}{2V}\sum U(q) \dots |\Psi_0\rangle$$

Spec. eset: Hubbard-kh.:

$$H_1 = \frac{U}{V}\sum c^+_{k+q,\uparrow} c^+_{k'-q,\downarrow} c_{k'\downarrow} c_{k\uparrow}$$

U nem függ q-tól.

U: Hubbard-taszító tag.

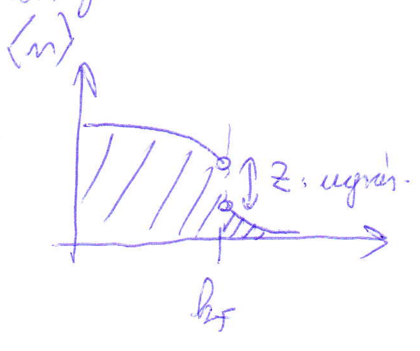
$$\langle n_{k\sigma}\rangle = {}^{(1)}\langle\Psi| c^+_{k,\sigma} c_{k,\sigma} |\Psi\rangle^{(1)} = \dots$$

← az elsőrendű korrekciót vesszük.

$$\dots = \langle\Psi_0| c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} |\Psi_0\rangle + U^2 \dots$$

Az ⟨alap | korr⟩ elemek nem adnak járulékot.

Eredmény:



A k_F alatt azt kapjuk, amit vártunk.

Lényeg: nem található a két rész k_F-nél.

Ez esetben a Fermi-felület definíciója a nakadás helye a k-térben.

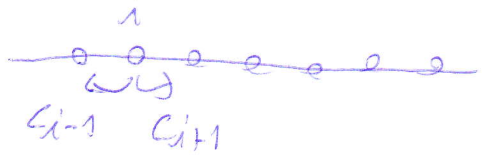
Ha a p. n. konvergens, akkor $\exists$ Z, és a Fermi-felület helye nem változik. → a gömb térfogata megmarad.

Normális rendszer, amire ez igaz. (p.sz. konvergens, etc...)

Nem normálisak pl.: kht. bekapcsolásakor fázisátalakulás lehet, és onnantól a p.sz. „felsőbban" szimmetriasértő megoldása lesz a rsz.-nek, (oda nem perturbálhatunk) → mágneses v. szupravez. fázis.

<u>Pl</u> arra, hogy gyenge kht. esetén sem konvergens a p.sz.:

Olyan rsz.-t nézzünk, amiben csak 1 irányba mehetnek az e^--ok! (lánc)

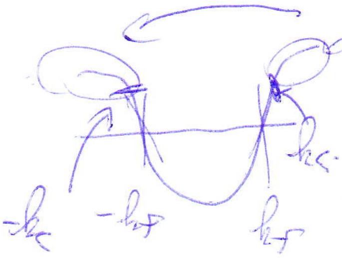


$U n_{i\downarrow} n_{i\uparrow}$: taszító kht.

$$\langle n_{k,\sigma} \rangle_{k>k_F} = 2\left(\frac{U}{4\pi \hbar v_F}\right) \ln \frac{k_c}{k-k_F}$$

v_F: e^- sebessége

k_c: valamilyen karakterisztikus k.



ezeket nem veszem figyelembe

$k \to k_F$ esetén a megoldás logaritmikusan divergál már a legalacsonyabb rendben, tetszőlegesen gyenge U-ra.

<u>Hartree-Fock közelítés:</u>

$$H = \sum_i \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_i\right)^2 + U_{ion}(r) + \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j \\ i\neq j}} u(r_i - r_j)$$

$$u(r_i, r_j) = \frac{\tilde{e}^2}{|r_i - r_j|} \quad ; \quad \tilde{e}^2 := \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \quad \text{Coulomb.}$$

$$\Psi(r_1, r_2, \ldots, r_N) = \varphi_{\lambda_1}(1)\,\varphi_{\lambda_2}(2)\ldots\varphi_{\lambda_N}(N)$$

1 részecske hullámfv.-ek (ismeretlenek)

$$E_H = \frac{\langle \Psi_H | H | \Psi_H \rangle}{\langle \Psi_H | \Psi_H \rangle}$$

Követelmény: E minimális, normált Ψ-re (mellékf.)

$$\langle \Psi_H | H | \Psi_H \rangle - \lambda\left(\langle \Psi | \Psi \rangle - 1\right)$$

Lagrange.

ezt kell φ szerint variálni. (Hartree)

$\Psi(\ldots)$ Slater : Hartree-Fock

$$E_{HF} = \frac{\langle \Psi_{HF} | H | \Psi_{HF} \rangle}{\langle \Psi_{HF} | \Psi_{HF} \rangle} \qquad \Psi_{HF} \cong \begin{vmatrix} \varphi & & \varphi \\ & \ddots & \\ \varphi & & \varphi \end{vmatrix}$$

$$\langle \Psi_{HF} | H | \Psi_{HF} \rangle - \lambda\left(\langle \Psi_{HF} | \Psi_{HF} \rangle - 1\right)$$

<u>Másodkvantált Hartree-Fock:</u>

$$H = \sum_k \varepsilon_k c^+_{k,\sigma} c_{k,\sigma} + \ldots \qquad \text{Síkhullámra } \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

egyébként ráviszonyítani kell.

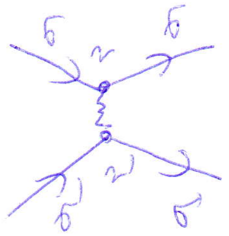
$$\ldots + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{k_1, k_2, q \\ \sigma, \sigma'}} U(q)\, c^+_{k_1+q,\sigma}\, c^+_{k_2-q,\sigma'}\, c_{k_2\sigma'}\, c_{k_1\sigma}$$

Téroperátorok: $\Psi(r) = \sum_k c_{k\sigma}\,\varphi_{k\sigma}(r)$

$$\Psi^+(r) = \sum_k c^+_{k\sigma}\,\varphi^*_{k\sigma}(r)$$

$$H_{khh} = \int dr\,dr'\,\psi^+_\sigma(r)\psi^+_{\sigma'}(r')\,U(r-r')\,\psi_{\sigma'}(r')\psi_\sigma(r)$$

értelme



a khh erősségét $r-r'$ adja meg.

$$\psi^+_\sigma(r)\psi_\sigma(r) = n_\sigma(r) \quad e^- \text{-sűrűség.}$$

vagyis $U(r-r')\,n_\sigma(r)\,n_{\sigma'}(r')$ alakú a H tagja.

(vigyázat, nem egészen, nem kommutálnak!)

Hartree-Fock filozófiája: az e^--ok átlagolt teret éreznek.

Most: átlagtérelmélet...

$$n_\sigma = n_\sigma - \langle n_\sigma\rangle + \langle n_\sigma\rangle$$

$$n_{\sigma'} = \underbrace{n_{\sigma'} - \langle n_{\sigma'}\rangle} + \langle n_{\sigma'}\rangle$$

ennek a másikkal szorzatát hagyjuk el.

$$\big(n_\sigma(r)\,n_{\sigma'}(r')\big) = \big(n_\sigma(r) - \cancel{\langle n_\sigma(r)\rangle}\big)\big(\langle n_{\sigma'}(r')\rangle\big) +$$

$$+ \langle n_\sigma(r)\rangle\big(n_{\sigma'}(r') - \langle n_{\sigma'}(r')\rangle\big) + \cancel{\langle n_\sigma(r)\rangle\langle n_{\sigma'}(r')\rangle}$$

Maradék:

$$n_\sigma(r)\langle n_{\sigma'}(r')\rangle + \langle n_\sigma(r)\rangle n_{\sigma'}(r') - \langle\ \rangle\langle\ \rangle.$$

A maradék operátorokban bilineáris!

Ez analóg a $H_{Hartree}$ előkvantált alakjával.

Ebből Hartree-Fock...:

4-ből 2-t az átlagával helyettesítjük.

$$\psi^+_\sigma(r)\psi^+_{\sigma'}(r')\psi_{\sigma'}(r')\psi_\sigma(r)$$

$\psi^+\psi = \langle n\rangle$...

← 2 lehetséges párosítás...

$\langle \psi^+_{\sigma'}(r') \psi_{\sigma'}(r') \rangle$ ~~$r' \sigma'$~~ σ kiveszünk és visszateszünk elektront.

$\psi^+\psi^+$ és $\psi\psi$ közelítése:

$\langle \psi_{\sigma'}(r') \psi_\sigma(r) \rangle = 0$ kivettem 1-1 elektront. visszamentünk az eredeti állapotba? Normális rendszerben nem. (szupravezetésnél igen... anomális állapot)

$\psi^+\psi$:

$\langle \psi^+_\sigma(r') \psi_\sigma(r) \rangle = ?$ ← ez van, nem feltétlenül 0.

$$\psi^+_\sigma \psi^+_{\sigma'} \psi_\sigma \psi_{\sigma'} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{antik.}}}{=} - \psi^+_\sigma(r) \underbrace{\psi^+_{\sigma'}(r') \psi_\sigma(r)}_{\text{ezt bővítjük} \ldots} \psi_{\sigma'}(r')$$

$\langle \ldots | \ldots \rangle \, \delta_{\sigma\sigma'}$ ← azonos spin kell.

Ez a HFock.

Ionpotenciál nélküli rendszer:

Tfh $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$; $U(q) \sim \frac{1}{q^2}$ (Coulomb Fourierje)

Hartree: $c^+_{k_2 - q, \sigma} c_{k_2, \sigma}$ -t bővítjük.

$\langle c^+_{k_2 - q, \sigma'} c_{k, \sigma'} \rangle =$ csak $q = 0$-ban van véges járulék.

de $U(q)$ $q = 0$-ban divergál...

