Statisztikus fizika

előadó: Sasvári László

1. óra

Statisztikus leírás

(valószínűség → val. szám.
gyakoriság → statfiz.)

- állapotokat, eseményeket kell megadni, ezekhez rendelünk valósz.-et

↳ konzervatív mech. rendsz.: $(q,p) = (q_1 \dots q_f, p_1 \dots p_f)$

valósz. sűrűség: $\rho(q,p,t)$ $\qquad$ 2f dim. fázistér

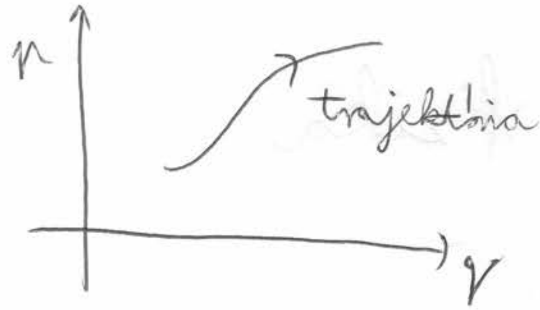
din. egyenlet: kanonikus mozgásegyenletek

$\mathcal{H}$: Hamilton-fv.

$\mathcal{H}(p,q)$

$$\dot{q} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \qquad \dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$

$$\left.\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \end{aligned}\right\} \quad i = 1 \dots f$$



fázistér "mozgása" (időbeli fejlődés) : áramlás $(\dot{q}, \dot{p})$ sebességgel adható meg

Milyen ez az áramlás?

- Összenyomhatatlan
  - hidrodin.-ból: összenyomhatatlan, ha div $= 0$

$$v = (\dot{q}\ \dot{p}) = (\dot{q}_1 \dots \dot{q}_f\ \ \dot{p}_1 \dots \dot{p}_f)$$

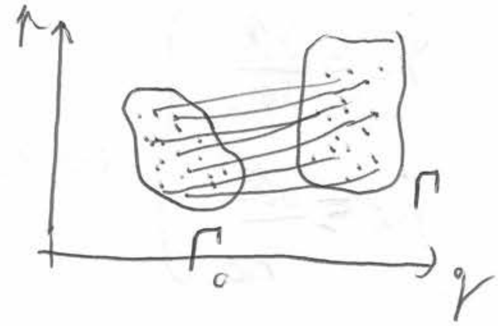
$$\underline{\underline{\operatorname{Div} v}} = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right) = \underline{\underline{0}}$$

(<u>Liouville - tétel</u>)

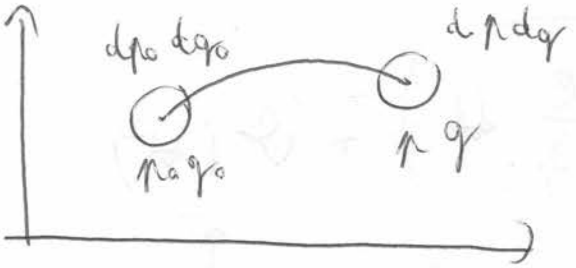
$\Rightarrow$ összenyomhatatlan az áramlás $\Rightarrow$ a sűrűségek megmaradnak

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt} \rho(p, q, t) = 0}$$

- másik megfogalmazás:



$$\int_{\Gamma_0} \rho(p, q, t_0)\, dp\, dq = \int_{\Gamma} \rho(p, q, t)\, dp\, dq$$



infinitezimálisan is igaz

$$\rho(p_0, q_0, t_0)\, dq_0\, dp_0 = \rho(p, q, t)\, dp\, dq$$

a kapcsolatot a Jacobi adja meg

$$q_i' = q_i(t+dt) = q_i(t) + \overbrace{\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}}^{\text{kanon. egy.-ből}}(t)\, dt$$

$$p_i' = p_i(t+dt) = p_i(t) - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}(t) \cdot dt$$

$\Rightarrow$ a Jacobi-det:

$$J = \frac{\partial (q_1' \dots q_f'\ p_1' \dots p_f')}{\partial (q_1 \dots q_f\ p_1 \dots p_f)} = \begin{vmatrix} 1 + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_1 \partial q_1} dt & & \\ & \ddots & \\ & & \ddots \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 1 + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_1 \partial q_1} dt & & & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} dt & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_i} dt & & \\ & & & \ddots & \\ \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} dt & & & 1 - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_i} dt & \\ & & & & \ddots \end{vmatrix} =$$

$$= 1 + \underbrace{\overbrace{\sum_i \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_i} dt - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_i} dt \right)}^{=0}}_{\text{diag. elemekből}} + \mathcal{O}(dt^2)$$

diag. és nemdiag. elemekből

$\Rightarrow$ a fázistér térfogata nem változik

$\Rightarrow$ $\rho(q,p,t) =$ állandó (trajektória mentén)

$$\Rightarrow \quad \frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = 0$$

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right)} \overset{\uparrow}{=} - \{\rho, \mathcal{H}\}$$

kompaktabb felírás

(parc.) diffegyenlet $\Rightarrow$ kezdeti feltétel (eloszlásfv.) kell (nem tudjuk pontosan, melyik állapotból indult a rsz.)

<u>Poisson-zárójel</u>: $f(p,q)$ $\quad g(p,q)$

$$\{f, g\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial g}{\partial q_i} \right)$$

$f(p,q)$ változása a trajektória mentén:

$$\frac{df}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = \{ f, \mathcal{H} \}$$

ált. ban igaz

stacionárius eloszlás: $\{ \rho, \mathcal{H} \} = 0$

⇒ ez ~~a~~ mozgásállandókat eredményez (többi $\frac{df}{dt}$ is 0)

⇒ a stac. eloszlás mozgásállandó~~kat~~ ~~(eredményez)~~ jellemezhető,
kkal
pl. az energiával

fordítva is igaz: ha ρ ~~csak~~ $\mathcal{H}$-val jellemezhető:

$\rho(\mathcal{H})$ $\quad \underline{\underline{\{ \rho, \mathcal{H} \}}} = \sum_i \left(\frac{d\rho}{\partial \mathcal{H}} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{d\rho}{d\mathcal{H}} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) \underline{\underline{= 0}}$

~~(⇒ egy klassz. mech. rsz. jellemezhető az energiájával)~~

<u>Nem mechanikai klasszikus rendszer:</u>

pl. Ising-modell $\qquad$ Ising-spin: $S = \pm 1$

- $S(\underline{R}_i) = \pm 1$ lehet
- spin-konfiguráció:

$$\tilde{S} = \left(S(\underline{R}_1) \ldots S(\underline{R}_i) \ldots S(\underline{R}_N) \right)$$

- valósz. eloszlás: $P(\tilde{S})$

~~(Ising-spin 2 állapot)~~ $\qquad$ ~~(1/2 spin)~~

~~(S=1 $\quad$ S=-1)~~

Ising - spin ⟷ 1/2 spin (kv. mech.)

2 állapot

bázis: 2 elemű

$\sigma = 1 \qquad \sigma = -1$

$S_z = \frac{\hbar}{2} \qquad S_z = -\frac{\hbar}{2}$

szuperpozíció!

↓

is mind külön állapot

tiszta állapot ⟷ kevert állapot

hullámfv.-el leírható

Ψ

nem írható le hullámfv.-el

• statisztikusan kevert állapot

$\{\Psi_\alpha\}_\alpha$ tiszta állapotok egy halmaza

p_α: annak valósz., hogy a rendszer hullámfv.-e Ψ_α

↓

hasonlít a klassz. sz. fizikához, csak most nem a fázistér, hanem a Hilbert-tér elemei a lehetséges állapotok

$$\langle A \rangle = \sum_\alpha \underset{\substack{\uparrow \\ \text{stat. átlag}}}{p_\alpha} \underbrace{(\Psi_\alpha, A\Psi_\alpha)}_{\text{kv. mech. átlag}}$$

Ψ hullámfv. $(\Psi, \Psi) = 1$

$\{\varphi_n\}_{n=1}^{\infty}$ teljes ortonormált bázis (TONR)

$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n$ $\qquad (\varphi_m, \Psi) = \sum_n c_n \underbrace{(\varphi_m, \varphi_n)}_{\delta_{mn}} = c_m$

(TONR miatt)

tetsz. fiz. mennyiség (op.) várható értéke

$\langle A \rangle = (\Psi, A\Psi)$

$\langle A \rangle = \left(\sum_n c_n \varphi_n , A \sum_m c_m \varphi_m \right) = \sum_{n,m} c_n^* c_m \underbrace{(\varphi_n, A\varphi_m)}_{\text{mátrixelem } A_{nm}} =$

$P_{mn} = c_m \cdot c_n^*$

$= \sum_{nm} P_{mn} A_{nm} = \mathrm{Tr}\,(PA)$

P_Ψ projektor: $P_\Psi \phi = (\Psi, \phi) \cdot \Psi$

(Ψ normált állapot) $\quad \phi$ tetsz

$P_{\Psi\, nm} = (\varphi_m, P_\Psi \varphi_n) = (\varphi_m, (\Psi, \varphi_n) \cdot \Psi) =$

$= (\Psi, \varphi_n) \cdot (\varphi_m, \Psi) = c_n^* \cdot c_m \rightarrow$ (együtthatók vektorának önmagával vett diadikus szorzata)

$\langle A \rangle = (\Psi, A\Psi) = \mathrm{Tr}\,(P_\Psi A)$

$\boxed{P \text{ a diád által.-sítása}}$

koord. ábrázolás: $P_\psi \varphi(x) = \int dx' \, \psi^*(x') \cdot \varphi(x') \cdot \psi(x)$

$$\varphi'(x) = \int dx' \, \underbrace{\psi(x) \cdot \psi^*(x')}_{P(x,x')} \varphi(x')$$

---

kevert állapot (~~ψ_α tetsz. bázis~~ ψ_α nem feltétlenül A sajátállapota!) ~~állapot~~ statisztikai val. sűr. ||| sűrűség-operátor

$\hookrightarrow$ ezért kell kikötni

$$\langle A \rangle = \sum_\alpha p_\alpha \underbrace{(\psi_\alpha, A\psi_\alpha)}_{\text{várh. érték}} = \sum_\alpha p_\alpha \operatorname{Tr}(P_{\psi_\alpha} A) = \operatorname{Tr}\left(\sum_\alpha p_\alpha P_{\psi_\alpha} A\right) =$$

$\uparrow$ a vsz.-e, hogy ψ_α áll.-ban vagyunk

az α áll.-ban

$\boxed{\psi_\alpha \text{ nem felt. bázis!!!}}$

$$= \operatorname{Tr}(\rho A)$$

~~lehet kevert pl. 2 állapotom is (α_1, α_2), ami ... ban a vsz. tartoz- hat ...-ssel~~

?

pl. $\{\varphi_n\}$ lehet $\hat{H}$ sajátfv. rendszere, $\{\psi_\alpha\}$ pedig ~~egy~~ tetsz. vizsgált állapotok, amik $\hat{H}$-nak nem sajátállapotai (de mondjuk egy másik $\hat{H}$-nak igen)

$\{\varphi_n\}$ bázison $(P_{\psi_\alpha})_{mn} = c^*_{\alpha n} c_{\alpha m}$

$$\rho_{mn} = \sum_\alpha p_\alpha (P_{\psi_\alpha})_{mn} = \sum_\alpha p_\alpha c^*_{\alpha n} c_{\alpha m}$$

koord. ábrázolás:

$$\rho(x, x') = \sum_\alpha p_\alpha \psi_\alpha(x) \psi^*_\alpha(x')$$

- P_ψ hermitikus op.: $P_{mn} = c^*_n c_m$, $(P_{mn})^+ = P^*_{nm} = c_m c^*_n = P_{mn}$

$\Rightarrow \rho = \sum_\alpha p_\alpha P_{\psi_\alpha}$ hermitikus!

• $\boxed{\mathrm{Tr}\,\rho = 1}$ ⟸ uis.: $\sum_\alpha p_\alpha \underbrace{\sum_n c^*_{\alpha n} c_{\alpha n}}_{=(\Psi_\alpha,\Psi_\alpha)=1} = \sum_\alpha p_\alpha = 1$

normálási feltétel a sűr. operátorra

• diag. elem: $\{\varphi_n\}$ bázison

$$\rho_{nn} = \sum_\alpha p_\alpha |c_{\alpha n}|^2 \geq 0$$ annak a vsz.-e, hogy ~~állapotban~~ a φ_n állapotban találjuk a rendszert ($\alpha, \beta, \gamma, \ldots$ állapotokra összegeztünk)

• $\mathrm{Tr}\,\rho^2 \leq 1$

de ha $\mathrm{Tr}\,\rho^2 = 1$, akkor tiszta állapotom van!

Uim: ρ diagonális vsz.-len:

$$\rho_{nm} = \delta_{nm}\,\rho_{nn} \qquad (\rho^2)_{nm} = \delta_{nm}\,\rho^2_{nn}$$

$$\mathrm{Tr}\,\rho^2 = \sum_n \rho^2_{nn} \leq \Big(\sum_n \rho_{nn}\Big)^2 = 1$$

$=$, ha a kétszeres szorzatok (≥ 0) mind $0 \Rightarrow$

$\Rightarrow$ egyetlen ρ_{nn} különbözik 0-tól, ez pedig $=1$

⇓

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} = \rho$$

, ami tiszta állapot (φ_n bázis szerint)

(φ_n állapotban vagyunk) ~~csak ezt~~

Ψ_α bázisban kevert állapotban is vagyunk így is

↳ egy tiszta állapotot látottunk fel más bázis szerint, és milyen vsz-el található a vsz. az új bázis-állapotokban

ρ diag. vsz.-ében: $\rho_{nm} = \delta_{nm}\,\rho_{nn}$

- időbeli fejlődés:

$|c_1|^2$ vsz-el $|\Psi_1\rangle$-ben vagyunk, $|c_2|^2$ vsz-el $|\Psi_2\rangle$-ben, de biztos, hogy φ_0 energiaáll.-ban ← (pl. a vsz. energia sajátállapotban van $(\varphi_0) \Rightarrow |\varphi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle + \ldots$ (vagy fordítva))

$$i\hbar\dot{\Psi} = H\Psi \qquad \text{Schrödinger-egy.}$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{d}{dt}(\Psi, A\Psi) = (\dot\Psi, A\Psi) + (\Psi, A\dot\Psi) = \cancel{\left(\frac{H}{i\hbar}\Psi, A\frac{H}{i\hbar}\Psi\right)} \qquad \frac{\partial A}{\partial t} = 0$$

$$= \left(\frac{H}{i\hbar}\Psi, A\Psi\right) + \left(\Psi, A\frac{H}{i\hbar}\Psi\right) = \frac{1}{i\hbar}\left(\Psi, (AH - HA)\Psi\right) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(\Psi, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{kommutátor}}}{[H, A]}\Psi\right) = \mathrm{Tr}\left(\rho_\Psi \cdot \frac{i}{\hbar}[H, A]\right)$$

kevert állapot

$$i\hbar\dot\Psi_\alpha = H\Psi_\alpha$$

$$\langle A\rangle = \sum_\alpha p_\alpha (\Psi_\alpha, A\Psi_\alpha)$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \sum_\alpha p_\alpha \overbrace{\left(\Psi_\alpha, \frac{i}{\hbar}[H, A]\Psi_\alpha\right)}^{\mathrm{Tr}\left(\rho_{\Psi_\alpha}\frac{i}{\hbar}[H,A]\right)} = \mathrm{Tr}\left(\rho \cdot \frac{i}{\hbar}[H, A]\right) =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \operatorname{Tr}\left(\rho H A - \rho A H\right) =$$

megj.:

$$\sum_{nmp} A_{nm} B_{mp} C_{pn}$$

$$= \frac{i}{\hbar} \operatorname{Tr}\left(\left(\rho H - H \rho\right) A\right) = \quad \Leftarrow \quad \operatorname{Tr}(ABC) = \operatorname{Tr}(CAB)$$

$$= \operatorname{Tr}\left(\frac{i}{\hbar}[\rho, H]\, A\right) = \frac{d}{dt}\langle A\rangle$$

$$\Downarrow$$

vagyis:

$$\left.\begin{array}{l} \langle A\rangle = \operatorname{Tr}(\rho A) \quad / \frac{d}{dt} \\ \downarrow \\ \frac{d}{dt}\langle A\rangle = \operatorname{Tr}(\dot{\rho} A) \end{array}\right\} \Rightarrow \boxed{\dot{\rho} = \frac{i}{\hbar}[\rho, H]}$$

ha ↑ (A nem függ t-től)

stac. állapotban $\dot{\rho} = 0$

$$[\rho, H] = 0$$

$$\Downarrow$$

a sűrűségoperátort az energia sajátáll.-ok diagonalizálják $\Leftarrow$ együtt diagonalizálhatóak

+ stac. áll.-ban ρ megmaradó mennyiség !

$$\Downarrow$$

(az energia bázis jó nekünk)

(kvantum — klassz. — Poisson zárójel)

$$\dot{\rho} = \frac{i}{\hbar}[\rho, H] \qquad \dot{\rho} = -\{\rho, \mathcal{H}\}$$

0) Ismétlés:

a) Sokaság: p_α, Ψ_α, bevezetjük ρ-t:

$$\rho = \sum_\alpha p_\alpha P_{\Psi_\alpha}$$

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

$$\mathrm{Tr}(\rho) = 1$$

$$\rho = \rho^+$$

$$\rho \underset{nn}{\cancel{\quad}} \geq 0$$

és ezen az n kívánom a vsz.-t, hogy itt-találom:

$$(\varphi, \rho\varphi)$$

továbbá: $\mathrm{Tr}(\rho^2) \leq 1$

és $\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(\rho, H)$

$$\langle A \rangle_t = \mathrm{Tr}\left(\rho(t)\ A\right) = \mathrm{Tr}\ \sum_\alpha p_\alpha \langle \Psi_\alpha(t), A \Psi_\alpha(t) \rangle$$

Ha a H op. nem függ t-től, akkor

$$\Psi_\alpha(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \cdot H \cdot t}\ \Psi_\alpha(0)$$

így $\langle A \rangle = \left(\sum_\alpha r_\alpha \left(e^{-i\cancel{\hbar}\hat{H}t}\psi_\alpha(0),\ A\cdot e^{-i\cancel{\hbar}\hat{H}t}\psi_\alpha(0)\right)\right) =$

$$= \left[\sum_\alpha r_\alpha \left(\psi_\alpha(0),\ \underbrace{e^{i\cancel{\hbar}\hat{H}t} A e^{-i\cancel{\hbar}\hat{H}t}}_{\text{Heisenberg képbeli } A}\ \psi_\alpha(0)\right)\right] =$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\rho(0)\, A(t)\right)$$

$\uparrow$

<u>Heis.-kép</u>

(Legyen $U(t)\,U^+(t) = 1$ (unitér), ekkor

$$\left(U(t)\,U^+(t)\,\psi(t),\ A\,U(t)\,U^+(t)\,\psi(t)\right)$$

kapok egy időfüggő részt, egyik részét az op.-ra tesszük, másik részét az állapotra.)

b) Legyen 2 részrendszerünk:

 $\psi(x,y)$

ρ koordinátaábr.-ban

(Pl. kötött rsz.-ek)

$$\int dx\, dx'\, dy\ \psi^*(x,y)\ A(x,x')\,\psi(x',y) =$$

$$= \int dx\, dx'\ A(x,x') \underbrace{\int dy\ \psi(x',y)\ \psi^*(x,y)}_{\rho(x',x)} =$$

$$= \int dx\, dx'\ A(x,x')\,\rho(x',x) = \mathrm{Tr}(\rho A)$$

c) Egyensúlyi (stac.) állapot:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad [\rho, \mathcal{H}] = 0$$

azaz egyszerre diagonalizálhatóak. Legyenek $\hat{H}$ sf.-ei

$$\hat{H}\varphi_n = E_n \varphi_n$$

Ekkor ezen a bázison

$$\rho_{nm} = \delta_{nm} \cdot p_n$$

n. állapot vsz.-e

Tehát:

$$\rho = \sum_n p_n \cdot P_{\varphi_n}$$

koord. ábrázolásban:

$$\rho(x, x') = \sum_n p_n \varphi_n^*(x') \varphi_n(x)$$

1) Egyensúlyi stat. mech.-ban, pl. kanonikus sokaság

$$p_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

Fundamentális összefüggés:

$$F = -k_B T \ln Z$$

$$dF = -S\,dT - p\,dV + \mu\,dN$$

továbbá $E = \langle H \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$

$S = \frac{E-F}{T}$ (termóból)

$$\underline{\underline{Z}} = \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_n \left(\varphi_n, e^{-\beta \hat{H}} \varphi_n \right) = \underline{\underline{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta \hat{H}}}}$$

$$\rho_{nm} = \delta_{nm} \frac{e^{-\beta E_n}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta \hat{H}}}$$

azaz $\boxed{\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}}$

tehát

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

Továbbá tudjuk, hogy

$$\boxed{S = -k_B \mathrm{Tr}\left(\rho \ln \rho \right)}$$

mert így:

$$S = -k_B \mathrm{Tr}\left(\rho \left(-\beta \hat{H} - \ln Z \right) \right) = \frac{1}{T} \langle H \rangle + k_B \ln Z = \frac{E-F}{T}$$

azaz az entrópia ténylegesen a kifejezhető sűrűség operátorokkal

(Shannon-féle entrópia: $-k_B \sum_n \rho_{nn} \ln \rho_{nn}$, ami ugyanez k_B egységben)

Nagykanonikus sokaság

1) Részecskék léphetnek ki/be

Valószínűsége, hogy N részecske legyen, $E_n(N)$ energiával a rendszerben:

$$P(N, E_n(N)) = \frac{1}{Z} e^{-\beta\left(E_n(N) - \mu N\right)}$$

Ha operátorokban benne van a részecskeszám, olyan formalizmus kell, amiben lehet változtatni azt.