Pozitív homogén hátteret teszek az elektronok mögé.

A ⊕ háttér $q=0$-t kiüti...

$$U(q)=\left(\frac{\text{const}}{q^2}\right)\delta_{q\neq 0}$$

A Hartree-közelítés kiüti a Coulomb-kht.-t.

<u>Hartree-Fock:</u> $c^+_{k_2-q,\sigma'}c_{k,\sigma}$-t bontjuk.

$$\langle \_\_\_ \rangle = \cancel{\delta=\sigma}$$

$\sigma=\sigma'$ és $k_1=k_2-q$ igaz kell legyen...

A kht. tag:

$$-2\frac{1}{2V}\sum_{\substack{k_1,k_2,q\\ \sigma,\sigma'}}U(q)\,c^+_{k_1+q,\sigma}\,c_{k_2\sigma}\langle c^+_{k_2-q,\sigma}c_{k,\sigma}\rangle=$$

fordított tag!

$$=-\frac{1}{V}\sum_{k,q,\sigma}U(q)\,c^+_{\underbrace{k_1+q}_{k}\,\sigma}\,c_{k_1+q}\langle c^+_{\underbrace{k_1}_{k'},\sigma}c_{k_1,\sigma}\rangle=\ldots$$

k_1 benne kell legyen a Fermi-gömbben.

$$=-\frac{1}{V}\sum_{k,k',\sigma}U(k-k')\,c^+_{k\sigma}c_{k\sigma}\langle c^+_{k'\sigma}c_{k'\sigma}\rangle$$

$$H=\sum_{k,\sigma}\varepsilon_{k\sigma}c^+_{k\sigma}c_{k\sigma}-\frac{1}{V}\sum_{k\sigma}\left(\sum_{k'}U(k'-k)\langle c^+_{k'\sigma}c_{k'\sigma}\rangle\right)c^+_{k\sigma}c_{k\sigma}=$$

$$=\sum_{k,\sigma}\tilde{\varepsilon}_k c^+_{k\sigma}c_{k\sigma}$$

$$\hookrightarrow \tilde{\varepsilon}_k=\underbrace{\varepsilon_k-\frac{1}{V}\sum_{k'}U(k-k')\langle c^+_{k'\sigma}c_{k'\sigma}\rangle}_{}$$

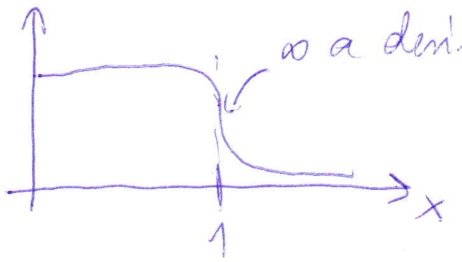
Fermi-gömbbeli e^--ok, ~~mint~~

korrekció a szabad értékhez.

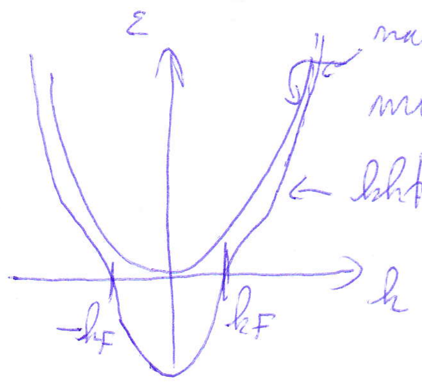
Megoldás:

$$\tilde{\varepsilon}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{2}{\pi}\tilde{e}\, k_F\, F\left(\frac{k}{k_F}\right)$$

$$F(x) := \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x}\ln\left(\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right)$$



Energia:



Ha $k = k_F$ → ~~több állapot~~ energiacsökkenés lett a szabad eset-hez képest. A sáv szélessége megnő. A kísérletek ezt a jelenséget nem mutatják.

A H–F közelítés elektrongázra nem jó.

→ az e^--ok ~~ez~~ át tudják rendezni a hátteret (leárnyékolás)

→ a töltésnek kisebb szerepe van, mint azt várjuk.

Külső tér hatása: (Lineáris válasz elmélet)

B fiz. mennyiség, F külső erő.

$$H_{\text{külső}} = \int B(r)F(r)\,dr \quad ; \text{pl } \; gV \text{ vagy } -\vec{m}\vec{B}$$

$$\langle A \rangle - \langle A_0 \rangle = ?$$

Sűrűségoppal: $\langle A \rangle = \mathrm{Tr}(\rho A)$

egyensúlyi rendszerben: $\langle A \rangle = \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \langle \psi_n | A | \psi_n \rangle = \mathrm{Tr}(\rho_0 A)$

$$\rho_0 := \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$$

Külső pert. lineáris hatásához elég elsőrendig iterálni a ρ egyenletét.

$$\Delta A(r,t) = \frac{i}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t}\int \cancel{B(r',t')} \langle [A(r,t-t'), B(r')] \rangle F(r',t)\, dt'\, dr'$$

$$\chi_{AB}(r,r',t-t') = \frac{i}{\hbar} \langle [A(r,t-t'), B(r')] \rangle \quad ; \; t > t'.$$

retardált fv.,

Fourier:

$$\chi_{AB}(q, t-t') = \frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') \frac{1}{V} \langle [A(q,t), B(-q,t')] \rangle$$

| 3. előadás |

Kölcsönható elektronrendszerek válasza külső perturbációra:

pert $\rightarrow$ transzport, optikai tul. $\Big\}$ ezeket lehet vizsgálni lin. válasszal.

<u>Dielektromos fv.:</u> $D(q,\omega) = \varepsilon(q,\omega) E(q,\omega)$

Tfh. homogén e^- gáz $+ \rho_{ext}(r,t)$

Maxwell: $\operatorname{div} D = \rho_{ext}$; $\varepsilon_0 \operatorname{div} \underline{E} = \rho$; $E = -\operatorname{grad} \Phi$

$\rho = \rho_{ind} + \rho_{ext}$; $D = -\varepsilon_0 \operatorname{grad} \varphi_{ext}$

ρ_{ind}: indukált; φ_{ext}: külső ρ_{ext} potenciálja.

$\downarrow$

Fourier: $\underline{E}(q,\omega) = -i\underline{q}\,\Phi(q,\overset{\omega?}{t})$

$\underline{D}(q,\omega) = -i\varepsilon_0 \underline{q}\,\varphi_{ext}(q,\overset{\omega?}{t})$

$$\Rightarrow \underline{\underline{\varphi(q,\omega)}} = \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(q,\omega)}\varphi_{ext}(q,\omega) =: \underline{\underline{\frac{\varphi_{ext}(q,\omega)}{\varepsilon_r(q,\omega)}}}$$

Cél: $\varepsilon_r(q,\omega)$ kiszámolása.

Maxwellek potenciálokkal:

$$\left.\begin{aligned} \varepsilon_0 q^2 \varphi(q,\omega) &= \rho(q,\omega) \\ \varepsilon_0 q^2 \varphi_{ext}(q,\omega) &= \rho_{ext}(q,\omega) \end{aligned}\right\} \Rightarrow \frac{1}{\varepsilon_r(q,\omega)} = \frac{\rho}{\rho_{ext}} = \frac{\rho_{ind}+\rho_{ext}}{\rho_{ext}}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\varepsilon_r(q,\omega)} = \left\{1 + \rho_{ind}\right\}\frac{1}{\rho_{ext}} = 1 + \frac{\rho_{ind}(q,\omega)}{\varphi_{ext}(q,\omega)\,\varepsilon_0 q^2} =$$

Részecskeszám-sűrűséggel $\rho = -e\overset{>0}{n}$

$u = -e\varphi$ pot. energia.

$$\Rightarrow \frac{1}{\varepsilon_r(q,\omega)} = 1 + \frac{e^2\, n_{ind}(q,\omega)}{\varepsilon_0 q^2\, u_{ext}(q,\omega)}$$

$$\frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2} = \frac{4\pi \tilde{e}^2}{q^2}$$

Def.: $n_{ind}(q,\omega) = \Pi(q,\omega)\, U_{ext}(q,\omega)$

válaszfüggvény.

$$\frac{1}{\varepsilon_r(q,\omega)} = 1 + \frac{4\pi \tilde{e}^2}{q^2}\, \Pi(q,\omega) \quad *$$

Kapcsolat a n-n korrelációs függvénnyel.

U_{ext} egyrészecske-operátor.

$$\hat{H}_{ext} = \int U_{ext}(\underline{r},t)\, n(\underline{r})\, d\underline{r} \quad \text{perturbáció,}$$

és rakom a n.-be.