2) Fock-tér: (0, 1, 2, ... N, ... részecskékhez tartozó állapotok direkt összege)

A $\emptyset$ részecskéhez tartozó a vákuum

- Bevezetünk részecske keltő/eltüntető operátorokat, így nem jelenik meg a részecskeszám

3) Azonos részecskék rendszere: $5 \times \frac{1}{2}$ spin $(2p, 1n, 2e^-)$

- fermion: feles spin (pl. e^-, ^3He)
- bozon: egész spin (pl. ^4He) $(2p\ 2n\ 2e)$ $6 \times \frac{1}{2}$ spin

Olyan folyamatok játszódjanak le, amelyek nem változt. meg a részecskék tulajdonságait.

Ψ bozonoknál szimm. a hullámfv., fermionoknál antiszimm.
2 részecske cseréjére.

4) Kötött sokrészecskés rendszer:

a) 1 részecske rendszernél a h. fv.

$$\Psi(x), \quad x = (\underline{r}, \sigma)$$
$\underline{r}$: hely, σ: spin

- Ha $s = \frac{1}{2}$, σ két ~~értéket~~ vehet fel.
- Bázis legyen (TONR):

$$\{\varphi_l(x)\}_{l=1}^{\infty}$$

↳ minden fv. ~~kifejthető~~:

$$\Psi(x) = \sum_l c_l \varphi_l(x)$$

$$c_l = \int \varphi_l^*(x) \varphi_l(x)\, dx = \int d^3 r \sum_\sigma \varphi_l^*(\underline{r}, \sigma) \Psi(\underline{r}, \sigma)$$

- Pl. L élű dobozba zárt rész., periodikus határfelt.:

$$H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad \text{(a dobozon belül}$$

akkor

$$\underbrace{\varphi_{\underline{k}, s}}_{l}(\underline{r}, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}\underline{r}} \chi_s(\sigma)$$

$$\chi_s(\sigma) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow s$$

b) N részecske probléma:

$$\Psi(x_1, \dots, x_N), \quad x_i = (\underline{r}_i, \sigma_i)$$

- itt a bázis lehetséges

$$\varphi_{\ell_1}(x_1)\varphi_{\ell_2}(x_2)\dots\varphi_{\ell_N}(x_N)$$

- Így:

$$\Psi(x_1, \dots x_N) = \sum_{\ell_1, \dots \ell_N} c(\ell_1, \dots \ell_N)\, \varphi_{\ell_1}(x_1)\varphi_{\ell_2}(x_2)\dots\varphi_{\ell_N}(x_N)$$

Az együtthatóknak kell olyannak lenni, hogy a részecskék megcserélése (koordináták megcser.-e) (±1)-el szorozódjon Ψ. Így a bozonoknál a koord.-k felcserélésére nem vált előjelet az elrend., de fermionoknál igen.

- Bozonokra:

$c(\ell_1, \dots \ell_N)$ csak a betöltési számoktól függ

$\not\exists$ (attól hogy hány rész. van a φ_ℓ állapotban)

$$\equiv n_\ell$$

báziselemek:

$$\phi(x_1, \dots x_N; \dots n_\ell)$$

$\uparrow$ betöltési számok

Nyilván: $\sum_{\ell=1}^{\infty} n_\ell = N$

normálás

$$\phi(x_1, \dots x_N; \dots n_\ell \dots) = \overset{\downarrow}{A} \cdot \sum_{\alpha} \varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1})\varphi_{\ell_2}(x_{\alpha_2})\dots\varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N}),$$

ahol

$x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \dots x_{\alpha_N}$ az $x_1, x_2, \dots x_N$ változók permutációja.

<u>Ortogonalitás</u>

$$\int dx_1 \dots dx_N \, \Phi^*(x_1, \dots x_N; \ell_1, \dots \ell_N) \, \Phi(x_1', \dots x_N', \ell_1', \dots \ell_N') =$$

$$= \int A A' \left(\sum_\alpha \varphi_{\ell_1}^*(x_{\alpha_1}) \varphi_{\ell_2}^*(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{\ell_N}^*(x_{\alpha_N}) \right) \left(\sum_{\alpha'} \varphi_{\ell_1'}(x_{\alpha_1}') \varphi_{\ell_2'}(x_{\alpha_2}') \dots \right.$$

$$\left. \dots \varphi_{\ell_N'}(x_{\alpha_N}') \right) dx_1 \dots dx_N =$$

Integrálási változót átnevezzük, $\forall$ permut. előfordul:

$$= N! \, A A' \int \left(\sum_\alpha \varphi_{\ell_1}^*(x_{\alpha_1}) \cdot \varphi_{\ell_2}^*(x_{\alpha_2}) \cdot \dots \varphi_{\ell_N}^*(x_{\alpha_N}) \right) \left(\varphi_{\ell_1'}(x_1) \varphi_{\ell_2'}(x_2) \dots \right.$$

$$\left. \dots \varphi_{\ell_N'}(x_N) \right) dx_1 \dots dx_N =$$

teljes ortonorm. bázis miatt ugyanazoknak a kvantumszámoknak kell megegyezniük, és ha több azonos kvantumszám van, akkor azok még megjelennek

$$= \begin{cases} N! \left(\prod_\ell n_\ell! \right) \cdot |A|^2 & \text{ha } (\ell_1, \dots \ell_N) \text{ megegyezik } (\ell_1', \ell_2', \dots \ell_N')\text{-vel} \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_\ell n_\ell!}}$$

és $\Phi(x_1 \dots x_N, l_1 \dots l_N)$-t meghatározzák az $\{n_l\}_{l=1}^{\infty}$

betöltési számok. ← az állapotok felől érdemes

nézni

- Fermionok

Állapotfv.:

$$\sum_\alpha (-1)^{\sigma_\alpha} \varphi_{l_1}(x_{\alpha_1}) \varphi_{l_2}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{l_N}(x_{\alpha_N}) =$$

$$\left(\sigma_\alpha = \begin{cases} 1 & \text{, ha ptlan} \\ 0 & \text{, ha páros} \end{cases} \right)$$

$$= \begin{vmatrix} \varphi_{l_1}(x_1) & \varphi_{l_2}(x_1) & \dots & \varphi_{l_N}(x_1) \\ \varphi_{l_1}(x_2) & \varphi_{l_2}(x_2) & \dots & \varphi_{l_N}(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_{l_1}(x_N) & \varphi_{l_2}(x_N) & \dots & \varphi_{l}(x_N) \end{vmatrix}$$

Slater det.

(a rész.-kék felől érdemes nézni ↓ melyik milyen áll.-ban van (mindegyik küül.-ben))

Ha ennek 2 oszlopa megegyezik, akkor a det $= \phi$,

azaz ∀ kvantumszám legfeljebb csak 1x szerepelhet

(kizárási elv). Ez csak ilyen típusú hu. fv.-ekre

érvényes

Itt a betöltési szám: $n_l = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}$

Normálás hasonlóan az előző szám. hoz:

$$A^* A \int dx_1 \dots dx_N \left(\sum_\alpha \varphi_{l_1}^*(x_{\alpha_1}) \dots \varphi_{l_N}^*(x_{\alpha_N}) \right) \varphi_{l_1}(x_1) \dots \varphi_{l_N}(x_N) \, N! =$$

$$= \begin{cases} A^* A \cdot N! = 1 & \text{ha a kv. számolás megegyeznek} \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

$$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{N!}}$$

A felírást egyértelműsíteni kell (mert $(-1)^{-\text{szer}}$ kijöhet, ha máshogy írom).

Lehetséges sorrendezés, hogy l növekvő sorrendbe legyen.
Így a betöltési számok egyértelműen megadják a kv.-t.

- Fock-tér:

$$|\ldots n_l \ldots\rangle$$

fermionok esetén ez 0, 1 lehet lánként, és a k. kv.-t antiszimm.-om, ha a bázistv-ekből előállítom

bozonoknál szimmetrizálom

Többféle tér, amely ilyen ksz. számokat ír le, egyenrangú, kifejezhetők egymásból.

a^+, a -kat majd bevezetünk, és ezek bármilyen állapotból bármilyen állapotot adhatnak, így a a^+-okkal mindenféle operátort kifejezhetünk.

3. óra

0) Ism.:

Fock-tér:

$$\{\varphi_l(x)\}_{l=1}^{\infty} \to |\ \dots\ n_l \dots \rangle$$

bozon: $n_l = 0,1,2,\dots$

n_l betöltési szám

fermion: $n_l = 0,1$

$$\sum_{l=1}^{\infty} n_l = N$$

$|0\rangle$ vákuum-állapot ortonormáltság:

$$\langle \dots \tilde{n}_{l'} \dots | \dots n_l \dots \rangle =$$

$$= \begin{cases} 1 & \text{ha } \tilde{n}_l = n_l \ \forall l\text{-re} \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

bázis

$\forall$ áll.-ban ugyanannyi rész. van

(megj.:
1 rész sz.

$\langle 0 0 \dots 0 1 0 \dots 0 | 0 \dots 1 \dots 0 \rangle =$
l'. áll. ... l. áll

$= \delta_{ll'}$)

1) Keltő / eltüntető operátorok

A Fock-tér elemei között a keltő / eltüntető operátorok
a) visznek át

b) bozonok:
$$a_l |\dots n_l \dots\rangle = \sqrt{n_l}\, |\dots (n_l - 1) \dots\rangle$$

$$a_l^+ |\dots n_l \dots\rangle = \sqrt{n_l + 1}\, |\dots n_l + 1 \dots\rangle$$

(csak alsó határa van a betölt. számnak (0))

Áll.: a_l és a_l^+ egymás adjungáltjai.

Biz.: $\langle \ldots n_l - 1 \ldots | a_l | \ldots n_l \ldots \rangle = \sqrt{n_l}$

$\langle \ldots n_l \ldots | a_l^+ | \ldots (n_l - 1) \ldots \rangle = \sqrt{n_l}$

adjungálás

felcserélési relációk:

· **Áll.:** $[a_l, a_{l'}^+] = \delta_{ll'}$

$[a_l, a_{l'}] = 0$

· **Biz.:**

$a_l a_l^+ | \ldots n_l \ldots \rangle = a_l \sqrt{n_l + 1} \, | \ldots n_l + 1 \ldots \rangle = (n_l + 1) | \ldots n_l \ldots \rangle$

$a_l^+ a_l | \ldots n_l \ldots \rangle = a_l^+ \sqrt{n_l} \, | \ldots n_l - 1 \ldots \rangle = n_l \, | \ldots n_l \ldots \rangle$

$a_l a_l^+ - a_l^+ a_l = 1$

$a_l^+ a_l$ betöltési szám operátora („$\hat{N}_l$")

$$\boxed{N = \sum_{l=1}^{\infty} a_l^+ a_l}$$ rész. szám operátor

(Megj.: $[a, a^+] = 1$, $[a, a] = 0$ ha ált. ban a, a^+ op.-okra ↑ teljesül $\Rightarrow$ ebből következnek a fenti tul.-k

φ tetsz. állapot: $(\varphi, a^+ a \, \varphi) = (a\varphi, a\varphi) \geq 0$

⇓

$$\Downarrow$$

$$a^+a\,\phi = \lambda\phi \qquad \lambda \geq 0$$

$$a^+a\cdot(a\phi) = (aa^+-1)\,a\,\phi = a\,(a^+a-1)\,\phi = (\lambda-1)\cdot(a\phi)$$

$\Rightarrow$ $a\phi$ is s.értéke a^+a-nak $(\lambda-1)$ s.ért.-el

λ: egész $\qquad a^+a$ sajátértékei : $0, 1, 2, \dots n, \dots$

$$a\,\phi_n = \alpha\,\phi_{n-1}\ , \quad \alpha = ?$$

$$(a\phi_n, a\phi_n) = (\phi_n, a^+a\,\phi_n) = n$$

és $\hookrightarrow (\alpha\,\phi_{n-1}, \alpha\,\phi_{n-1}) = |\alpha|^2 \quad \Rightarrow \quad |\alpha|^2 = n$

$$\alpha = \sqrt{n}$$

c) fermion:

- van felső határa is a betöltési számnak (1)
- def.:

$$a_\ell\,|\dots n_\ell \dots\rangle = n_\ell\,(-1)^{S_\ell}\,|\dots(n_\ell-1)\dots\rangle$$

ahol $S_\ell = \sum\limits_{m=0}^{\ell-1} n_m$

$$a_\ell^+\,|\dots n_\ell\dots\rangle = \underbrace{(1-n_\ell)}_{\text{ha } n_\ell = 1 \text{ volt} \Rightarrow 0\text{-t kapunk}}\,(-1)^{S_\ell}\,|\dots, n_\ell+1\dots\rangle$$

- egymás adjungáltjai:

$$\langle \dots n_l=0 \dots | a_l | \dots n_l=1 \dots \rangle = (-1)^{S_l}$$

$$\langle \dots n_l=1 \dots | a_l^+ | \dots n_l=0 \dots \rangle = (-1)^{S_l}$$

adjungálás

$$\Rightarrow (a_l^+)^+ = a_l$$

- felcserélési relációk:

$$\{a_l, a_{l'}^+\} = a_l a_{l'}^+ + a_{l'}^+ a_l = \delta_{l,l'}$$

$$\{a_l, a_{l'}\} = 0$$

S_l ~~...~~ ≥ 0, egész

Biz.: $$a_l a_l^+ | \dots n_l \dots \rangle = \begin{cases} (-1)^{S_l}(-1)^{S_l} = 1 & n_l = 0 \\ 0 & n_l = 1 \end{cases}$$

$$a_l^+ a_l | \dots n_l \dots \rangle = \begin{cases} (-1)^{S_l}(-1)^{S_l} = 1 & n_l = 1 \\ 0 & n_l = 0 \end{cases}$$

1 a betöltési szám

$$(a a^+ + a^+ a) | \dots n_l \dots \rangle = | \dots n_l \dots \rangle$$

ha l és l' van:

l' előtt a_l eltüntetett 1 részecskét! → $S_{l'}$ csökkent!

$$a_l a_{l'}^+ | \dots n_l \dots n_{l'} \dots \rangle = \begin{cases} (-1)^{S_{l'}}(-1)^{S_l} & n_l = 1,\ n_{l'} = 0 \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

$$a_{l'}^+ a_l | \dots n_l \dots n_{l'} \dots \rangle = \begin{cases} (-1)^{S_l}(-1)^{S_{l'}-1} & n_l = 1\ n_{l'} = 0 \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \left(a_\ell a_{\ell'}^+ + a_{\ell'}^+ a_\ell\right) \Big| \ldots n_\ell \ldots n_{\ell'} \ldots \Big\rangle = 0$$

Megj.:

Itt is be lehet látni, hogy ha 2 operátorra ált. ban telj.:

$$\{a, a^+\} = 1$$

$$\{a, a\} = 0$$

$$\Downarrow$$

a fenti tul.-ok jelennek meg

a^+a 0 vagy 1

2) Egyéb operátorok a Fock-térben:

a) betöltési szám op.: $a_\ell^+ a_\ell$

b) rész. szám op.: $\sum_\ell a_\ell^+ a_\ell = N$

c) Ideális kv. gáz: $\mathcal{H}_N = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^{N} U(r_i)$

N részecskés Ham.-op. $\rightarrow$ <u>rész. cseré re szimm.</u>

$$\mathcal{H}_N = \sum_{i=1}^{N} \mathcal{H}_1(i)$$ <u>ha függetlenek a részecskék!</u>

1 rész.-és Ham.-op.

bázis: H_1 sajátállapotai: $H_1 u_\ell = \varepsilon_\ell u_\ell$

~~1 rész. ham. Ham. s. áll.~~

$$\Downarrow$$

$\varphi_{l_1}(x_1)\dots\varphi_{l_N}(x_N) \to$ N rsz. spektruma:

$$\boxed{\begin{gathered} E = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon_l n_l \\ \sum_l n_l = N \end{gathered}}$$

$\to$ ez $\forall$ részecskeszámra érvényes

$\downarrow$

Fock-térben: $\boxed{H = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon_l \cdot a_l^+ \cdot a_l}$

d) Bázistransf.:

$a_l^+|0\rangle \to \varphi_l(x)$

$\varphi_l(x)$

$\Psi = \sum_{l=1}^{\infty} c_l \varphi_l \qquad c_l = (\varphi_l, \Psi)$

$$|\Psi\rangle = \left(\sum_l c_l \cdot a_l^+\right)|0\rangle = \underbrace{a_\Psi^+}_{\Psi \text{ állapotot keltő operátor}}|0\rangle$$

$\Rightarrow$ lehet másféle bázis szerint is kifejteni az állapotokat

$\{\tilde{\varphi}_m\}_1^{\infty}$ TONR $\qquad \{\varphi_l\}_1^{\infty}$ TONR

$\tilde{\varphi}_m = \sum_l c_{ml} \varphi_l \qquad c_{ml} = (\varphi_l, \tilde{\varphi}_m)$

→ ezen az új bázison is el tudom késziteni
a léptetőoperátorokat!