~~$\Pi(q,t) =$~~

$$\Pi(r, r'; t-t') = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t-t')\langle [n(\underline{r},t), n(\underline{r}',t')] \rangle$$

Spin szerint + Fourier:

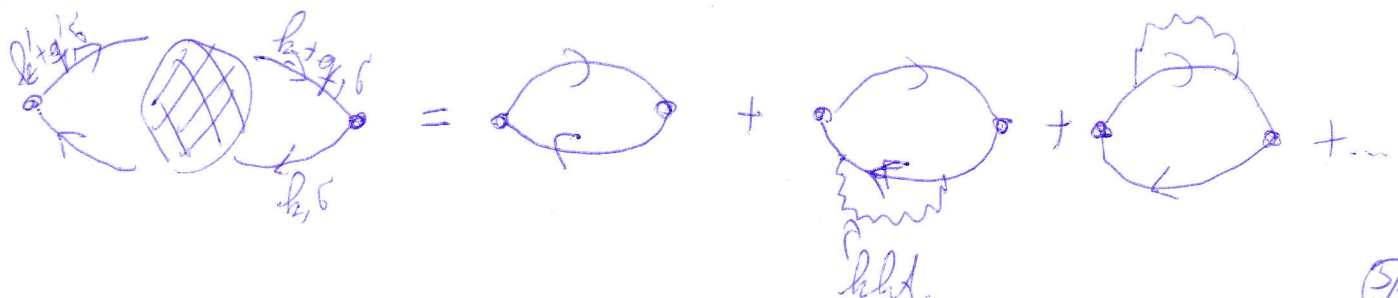
$$\Pi_{\sigma\sigma'}(q, t-t') = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t-t')\frac{1}{V}\langle [n_\sigma(q,t), n_{\sigma'}(q',t')] \rangle$$

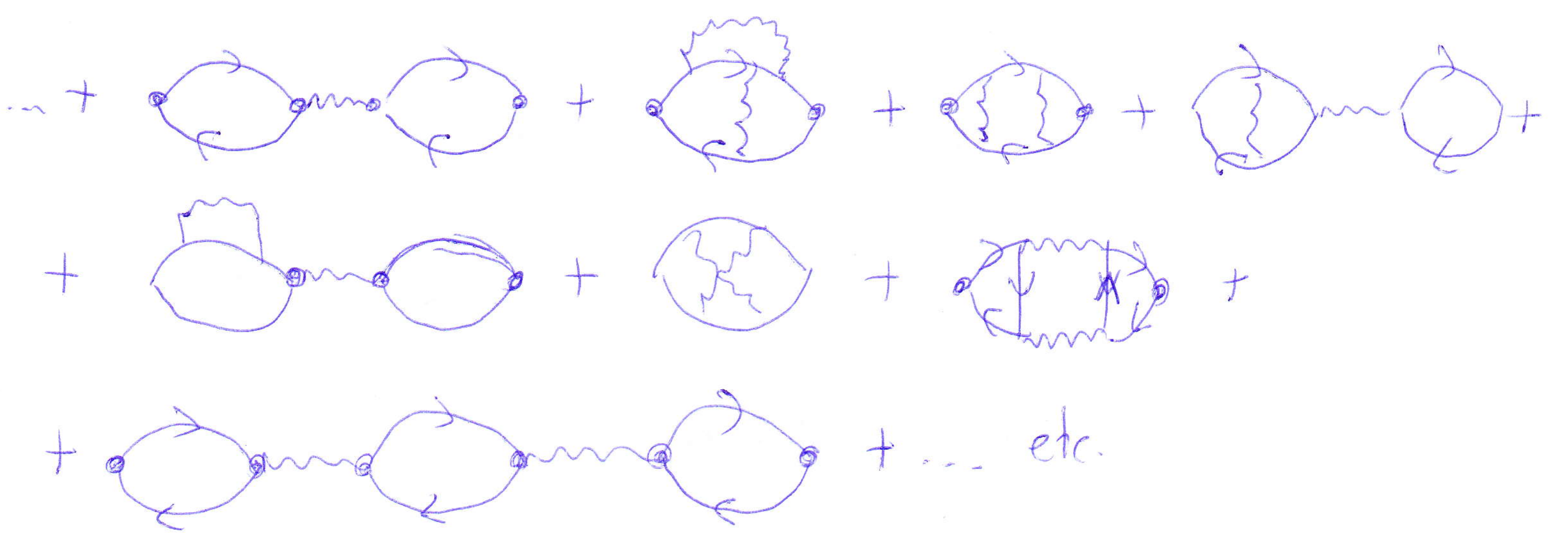
a képletben $n_\sigma(q,t) := \sum_k c^+_{k,\sigma}(t)\, c_{k+q,\sigma}(t)$

a kommutátorban 4 keltő-eltüntető lesz.

Green-fv.-el lehet kiszámolni.

Gráfok:





Önkonzisztens~~cia~~ számolás $\Longleftrightarrow$ figyelembe vesszük az $e^- - e^-$ khd.-t.

$$\varphi = \frac{u_{ext}}{\varepsilon_r} \qquad u = \frac{u_{ext}}{\varepsilon_r}$$ teljes potenciál.

$$\frac{1}{\varepsilon_r} = 1 + \frac{4\pi\tilde{e}^2}{q^2}\cdot\frac{n_{ind}}{\varepsilon_r u} \rightarrow \varepsilon_r(q,\omega) = 1 - \frac{4\pi\tilde{e}^2}{q^2}\,\frac{n_{ind}(q,\omega)}{u(q,\omega)}$$

Tfh $n_{ind} = \bar{\Pi}\cdot u$

$\hookrightarrow \varepsilon_r = 1 - \dfrac{4\pi\tilde{e}^2}{q^2}\,\bar{\Pi}$

$*$-gal összevetve:

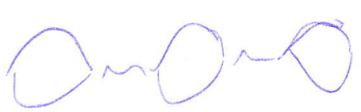
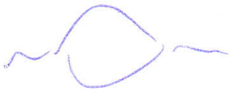
$$\tilde{\Pi}(q,\omega) = \frac{\bar{\Pi}(q,\omega)}{1-\frac{4\pi\tilde{e}^2}{q^2}\bar{\Pi}(q,\omega)} = \frac{\bar{\Pi}(q,\omega)}{\varepsilon_r}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\varepsilon_r(q,\omega)} = 1 + \frac{4\pi\tilde{e}^2}{q^2}\,\frac{\bar{\Pi}}{\varepsilon_r} = 1 + \frac{4\pi\tilde{e}^2/q^2}{1-\frac{4\pi\tilde{e}^2}{q^2}\bar{\Pi}}\,\bar{\Pi} \equiv 1 + U_{eff}(q,\omega)\,\bar{\Pi}(q,\omega)$$

$$U_{eff}(q,\omega) := \overbrace{\frac{4\pi\tilde{e}^2}{q^2}}^{\text{pontkölten}}\cdot\left(1-\frac{4\pi\tilde{e}^2}{q^2}\bar{\Pi}\right)^{-1}$$

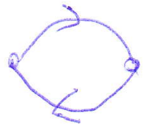
bármely más khd esetén is jó. Bizonyos gráffelös-szegzéshez elég, ha nem adjuk meg $\varepsilon_r(q,\omega)$-t

Pl.:

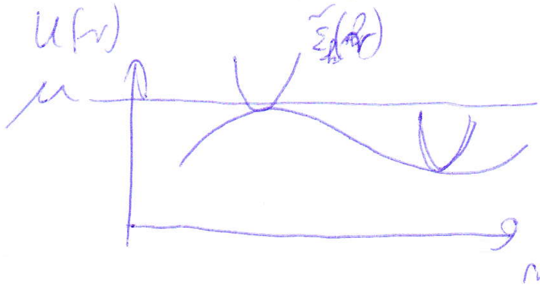
 a  gráf sorozata.

↑ irreducibilis gráfokká esik szét, ezeket felösszegezhetjük.

Már csak az irreducibiliseket kell kiszámolni.

Buborék:  $\Rightarrow$ ez a legegyszerűbb ired. gráf.

Thomas – Fermi közelítés:



$U(r)$ lassan változik a rácsállandóhoz képest.

szabad e^--ra: $\varepsilon_k \longrightarrow \tilde{\varepsilon}_k(r) = \varepsilon_k + U(r)$

$\forall$ hol más lesz ε_F és k_F.

Szabad e^--ra $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$; $\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2(r)}{2m_e} + U(r)$

$$\Rightarrow k_F(r) = k_F\left(1 - \frac{U(r)}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}}$$; $k_F = \dots$ 0 pot. esetén.

Elektronsűrűség: $n_e(r) = \frac{k_F^3(r)}{3\pi^2} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}\left(1 - \frac{U(r)}{\mu}\right)^{\frac{3}{2}}$

sorfejtés után: $n_e(r) = \frac{k_F^3}{3\pi^2} - \underbrace{\frac{m_e k_F}{\pi^2 \hbar^2}}_{\rho(\varepsilon_F)} U(r)$

$\rho(\varepsilon_F)$: állapotsűrűség.

$$\boxed{n_{ind}(r) = -\varrho(\varepsilon_F)\, U(r)}$$

ezt beletehetjük $\frac{1}{\varepsilon_r}$-es képletbe...

$$\frac{1}{\varepsilon_r(q)} = 1 \cancel{-} \frac{4\pi e^2}{q^2}\varrho(\varepsilon_F) \equiv 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2} \qquad q_{TF}^2 := \frac{4\pi e^2}{1}\varrho(\varepsilon_F)$$

frekfüggetlen, mert U időfüggetlen.

? előjel!

T-F hullámszám.

Mennyi a q_{TF}?

Fémekre $\frac{1}{q_{TF}} \sim a$ rácsállandó.

<u>Linhard-féle ε_r-alak:</u>

szabad e: $|k\rangle = e^{ikr}\frac{1}{\sqrt{V}}$ síkhullám.

perturbáció hatása: $\Phi_k(r,t) = \sum_{k'} \alpha_{k'}(t)\,|k\rangle\, e^{-i\frac{\varepsilon_k t}{\hbar}}$

$$n_{ind}(r,t) = 2\sum_{k<k_F}\left\{|\Phi_k(r,t)|^2 - \frac{1}{V}\right\} = \text{p.n.} = \Pi(q,\omega)\,U(q)$$

$$\Pi(q,\omega) = \frac{2}{V}\sum_k \frac{f_0(\varepsilon_k) - f_0(\varepsilon_{k+q})}{\hbar\omega - \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k + i\eta} \quad **$$

Fermi-stat.

Linhard-féle dielektromos fv.

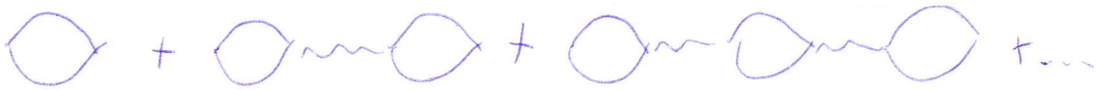
külső gerj. energiája.

úgy integrálunk, hogy regularizáljuk a kifejezést.

$$\frac{1}{x+i\varepsilon} = \mathcal{P}\frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$$ ... valami ilyesmi lesz.

Egy buborékra (Green-fv.-el) legyen Π_0

Felösszegzésre ... mértani sor.



$$\Pi(q,\omega) = \frac{\Pi_0(q,\omega)}{1-\frac{4\pi e^2}{q^2}\Pi_0(q,\omega)}$$

Random Phase Approximation.

$\boxed{\text{RPA}}$

$\downarrow$

ez is a ** eredményt adja.

$\omega \neq 0$-ra $\quad \varepsilon_r = \varepsilon_r' + i\varepsilon_r''$

$\omega = 0$-ra $\quad \varepsilon_r(q) = 1 + \underbrace{\frac{q_{TF}^2}{q^2}}_{\frac{4\pi e^2}{q^2}\varrho(\varepsilon_F)} \underbrace{\left(\frac{1}{2} + \frac{k_F}{2q}\left(1-\frac{q^2}{4k_F^2}\right)\ln\left|\frac{q+2k_F}{q-2k_F}\right|\right)}_{F\left(\frac{q}{2k_F}\right)}$

RPA-n túli bonyolult gráfok korrekciója csak q_{TF}-et változtatják, a fizikát nem nagyon.

$\varepsilon_k \sim \tilde{\varepsilon}_k$ kvázirészecske ... (e^- + kkt „palást")

Leárnyékolás: fémekben külső töltés átrendezi az e^--okat. úgy, hogy a bevitt töltést a többi töltés leárnyékolja. $\varepsilon_r \xrightarrow{q \to 0} \infty$; u_{ext}/ε_r ...

$$\varphi_{ext} = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad \text{pontszerű forrás.}$$

$\hookrightarrow$ Fourier: $\varphi_{ext}(q) = \dfrac{Q}{\varepsilon_0 q^2}$

$\omega = 0$ (statikus)

Indukált töltéssűrűség: $n_{ind}(q) = \Pi(q) U_{ext} =$

$$= \Pi(q)(-e)\varphi_{ext}(q) = -e\,\Pi(q)\frac{Q}{\varepsilon_0 q^2}$$

$$Q_{ind} \overset{-e}{=} \int n_{ind}(r)\,dr \overset{-e}{=} n(q=0) = \lim_{q\to 0}\left(+e^2\Pi(q,\omega)\frac{Q}{\varepsilon_0 q^2}\right) =$$

$$= e^2 \lim_{q\to 0}\left(\frac{\Pi(q)}{1-\frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2}\Pi(q)}\cdot\frac{Q}{\varepsilon_0 q^2}\right) = -Q \quad \text{tökéletes leárnyékolás!}$$

$\Pi(q)$ $q \to 0$ - ban véges.

De migetelőknél ez nem igaz!

<u>Thomas-Fermi leárnyékolás:</u> $\varphi(q) = \dfrac{\varphi_{ext}(q)}{\varepsilon_r(q)} = \dfrac{1}{\varepsilon_r(q)}\dfrac{Q}{\varepsilon_0 q^2}$

Ide kell a T-F.

$$\varphi(q) = \left(1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2}\right)^{-1}\frac{Q}{\varepsilon_0 q^2} = \frac{Q}{q^2+q_{TF}^2}\,\frac{1}{\varepsilon_0}$$

Vissza Fourier: $\underline{\underline{\varphi(r)}} = \dfrac{1}{V}\sum_k \dfrac{Q}{\varepsilon_0(q^2+q_{TF}^2)}e^{iqr} = \ldots = \underline{\underline{\dfrac{Q}{4\pi\varepsilon_0 r}e^{-q_{TF}r}}}$

Yukawa.

$$\frac{1}{q_{TF}} \sim a \quad \text{(lecsengési hossz)}$$

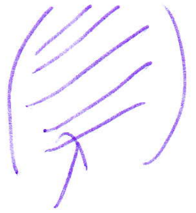
De azt feltételeztük, hogy U lassan változik...

A közelítés nem jogos.

Friedel-oszcilláció: TF helyett Lindhard...

$$n_{ind}(r) \cong \left(\cos(2k_F r)\frac{1}{(2k_F r)^3}\right)$$

$\boxed{\text{4. előadás}}$



e⁻-rendszer

V_{ext}: külső perturbáció

$$H_{ext} = \int n(r') V_{ext}(r')\,dr'$$

Eredetileg homogén $n(r)$ változása ... $\Delta n(r) = ?$

ált. szuszceptibilitás

$$\Delta n(r) \sim \int \Pi(r,r') V_{ext}(r')\,dr'$$

Fourierje

Nem lokális a változás!

dielektromos fv.: $\dfrac{1}{\varepsilon_r(q,\omega)} = 1 + 4\pi \dfrac{\tilde{e}^2}{q^2}\Pi(q,\omega)$

$$\Pi(r,t,r',t') = -\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[n(r,t), n(r',t')\right]\right\rangle \Theta(t-t')$$

$t' > t$ garantálása...

Szabad rendszerre:

$$\Pi^0(q,\omega) = \frac{2}{V}\sum_k \frac{f_0(\varepsilon_k) - f_0(\varepsilon_{k+q})}{\hbar\omega - \varepsilon_{k+q} + \varepsilon_k + i\delta} \qquad *$$

RPA:

$$\Pi(q,\omega) = \frac{\Pi^0}{1+\frac{4\pi \tilde{e}^2}{q^2}\Pi^0} \; ; \quad \varepsilon_r(q,\omega) = 1 - \frac{4\pi \tilde{e}^2}{q^2}\Pi^0(q,\omega)$$

Statikus eset: $\omega \to 0$; $q \to 0$.

*-ból látszik a baj.

Nem ugyanaz a kettő!

először $q \to 0$: a számláló eltűnik $\forall\omega$-ra, Π^0 0 lesz.

először $\omega \to 0$: $\hbar\omega$ elmegy, Π^0 véges lesz...

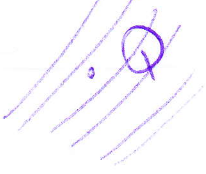
$$\Pi^0 = -\varrho(\varepsilon_F)$$

Miért? $q = 0 \to$ teljes térre vett integrál $\to \int n\,dr$ megmaradó $\to [\ ,\ ] = 0$.

(Az $\omega = 0$ a jobb...)

Statikus diel. állandó: $\varepsilon_r = 1 + \frac{4\pi \tilde{e}^2}{q^2}\varrho(\varepsilon_F)$

← lényeg: fémekben $\sim \frac{1}{q^2}$.

Árnyékolás: 

pontszerű töltés hatására a kezdetben homogén $n(r)$ változik.

Thomas-Fermi: $\sim \dfrac{e^{-rq}}{r}$ | Lindhard: $\sim \dfrac{\cos 2k_F r}{(2k_F r)^3}$ ← (?)

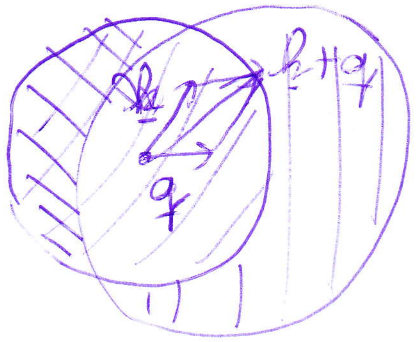
A Fermi-felület szélénél lévő szakadás miatt oszcillál...

1D rendszerek: Fermi-gömb helyett...

Legyen $\omega = 0$. (most még 3D)

$$\Pi^0(q,\omega) = \frac{2}{V}\sum_k \frac{f(\varepsilon_k) - f(\varepsilon_{k+q})}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}$$

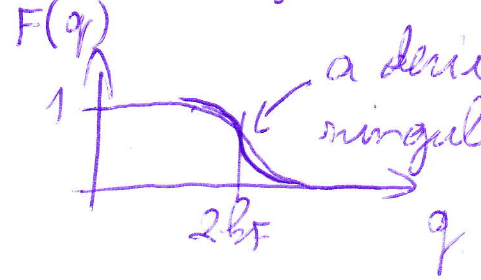
✓ valós rész, $i\delta$-t hagyjuk.



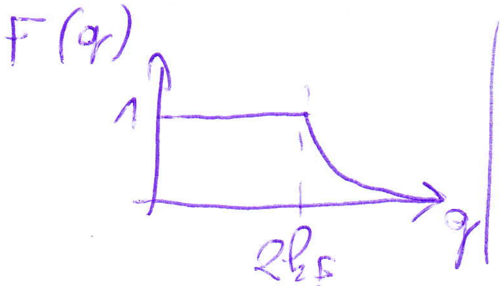
Ha $k+q$ kívül van a gömbön, az a ### (k benne van!), ha k kívül van, $k+q$ belül, az a |||. Ezekre kell integrálni.

$$\Pi^0(q,\omega) = -\rho(\varepsilon_F)\,F(q)$$

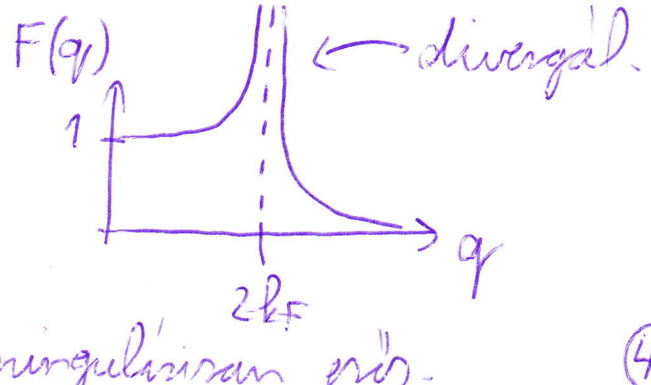
↑ folytonos...