inverz reláció

$$b_n^+ = \sum_l c_{nl}\, a_l^+$$

adjung.

$$b_n = \sum_l c_{nl}^* a_l$$

$$a_l^+ = \sum_n \underbrace{(\tilde{\varphi}_n, \varphi_l)}_{=c_{nl}^*} b_n^+$$

– kommutátor:

$$\underline{\underline{[b_n, b_{n'}^+]}} = \sum_{l,l'} c_{nl}^* c_{n'l'} \underbrace{[a_l, a_{l'}^+]}_{\delta_{l,l'}} = \sum_l c_{nl}^* c_{n'l} =$$

$$= (\tilde{\varphi}_n, \tilde{\varphi}_{n'}) = \underline{\underline{\delta_{n,n'}}} \qquad (\{\tilde{\varphi}\} \text{ is TONR})$$

⇒ <u>kül. ábrázolásokat össze tudunk kötni.</u>

~~(ábrázolások:)~~

3) <u>Koord. ábrázolás: téroperátorok</u>

$$\psi^+(x) = \sum_l \varphi_l^*(x) \cdot a_l^+ \quad \rightarrow x \text{ helyen keltettünk 1 rész.-t}$$

$$\psi(x) = \sum \varphi_l(x)\, a_l \quad \rightarrow x \text{ helyen eltüntettünk } -\parallel-$$

inverz reláció:

$$\int dx\, \varphi_l^*(x)\, \psi(x) = \int dx \sum_{l'} \varphi_l^*(x)\, \varphi_{l'}(x) \cdot a_{l'} =$$

$$= \sum_{l'} \underbrace{(\varphi_l, \varphi_{l'})}_{\delta_{ll'}} a_{l'} = a_l$$

$\nvDash$ <u>másodkvantálás</u>: $\Psi(x)$-ben hfv.$^{(ek)}$ helyett operátor(ok) állnak

- <u>Vel.</u>: a felcserélési rel.-ók:

<u>bozonok:</u>

$$[\Psi(x), \Psi^+(x')] = \delta(x-x')$$

$$[\Psi(x), \Psi(x')] = 0$$

<u>fermionok</u>

$$\{\Psi(x), \Psi^+(x')\} = \delta(x-x')$$

$$\{\Psi(x), \Psi(x')\} = 0$$

<u>Biz.:</u>

$$[\Psi(x), \Psi^+(x')] = \sum_{ll'} \varphi_l(x) \varphi^*_{l'}(x') \underbrace{[a_l, a^+_{l'}]}_{\delta_{ll'}}$$

$$= \sum_l \varphi_l(x) \varphi^*_l(x') = \delta(x-x')$$

$\uparrow$ teljesség miatt $\left(\sum_l |\varphi_l\rangle\langle\varphi_l| = \underline{\underline{1}}\right)$

- <u>Érvevétel</u>:

($\Psi^*(x)\Psi(x)$ = milyen vsz.-el van a részecske x közelében !)

térop.-nál

$$\int dx\, \Psi^+(x)\Psi(x) = \int dx \sum_{ll'} \varphi^*_l(x)\, a^+_l\, \varphi_{l'}(x)\, a_{l'} = \sum_{ll'} a^+_l a_{l'} \underbrace{\int dx\, \varphi^*_l(x)\varphi_{l'}(x)}_{(\varphi_l, \varphi_{l'}) = \delta_{ll'}} =$$

$$= \sum_l a^+_l a_l = N \Rightarrow \Psi^+\Psi = \text{mekkora vsz.-el van részecske az } x \text{ körüli térben}$$

$\Downarrow$

sűrűség operátor: $\psi^+(x)\cdot\psi(x) = \psi^+_\sigma(\underline{r})\,\psi_\sigma(\underline{r})$

!! $\neq$ $\quad$ σ spinű részecskék sűrűsége

a sűrűségoperátor

$\left(\rho = \sum_\alpha p_\alpha P_{\psi_\alpha}\right)$

teljes (~~[illegible]~~) sűrűség:

$$\sum_\sigma \psi^+_\sigma(\underline{r})\,\psi_\sigma(\underline{r})$$

$$N = \int d^3\underline{r} \sum_\sigma \psi^+_\sigma(\underline{r})\cdot\psi_\sigma(\underline{r})$$

4) egyrészecske operátorok: $T_N = \sum_{i=1}^{N} T_1(i)$

T_1 sajátállapotai: $T_1\tilde{\varphi}_m = t_m\tilde{\varphi}_m$ ← sajátvektor

↑ sajátérték

$\{\tilde{\varphi}_m\}$ bázisra épített Fock-téren:

spektrum: $\sum_m t_m n_m \rightarrow \boxed{T = \sum_m t_m b^+_m b_m} = ~~[illegible]~~$ ⊛

($\{\tilde{\varphi}_m\}$ bázison)

$$(T_1)_{mm'} = \left(\tilde{\varphi}_m, T_1\tilde{\varphi}_{m'}\right) = t_m\delta_{mm'}$$

$$⊛ = \sum_{mm'}\left(\tilde{\varphi}_m, T_1\tilde{\varphi}_{m'}\right) b^+_m b_{m'}$$

$\{\varphi_n\}$ bázisban:

$$\tilde{\varphi}_m = \sum_l c_{ml}\varphi_l$$

$$T = \sum_{m,m'} \sum_{l,l'} c^*_{ml} c_{m'l'} \left(\varphi^*_l, T_1 \varphi_{l'}\right) b^+_m b_{m'}$$

és:

$$a^+_l = \sum_m c^*_{ml} b^+_m \qquad a_{l'} = \sum_{m'} c_{m'l'} b_{m'}$$

$$\Rightarrow \boxed{T = \sum_{l l'} \left(\varphi^*_l, T_1 \varphi_{l'}\right) a^+_l a_{l'}} \qquad \text{ha } T = \sum_{i=1}^{N} T_1(i)$$

$\forall$ 1 rész. operátorokból felépülő N rész. operátor

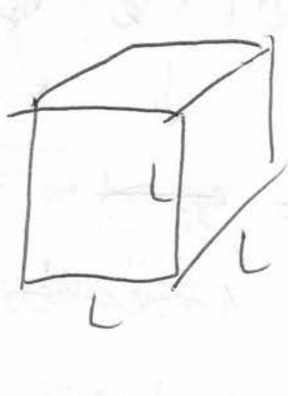
~~(így is)~~ ilyen alakú! (fermion, bozontól függetlenül)

$\Downarrow$

ez $\hat{a}$-ban van elrejtve

(pl. $\hat{H}$ és $\hat{N}$-re láttuk)

pl. Dobozba zárt részecskék gáza:



$$\varphi_l(r, s) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \chi_\sigma(s)$$

$$l = (\underline{k}, \sigma) \qquad \varepsilon(\underline{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

a kinetikus energia

$$\left(T_1\right)_{\underline{k}\sigma, \underline{k}'\sigma'} = \frac{1}{V} \int d^3r \underbrace{\sum_s e^{-i\underline{k}\underline{r}} \chi^*_\sigma(s) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}\right) e^{i\underline{k}'\underline{r}} \chi_{\sigma'}(s)}_{= \delta_{\sigma,\sigma'}} =$$

(most s a spin változó, σ a lehets. értéke)

Msz:

$$= \frac{1}{V}\int d^3\underline{r}\; e^{-i(\underline{k}-\underline{k}')\underline{r}}$$

$$= \frac{1}{V}\int dx\,dy\,dz\; e^{-i(k_x-k'_x)x}\cdot e^{-i(\ldots)y}\cdot e^{-i(\ldots)z} = \frac{1}{V}\,\delta_{\underline{k},\underline{k}'}\cdot V =$$

$$= \underline{\underline{\delta_{\underline{k}\underline{k}'}}}$$

$\Downarrow$

$$\left(T_1\right)_{\underline{k}\sigma,\underline{k}'\sigma'} = \delta_{\underline{k},\underline{k}'}\,\delta_{\sigma\sigma'}\,\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\underline{\underline{T = \sum_{k,\sigma}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\,a^+_{k\sigma}\,a_{k\sigma}}}$$

$\rightarrow$ tényleg ilyen alakú, ha nincs kh. $\Leftrightarrow$ $\left(\sum_{i=1}^{N} T_1(i) = T_N\right)$

$$\sum_{\ell'}\left(\varphi_{\ell'}, T_1\varphi_\ell\right)\varphi_{\ell'}$$

$\downarrow$

= ~~egy adot~~ az ℓ kvantumállapotúból eltüntetünk és ℓ'-be beültünk 1 részecskét ($\Leftrightarrow$ Slater-det-ből 1 ~~sorbanpot~~ oszlopot ~~sor~~ és 1 másikat írunk a helyére)

4. óra

Ideális kvantumgázok

$$\mathcal{H}_N = \sum_{i=1}^{N} \mathcal{H}_1(x_i, p_i)$$

1 részecskés Hamilton

- Legyen $\varphi_\ell, \varepsilon_\ell$:

$$\mathcal{H}_1 \varphi_\ell = \varepsilon_\ell \varphi_\ell \qquad \varepsilon_0 = 0$$

$$E = \sum_{\ell=0}^{\infty} \varepsilon_\ell n_\ell \qquad \varepsilon_0 \leq \varepsilon_1 \leq \varepsilon_2$$

- Fock-térben: $\mathcal{H} = \sum_\ell \varepsilon_\ell a_\ell^+ a_\ell$

Nagykanonikus sokaságban

$$|\ldots n_\ell \ldots\rangle \text{ valósz } \frac{e^{-\beta(E-\mu N)}}{Z}$$

$$E = \sum_\ell \varepsilon_\ell n_\ell$$

$$N = \sum_\ell n_\ell$$

sűrűségoperátor:

$$\rho = \frac{e^{-\beta \mathcal{H} - \mu N}}{Z}$$

$$\mathcal{K} = \mathcal{H} - \mu N = \sum_l (\varepsilon_l - \mu) a_l^+ a_l$$

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-\mu N)}\right) = \sum_{\{n_l\}} e^{-\beta \sum_l (\varepsilon_l - \mu) n_l} = \sum_{\{n_l\}} \prod_l e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu) n_l} =$$

$$= \prod_l \sum_n e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu) n} = (*)$$

a betöltési szám

már $\forall$ állapotnál uazokon

az értékeken fut végig

fermion: $n = 0, 1$ $\qquad (*) = \prod_l \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}\right)$

bozon: $n = 0, 1, 2$ $\qquad (*) = \prod_l \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu) n} =$

$$= \prod_l \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}}$$

választhatjuk ε_0-t 0-nak

$\mu < 0 = \varepsilon_0$

$e^{\beta\mu} < 1$

(konvergencia: $e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)} < 1$ $\forall l$-re)

$$\Phi(T, \mu, V) = -k_B T \ln Z \underset{\text{fermion}}{=} -k_B T \sum_l \ln\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}\right)$$

$$\underset{\text{bozon}}{=} +k_B T \sum_l \ln\left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}\right)$$

$$= \pm k_B T \sum_l \ln\left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}\right) \qquad \text{előjel: } \binom{\text{bozon}}{\text{fermion}}$$

$$\langle a_l^+ a_{l'} \rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K} \cdot a_l^+ a_{l'}\right)}{Z} = \delta_{ll'} \frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K} a_l^+ a_l\right)}{Z} = \delta_{ll'} \langle n_l \rangle$$

ha különböző

ll'-től függetlek

el is felhetek, akkor

$\langle \varphi_{m} | \ldots | \varphi_{m} \rangle$ miatt

0-t kapunk

A kvör. módszer tetsz. 2 operátor várható értékének kiszámításához alkalmas

Tr miatt permutáció lehet

$$\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta K}}{Z} \cdot a_l^+ a_l\right) = \mathrm{Tr}\left(a_l \frac{e^{-\beta K}}{Z} a_l^+\right) =$$

msz.:

$$a_l \frac{\prod_m e^{-\beta(\varepsilon_m - \mu) a_m^+ a_m}}{Z}$$

fermionoknál

az előjel sem

számít, mert páros

számú op. van (2 db)

$$a_l \, e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu) a_l^+ a_l} = e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu) a_l^+ a_l} \cdot a_l \cdot e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}$$

(lásd: 2. HF gyakorl)

$$= \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta K}}{Z} \underbrace{a_l a_l^+}_{1 \pm a_l^+ a_l}\right) \cdot e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)} = e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)} \cdot \left(1 \pm \langle a_l^+ a_l \rangle\right)$$

$$\boxed{\langle a_l^+ a_l \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_l-\mu)} \mp 1} = \langle n_l \rangle}$$

operátorok várható értéke

ugyanannyi keltő és eltüntető operátor kell legyen,

és a^+, a-knak valahogy párba kell állniuk

$$\langle \underbrace{a^+ \dots a^+}_{n \text{ db}} \underbrace{a \dots a}_{n \text{ db}} \rangle = \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta K}}{Z} a^+ \dots a^+ a \dots a\right) =$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta K}}{Z} a_l \underbrace{a^+ \dots a^+}_{n \text{ db}} \underbrace{a \dots a}_{n-1 \text{ db}}\right) e^{-\beta(\varepsilon_l-\mu)}$$

Tr miatt cserélhetem

ezt a végére kell hozni

$\Rightarrow a, a^+$ csere lehet, (± 1)

$a, a^+ \to$ ha $l \neq k$ $[a_l, a_k^+] = 0$,

ha $a_k^+ = a_l^+ \Rightarrow$ kioltják egymást (1 marad)

$\Rightarrow$ $(n-1)$db $\hat{a}^+$, $(n-1)$db $\hat{a}$ várható értékére vezettük vissza a problémát

$\Rightarrow \forall$ operátor · operátor várható érték visszavezethető $\langle a_l^+ a_l \rangle$-ra

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \sum_\ell \varepsilon_\ell \langle n_\ell \rangle = \sum_\ell \frac{\varepsilon_\ell}{e^{\beta(\varepsilon_\ell - \mu)} \mp 1}$$

$$N = \langle N \rangle = \sum_\ell \langle n_\ell \rangle = \sum_\ell \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\ell - \mu)} \mp 1}$$

eljárás:

$$N(T, \mu) \to \mu(T, N)$$

$$E(T, \mu) \longrightarrow E(T, N) \qquad \text{mérhető!!}: \quad C = \left(\frac{\partial E(T,N)}{\partial T} \right)_N$$

fajhő!!

(Egyrészecske-) állapotsűrűség

sajátállapotok száma:

$$D(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

áll. sűrűség

sajátáll.-ok száma:

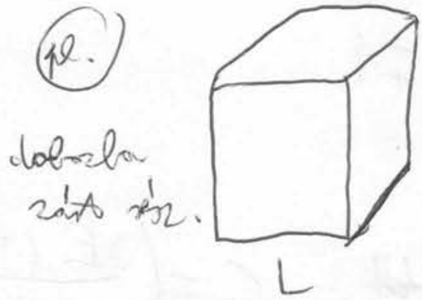
$$\Omega(E) \qquad D(\varepsilon)\, d(\varepsilon) = \Omega(\varepsilon + d\varepsilon) - \Omega(\varepsilon) = \frac{d\Omega}{d\varepsilon} d\varepsilon$$

$$E = \int_0^\infty d\varepsilon\, D(\varepsilon)\, \bar{n}(\varepsilon)\, \varepsilon$$

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon\, D(\varepsilon)\, \bar{n}(\varepsilon)$$

$$\phi = \pm k_B T \int_0^\infty d\varepsilon\, D(\varepsilon) \left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right)$$

pl.



$$l \Rightarrow \underline{k}, \sigma$$

$$k_x = \frac{2\pi}{L} m \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$\sum_l \dots$ helyett most $\sum_\sigma \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} \dots \Rightarrow \sum_\sigma \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \int dk_x\, dk_y\, dk_z \dots$

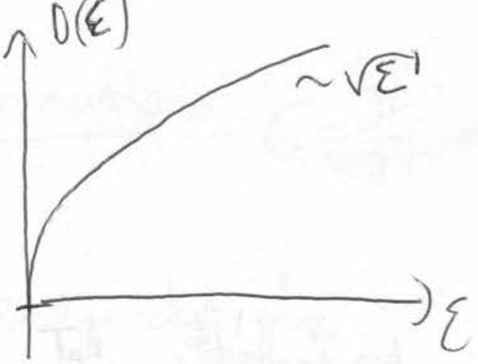
$$\frac{dk_x}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)} = \frac{L}{2\pi} dk_x$$

$$\Omega(\varepsilon) = \sum_\sigma \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}} d^3k \cdot 1 = \qquad \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} < \varepsilon$$

$$k < \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}$$

$$= (2s+1) \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{(2m\varepsilon)^{3/2}}{\hbar^3} = \frac{V}{h^3}(2s+1) \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot (2m)^{3/2} \cdot \varepsilon^{3/2}$$

$$\Rightarrow D(\varepsilon) = \frac{V}{h^3} \cdot (2s+1)\, 2\pi \cdot (2m)^{\frac{3}{2}} \cdot \varepsilon^{1/2} = A \cdot V \cdot \varepsilon^{1/2}$$

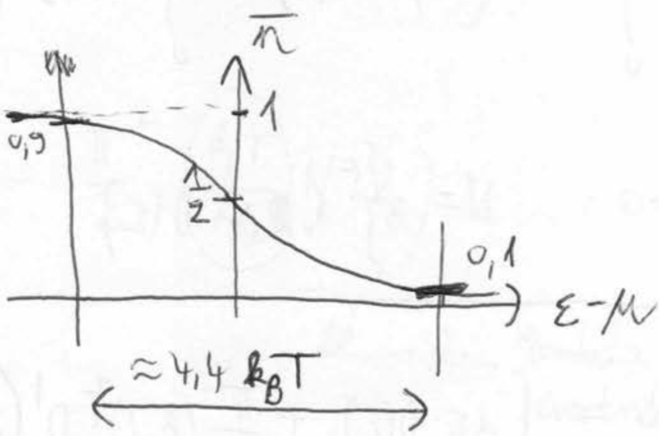


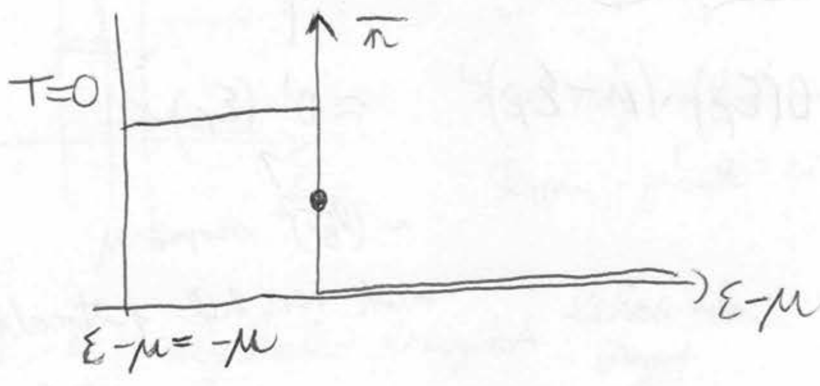
$D(\varepsilon)$-t a spektrum segítségével tudjuk kiszámolni

$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \text{ kell}\right)$

<u>Ideális fermi-gáz</u>

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$





$\mu(T=0) = \varepsilon_F$

degenerált fermi-gáz

$$k_B T \ll \varepsilon_F = k_B T_F$$

- Bethe-Sommerfeld-sorfejtés: kis paraméter $\frac{k_B T}{\varepsilon_F}$

$$\int_0^\infty d\varepsilon\, F(\varepsilon)\, \bar{n}(\varepsilon) = \int_0^\mu d\varepsilon\, F(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \cdot F'(\mu) + \mathcal{O}\left((k_B T)^4\right)$$

$$\ominus \begin{cases} N = \int_0^\infty d\varepsilon\, D(\varepsilon)\, \bar{n}(\varepsilon) = \int_0^\mu d\varepsilon\, D(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \cdot D'(\mu) \\ T=0: \quad N = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, D(\varepsilon) \end{cases}$$

$$0 = \underbrace{\int_{\varepsilon_F}^\mu d\varepsilon \cdot D(\varepsilon)}_{\simeq D(\varepsilon_F)\cdot(\mu - \varepsilon_F)} + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \cdot \underbrace{D'(\mu)}_{\simeq D'(\varepsilon_F)} \qquad \mu - \varepsilon_F \sim \mathcal{O}\left((k T)^2\right)$$

$\sim (k_B T)^2$ szorzó miatt nem kell pontosabban számolni

$$\mu - \varepsilon_F = -\frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \cdot \frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)}$$

$$\bullet\ E = \int_0^\infty d\varepsilon\, D(\varepsilon) \cdot \bar{n}(\varepsilon) \cdot \varepsilon = \overbrace{\int_0^\mu d\varepsilon \cdot D(\varepsilon) \cdot \varepsilon}^{\overbrace{\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, D(\varepsilon)\cdot\varepsilon}^{E(T=0)} + \overbrace{\int_{\varepsilon_F}^\mu d\varepsilon\, D(\varepsilon)\,\varepsilon}^{\simeq D(\varepsilon_F)\cdot\varepsilon_F\cdot(\mu-\varepsilon_F)\ \|\ -\frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \cdot \cancel{\frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)}} D(\varepsilon_F)}} + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \cdot \underbrace{\left(D(\mu) + \mu D'(\mu)\right)}_{\simeq D(\varepsilon_F) + \varepsilon_F \cdot D'(\varepsilon_F)}$$

$$= E(T=0) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \cdot D(\varepsilon_F)$$

Hőkapacitás: $C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\pi^2}{3} D(\varepsilon_F) \cdot k_B T \cdot k_B$

dobozba zárt gáz:

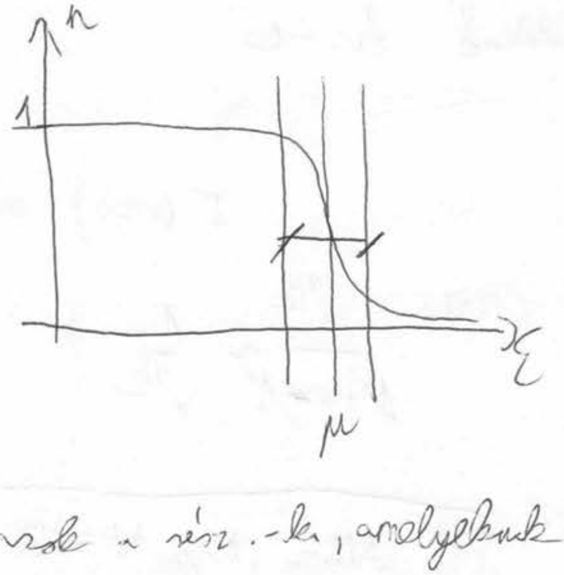
$$D(\varepsilon) = A \cdot V \cdot \varepsilon^{1/2}$$

$$D(\varepsilon_F) = A \cdot V \cdot \varepsilon_F^{1/2}$$

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \cdot D(\varepsilon) = A V \cdot \frac{2}{3} \varepsilon_F^{3/2} = \frac{2}{3} \varepsilon_F D(\varepsilon_F)$$

$$C = \frac{\pi^2}{\cancel{3}} k_B T \cdot k_B \frac{\cancel{3} N}{2\varepsilon_F} = \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right) \underbrace{N \cdot k_B}_{\text{klasszikus eredmény}}$$

klasszikus ~~érték~~ eredmény



$C \sim T$

↳ ezt még a kölcsönható Fermi-gázok is mutatják

azok a rész.-k, amelyeknek energiát lehet ~~Nagy~~ adni (vagy elvenni), a Fermi-szint közelében vannak normális Fermi-rendszerek : lineárisan ~~csökken~~ nő a fajhő

pl. szupravezető —"— : nem —"— —"—

(pl. exponenciálisan)

<u>Bose-gázok</u> : $D(\varepsilon) = V \cdot A \cdot \varepsilon^{1/2}$

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon \; D(\varepsilon)\, \bar{n}(\varepsilon) = V \cdot A \cdot \int_0^\infty d\varepsilon \; \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} =$$

dimenziótlanítsuk az integrált!

$$\beta\varepsilon := x \qquad -\beta\mu := \alpha$$

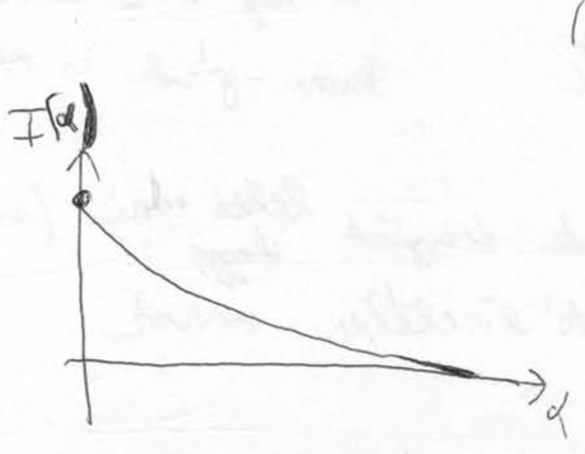
$$= V \cdot A \cdot (k_B T)^{3/2} \cdot \underbrace{\int_0^\infty dx \; \frac{x^{1/2}}{e^{x+\alpha}-1}}$$

$I(\alpha) \to 0$ $(\alpha \to \infty)$

$I(\alpha)$: α mon. csökkenő fv.-e

$I(\alpha = 0)$ véges

(mert: $\frac{x^{1/2}}{\cancel{1}+x-\cancel{1}} \sim \frac{1}{x^{1/2}}$)

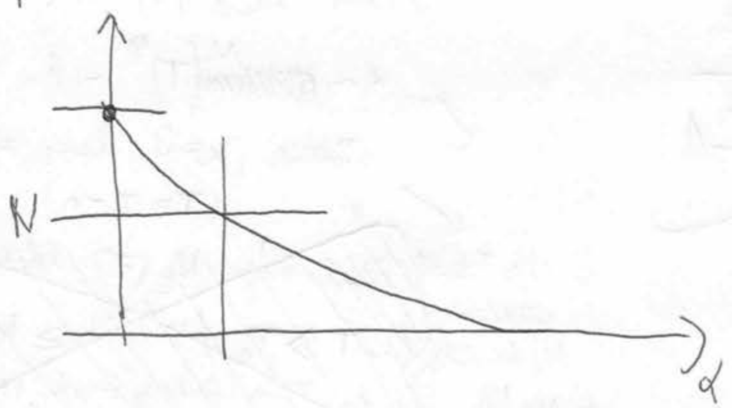


$\Rightarrow$

Akkor, hogy N = áll. maradjon, ha T csökken, $I(\alpha)$-nak nőnie kell $\Rightarrow \alpha$ csökken

$(\alpha = -\beta\mu$, $\boxed{\mu < 0}$ $\Rightarrow \alpha = +\beta|\mu| \Rightarrow$
$\Rightarrow |\mu|$ csökken $\to$ éri a 0-t)

N, T adott



$$N_0 = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0-\mu)}-1} \overset{\varepsilon_0=0}{=} \frac{1}{e^{-\beta\mu}-1} = \frac{1}{e^{\alpha}-1}$$

ha α csökken $\Rightarrow$ $N_0 \approx N$ $\quad \frac{1}{e^{\alpha}-1} \sim N$

$\rightarrow$ ha α nagyon kicsi : $\frac{1}{\alpha} \sim N$ $\quad \alpha \sim \frac{1}{N}$

termodin. határesetben : $\alpha = 0$

DE ha N_0-ba is α-t írnánk, divergálna $\Rightarrow$ $\nexists$

α helyett $N_0 \approx N$ Bose-kondenzáció

5. óra

Bose-kondenzáció

0 spinű bozonok

$$N = V \cdot A \cdot \int_0^\infty d\varepsilon \, \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} \qquad \begin{array}{l} \beta\varepsilon := x \\ -\beta\mu := \alpha \end{array}$$

$$N = V \cdot A \cdot (kT)^{3/2} \cdot \underbrace{\int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{e^{x+\alpha}-1}}_{I(\alpha)}$$

Mikor kicsi (0) α?

$\alpha \sim \mu(T)$ → ha T csökken, $\mu = 0$ lesz ⇒ $\alpha = 0$

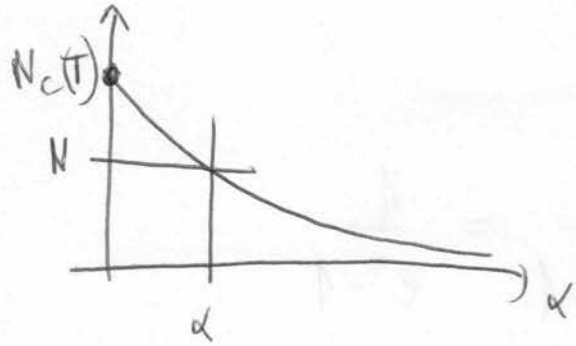
$(T = T_0 - n)$

Ha T-t tovább csökken, N_c is csökken, de N = áll ⇒ $N_0 = N - N_c(T)$

~~akkor meg $N_c(T)$ eldobb ..., ha $T > T_0$ (N lehet $\geq N_c$), de ha T-t csökkentjük, $N_c(T)$ eldői ... ⇒ kapcsolatdekulás~~

← ha $\alpha = 0$, akkor az $N_c(T)$ képlet egy véges értéket ad meg ⇒ a teljes N-hez ez nem elég

($I(\alpha)$ nem tud tovább nőni, $\alpha < 0$-ra nincs ért.-e)



$$N_c(T) = V \cdot A \cdot (kT)^{3/2} \cdot \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{e^{x}-1} \quad \leftarrow \alpha = 0$$

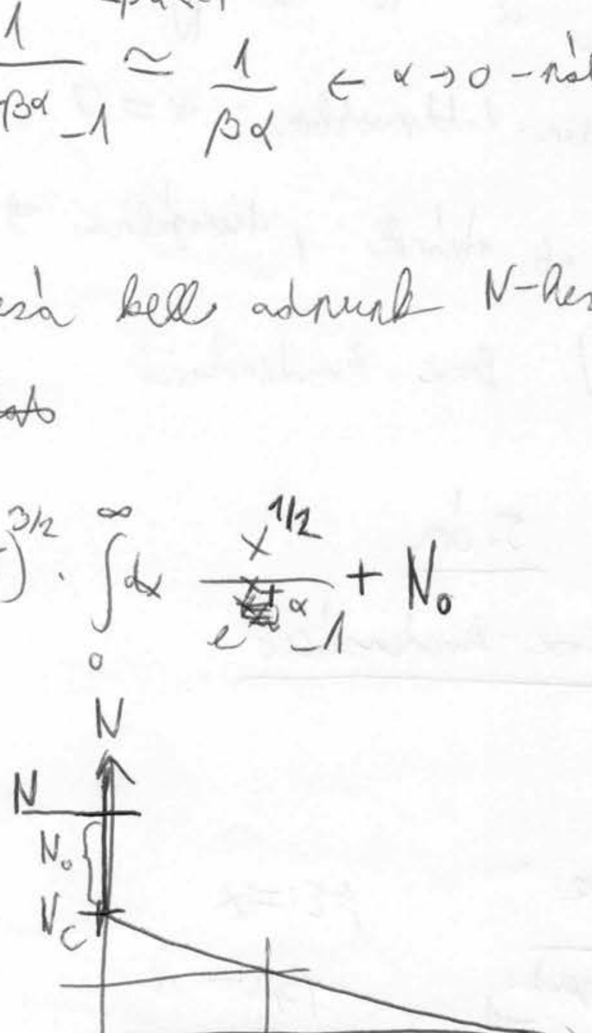
$$N_0 = \frac{1}{e^{+\beta\alpha}-1} \overset{-\beta\alpha \ll 1}{\simeq} \frac{1}{\beta\alpha} \leftarrow \alpha \to 0\text{-nál divergálna}$$

⇓

külön hozzá kell adnunk N-hez a 0 energiás állapotokat

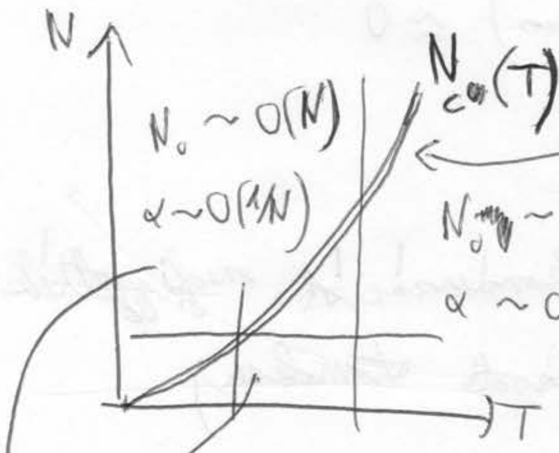
$$N = VA(kT)^{3/2} \cdot \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{e^{x+\alpha}-1} + N_0$$

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



ha $N < N_c \Rightarrow \alpha$ véges $(\neq 0)$

ha $N > N_c \Rightarrow \alpha = 0$, ilyenkor $N = N_c + N_0$



fázisátalakulás: kondenzáció

<u>Bose-Einstein-kondenzáció</u>

- N_0 összemérhető N-el, az alapáll. makroszkopikus mértékben be van töltve
- N_0 elhanyagolható N mellett

adott N-re $\exists\, T_0$, aminél a fázisátalakulás végbemegy

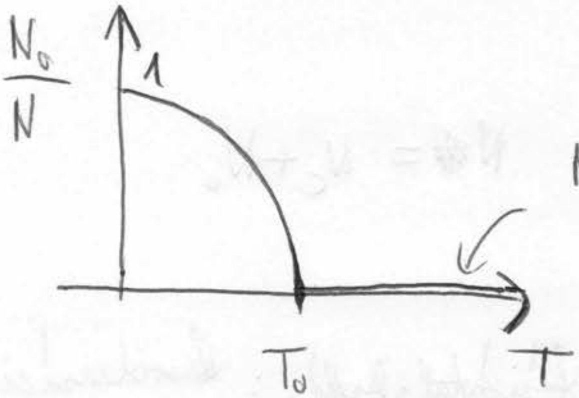
kondenzáció hőm.-e adott N-re: $N = N_c(T_0)$

<u>$T < T_0$:</u>

T_0-n még $N_0 = 0$ (onnantól lefelé kezd el nőni)

$$N = N_c(T) + N_0 = \frac{T^{3/2}}{T_0^{3/2}} \underbrace{\overbrace{N_c(T_0)}^{N}}_{N_c\text{-ben } T^{3/2} \text{ van}} + N_0$$

$$N_0 = N\left(1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right)$$



N_0 itt is véges, de $\frac{N_0}{N}$ termodin. határesetben

$(N \to \infty) \approx 0$

- ideális Bose-gáz nincs, de a kondenzációt megfigyelték (csapdázott atomokon)

  ↑

  kh. is van!

- ^3He: szupefolyékony, a kond. végbemegy, de az erős kh. miatt csak 8-10% lesz kond. fázisban.

Kölcsönható rendszerek

Erősen kh. rendszerek

1) Lin. oszcillátor

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$$

$$\left.\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\left(x + i\frac{p}{m\omega_0}\right) \\ a^+ &= \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\left(x - i\frac{p}{m\omega_0}\right) \end{aligned}\right\} \quad [a, a^+] = 1$$

$$\left([p, x] = \frac{\hbar}{i} \text{ miatt igaz } [a, a^+] = 1 \right)$$

$$\Downarrow$$

a^+a spektruma : $0, 1, 2, \ldots, n, \ldots$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\,(a + a^+) \qquad p = \sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}}\, i\,(a - a^+)$$

$$E_n = \hbar\omega_0 (n + 1/2)$$

$$\langle a^+ a \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1}$$

$$E = \langle H \rangle = \hbar\omega_0 \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1} + \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

$\bar{n}$: átlagosan hány energiakvantumot adtunk az oszcillátornak

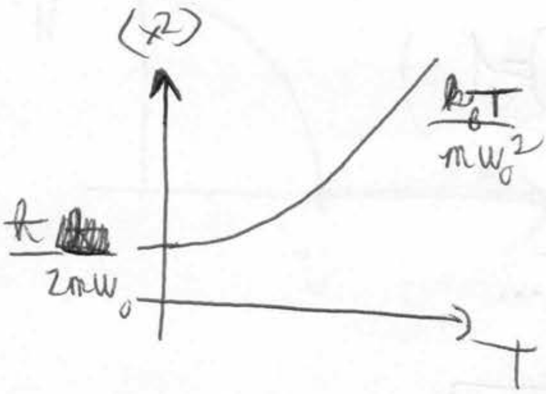
$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_0} \left\langle (a + a^+)(a + a^+) \right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_0} \left\langle \cancel{aa} + a^+a + \underbrace{aa^+}_{1 + a^+a} + \cancel{a^+a^+} \right\rangle =$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega_0} \underbrace{(2\bar{n} + 1)} \qquad \langle x^2 \rangle \sim \langle E \rangle$$

$$\frac{2 + e^{\beta\hbar\omega_0} - 1}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1} = \frac{e^{\beta\hbar\omega_0} + 1}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1} = \mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\right)$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_0} \mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\right) \qquad \beta\hbar\omega_0 \gg 1 \;\to \frac{\hbar}{2m\omega_0}$$

$$\beta\hbar\omega_0 \ll 1 \; - \left(\mathrm{cth}\, x \underset{x \to 0}{\sim} \frac{1}{x}\right) \to \frac{\cancel{\hbar}}{\cancel{2}m\omega_0} \cdot \frac{\cancel{2}}{\beta\cancel{\hbar}\omega_0}$$



szilárd halmazállapot (kristály) mozgása $\Rightarrow$ <u>rácsrezgések</u>

2) <u>Rácsrezgések:</u>

N atom, egyensúlyi körüli kis rezgések

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} + U(r_1, \dots r_\alpha \dots r_N)$$

kül. tömegek is lehetnek

átszámozás: $p_{1x}\ p_{1y}\ p_{1z}\ \dots\ p_{Nx}\ p_{Ny}\ p_{Nz}$

$p_1 \cdot p_2 \cdot p_3 \ \dots \ p_{3N}$

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m_i} + U(r_1 \dots r_{3N})$$

pot. energia minimuma: $r_i = \overline{r_i}$

ált. kar: $r_i = \overline{r_i} + u_i$

$$\Rightarrow \mathcal{H} = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m_i} + \underbrace{U(\overline{r_1} \dots \overline{r_N})}_{=U_0} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \phi_{ij} u_i u_j + \cancel{\dots}$$

<u>harmonikus közelítés</u>

$$\Phi_{ij} = \frac{\partial^2 U}{\partial r_i \partial r_j}$$ $\rightarrow$ szimmetrikus

$\rightarrow$ poz. szemidef. (nincs negatív s.é.-e)

Kanonikus trafó: $P_i := \frac{p_i}{\sqrt{m_i}}$ $\quad U_i := \sqrt{m_i}\, u_i$

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{P_i^2}{2} + \frac{1}{2}\sum_{ij} D_{ij} U_i U_j + U_0$$ ahol $D_{ij} = \frac{\Phi_{ij}}{\sqrt{m_i m_j}}$

ez is szimm., poz. szem. def.