2D-ben:



1D-ben



→ 1D-ben a $2k_F$-es válasz szingulárisan erős.

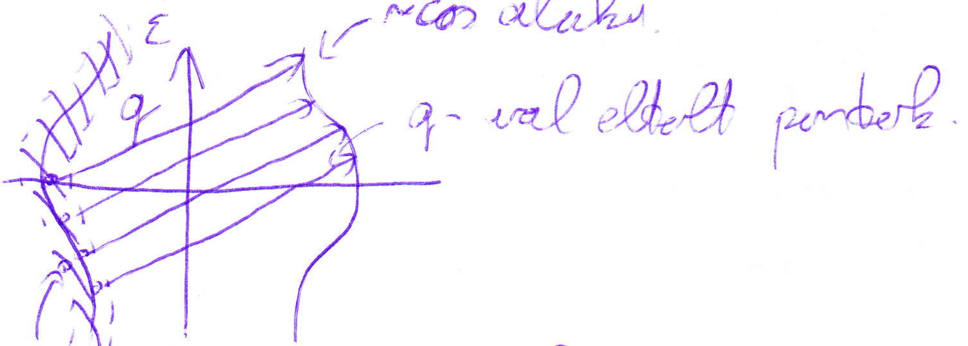
3D-s, ami 1D-ként viselkedik...

↳ lehet, hogy k és $k+q$ is a Fermi felületen van...
(nagy lesz az integrálandó függvény (kicsi energianevező")

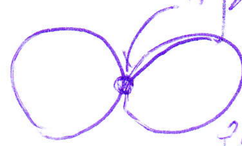
↳ a teljes integrálban ez a járulék elhagyható.

↳ alacsonyabb dimenzióban egyre nagyobb a felület járuléka.

Tfh. ilyen alakú a felület.



gömbnél.



1 pont a metszet, ezért hagyható el.

Emiatt kint lévő elemekre a nevező kicsi.

„Illeszkedő Fermi-felület" → lehet szinguláris járulék.

Mágneses indukció, mint perturbálás. (nem skalár V)

$$\mathcal{H}_{ext} = -\int B(r')\, m(r')\, dr'$$

↳ mágn. mom.

Mágneses mom. megjelenése várható.

$$m(r) \sim \int \chi(r-r')\, B(r')\, dr'$$

↳ megint nem lokális a kapcsolat (mágneses szusz.)

$$\chi(r,t,r',t') = \frac{i}{\hbar}\Theta(t-t')\langle[m(r,t),m(r',t')]\rangle$$

$$n(r,t) = n_\downarrow(r,t) + n_\uparrow(r,t)$$

$$m(r,t) = \frac{1}{2} g_e \mu_B \left[n_\uparrow(r,t) - n_\downarrow(r,t)\right]$$

Ami már Π-ben mint χ-ben, a kommutátorban kiesik → kb. u. olyan eredmények lesznek.

$$\chi(q,\omega) = \left(\frac{1}{2} g_e \mu_B\right)^2 \mu_0 \Sigma(q,\omega)$$

← $q = 0$-ban $\rho(\varepsilon_F)$

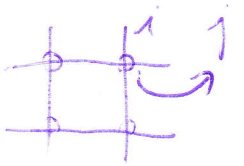
← u. az mint a Π ...

$(-\Pi)$?

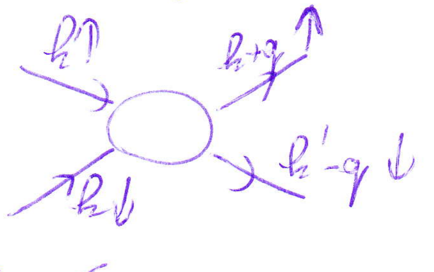
a mágn.-t $B \sim H$ adja.

v. ö.: Pauli mágn.: $\chi = \left(\frac{1}{2} g_e \mu_B\right)^2 \mu_0 \rho(\varepsilon_F)$ visszakaptuk.

Hubbard modell.



$$\underbrace{\sum_{ij} t_{ij} c_i^+ c_j}_{\text{ugrálás}} + \underbrace{\sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}_{\text{nem szeretnek egy helyre menni.}} \quad \text{(rácsrepr.)}$$



Impulzusrepr.:

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} + U \sum_{k,k',q} c^+_{k+q\uparrow} c^+_{k'-q\downarrow} c_{k'\downarrow} c_{k\uparrow}$$

kül. spinű e⁻-ek nem hatnak kölcsön.

Átlagtérelmélet:

$U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ -ből ...

$$(n_{i\uparrow}+\langle n_{i\uparrow}\rangle-\langle n_{i\uparrow}\rangle)(n_{i\downarrow}+\langle n_{i\downarrow}\rangle-\langle n_{i\downarrow}\rangle)$$

$$\Rightarrow U(n_{i\uparrow}\langle n_{i\downarrow}\rangle+n_{i\downarrow}\langle n_{i\uparrow}\rangle)+\mathcal{O}(^2)$$

$\uparrow$ állók $U\langle n_{i\downarrow}\rangle$-t, $\downarrow$ állók $U\langle n_{i\uparrow}\rangle$-t éreznek.

$$\tilde{\varepsilon}_{k\uparrow}=\varepsilon_k+U\langle n_\downarrow\rangle \; ; \; \tilde{\varepsilon}_{k\downarrow}=\varepsilon_k+U\langle n_\uparrow\rangle$$

↪ az átlagtér eltolja az energiákat.

Homogén külső térrel (H) statikus χ-t mérünk.

$$\tilde{\varepsilon}_{k\uparrow}\to\tilde{\varepsilon}_{k\uparrow}-\frac{1}{2}g_e\mu_B\mu_0 H$$

$$\tilde{\varepsilon}_{k\downarrow}\to\varepsilon_{k\downarrow}+\frac{1}{2}g_e\mu_B\mu_0 H$$

$$m=\frac{1}{2}g_e\mu_B(\langle n_\uparrow\rangle-\langle n_\downarrow\rangle)$$

$$\langle n_\uparrow\rangle-\langle n_\downarrow\rangle=\sum_k f_0(\varepsilon_{k\uparrow})-\sum_k f_0(\varepsilon_{k\downarrow})$$

önkonzisztensen kell megoldani. (f-ben van $\langle\ldots\rangle$!)

$\tilde{\varepsilon}_k$-kat kell beírni!

Mellékfeltétel: a teljes részecskeszám megmarad.

$$m\sim\sum_k\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon_k}\left[U\langle n_\downarrow\rangle-\frac{1}{2}g\mu_B\mu_0 H-U\langle n_\uparrow\rangle-\frac{1}{2}g_e\mu_B\mu_0 H\right]$$

megjelent ebben az m!

Teljes mágn.:

$$M = -\frac{1}{2} g_e \mu_B \left[U(\underbrace{\langle n_\downarrow\rangle - \langle n_\uparrow\rangle}_{m\ldots}) - g_e\mu_B\mu_0 H\right] \rho(\varepsilon_F)$$

$$M = U\rho(\varepsilon_F) M + \frac{1}{2}(g_e\mu_B)^2 \mu_0 H \rho(\varepsilon_F)$$

$$M = \left(\frac{1}{2}(g\mu_B)^2\mu_0 H \rho(\varepsilon_F)\right)\left(1 - U\rho(\varepsilon_F)\right)^{-1}$$

$$\Rightarrow \chi = \chi_{Pauli}\left(1-U\rho(\varepsilon_F)\right)^{-1}$$

Stoner-növekedés. a χ a Coulomb miatt felerősödik a kölcsön nem ható rendszerhez képest.

Dinamikusra...

$$\chi(q,\omega) = \frac{\chi^0(q,\omega)}{1-U\chi^0(q,\omega)}$$

Pontszerű mágneses pert (mágnesesen nemrendezett atomot rakok bele)

↳ a spinsűrűséget kell vizsgálni.

⇓

Ruderman-Kittel oszcilláció

$$m(r) \sim \frac{\cos(2kr)}{r^3}$$

R

vezető e^--tenger oszcillálni kezd, a szomszéd ezt érzi. (RKKY)

Kltó e^--rendszer... (7)

$$\mathcal{H} = \sum_{k} \varepsilon_k c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{kk'q} U(q)\, c^+_{k+q\,\sigma}\, c^+_{k'-q\,\sigma'}\, c_{k'\sigma'}\, c_{k\sigma}$$

$$U(q) = \frac{4\pi \tilde{e}^2}{q^2}$$

$n_e(N)$ helyett r_0-t adjuk meg.

$\hookrightarrow$ V térfogatban N_e $\bar{e}$. $\leftarrow$ 1 e^--hez tartozó gömb...

$$n_e = \frac{N_e}{V} \; ; \quad N_e \frac{4\pi r_0^3}{3} = V$$

r_0 és k_F... $\quad 2\,\frac{4\pi k_F^3}{3}\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = N_e$ ...

$$r_s = \frac{r_0}{a_0}$$ $\leftarrow$ Bohr-sugár. $\left(\frac{\tilde{e}^2}{a_0} \; \text{Hartree-féle energiaegység.} \right)$

Energia számítása (pert. sz.) (periodikus pot. nélkül)

$$E_0 = \sum_{|k|<k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{V}{\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k_F^5}{5} \Rightarrow \frac{E_0}{N_e} = \frac{1{,}105}{r_s^2} \left(\frac{\tilde{e}^2}{a_0}\right)$$

$$\Delta E^{(1)} = \langle \Psi_0 | \frac{1}{2V} \sum_{kk'q} U(q)\, c^+ c^+ c c \,| \Psi_0 \rangle$$

Fermi tenger. $\rightarrow$ ugyan oda kell visszajutni.