D_{ij}-t diagonalizáló bázison:

$$\mathcal{H} = \sum_\lambda \left(\frac{\Pi_\lambda^2}{2} + \omega_\lambda^2 Q_\lambda^2\right) + U_0$$ lin. oszcillátorokra esik szét a rácsrezgés

elvileg $3N$-ez, de ebből a merev testekhez tartozó mozgások $(\omega = 0)$ száma 6 (eltolás, forgás)

$\Rightarrow$ 6 s. érték: $\omega_\lambda^2 = 0$ $\Rightarrow$ $\boxed{3N-6}$ rezgési módus

rezgések:

$$a_\lambda := \sqrt{\frac{\omega_\lambda}{2\hbar}} \cdot \left(Q_\lambda + i\frac{\Pi_\lambda}{\omega_0}\right)$$

$\Downarrow$

$$\mathcal{H} = \sum_\lambda \hbar\omega\left(a_\lambda^+ a_\lambda + 1/2\right) + U_0$$

$$E_0 := U_0 + \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda/2$$

$$\boxed{\mathcal{H} = E_0 + \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda}$$ ahol $[a_\lambda, a_{\lambda'}^+] = \delta_{\lambda\lambda'}$, $[a_\lambda, a_{\lambda'}] = 0$

Ez formálisan olyan, mint az id. Bose-gáz energiája

→ $\underbrace{\text{kváziészecskék}}_{\boxed{\text{fonon}}}$ gáza

Kényszer gerjesztettük az adott osc. módust → betöltési szám

lehetséges energiái: $\hbar\omega_\lambda$

• Spektrum: $E = E_0 + \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda \cdot n_\lambda$

$$\langle a_\lambda^+ a_\lambda \rangle = \overline{n} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_\lambda} - 1}$$

• Különbség: nincs μ kémiai potenciál

→ a hőmérséklet egymaga beállítja a részecskék számát, mi nem tudjuk a környezetből beállítani azt

$$\langle a_\lambda^+ a_\lambda \rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta \sum_{\lambda'} \hbar\omega_{\lambda'} a_{\lambda'}^+ a_{\lambda'}} \cdot a_\lambda^+ a_\lambda\right)}{Z}$$

$$\langle Q_\lambda^2 \rangle = \frac{\hbar}{2\omega_\lambda} \cdot \mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega_\lambda}{2}\right)$$

ha T nő, Q_λ is nő ⇒ szerepet kapnak az anharmonikus tagok!

anharmonikus tag Q^3, Q^4 ⇒ $a a^+ a a^+, \ldots$ tagok is lesznek

⇔ kölcsönhatás a fononok közt.

Ez amiatt van, mert a ~~fononok~~ harmon. nem lesznek a

rsz. energiasajátállapotai ⇒ a fázisok szétszóródnak

⇒ fonon kh. = véges élettartam

- fonon
- magnon
- exciton

3) Szuperfolyékony : ^4He

Eljárás: feltesszük, hogy a kvázirész. közelítés helyes →

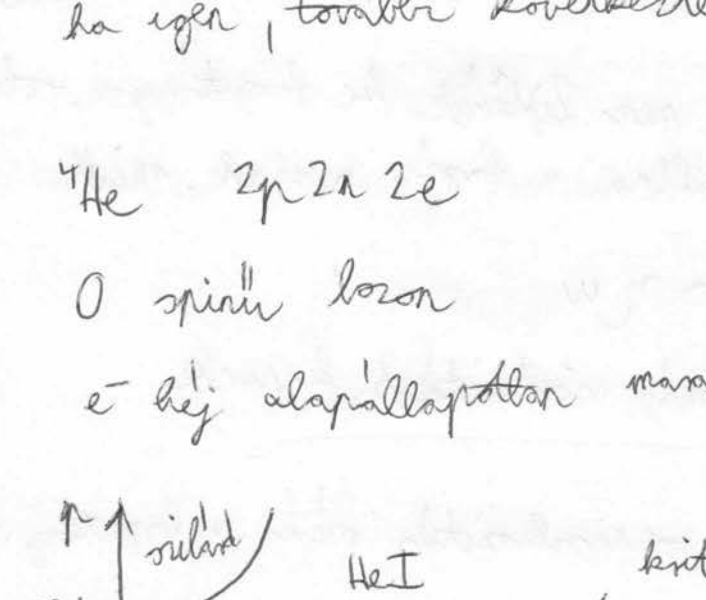
→ megnézzük, hogy ez egyezik-e a kísérlettel →

ha igen, ~~további következtetéseket~~ vonunk le.

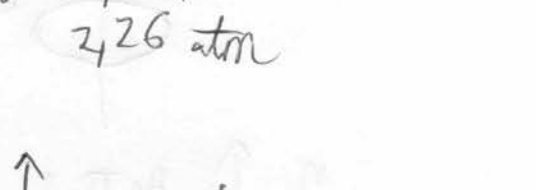
^4He 2p 2n 2e

0 spinű bozon

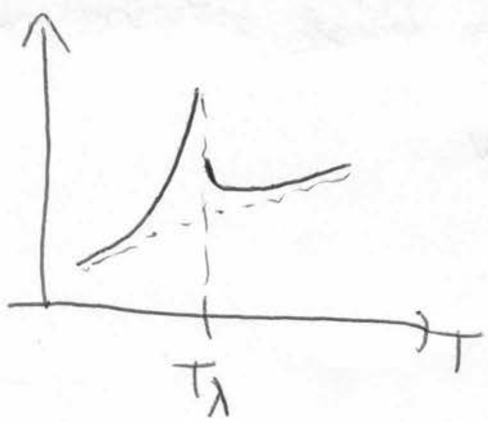
e^- héj alapállapotban marad (nem gerjesztődik)



kritikus pont : 5,2 K
2,26 atm



C_s : He fajhője a koegzisztencia görbén (gőznyomás)

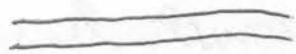


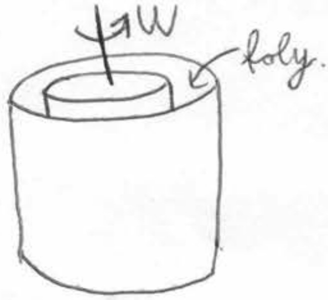
$\Rightarrow$ „λ" vonal emiatt van

Szuperfolyékony : kapillárison úgy folyik át, mintha nem lenne viszkozitása

① viszkozitás : kapillárison ellenállás nélkül átfolyik

visk. mérés

(i)  kapillárison anyagáram mérése $\rightarrow \eta = 0$ méréstől

(ii) 

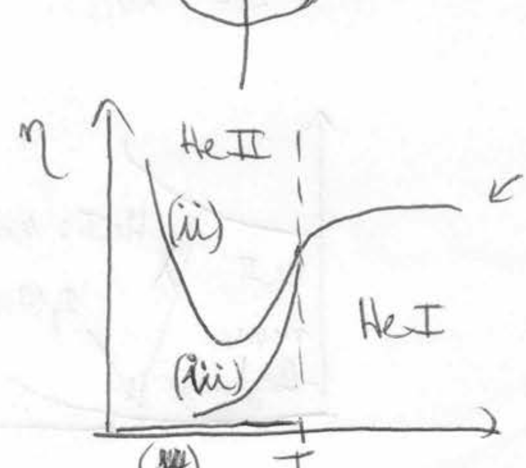
ha nem fejtenék ki forgatónyom.-t, megállna a forgás a visk. miatt

$M \sim \eta w$

$\rightarrow$ itt más viszkozitást kapunk

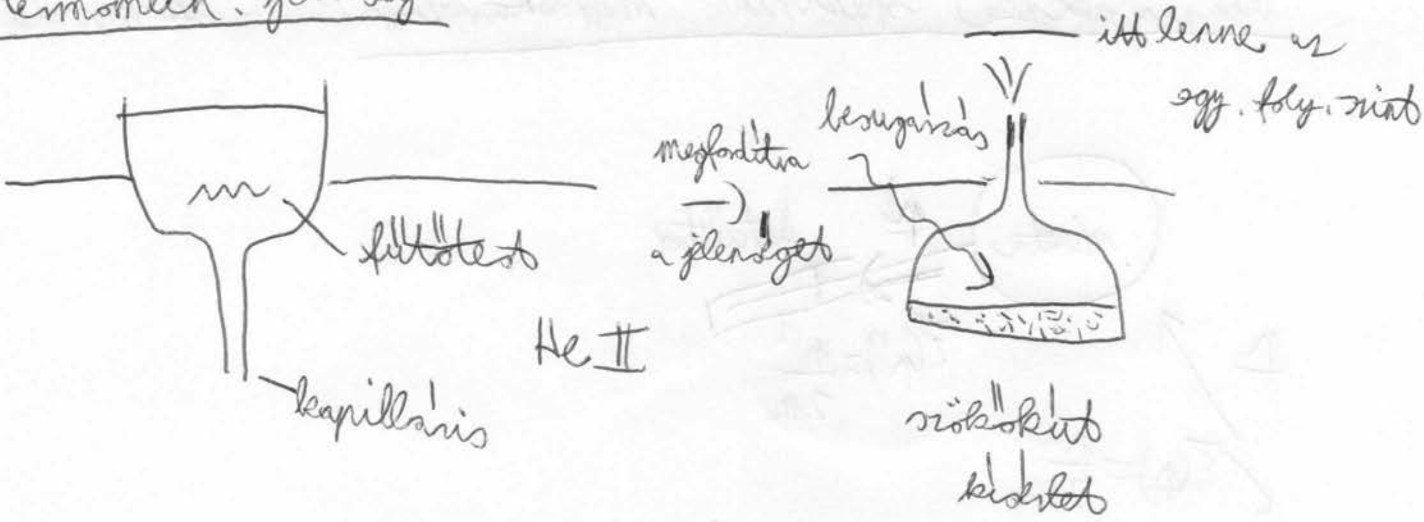
(iii) 

$\leftarrow$ folyadék $\rightarrow$ viszkozitás mérés a forgatóny.-ból



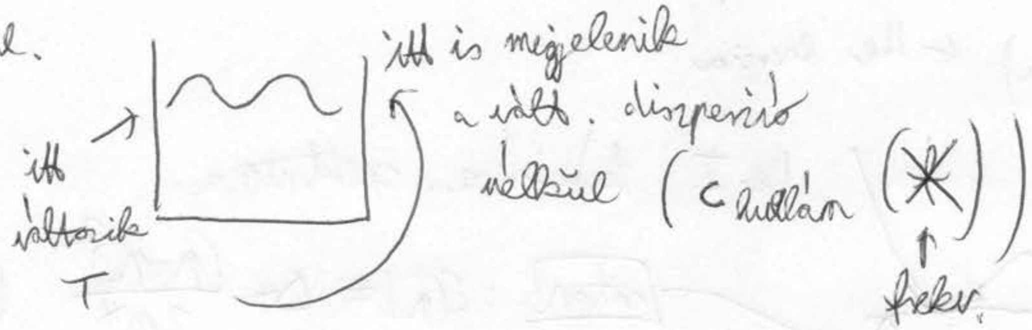
$\leftarrow$ erre mind3 mérés ugyanazt adja

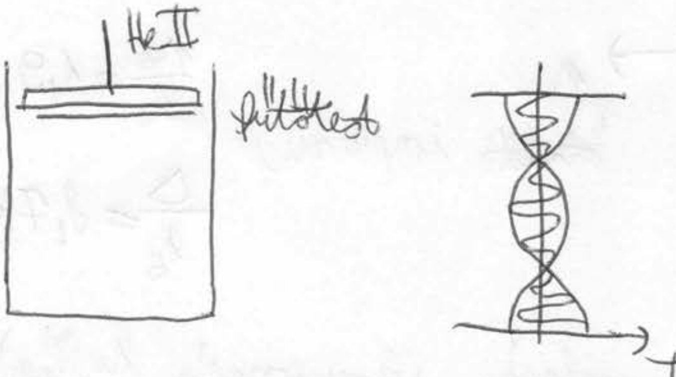
② termomech. jelenség:



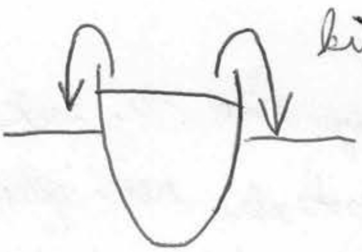
③ első hang: kompressziós hullámok
második hang: hőmérséklet hullámok

pl.



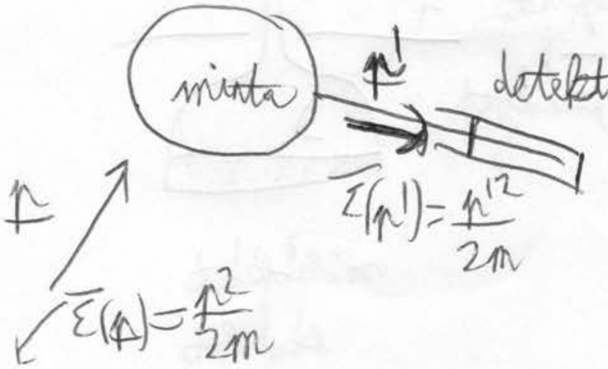


állóhullámok jönnek létre



kimászik a He az edényből

kvázirészecske spektrum meghatározása: n° szórással

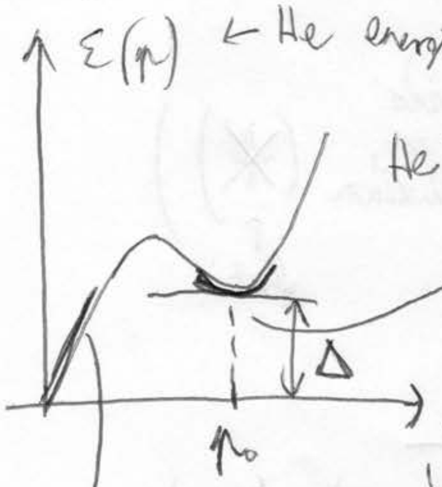


n° energia

adott impulzusátadás mellett egy nagyon jellemző energia jelenik meg ⇒ határozott spektrum

$\varepsilon(p)$ ← He energia

He II kvázirész. spektruma



átadott impulzus

$\boxed{\text{roton}}$: $\varepsilon(p) = \Delta + \frac{(p-p_0)^2}{2m^*}$ (kvadrat. disp.)

$\frac{p_0}{\hbar} = 1{,}9 \cdot 10^8/\mathrm{cm} \sim \frac{1}{a}$ (a: atomi táv.)

$\frac{\Delta}{k_B} = 8{,}7\,\mathrm{K}$

$m^* = 0{,}16\, m_{He}$

$\boxed{\text{fonon}}$

$\varepsilon(p) = u \cdot p$

$u = 239\ \mathrm{m/s}$ hangsebesség (kompressziós hullám)

gerj. száma: $e^{-\frac{\Delta}{k_BT}} = e^{-8{,}7} = 1{,}7 \cdot 10^{-4}$ → alacsony hőm.-en ezek a gerjesztések nem jelennek meg, DE az állapotsűr. nagy

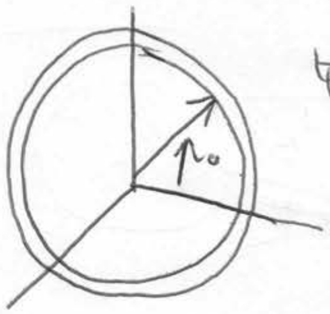
$\uparrow$
$T = 1\mathrm{K}$

~~(kis)~~

⇓

mégis sokan vannak

roton állapotsűrűség

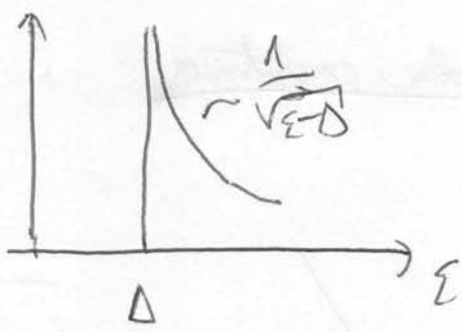


$$4\pi p^2\,dp = 4\pi p_0^2 \cdot \frac{m^*}{p-p_0} \cdot d\varepsilon = 4\pi p_0^2 \frac{m^*}{\sqrt{2m^*(\varepsilon-\Delta)}}\,d\varepsilon$$

$$d\varepsilon = \frac{\cancel{2}(p-p_0)}{\cancel{2}m^*}\,dp$$

$$p-p_0 = \sqrt{(\varepsilon-\Delta)\,2m^*}$$

$$D(\varepsilon) \sim \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon-\Delta)}}$$



Noha egyesével kis va.-űek, nagyon sok jelentős meg az állapotsűr. miatt.

$$E = E_0 + \sum_p \varepsilon(p)\, n(p)$$

$$H = E_0 + \sum_p \varepsilon(p)\, a_p^+ a_p$$ → bozon statisztika

$$\bar{n}(p) = \langle a_p^+ a_p \rangle = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon(p)}-1} \qquad (\mu=0)$$

↑ nem hat. meg a számukat

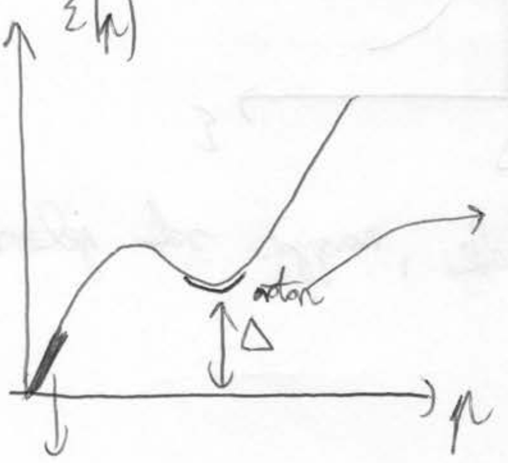
- Mérhető mennyiségek:
  - $E = E_0 + \sum_p \varepsilon(p)\,\bar{n}(p) = E_0 + \frac{V}{h^3}\int d^3p\, \varepsilon(p)\,\bar{n}(p)$
  - $F = E_0 + k_B T \sum_p \ln\left(1 - e^{-\beta\varepsilon(p)}\right)$

• $C_V = T \frac{\partial S}{\partial T}\Big|_{V=\text{áll}}$ $\qquad S = -\frac{\partial F}{\partial T}$

vagy $C_V = \frac{\partial E}{\partial T}\Big|_{V=\text{áll}}$

6. óra

1) Kvázirészecske spektrum



$$\varepsilon(p) = \Delta + \frac{(p-p_0)^2}{2m^*}$$

$$\frac{\Delta}{k_B} = 8{,}7\ \mathrm{K}$$

$$\frac{p_0}{\hbar} = 1{,}9 \cdot 10^8/\mathrm{cm}$$ (Å nagyságú hullámhossz)

$$m^* = 0{,}16 \cdot m_{He}$$

fonon

$\varepsilon(p) = u p$

↑ hangsebesség

$u = 239\ \frac{m}{s}$

$$E = E_0 + \sum_p \varepsilon(p)\, \overline{n}(p)$$

$$\overline{n}(p) = \frac{1}{e^{\beta \varepsilon(p)} - 1}$$

$$F = E_0 + k_B T \cdot \sum_p \ln\left(1 - e^{-\beta \varepsilon(p)}\right)$$

$$N_g = \sum_p \bar{n}(p)$$

a) Rész. szám:

a fonon és roton ágakra külön összegzünk:

$$N_g = \frac{V}{h^3}\int d^3p\, \bar{n}(p) = \frac{V}{h^3}\int_0^{\tilde{p}} d^3p \frac{1}{e^{\beta u p} - 1} + \frac{V}{h^3}\int d^3p \cdot e^{-\beta\left(\Delta + \frac{(p-p_0)^2}{2m^*}\right)} =$$

$\tilde{p}$ a lin. rész „vége"

$p_0 - \delta < p < p_0 + \delta$

δ a kvadr. min. „szélessége"

$e^{\beta\varepsilon} \gg 1$ rotonra, mert $\frac{\Delta}{k_B} \cdot \frac{1}{T}$ nagy szám $(T \to 0)$ ← min. energia

- $$N_{g_f} = \frac{V}{h^3}\int_0^{\tilde{p}} dp \cdot 4\pi p^2 \frac{1}{e^{\beta u p} - 1} =$$

dimenziótlanítsuk az $\int$-t! (alacsony hőm. számolásoknál bevett trükk)

$$= \frac{V}{h^3} 4\pi \underbrace{(\beta u)^{-3}}_{\left(\frac{k_B T}{u}\right)^3} \int_0^{\beta u \tilde{p}} dx \frac{x^2}{e^x - 1} \xrightarrow[\frac{u\tilde{p}}{k_B T} \to \infty \; (T \to 0)]{T \downarrow 0} \frac{V}{h^3} 4\pi \left(\frac{k_B T}{u}\right)^3 \cdot \underbrace{\int_0^\infty dx \cdot \frac{x^2}{e^x - 1}} \sim T^3$$

ha $x > 0 \Rightarrow \frac{1}{1 - e^{-x}}$ egy geom. sor összege

$$\int_0^\infty \frac{x^{n-1}}{e^x - 1} dx = \int_0^\infty dx \frac{x^{n-1} \cdot e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \int_0^\infty dx \cdot x^{n-1} \cdot e^{-x} \underbrace{\sum_{l=0}^{\infty} e^{-lx}}_{\sum_{l=1}^{\infty} e^{-lx}} =$$

$$= \sum_{l=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dx \cdot x^{n-1} e^{-lx} = \underbrace{\sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^n}}_{\zeta(n)} \underbrace{\int_0^{\infty} dt \cdot t^{n-1} \cdot e^{-t}}_{\Gamma(n)}$$

$t := lx$

Riemann-féle ζ-fv.

$$N_{gr} = \frac{V}{h^3} \cdot 4\pi \cdot \left(\frac{k_B T}{u}\right)^3 \cdot \Gamma(3) \cdot \zeta(3)$$

$$\Gamma(3) = 2 \qquad \zeta(3) = 1{,}202$$

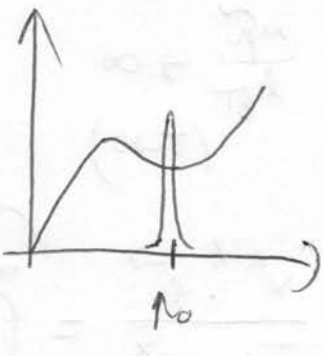
- $$N_r = \underbrace{\frac{V}{h^3} \int_{p=p_0-\delta}^{p_0+\delta} dp \; 4\pi p^2 \cdot e^{-\frac{\beta(p-p_0)^2}{2m^*}}}\cdot e^{-\beta\Delta}$$

$e^{-\frac{\beta(p-p_0)^2}{2m^*}}$ szélessége

$$\frac{m^* \cdot k_B T}{p_0^2} = 3{,}6 \cdot 10^{-3} \qquad \frac{\sqrt{m^* k_B T}}{p_0} = 6 \cdot 10^{-2} \Rightarrow \text{éles Gauss görbe}$$

$T = 1K$

$m^* = 0{,}16 \cdot m_{He}$



→ elég p-t p_0 körül nézni

$$N_r \simeq \frac{V}{h^3} 4\pi p_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp \cdot e^{-\frac{\beta(p-p_0)^2}{2m^*}} e^{-\beta\Delta}$$

kiterjeszthetem a tartományt, mert a lecsengés miatt ott úgyis kicsi a járulék

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

$$\Rightarrow N_r = \frac{V}{h^3} \cdot 4\pi p_0^2 \cdot \underbrace{e^{-\beta\Delta}}_{e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}} \cdot \sqrt{2\pi m^* k_B T}$$

exponenciálisan cseng le a rotonok száma.

↳ Ennek oka, hogy a rotonoknál van <u>gap</u>, míg a fononoknál nincs (hatványfv.-es lecsengés).

b) <u>Hőkapacitás:</u>

$$E = E_f + E_r + E_0$$

$$F = E_0 + F_r + F_f$$

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = T\frac{\partial S}{\partial T} \leftarrow \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial(F+TS)}{\partial T} = \cancel{\frac{\partial F}{\partial T}} + S + T\cdot\frac{\partial S}{\partial T} = T\cdot\frac{\partial S}{\partial T}$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}$$

- Fononok járuléka:

$$E_f = \frac{V}{h^3}\int_{p<\tilde{p}} d^3p\, \frac{up}{e^{\beta up}-1} = \frac{V}{h^3}\int_0^{\tilde{p}} dp \cdot 4\pi p^2 \cdot \frac{up}{e^{\beta up}-1} \overset{\beta up := x}{=}$$

$$= \frac{V}{h^3} 4\pi \cdot \frac{1}{\beta^4}\frac{1}{u^3}\int_0^{\beta u\tilde{p} \to \infty} dx\, \frac{x^3}{e^x-1} = \frac{V}{h^3} 4\pi \frac{(k_B T)^4}{u^3} \cdot \underbrace{\int_0^\infty dx\, \frac{x^3}{e^x-1}}_{\Gamma(4)\zeta(4) = 6\cdot\pi^4/90} \sim T^4$$

$$\boxed{C_f = \frac{\partial E_f}{\partial T} = \frac{V}{\hbar^3}\,\frac{2\pi^2}{15}\,\frac{(k_B T)^3}{u^3}\cdot k_B}$$ hőkapacitás

fajhő: $c = \frac{C_f}{n \cdot m_{He}} = \rho \cdot \frac{2\pi^2}{15\hbar^3} \cdot \frac{(k_B T)^3}{u^3} k_B$

↳ a mérésekkel összehasonlítva ($\rho \simeq$ áll-t ~~...~~ léírva) elég jó egyezést tapasztalunk.

- rotonokra:

$$F_r = \frac{V}{\hbar^3} k_B T \int\limits_{p_0-\delta<p<p_0+\delta} d^3p \ln\left(1 - e^{-\beta\varepsilon(p)}\right) = -k_B T \frac{V}{\hbar^3}\int d^3 e^{-\beta\varepsilon(p)} = -k_B T \cdot N_r$$

$$e^{-\beta\varepsilon(p)} = e^{-\beta\Delta} \cdot e^{-\beta\frac{(p-p_0)^2}{2m^*}} \qquad \ln(1-x) \simeq -x \quad x \ll 1$$

$$\frac{\partial N_r}{\partial T} = \frac{1}{2}\cdot\frac{N_r}{T} + N_r \cdot \frac{\Delta}{k_B T^2}$$

$$\frac{\partial F_r}{\partial T} = -k_B N_r - k_B T\left(\frac{N_r}{2T} + N_r \frac{\Delta}{k_B T^2}\right) = -k_B N_r \left(\underbrace{1 + \frac{1}{2}}_{3/2} + \frac{\Delta}{k_B T}\right)$$

$$S_r = -\frac{\partial F_r}{\partial T} = k_B N_r \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{k_B T}\right)$$

$$C_r = T\frac{\partial S_r}{\partial T} = \cancel{\left(T k_B\left(\frac{N_r}{2T} + N_r \cdot \frac{\Delta}{k_B T^2}\right)\right)}\; T \cdot \left[k_B\left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{k_B T}\right)\left(\frac{N_r}{2T} + N_r \frac{\Delta}{k_B T^2}\right) + k_B N_r\left(-\frac{\Delta}{k_B T^2}\right)\right] =$$

$$= N_r k_B \left[\frac{3}{4}+\frac{3}{2}\frac{\Delta}{k_BT}+\frac{\Delta^2}{(k_BT)^2}+\frac{\Delta}{2k_BT}\right\} - \frac{\Delta}{k_BT}\right] =$$

$$\boxed{C_r = N_r k_B\left(\frac{3}{4}+\frac{\Delta}{k_BT}+\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right)^2\right)}$$

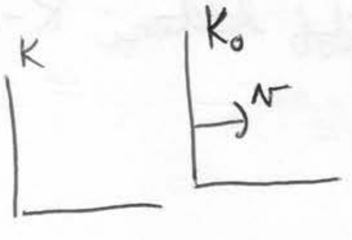
$\Downarrow$

$e^{-\frac{\Delta}{k_BT}}$ → ez határozza meg a hőm. függést

gappel rendelkező!! ~~részecskék~~ gerjesztések fajhője exponenciálisan cseng le

2) Szuperfolyékonyság Landau-feltétele

szuperfoly.: → kapillárisban érvényesül



$$\underset{(K)}{v_i} = \overbrace{v + \underset{(K_0)}{v_{i0}}}^{K\text{-ból nézett seb.}} \quad \text{(Galilei transzformáció!)}$$

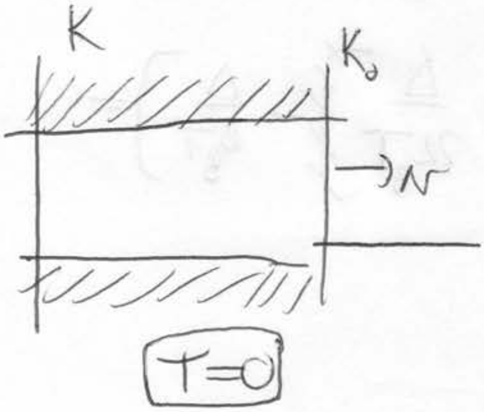
$$\frac{1}{2}\sum_i m_i v_i^2 = \frac{1}{2}\sum_i m_i\left(v^2 + 2 v v_{i0} + v_{i0}^2\right) = \frac{1}{2}M v^2 +$$

$$+ \underbrace{v\sum_i m_i v_{i0}}_{P_0 \text{ (összimpulzus)}} + \frac{1}{2}\sum_i m_i v_{i0}^2$$

$$\underset{(K)}{E} = \frac{1}{2}M v^2 + v P_0 + E_0$$

Hasonlóan

$$P = M v + P_0$$



K_0: folyadékhoz rögzített

K: kapillárishoz rögzített

fékeződés: folyadék energiát ad át a falnak

egy kvázirész.:

$$K_0\text{-ban} \begin{cases} \text{imp.}: p \\ \text{energia}: \varepsilon(p) \end{cases}$$

$$K\text{-ban} \{ \text{energia}: \underline{\varepsilon(p) + vp} \quad \text{(l. előző old. levezetés)}$$

$M_{\text{rész}} = 0$

a gerjesztés energiája megváltozik K-ban!

~~Akkor tudja~~

(ilyenkor lassul a folyadék)

Mikor lehetséges negatív en. gerjesztést kelteni K-ban?

$\Rightarrow$ ehhez: van olyan $\underline{p}$ imp., hogy

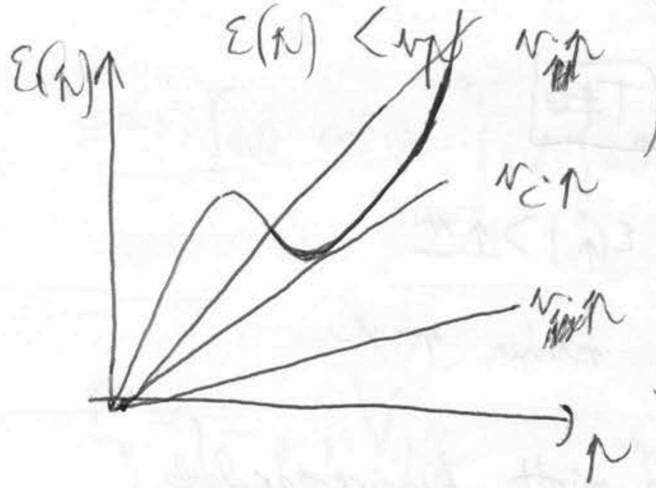
$$\varepsilon(p) + \underline{v}\,\underline{p} < 0$$

$$\varepsilon(p) < -\underline{v}\,\underline{p}$$

mivel $\varepsilon(p) > 0$, ezért $\underline{v} \sim -\underline{p}$ (~~ellen~~ az áramlás irányával ellentétes irányú gerjesztés kell)

$-\underline{v}\,\underline{p}$ max. értéke (adott $\underline{p}$ mellett): vp

$$\underset{\underline{p}}{\longleftarrow}\!\circ\!\longrightarrow \underline{v}$$



} felkeződés lehetséges

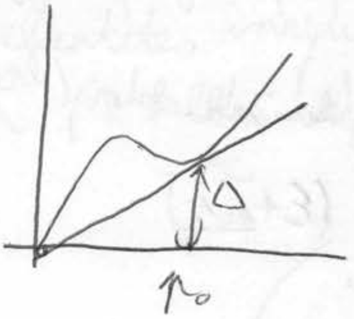
~~fekez~~

} nincs felkeződés → szuperfolyékony áramlás:

$$\boxed{v_c = \min_p \left(\frac{\varepsilon(p)}{p}\right)}$$

$\boxed{\text{szuperfoly., ha } v < v_c}$

v_c becslése



$$\frac{\Delta}{p_0} = \frac{8{,}7\,K \cdot k_B}{\hbar \cdot 1{,}9 \cdot 10^{10}/m} \simeq 60\ m/s$$ → kísérlet ezt nem igazolja (jóval kisebb)

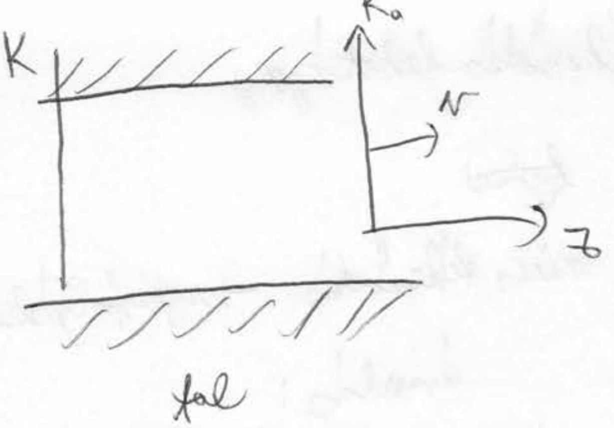
<u>Kísérlet</u> v_c függ a kapilláris átmérőjétől (d)

$v_c \sim d^{-1/4}$ pl. $d = 10^{-6}$ cm $v_c = 30\ \frac{cm}{s}$

↓

ez a kapilláris szájánál létrejövő örvények (makr. gerjesztések) miatt van: ezek energiája az örvény nagyságával (~ kapilláris átmérője) fordítottan arányos

(DE ha ionokat lőnek be → nincsenek örvények → 60 m/s-al összemérhető v_c)



$\boxed{T \neq 0}$

$\varepsilon(p) > pv$

minden p-re

DE $T \neq 0$ miatt kvázirészecskék jelen vannak

Feltételezés: a kvázirészecskék gáza egyensúlyban a fallal

K_0-beli impulzus:

$$\underset{\sim 0}{P} = \frac{V}{h^3} \underbrace{\int d^3p \, \underline{p} \cdot \overset{\text{kvázirész. szám (betölt. szám)}}{\overline{n}}}_{\text{teljes imp.}} (\varepsilon + \underline{p}\underline{v})$$

ezt akkor ~~tudnánk~~ lenne $\overline{n}(\varepsilon \ldots)$, ha a folyadékkal lennének egyensúlyban

$\Rightarrow$ a fal k. rendszerében kell a betöltési számot kiszámolni! (eltolódik a betöltési spektrum)

$$\underset{\sim 0}{P} = \frac{V}{h^3} \int d^3p \, \underline{p} \left[\overline{n}(\varepsilon(p)) + \frac{\partial \overline{n}}{\partial \varepsilon} (\underline{p}\underline{v}) + \ldots \right]$$

$$\begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} \qquad p_z \cdot v$$

mert:

1.tag: p ptlt., $\varepsilon(p)$ páros (iránytól-tlen) $\Rightarrow \int \underline{p} \cdot \pi(\varepsilon) \xrightarrow{d p} 0$

2.tag: $\int p_x p_z$; $\int p_x p_z \Big\} \to 0$ $\quad (p_x = p \sin\vartheta \cos\varphi)$

$\vdots$

$\int p_z p_z \to$ ez már nem 0 lesz

$\Rightarrow \underline{P}_0 \parallel z$

$$\Rightarrow \underline{P}_0 = \left(\frac{V}{h^3} \int d^3 p \cdot p_z^2 \cdot \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \right) \cdot \underline{v} = \left(\frac{V}{h^3} \int dp \cdot p^2 \cdot \underbrace{\int d\Omega \cdot \cos^2\vartheta}_{\frac{4\pi}{3}} \cdot p^2 \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \right) \underline{v}$$

$$p_z^2 = p^2 \cos^2\vartheta$$

$$\text{mert.: } \int d\Omega \cos^2\vartheta = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \cos^2\vartheta = 2\pi \underbrace{\left[-\frac{\cos^3\vartheta}{3} \right]_0^{\pi}}_{\frac{2}{3}} = \frac{4\pi}{3}$$

$$\underline{P}_0 = -\rho_n \cdot V \underline{v} \quad \text{ahol} \quad \rho_n = -\frac{1}{h^3} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot \int dp \cdot p^4 \cdot \underbrace{\frac{\partial n}{\partial \varepsilon}}_{<0}$$

folyadékkal együtt mozgó

k. rsz.-ben a kvázirészecskéknek $\quad \rho_n > 0 \Leftarrow$

az áramlással ellentétes irányú

impulzusuk van (a falhoz képest "egy helyben marad")

K-ban

$$\underline{P} = M\underline{v} + \underline{P}_0 = V\underbrace{(\rho - \rho_n)}_{\rho_s}\underline{v}$$

$$M = \rho V$$

$\Downarrow$

olyan, mintha egy $\rho - \rho_n$ sűrűségű folyadék áramlana !!!

~ (nem a teljes tömeget kell beírni)

$\Rightarrow$ „két-folyadék elmélet" / szuperfolyékony komponens \ normál komponens (kváziészecskék gáza)

Landau
Tisza László

(T=0 -n a normál komponens a kapilláris szájánál megáll)

↳ kapilláris méréskor nincs viszkozitás

↳  forgó hengerben a normál komponens is megjelenik, de ezt nem viszi magával a henger $\Rightarrow$ nem a teljes tömeg forog

fenomen. modell,
olyan, mintha
a rész. ~~(atomok)~~
egy része szuperfolyékony,
másik része normál komp. lenne } valójában nem erről van szó

7. óra

(folyt.)