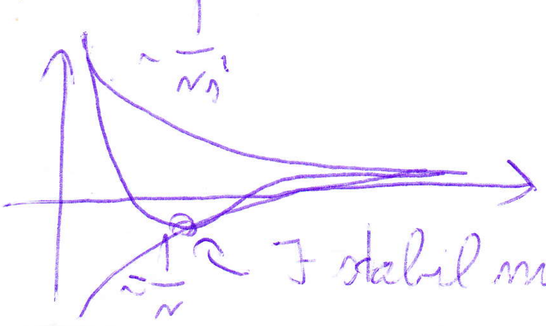
$q=0$-s tag nincs. (Hartree-járulék)

kicserélődési járulék.

$k' = k + q$.

eredmény:

$$\frac{\Delta E^{(1)}}{N} = -\frac{0{,}458}{r_s} \left(\frac{\tilde{e}^2}{a_0}\right)$$



$\exists$ stabil min.

Gond: $\Delta E^{(2)} \sim \ln r_s$

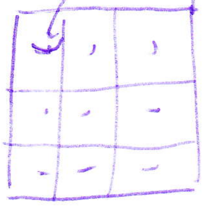
a p-számítás nem konvergens.

Ahol érvényes: sűrű e^--gáz (r_s kicsi)

Híg gáz: adott térf.-ban a legtávolabb akarnak lenni egymástól → rács (Wigner kristály)

(a homogén háttér miatt nem mennek a ∞-be.)

rácspont körül állnak az e^--ok.



A kocka cellákat gömbbel közelítjük (bennük homogén a háttér)

→ az e^- parabolát érez a homogén háttérből.

Ha $r_s \approx 100$, akkor elképzelhető, hogy a Wigner-rács stabil. (3D-ben...)

2D-ben lehet hogy létezik!

$\boxed{\text{5. előadás}}$

Homogén e^--gáz → Monte Carlo szimulációval ki lehet számolni az energiát.

Ami fontos: potenciálban mozgó elektronok...

DFT: sűrűségfunkcionál-elmélet

$H\Psi = E\Psi$ elvileg megoldható.

$$H = \underset{\text{kinetikus}}{T} + \underset{e^-\text{-}e^-\text{ khl.}}{U} + \overset{e^-\text{-rács khl.}}{V}$$

$$T = \sum_i \left(\frac{\hbar}{i}\nabla_i\right)^2 \frac{1}{2m} \qquad U = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} u(r_i - r_j)$$

$\psi \Rightarrow n_e(r)$ e^--ok sűrűsége kiszámolható a hullámfv.-ből.

Út: $H \to \psi \to n_e(r)$. (egyértelmű kapcsolat)

Áll: fordítva is lehet. $n_e(r) \to H$.

A sűrűségből kijön a potenciál alakja.

$V \to \psi \to n_e(r)$ elképzelhető, hogy más V-ből

$V' \to \psi' \to n_e^{?}{}'(r)$ ugyan az az $n_e(r)$ legyen?

Áll: ha $n_e(r) = n_e'(r)$, akkor $V = V' + \text{const}$.

(folytonos, nem szinguláris V-re igaz!)

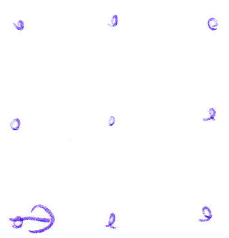
Hohenberg-Kohn I. tétele

$\forall$ mérhető fiz. mennyiség egyértelmű funkcionálja $n_e(r)$-nek.

Áll: A fizikai sűrűség az $E(\{n_e(r)\})$ minimuma.
(energia)

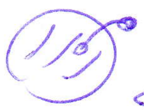
(Hohenberg-Kohn II. tétele)

Alkalmazás:



1 atom elmozdulására kijön az, hogy mennyi energia kell az elmozdításhoz. $\Rightarrow$ előállítható a fononoknál látott parabolikus potenciál.

Gerjentések keltése: E_0, Ψ_0 ...

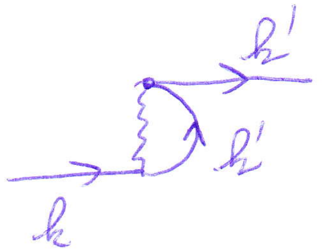
egyneműbb pl.:  e^--lyuk pár.

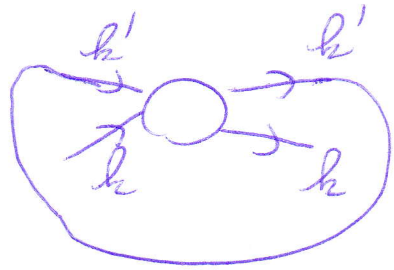
← 1 e^--t kilökök a Fermi-felületen kívülre.

Energia: $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, ennek változása a kérdés.

↳ homogén m.-ben Hartree közelítés nem ad járulékot.

A Hartree-Fock ezt adja: $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{V}\sum_{k'} u(k-k') f_0(\varepsilon_{k'})$

ábrán: 

vagy: 

A kijövő részecske tölti be a lyukat.

(Kicserélődési korrekció)

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{V}\sum_q \frac{4\pi e^2}{q^2} f_0(\varepsilon_{k+q}) \qquad \text{(Coulombra)}$$

↑ a Fermi-felület közelében rossz eredményt ad, ∞ tömegű részecskéket. ?

Megoldás: csupán Coulomb helyett árnyékolás.

$$\tilde{\varepsilon}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{V}\sum_q \frac{4\pi \tilde{e}^2}{q^2 \varepsilon_r(q)} f_0(\varepsilon_{k+q})$$

← dielektromos állandó.

Thomas-Fermi: $\varepsilon_r^{TF}(q) = 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2}$

↳ $\tilde{\varepsilon}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{V}\sum_q \frac{4\pi e^2}{q^2+q_{TF}^2} f_0(\varepsilon_{k+q})$ eltűnt a $q=0$-ás járulék.

→ a korrekció kicsi, „gyenge renormálás”:

Lindhardos cucc: ?

$$\tilde{\tilde{\varepsilon}}_k = \tilde{\tilde{\varepsilon}}_k^{(r)} + i\Gamma_k . \quad \text{(komplex)}$$

Részecske időfüggő állapota:

$\psi_k \to \varepsilon_k$ (stabilis megoldás)

Időfüggő: $e^{i\frac{t}{\hbar}\varepsilon_k}$ ← oszcillál.

Ha lenne komplex rész: $e^{i\frac{\varepsilon_k t}{\hbar} - \Gamma_k t/\hbar}$ ← lecsengés...

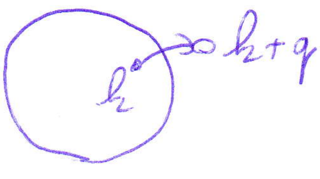
Γ_k jelentése: $\Gamma_k \sim \frac{1}{\tau_k}$ ← élettartam.

$T=0$-ban: $\Gamma_k \approx (\varepsilon_k - \mu)^2$

Véges T-re: $\Gamma_k \approx (\varepsilon_k - \mu)^2 + T^2$ ← a Fermi-felületen lévő részecskére is véges az élettartam.

Fémekre $T_{szoba} \approx T=0$. → jók a számolások... (hosszú élettartamúak a gerjesztések)

e^--lyuk pár:

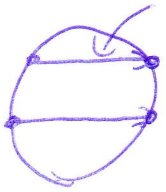


$q \to 0$ esetben tudunk 0 energiájú gerjesztést kelteni.

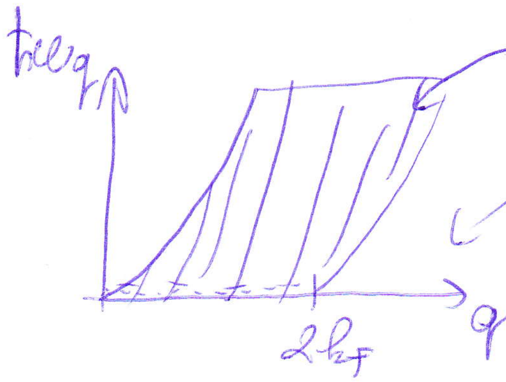
$q \to 0$ -ra tehát $\hbar\omega_q = (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \to 0$

Más eset:

nagy imp. változás, mégis kis energia...



Ha $q < 2k_F$, akkor $\exists$ 0 energiájú gerjesztés.



kontinuum.

itt nincs 0 energiájú gerj.

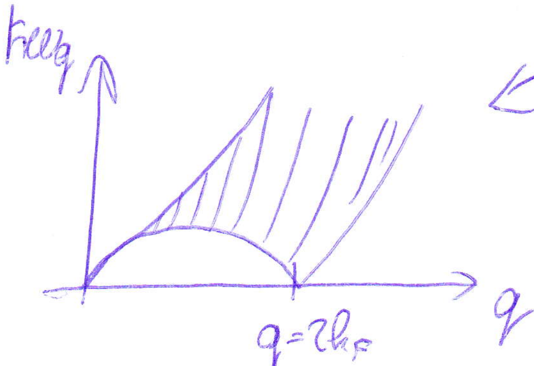
(az ábra Fermi gömbre v. körre jó.)

1D esetben:

$q \approx 0$ -nál és

$q \approx 2k_F$ -nél tudunk kis

energiájú gerjesztést csinálni.



$$\frac{\hbar^2 (k+q)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{m} \vec{k}\vec{q} + \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Khh. bekapcsolása:

$c^+_{k+q,\sigma} c_{k\sigma} |\Psi_{FS}\rangle$ (mi lesz vele, ha a khh bekapcsol? nem lesz sajátállapot!)

$\to$ átszóródik egy másik párrá. (k', $k+q$ impulzussal)

$$c^+_{k+q,\sigma} c_{k,\sigma} |\Psi_{FS}\rangle \to \quad c^+_{k'+q,\sigma} c_{k',\sigma} |\Psi_{FS}\rangle$$

q megmarad, k' bármi lehet...

$$\underbrace{\sum_{k'} \Phi_{k',q} c^+_{k'+q,\sigma} c_{k'\sigma}}_{\alpha^+_{q\sigma}} |\Psi_{FS}\rangle = \Psi \to \text{ez lehet hogy sajátállapot.}$$

$\alpha^+_{q\sigma}$ (keltő operátor)

Hasonlóan vezethető be $\alpha_{q\sigma}$.

$[\alpha_{q\sigma}, \alpha^+_{q'\sigma'}] = \delta_{qq'}\delta_{\sigma\sigma'}$, ha az alapállapotra hat.

$\to$ α-k bozonok az alapállapotban.
(közelítés: legyenek bozonok a gerjesztések...)

$$\hat{H} = \sum_q \hbar\omega_q \alpha^+_{q\sigma}\alpha_{q\sigma}$$

kell még: $[H, \alpha^+_{q\sigma}] = \hbar\omega_{q\sigma}\alpha^+_{q\sigma}$

$[H, \alpha_{q\sigma}] = -\hbar\omega_{q\sigma}\alpha_{q\sigma}$

ekkor írható a fenti alakba H úgy, hogy a gerjesztés bozon legyen.

H-ban van kht. Ki kell számolni az α-val vett kommutátorokat. A szokásos átlagteres módszerrel kijön, hogy a fentiek igazak.

Kérdés a $\hbar\omega$...

$\hbar\omega_{q\sigma}$:

[1] $$1 = u(q)\frac{1}{V}\sum_{k\sigma} \frac{f_0(\varepsilon_{k\sigma}) - f_0(\varepsilon_{k+q,\sigma})}{\hbar\omega_{q,\sigma} - \varepsilon_{k+q,\sigma} + \varepsilon_{k\sigma}}$$ önkonzisztens egyenlet.

Emlék:
$$\varepsilon(q,\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2}\sum_{k,\sigma}\left(-\|-\right)$$

Vagyis olyan $\hbar\omega$-nál van adott q-ra megoldás, ahol $\varepsilon(q,\omega) = 0$.

Emlék...: $\rho(q,\omega) = \dfrac{\rho_{ext}(q,\omega)}{\varepsilon_r(q,\omega)}$ a kis ε azt mondja, hogy külső zavarra a töltés nagy lesz. (?)

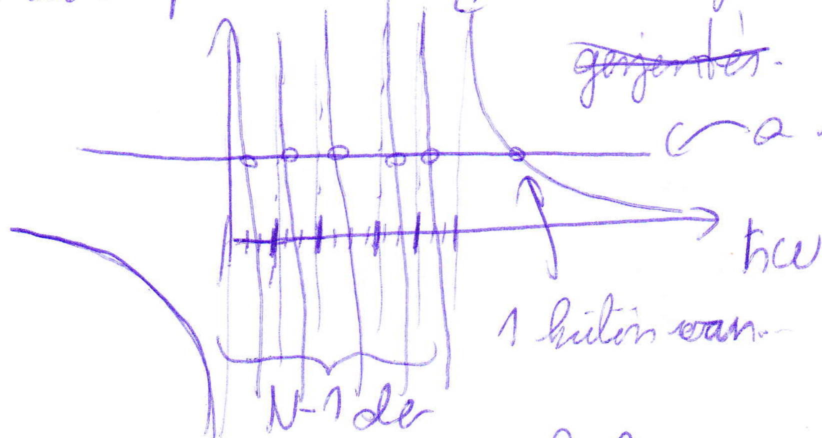
$\Downarrow$

$\varepsilon_r = 0$-nál ρ_{ext} nélkül is lehet válasz (?) spontán gerj.

Gond: közelítést vettem önre közelítéssel.
(de jobb közelítésekben is ugyanez jön ki)

[1]-et hogy oldjuk meg?

adott q-ra...



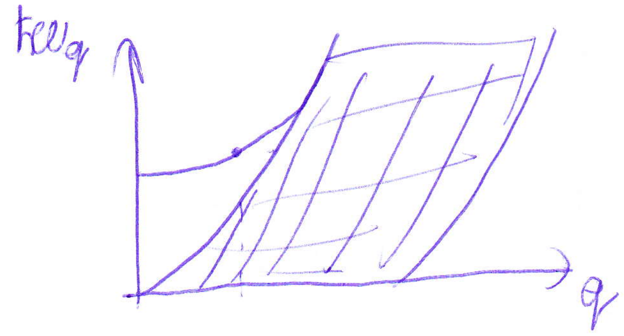
a szingularitások helyén ~~van~~ fi sűrűn vannak.
~~gerjesztés~~.
a metszeten vannak megoldások.

N megoldásból N-1 a kölcsön nem ható eset kvalitatív közt marad, 1 fölé kerül.

5/6

khd. esetben tehát:

(pár-gerjesztések kötött állapotai)



számolás után: $\varepsilon_r(q,\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$; $\omega_p^2 := \frac{4\pi n_e \tilde{e}^2}{m}$

(kis q-kra jó)

$\omega = \omega_p$-nél eltűnik az ε_r.

→ Spontán plazmarezgés külső pert. nélkül: <u>Plazmon</u>

→ Gerjesztési energia: $\hbar\omega_p \approx 10\,\mathrm{eV}$ → a sávenergiáknál és kT-nél nagyobb.
(nem tudjuk termikusan gerjeszteni.)

→ e^- nyalábbal lehet ilyeneket létrehozni.

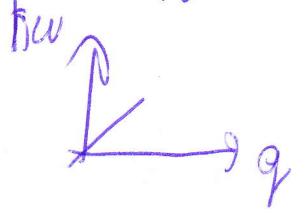
<u>Töltetlen részecskékre</u> (He^3) – $\varepsilon_r(q)$ nem szinguláris, nem $\sim \frac{1}{q^2}$-es!

↓

$(\hbar\omega)^2 = \text{const}$ helyett ... $1 = U(q)\, q^2 \sum$ – – –

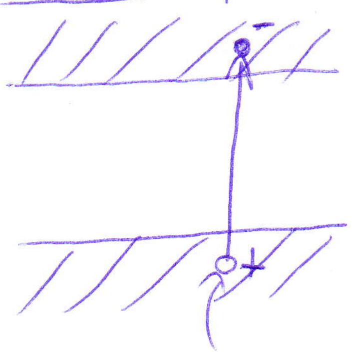
$U(q) \sim \text{const}$ (ilyen lesz az egyenlet)

↳ $(\hbar\omega)^2 \sim q^2$ → energia $\sim q$.



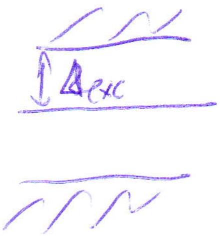
hanghullám-szerűség: „zérus-hang"

Sávok szerepe:



a két „részecske" vonzza egymást.

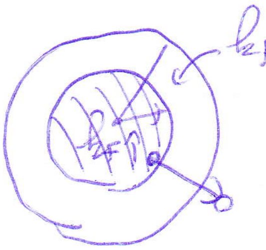
→ kollektív energianívó jöhet létre a tiltott sávban!, „exciton."



→ mélyen a Δ vannak, szigetelőkben érdekes,

→ optikai tulajdonságok nyomán vizsgálhatóak.

Minta polarizálása:



2 Fermi-gömb.

Gerjesztés közben átpolarizálás...

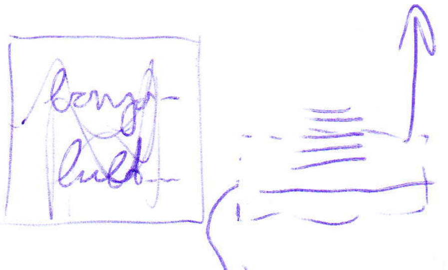
→ spinhullámszerű képződmények alakulnak ki.

→ nem spontán szimmetriasértés! Nincs Goldstone-módus...

|6. előadás|

Landau-féle Fermi-folyadék elmélet:

Kható rendszer:



↑ gerjesztések → bonyolultak. De nem érdekes mindig!

szobahőm-en az alsó $k_B T$-nyi tartomány érdekes. → itt kb. szabad gerj.

5/8

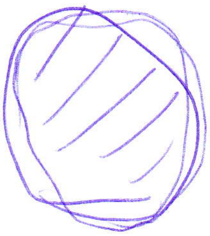
energiaspektrum alja:

$$\sum_{\lambda,q} \hbar\omega_{\lambda q}\left(a^+_{\lambda q} a_{\lambda q} + \frac{1}{2}\right)$$

szabad rezgések
fononok, magnonok,
(rácsponti rezgései)

Ha a khh.-t kikapcsoljuk, akkor a bozonikus gerjesztések megszűnnek.

Fermi-rendszer: $|\Psi_{FS}\rangle$: nem khtó rsz. alapállapota.