1) Hogyan függ a normál komponens sűrűsége a hőm.-tól?

$$\rho_n = -\frac{1}{h^3}\frac{4\pi}{3}\int dp\, p^4 \frac{\partial n}{\partial \varepsilon}$$

$$\rho_n = \rho_{nf} + \rho_{nr}$$

$$n = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon}-1}$$

$$\frac{\partial n}{\partial \varepsilon} = -\frac{e^{\beta\varepsilon}\beta}{\left(e^{\beta\varepsilon}-1\right)^2}$$

$$\rho_{nf} = -\frac{1}{h^3}\frac{4\pi}{3}\int_0^{\hat{p}} dp\, p^4 \frac{e^{\beta\varepsilon}\cdot\beta}{\left(e^{\beta\varepsilon}-1\right)^2} =$$

$$= \frac{4\pi}{3}\cdot\frac{1}{h^3}\int_0^{\infty \; \cancel{\beta u \hat{p}}} dx\, x^4 \cdot \frac{e^x}{\left(e^x-1\right)^2}\cdot\beta\cdot\frac{1}{(\beta u)^5} = \frac{4\pi}{3}\frac{1}{h^3}\frac{(k_B T)^4}{u^5}\int_0^\infty dx\, x^4 \frac{e^x}{\left(e^x-1\right)^2}$$

$$\rho_{nf} \sim T^4$$

$$\rho_{nr} \sim e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}(\dots)$$

<u>két folyadék modell:</u>

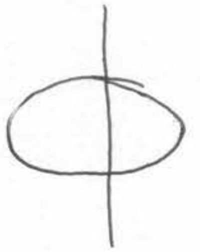
(2)

$M \sim \eta\,\omega$ normál komponenst magával viszi a henger, szuperfoly.-t nem

$\uparrow$ viszkozitás

(1) kapilláris (4) normál komponens "megakad" a cső szájánál

(3)

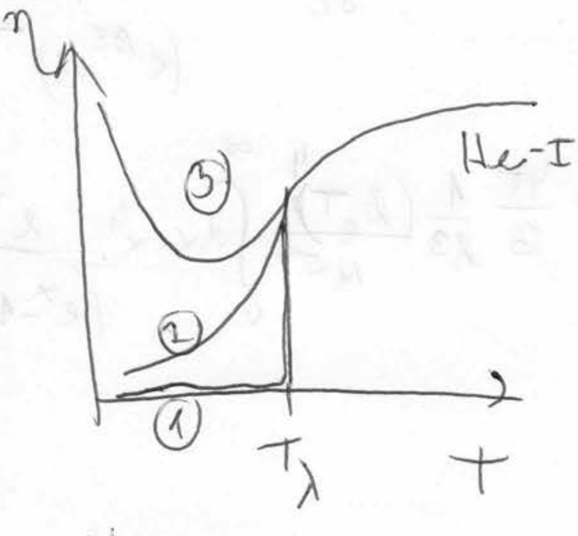


csillapítás $\sim \sqrt{\eta\rho}$

helyes kiértékelés: $\sqrt{\rho_n \eta_n} = \sqrt{\rho \left(\frac{\rho_n}{\rho}\cdot\eta_n\right)}$

csak a normál komponenst kell venni

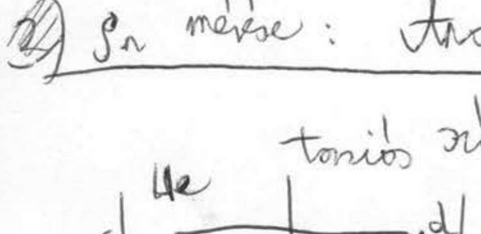
ha a teljes sűrűséget írjuk be, η_n helyett



$T \to 0$ $\frac{\rho_n}{\rho}\cdot\eta_n$ „viszkozitást" ~~0~~ kapunk

2) Kísérletek és magyarázatuk

~~4)~~ ρ_n mérése: Andronikasvili



d: lemezek távolsága

ν: kinem. visz.

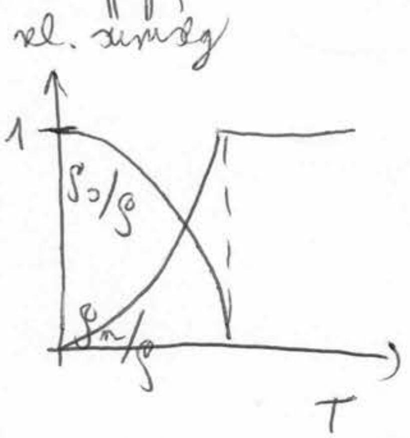
$\frac{d^2}{\nu}$: karakt. idő, amíg a viszkózus stac. áramlás kialakul ha $T_{torziós} \gg \frac{d^2}{\nu}$ → kialakul az áramlás

↙

normál komponens tömege megmérhető ← $\begin{cases} \omega^2 = \frac{\hat{D}}{\Theta} \\ \Theta = \frac{1}{2} m a^2 \text{ hengerre} \end{cases}$

$\hat{D}$ ← dir. nyomaték

Θ ←teh. nyomaték



$$\frac{\rho_s}{\rho} + \frac{\rho_n}{\rho} = 1$$

– Termomechanikai jelenség

...

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} = 10 \, \frac{\text{Hgcm}}{\text{mK}} \quad (T = 1\text{K})$$

szökőkút jelenség:

egyensúlyi magasság > kapilláris teteje

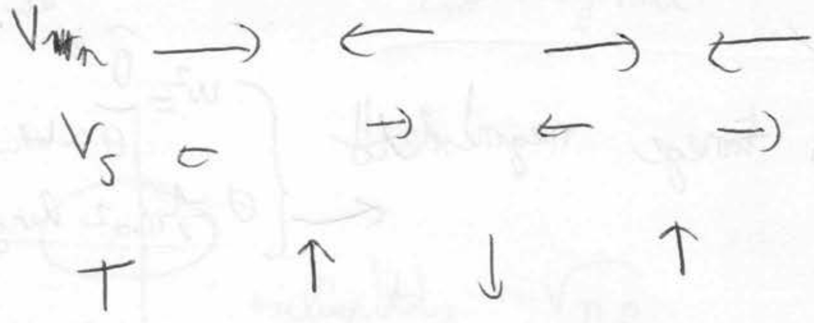
– Hullámok He II foly.-ban

v_n → ← → ←

v_s → ← → ←

ρ ↑ ↓ ↑

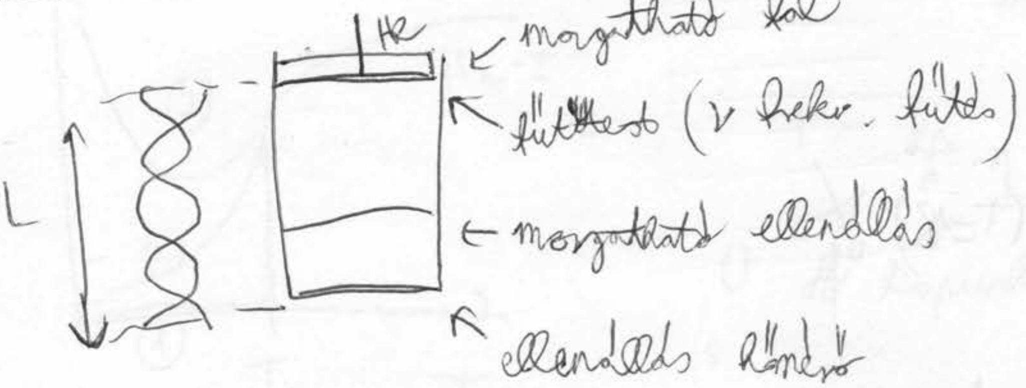
• 2. hang: hőmérséklet hullámok (eredő tömegáramlás nélkül)



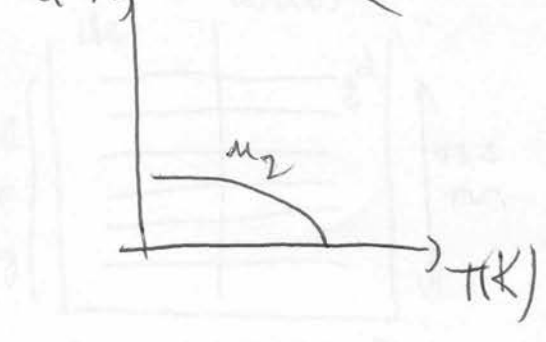
$\lambda \cdot \nu = u_2$

(megnő a normál komp. sűrűség)

– Peskov kísérlete

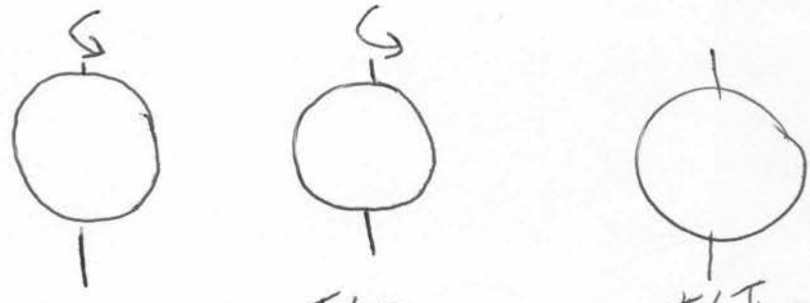


$L = \frac{\lambda}{2} l \qquad \lambda \nu = u_2$



– Fennmaradó (perzisztens) áramlás

pórusos anyaggal töltött edényben



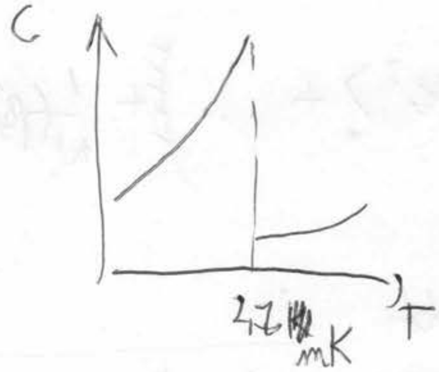
$T > T_\lambda$ — forgó edénnyel együtt forgó He I-fly.

$T < T_\lambda$ — forgó edénnyel együtt forgó He II-fly.

$T < T_\lambda$ — álló edényben álló normál komponens, fennmaradó forgás (szuperfly. komp.)

– Forrásnál ~~...~~ ha elérjük az átalakulási hőm.-et, megszűnik a forrás, mert a hőm. nagyon gyorsan kiegyenlítődik a fly.-ban.

– ^3He fajhője az olvadási vonalon:



→ " is ~~szu~~ szuperfolyékony lesz, de a –"– még a szupravezetéssel kapcsolatos

Perturbációszámítás

Klasszikus sz.:

$$Z = \int e^{-\beta \mathcal{H}} d\Gamma$$

$$d\Gamma = dp\, dq$$

Tfh.

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H}$ alakú, és

$Z_0 = \int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}_0}$ állapotösszeg ismert

mivel:

$$e^{-\beta\mathcal{H}} = e^{-\beta\mathcal{H}_0} \cdot e^{-\beta\delta\mathcal{H}} = e^{-\beta\mathcal{H}_0}\left(1 - \beta\delta\mathcal{H} + \frac{1}{2}(\beta\delta\mathcal{H})^2 + \dots\right)$$

$$\Rightarrow Z = \int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}} = \int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}_0}\left(1 - \beta\delta\mathcal{H} + \frac{1}{2}(\beta\delta\mathcal{H})^2 + \dots\right) =$$

$$= Z_0\left(1 - \beta\frac{\int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}_0}\delta\mathcal{H}}{Z_0} + \frac{1}{2}\beta^2\frac{\int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}_0}\delta\mathcal{H}^2}{Z_0} + \dots\right) =$$

$$= Z_0\left(1 - \beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0 + \frac{1}{2}\beta^2\langle\delta\mathcal{H}^2\rangle_0 + \dots + \frac{1}{n!}(-\beta)^n\langle\delta\mathcal{H}^n\rangle_0 + \dots\right)$$

$\uparrow$

$\delta\mathcal{H}$ perturbálatlan sz. beli vett várható értéke = $\delta\mathcal{H}$ első momentuma"

($\Rightarrow Z$ a $\delta\mathcal{H}$ momentumgeneráló fv.-e)

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T \ln Z_0 - k_B T \ln\left(1 - \beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0 + \frac{\beta^2}{2}\langle\delta\mathcal{H}^2\rangle_0 + \dots\right)$$

$$\ln(1+x) \underset{x \ll 1}{\simeq} x - \frac{x^2}{2} + \dots$$

a $-\frac{x^2}{2}$ tagból is → a legmagasabb rendű

$$F = -k_B T \ln Z_0 - k_B T\left(-\beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0 + \frac{\beta^2}{2}\langle\delta\mathcal{H}^2\rangle_0 - \frac{1}{2}\beta^2\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0^2 + \dots\right) =$$

$$= \underbrace{-k_B T \ln Z_0}_{F_0} - k_B T\left(-\beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0 + \frac{\beta^2}{2}\left[\langle\delta\mathcal{H}^2\rangle_0 - \langle\delta\mathcal{H}\rangle_0^2\right] + \dots\right)$$

első -rend: ~~$F = F_0 + \langle\delta\mathcal{H}\rangle_0$~~

$$\boxed{F = F_0 + \langle\delta\mathcal{H}\rangle_0}$$

<u>Kvantummech.:</u>

baj: $e^{-\beta\mathcal{H}} \neq e^{-\beta\mathcal{H}_0} \cdot e^{-\beta\delta\mathcal{H}}$, mert $\mathcal{H}_0$ és $\delta\mathcal{H}$ ált. nem felcserélhető, azaz $[\mathcal{H}_0, \delta\mathcal{H}] \neq 0$

Trükk: $e^{-\beta\mathcal{H}} = e^{-\beta\mathcal{H}_0} \cdot S(\beta)$

$$S(\beta) = e^{\beta\mathcal{H}_0} e^{-\beta\mathcal{H}}$$

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial\beta} = \mathcal{H}_0 e^{\beta\mathcal{H}_0} e^{-\beta\mathcal{H}} + e^{\beta\mathcal{H}_0}(-\mathcal{H}) \cdot e^{-\beta\mathcal{H}} = \cancel{e^{\beta\mathcal{H}_0}(\mathcal{H}_0 - \mathcal{H})}$$

$$\Rightarrow e^{\beta\mathcal{H}_0}\underbrace{(\mathcal{H}_0-\mathcal{H})}_{-\delta\mathcal{H}}e^{-\beta\mathcal{H}_0}\,S(\beta)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial S(\beta)}{\partial\beta}=-e^{\beta\mathcal{H}_0}\cdot\delta\mathcal{H}\cdot e^{-\beta\mathcal{H}_0}\,S(\beta)$$

def: $A(\tau)\equiv e^{\tau\mathcal{H}_0}\cdot A\cdot e^{-\tau\mathcal{H}_0}$ (lényegében Heisenberg-kép)

$$\boxed{\frac{\partial S(\beta)}{\partial\beta}=-\delta\mathcal{H}(\beta)\cdot S(\beta)\qquad S(\beta=0)=1}$$

ezt kell megoldani

b.o.: $\int_0^\beta\frac{\partial S(\tau)}{\partial\tau}\cdot d\tau=S(\beta)-S(0)=S(\beta)-1$

j.o.: $-\int_0^\beta d\tau\,\delta\mathcal{H}(\tau)\,S(\tau)$

$$\Rightarrow\quad\boxed{S(\beta)=1-\int_0^\beta d\tau\,\delta\mathcal{H}(\tau)\,S(\tau)}$$

iterációval megoldható

perturbálatlan eset a 0. közelítés

$\delta\mathcal{H}=0:\quad S(\beta)=1\quad\rightarrow S(\beta)^{(1)}=1-\int_0^\beta d\tau\,\delta\mathcal{H}(\tau)$

$$S(\beta)^{(2)}=1-\int_0^\beta d\tau\,\delta\mathcal{H}(\tau)+\int_0^\beta d\tau\,\delta\mathcal{H}(\tau)\int_0^\tau d\tau'\,\delta\mathcal{H}(\tau')\,S(\tau')$$

$$\Rightarrow S(\beta) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \cdot \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n \cdot \delta\mathcal{H}(\tau_1)\cdot \delta\mathcal{H}(\tau_2) \dots \delta\mathcal{H}(\tau_n)$$

(analóg az időfüggő pert. számítással)

Első rendig: $S(\beta) = 1 - \int_0^\beta d\tau \cdot \delta\mathcal{H}(\tau)$

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}}\right) = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0} \cdot S(\beta)\right) = \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}_0}\left(1 - \int_0^\beta d\tau \cdot \delta\mathcal{H}(\tau)\right)\right]$$

$$Z_0 = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}\right)$$

$$Z = Z_0 \cdot \left(1 - \int_0^\beta d\tau \frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}\, \delta\mathcal{H}(\tau)\right)}{Z_0}\right) \qquad \text{1. rendig}$$

Msz.:

$$\mathrm{Tr}\Big(e^{-\beta\mathcal{H}_0} \cdot \underbrace{e^{\tau\mathcal{H}_0} \cdot \delta\mathcal{H}\, e^{-\tau\mathcal{H}_0}}_{\delta\mathcal{H}(\tau)}\Big) = \mathrm{Tr}\left(e^{-\tau\mathcal{H}_0} e^{-\beta\mathcal{H}_0} e^{\tau\mathcal{H}_0}\, \delta\mathcal{H}\right) =$$

$$= \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}\, \cancel{e^{-\tau\mathcal{H}_0}} \cdot \cancel{e^{\tau\mathcal{H}_0}}\, \delta\mathcal{H}\right)$$

τ-tól nem függ $\Rightarrow \int$-ből csak egy β szorzó lesz

$$\underline{\underline{Z = Z_0\left(1 - \langle\delta\mathcal{H}\rangle_0\, \beta\right)}}$$

1. rendig uaz, mint a klassz. képlet (DE 2. rendig már eltérés van)

$\Downarrow$

$$\underline{\underline{F = F_0 + \langle\delta\mathcal{H}\rangle_0}}$$

Fiz. mennyiség várható értéke:

$$\langle B\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}} B\right)}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}}\right)} = \frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}\cdot\left(1-\int_0^\beta d\tau\, \delta\mathcal{H}(\tau)\right)\cdot B\right)}{Z_0\left(1-\beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0\right)} =$$

$$= \frac{\frac{1}{Z_0}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}\cdot B\right) - \int_0^\beta d\tau\, \frac{1}{Z_0}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}\,\delta\mathcal{H}(\tau)\cdot B\right)}{1-\beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0}$$

$$\langle B\rangle = \frac{\langle B\rangle_0 - \int_0^\beta d\tau\,\langle\delta\mathcal{H}(\tau)\cdot B\rangle_0}{1-\beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0} = \langle B\rangle_0 - \int_0^\beta d\tau\,\langle\delta\mathcal{H}(\tau)\cdot B\rangle_0 +$$

~~1. rendig:~~ mn.:

$$+\ \beta\langle B\rangle_0\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0 \qquad (1.\ \text{rendig})$$

$$\frac{1}{1-x} \simeq 1+x$$

$$x \ll 1$$

$$\langle B\rangle = \langle B\rangle_0 - \int_0^\beta d\tau\left[\langle\delta\mathcal{H}(\tau)\cdot B\rangle_0 - \langle B\rangle_0\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0\right]$$

- ha $[\delta\mathcal{H},\mathcal{H}_0]=0$: $\delta\mathcal{H}(\tau) = e^{\tau\mathcal{H}_0}\cdot\delta\mathcal{H}\cdot e^{-\tau\mathcal{H}_0} = \delta\mathcal{H}$