$c^+_{k\sigma}|\Psi_{FS}\rangle$: gerjesztés

khh. bekapcsolása: $|\Psi_{FS}\rangle \xRightarrow{\text{helyett...}} |\Psi_0\rangle$ khtó alapállapot.
(adiabatikus)

$c^+_{k\sigma}|\Psi_{FS}\rangle \xrightarrow{\text{helyett...}} \beta^+_{k\sigma}|\Psi_0\rangle$ kvázirészecske

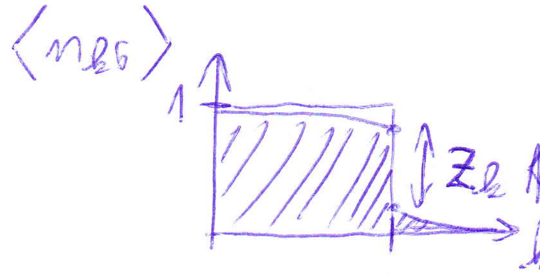
↳ a kvantumszámok u-azok!

A kvázirészecske a khh kikapcsolásakor igazi részecske lesz. ②

Khtó rendszer → kvázirészecskék majdnem szabad rendszere.

→ igazi részecskék által alkotott „folyadék".

Feltételezzük, hogy a kép jó, nem „bizonyítjuk"!



$Z_k \ll 1$, véges ($\mathcal{O}(1)$) Fermi-él.

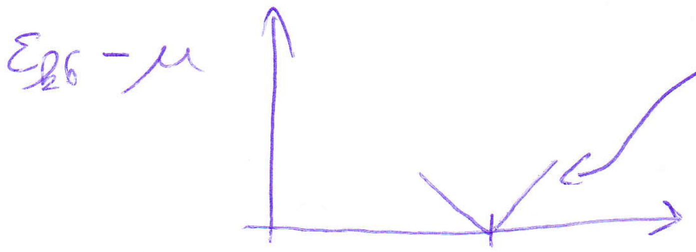
k_F ← ennek a helye nem változik.

$$Z_k = \left|\langle \Psi_{k,\sigma} | c^+_{k\sigma} | \Psi_0 \rangle\right|^2$$ (átfedés)

↑ $\beta^+_{k\sigma}|\Psi_0\rangle$

annak a vsz-e, hogy a kv. részecskét tartalmazó állapotban van igazi részecske.

Disp. rel (kvázirész.-é):



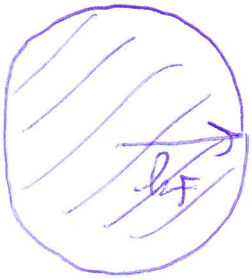
$\hbar v_F (k - k_F)$

$v_F = \dfrac{\hbar k_F}{m^*}$ ← effektív tömeg.

a felületen eltűnik, onnan lineárisan nyílik.

(A szupravezetőknél pl. nem ilyen...)

<u>Landau:</u> $\delta n_{k\sigma}$ számú e^--t és lyukat keltek. (nem kh-tó rendszerben)



$$E^{(0)} = E_0^{(0)} + \sum_{k,\sigma} \left(\varepsilon_k^{(0)} - \mu\right) \delta n_{k\sigma}$$

← μ-től mérve...

Ezután bekapcsoljuk a kh-t...

$\delta n_{k\sigma}$ változatlan, de...

$$E = E_0 + \sum_{k,\sigma} \underbrace{(\varepsilon_{k,\sigma} - \mu)}\, \delta n_{k\sigma}$$ az energia más...

tfh. $\frac{\hbar^2 k_F}{m^*}(k - k_F)$ alakú! m^* egy új paraméter (az egyetlen)

→ m^* tömegű rések szabad rendszere, triviprobléma.

c_V, χ $\varrho(\varepsilon_F)$-től függ, abban van vhogy az m^*...

Szabadenergia...

$$F = F_0 + \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_k - \mu)\, \delta n_{k,\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{k,\sigma,k',\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k, k')\, \delta n_{k\sigma}\, \delta n_{k'\sigma'} + \dots$$

Landau lényege, hogy ez is itt van.

új paraméterek: $f_{\sigma\sigma'}(k, k')$ ... sok!

A 2 tag u. olyan nagyságrendű. $\delta n_k \gg \delta n_k \delta n_{k'}$, de $(\varepsilon_k - \mu)$ is kicsi!

$$f_{\sigma\sigma'}(k, k') = ?$$

$$\frac{\delta F}{\delta n_{k\sigma}\, \delta n_{k'\sigma'}} = \frac{1}{V} f_{\sigma\sigma'}(k, k') = \frac{1}{V} f_{\sigma'\sigma}(k', k)$$

ahhoz, hogy fizikai mennyiség legyen...

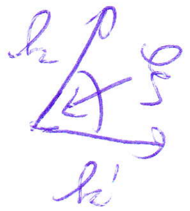
Időtükrözés:

$$f_{\sigma\sigma'}(k,k') = f_{-\sigma,-\sigma'}(-k,-k')$$

Paritás: $f_{\sigma\sigma'}(k,k') = f_{\sigma,\sigma'}(-k,-k')$

$$\Longrightarrow \quad f_{\uparrow\uparrow} = f_{\downarrow\downarrow} \quad \text{ill.} \quad f_{\uparrow\downarrow} = f_{\downarrow\uparrow}$$

k-függés izotróp rendszerben:



$$f(k,k') = f(\xi) = f(\cos(\xi))$$

$$f_{\uparrow\uparrow}(\cos\xi) = f_{\downarrow\downarrow}(\cos\xi)$$

$$f_{\downarrow\uparrow}(\cos\xi) = f_{\uparrow\downarrow}(\cos\xi)$$

kombinációk:

$$f^{s} = \frac{1}{2}\left(f_{\uparrow\uparrow} + f_{\uparrow\downarrow}\right)$$

$$f^{a} = \frac{1}{2}\left(f_{\uparrow\uparrow} - f_{\uparrow\downarrow}\right)$$

szögfüggés:

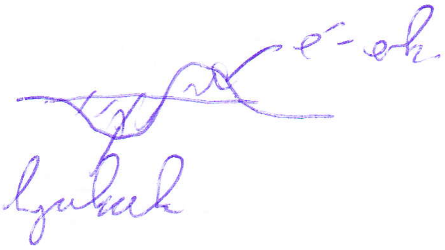
$$f^{s/a}(\cos\xi) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l^{s/a} P_l(\cos\xi)$$

∞ sok paraméter, de nem mind kell a fizikához.

Ha már vannak kv. részecskék, akkor mennyi en. kell, hogy még egyet betegyek?

$$\frac{\delta F}{\delta n_{k\sigma}} = (\varepsilon_k - \mu) + \frac{1}{V}\sum_{k',\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k,k')\,\delta n_{k'\sigma'} =: \tilde{\varepsilon}_{k\sigma} - \mu .$$

Kérdés: termikusan gerj. rendszerben hány kvázirészecske van?



$$\delta n(\tilde{\varepsilon}_{k,\sigma}, T) = \frac{1}{e^{\beta(\tilde{\varepsilon}_{k\sigma}-\mu)}+1} - \underbrace{\Theta(\varepsilon_k - \mu)}_{T=0\text{-ás izé...}}$$

önkonzisztensen kell megoldani.

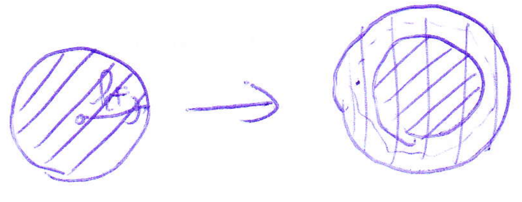
BS-sorfejtés: $\forall$ termikus korrekció $\sim T^2$ rendű korrekciót ad. $\delta n \sim T^2$; $F \sim T^4$-es tag lesz benne!

Végeredmény: $F = F_0 + V\frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \varrho(\varepsilon_F)$

mint a szabad rendszer, csak a ϱ más!

Mágneses tér hatása:

$$\tilde{\varepsilon}_{k\sigma} - \mu = \varepsilon_k - \mu + \frac{1}{V}\sum_{k',\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(k,k')\,\delta n_{k'\sigma'} - \frac{1}{2}\overset{-2}{\overset{\downarrow}{g}}\mu_B\mu_0\sigma H .$$



kérés μ-ig kell hogy betöltve legyenek.

Önkonzisztens megoldás...

$$M = \sum_k (\delta n_{k\uparrow} - \delta n_{k\downarrow}) = \ldots\ M.$$

Eredmény:

$$M = \frac{M^{(0)}}{1+F_0^a}$$ ← nemkhtó

$$F_l^{s/a} = f_l^{s/a}\,\rho(\varepsilon_F)$$

$$\chi = \frac{\chi^{(0)}}{1+F_0^a}$$

növekedési faktorok.

Egyéb...:

$$m^* = m\left(1+\frac{1}{3}F_1^s\right)$$

Fémekre az egész elmélet nem jó. Feltettük, hogy a Fermi-felület gömb.

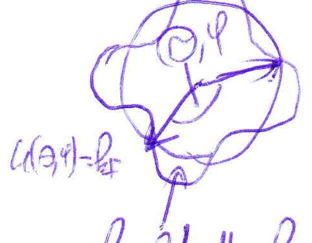
Mikor nem jó a modell?

$$\chi = \frac{\chi^{(0)}}{1+F_0^a};$$ Ha $F_0^a < -1$, akkor $\chi < 0$. Muszáj, hogy $F_0^a > -1$ legyen.

$$m^* = m\left(1+\frac{1}{3}F_1^s\right) \Rightarrow F_1^s > -3 \text{ muszáj...}$$

Megmutatható még: $F_l^{s/a} > -(2l+1)$ -nek teljesülnie kell.

Mert: Fermi-felület def..



beltett ki-növések és lyukak.

$\delta n_{k,\sigma}$

~~Nagyobbnak~~

Ennek az energiája nagyobb kell legyen a gömbi-nek, különben a gömb instabil lenne.