$\Rightarrow \delta\mathcal{H}$ megmarad (időtől független menny.)

$$\Rightarrow \boxed{\langle B\rangle = \langle B\rangle_0 - \beta\underbrace{\left(\langle\delta\mathcal{H}\cdot B\rangle_0 - \langle\delta\mathcal{H}\rangle_0\langle B\rangle_0\right)}_{\text{korrelációs fv.}}}$$

↳ egyben klasszikus eredmény is (mert itt is $[\delta\mathcal{H},\mathcal{H}_0]=0$)

Nagykanonikus sokaságra: $e^{-\beta(\mathcal{H}-\mu N)}$

$\delta\mathcal{H}$ marad, de $\mathcal{H} \to \mathcal{H}-\mu N$

$\mathcal{H}_0 \to \mathcal{H}_0-\mu N$

• Spec. eset:

$$\delta\mathcal{H} = -\hat{A} f$$

pl. $\hat{A}$ f

• mágn. momentum, mágn. térerősség $-\hat{M} B$

• el. dip. mom., el. térerősség $-\hat{p} E$

(nincs visszahatás a környezetre)

$$\langle B\rangle = \langle B\rangle_0 + \underbrace{\beta\int_0^\beta d\tau\left[\langle A(\tau) B\rangle_0 - \langle B\rangle_0\langle A\rangle_0\right]}_{\text{izoterm statikus szuszceptibilitás}} \cdot f + \mathcal{O}(f^2)$$

egyensúlyi várható értéktől való eltérés lineáris f-ben

χ^T_{BA} (mért, zavar (perturbáció) ~~külső tér~~)

klasszikus rsz.-ben vagy ha $[\hat{A}, \mathcal{H}_0]=0$

$$\boxed{\langle B\rangle = \langle B_0\rangle + \frac{\langle AB\rangle_0 - \langle A\rangle_0\langle B\rangle_0}{k_B T} f}$$

fluktuáció-válaszlétel

8. óra

Kölcsönható részecskerendszerek

1) N rész. $\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i\neq j)}}^{N} v(\underline{r}_i - \underline{r}_j)$

koord. ábrázolás: $\Psi_\sigma(\underline{r}) \quad \Psi^+_\sigma(\underline{r})$

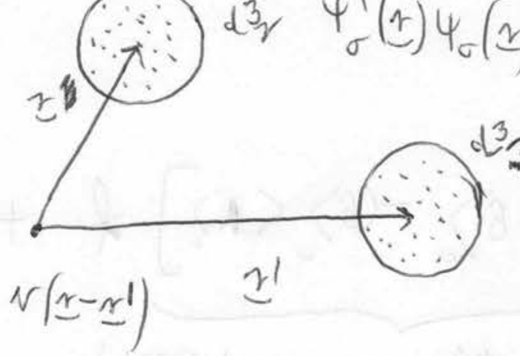
$\uparrow$ $\underline{r}$ helyen ~~kelt~~ σ spinű rész.-t

a) Hamilton-op.:

$$\mathcal{H} = \underbrace{\int d^3r \sum_\sigma \Psi^+_\sigma(\underline{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}\right) \Psi_\sigma(\underline{r})}_{\text{kin. energia várh. érték}} + \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \sum_{\sigma\sigma'} v(\underline{r}-\underline{r}') \underbrace{\Psi^+_\sigma(\underline{r}) \Psi^+_{\sigma'}(\underline{r}') \Psi_{\sigma'}(\underline{r}') \Psi_\sigma(\underline{r})}$$

belátható, hogy ilyen sorrendben kell felírni őket (ez fermionoknál számít)

$d^3r \quad \Psi^+_\sigma(\underline{r}) \Psi_\sigma(\underline{r})$



sűrűség $\underline{r}'$ helyen: $\Psi^+_{\sigma'}(\underline{r}') \Psi_{\sigma'}(\underline{r}')$

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i\neq j)}} f(i,j) = f(1,2) + f(1,3) \ldots + \ldots + \ldots$$

$\uparrow$ kétrész. operátor

Fock-térben $F^{(2)} = \frac{1}{2} \cdot \sum_{l_1 l_2, l_3 l_4} \langle l_1 l_2 | f | l_3 l_4 \rangle \, \underbrace{a^+_{l_1} a^+_{l_2} a_{l_4} a_{l_3}}_{\text{sorrend!}}$

ha $l_2 = l_3$, $l_1 = l_4$ → olyan sorrendben teszem vissza a rész.-ket, amilyen sorrendben elvettem

l_1, l_2 kv. szám jellemzi a 2 állapotot

szabad ksz. bázison

$$\varphi_e \Rightarrow \varphi_{\underline{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}\underline{r}} \chi_\sigma(s) \Rightarrow$$ mátrixelem: $$\langle k_1\sigma_1, k_2\sigma_2 | v | k_1'\sigma_1', k_2'\sigma_2' \rangle =$$

$$= \frac{1}{V^2} \int d^3r_1\, d^3r_2 \sum_{s_1 s_2} e^{i\underline{k}_1\underline{r}_1} \cdot \chi^*_{\sigma_1}(s_1)\, e^{i\underline{k}_2\underline{r}_2} \cdot \chi^*_{\sigma_2}(s_2) \cdot$$

$$\cdot v(\underline{r}_1 - \underline{r}_2) \cdot e^{i\underline{k}_1'\underline{r}_1} \cdot \chi_{\sigma_1'}(s_1)\, e^{i\underline{k}_2'\underline{r}_2} \chi_{\sigma_2'}(s_2) = \%$$

$$\sum_{s_1} \chi^*_{\sigma_1}(s_1) \chi_{\sigma_1'}(s_1) = \delta_{\sigma_1\sigma_1'} \qquad \delta_{\sigma_1\sigma_1'} \qquad \delta_{\sigma_2\sigma_2'}$$

$$\underline{R} = \frac{\underline{r}_1 + \underline{r}_2}{2} \qquad \underline{r} = \underline{r}_1 - \underline{r}_2 \qquad \left.\begin{aligned} \underline{r}_1 &= \underline{R} + \frac{\underline{r}}{2} \\ \underline{r}_2 &= \underline{R} - \frac{\underline{r}}{2} \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} x_1 &= X + \frac{x}{2} \\ x_2 &= X - \frac{x}{2} \end{aligned}$$

$$d^3\underline{r}_1\, d^3\underline{r}_2 = d^3\underline{R}\, d^3\underline{r}$$

$$\Leftarrow \quad \text{Jacobi-det} = \left| \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \right| = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1 \Rightarrow |\;| = 1$$

$$\underline{k}_1\underline{r}_1 + \underline{k}_2\underline{r}_2 = (\underline{k}_1 + \underline{k}_2)\underline{R} + (\underline{k}_1 - \underline{k}_2)\frac{\underline{r}}{2}$$

$$\% = \int d^3\underline{r}\, d^3\underline{R}\; v(\underline{r})\, e^{-i(\underline{k}_1 + \underline{k}_2 - \underline{k}_1' - \underline{k}_2')\underline{R}} \cdot e^{-i(\underline{k}_1 - \underline{k}_2 - \underline{k}_1' + \underline{k}_2') \cdot \frac{\underline{r}}{2}} = \%$$

$$\int d^3\underline{R}\, e^{-i(\underline{k}_1 + \underline{k}_2 - \underline{k}_1' - \underline{k}_2')\underline{R}} = \left\{ \begin{array}{l} V, \text{ ha } \underline{k}_1 + \underline{k}_2 = \underline{k}_1' + \underline{k}_2' \\ 0 \text{ egyébként} \end{array} \right\} = V \cdot \delta_{\underline{k}_1+\underline{k}_2, \underline{k}_1'+\underline{k}_2'}$$

akkor lesz nem 0 a várható érték, ha a két összimpulzus megegyezik

$$\underbrace{q}_{\text{átadott impulzus}} = k_1 - k_1' = -(k_2 - k_2')$$

$$e^{-i(\underbrace{k_1 - k_1'}_{q} \underbrace{- k_2 + k_2'}_{q})\frac{r}{2}} = e^{-iqr}$$

$$\% = \frac{1}{V^2} \cdot \delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'} \cdot V \cdot \delta_{k_1+k_2, k_1'+k_2'} \overbrace{\int d^3r\, v(r) e^{-iqr}}^{v(q) \quad (v(r) \text{ Fourier-tr.-ja})}$$

$$\langle k_1\sigma_1, k_2\sigma_2 | v | k_1'\sigma_1', k_2'\sigma_2' \rangle = \frac{1}{V} \delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'}\delta_{k_1+k_2, k_1'+k_2'} \cdot v(q)$$

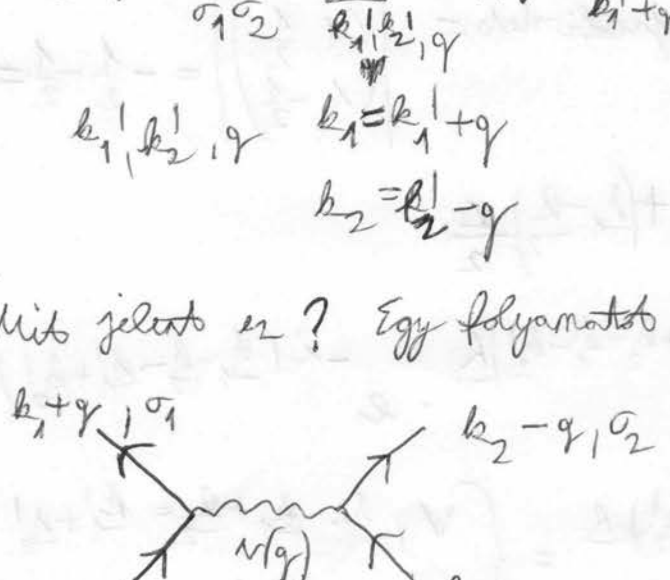
$$\frac{1}{2}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\sum_{\sigma_1\sigma_2\sigma_1'\sigma_2'} \langle k_1\sigma_1, k_2\sigma_2 | v | k_1'\sigma_1', k_2'\sigma_2' \rangle a^+_{k_1\sigma_1} a^+_{k_2\sigma_2} a_{k_2'\sigma_2'} a_{k_1'\sigma_1'} =$$

$$= \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{V}\cdot\sum_{\sigma_1\sigma_2}\sum_{k_1',k_2',q} v(q)\cdot a^+_{k_1'+q,\sigma_1} a^+_{k_2'-q,\sigma_2} a_{k_2'\sigma_2} a_{k_1'\sigma_1}$$

k_1', k_2', q $\quad k_1 = k_1' + q$

$k_2 = k_2' - q$

Mit jelent ez? Egy folyamatot rendelhetünk hozzá:



q impulzusátadás történik

(szórási hatáskeresztmetszet:

Born-közelítés: $d\sigma \sim |v(q)|^2 d\Omega$)

teljes Ham.:

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sum_{k,\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\frac{1}{2V} \sum_{\substack{k,k',q\\ \sigma,\sigma'}} v(q)\, a^+_{k+q,\sigma} a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k',\sigma'} a_{k,\sigma}}_{\delta\mathcal{H}}$$

↳ spinfüggetlen kh. Hamilton-operátora

b) 1. rendű pert. számítás

$$\phi = \phi_0 + \langle \delta\mathcal{H}\rangle_0 \qquad \phi_0 = \pm k_B T \sum_{k\sigma} \ln\left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}\right)$$

(felső: bozon
alsó: fermion) $\qquad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\langle \delta\mathcal{H}\rangle_0 = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk'q\\ \sigma\sigma'}} v(q) \cdot \left\langle a^+_{k+q,\sigma} a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma} \right\rangle_0$$

↑ ideális esetet (kh. nélküli) jelöli

$$\langle a^+_{k\sigma} a_{k'\sigma'}\rangle = \delta_{k,k'} \delta_{\sigma\sigma'} \cdot \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} \mp 1}$$

$$+ \delta_{k+q,k} \bar{n}_k \delta_{k'-q,k'} \bar{n}_{k'} \pm \delta_{k+q,k'} \delta_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{k'} \delta_{k'-q,k} \bar{n}_k$$

$$\langle \mathcal{H}\rangle_0 = \frac{1}{2V} \underbrace{\sum_{\substack{kk'\\ \sigma\sigma'}} v(0) \bar{n}_k \bar{n}_{k'}}_{\sum_{k\sigma} \bar{n}_k \sum_{k'\sigma'} \bar{n}_{k'} = N \cdot N} \pm \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kq\\ \sigma}} v(q) \bar{n}_{k+q} \bar{n}_k =$$

$$= \boxed{\frac{N^2}{V}\cdot\frac{v(0)}{2} \pm \frac{1}{V}\sum_{k',k} v(k'-k)\cdot \bar{n}_{k'}\bar{n}_{k} = \langle \delta\mathcal{H}\rangle_0}$$

(bozonok esetében csak a kond. hőm. -e fölött használható)

$\boxminus$ (variációs elv:

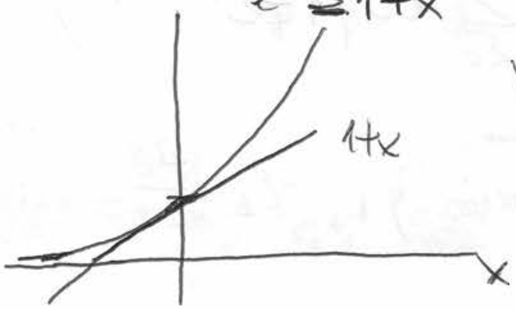
$\langle\Psi|H|\Psi\rangle \geq E_0$

ez akkor ad vmi közelítést, ha megsejtem a hfv.-t)

$\Downarrow$

2) <u>Statisztikus fizika variációs elve</u>

$e^x \geq 1+x \quad = \text{ ha } x=0$



x valósz. változó

$\phi(x)$

$$e^{-\lambda\phi(x)} = e^{-\lambda\langle\phi\rangle}e^{-\lambda(\phi(x)-\langle\phi\rangle)} \geq$$

$$\geq e^{-\lambda\langle\phi\rangle}\left(1-\lambda\cdot(\phi(x)-\langle\phi\rangle)\right)$$

$$\boxed{\langle e^{-\lambda\phi(x)}\rangle \geq e^{-\lambda\langle\phi\rangle}} \Longleftarrow \langle\ \rangle$$

$=$, ha $\phi(x)=\langle\phi\rangle$ (konst.)

a) <u>klasszikus ~~stat.~~:</u>

ρ tetszőleges eloszlásfv. az állapottéren

$\mathrm{Tr}\,\rho = \int d\Gamma\,\rho = 1$ (normált eloszlás)

$$e^{-\beta F} = Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta \mathcal{H}}\right) = \int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}} = \mathrm{Tr}\left(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{tetsz. eloszlásfv.}}}{\rho} \cdot e^{-\beta\mathcal{H} - \ln\rho}\right) \geq$$

$$\geq e^{-\beta \mathrm{Tr}(\rho\cdot\mathcal{H}) - \mathrm{Tr}(\rho\cdot\ln\rho)}$$

$$\Rightarrow \underset{\substack{\uparrow \\ \langle\mathcal{H}\rangle - TS_{inf}}}{F} \leq \underbrace{\mathrm{Tr}(\rho\mathcal{H})}_{\langle\mathcal{H}\rangle_\rho} + \underbrace{k_B T\cdot \mathrm{Tr}(\rho\ln\rho)}_{-k_B T\langle\ln\rho\rangle_\rho} = \langle\mathcal{H}\rangle_\rho - T\cdot S_{inf}(\rho) \equiv$$

$$\equiv F_\rho$$

(Shanon-féle)
<u>információs entrópia</u>: $p_i \quad S_{inf} = -k_B \sum_i p_i \ln p_i$

$\rho \quad S_{inf} = -\mathrm{Tr}(\rho\ln\rho)$

F kanonikus eloszlásban $\leq F$ tetsz. eloszlásban

<u>egyenlőség</u>: $-\beta\mathcal{H} - \ln\rho = -\ln C$

$$\rho = C\cdot e^{-\beta\mathcal{H}}$$

$\Rightarrow$ akkor van egyenlőség, ha $\rho =$ a kanonikus eloszlással

$\Rightarrow$ ha $e^{-\beta\mathcal{H}}$-ban nem tudjuk kiszámítani a szabadenergiát, akkor tetsz. ρ eloszlásban kiszámítjuk, majd minimalizáljuk egy paraméter szerint

b) ~~...~~ kvantumos eset:

$$\langle n | e^{-\lambda A} | n \rangle \geq e^{-\lambda \langle n|A|n\rangle}$$

$A|l\rangle = a_l |l\rangle$

$|n\rangle = \sum_l c_l |l\rangle$

$c_l = \langle l | n \rangle$

kifejtjük $|n\rangle$-et az A operátor sfv.-ei szerint

$$\langle n | e^{-\lambda A} | n \rangle = \sum_{l l'} c_l^* c_{l'} \underbrace{\langle l | e^{-\lambda A} | l' \rangle}_{\delta_{ll'} e^{-\lambda a_l}} =$$

$$= \underbrace{\sum_l \underbrace{|c_l|^2}_{\text{ez egy eloszlásfv., normált}} \left(e^{-\lambda a_l} e^{\lambda \langle n|A|n\rangle} \right)}\, e^{-\lambda \langle n|A|n\rangle}$$

$$\geq \sum_l |c_l|^2 \left(1 - \lambda a_l + \lambda \langle n|A|n\rangle \right) =$$

$$= 1 - \lambda \underbrace{\sum_l |c_l|^2 a_l}_{\langle n|A|n\rangle} + \lambda \langle n|A|n\rangle = 1$$

egyenlőség akkor áll fent, ha $|n\rangle$ éppen A sajátállapota

(ilyenkor $e^{\lambda \langle n|A|n\rangle} = e^{\lambda a_l}$) !

$$e^{-\beta F} = Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_n \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}} | n \rangle \geq \sum_n e^{-\beta \langle n|\mathcal{H}|n\rangle} = (*)$$

ρ tetsz. sűrűség op.

$\rho |n\rangle = \rho_n |n\rangle$

akkor van egyenlőség, ha $|n\rangle$ nem csak ρ-nak, de $\mathcal{H}$-nak is sfv.-e $\Rightarrow$ ρ és H felcserél

$$\textcircled{A} = \sum_n \rho_n \left(e^{-\beta\langle n|H|n\rangle - \ln \rho_n} \right) \geq e^{-\beta \sum_n \rho_n \langle n|H|n\rangle - \sum_n \rho_n \ln \rho_n}$$

$$\Rightarrow F \leq \sum_n \rho_n \langle n|H|n\rangle + k_B T \sum_n \rho_n \ln \rho_n = \mathrm{Tr}(\rho \mathcal{H})$$

$$- T\left(-k_B \mathrm{Tr}(\rho \ln \rho)\right) = \langle \mathcal{H} \rangle_\rho - T S_\rho$$

$$\boxed{F \leq \langle \mathcal{H} \rangle_\rho - T \cdot S_\rho}$$

egyenlőség:

- egyrészt ρ és $\mathcal{H}$ felcseréll (uaz a sfv. rsz.-ük) $\Rightarrow |n\rangle$ $\mathcal{H}$ s. áll.-a
- másrészt $-\beta\langle n|H|n\rangle - \ln \rho = -\ln C$ (2. egyenlőtlenség)

$$\Rightarrow -\beta \underbrace{\langle n|H|n\rangle}_{E_n} - \ln \rho_n = -\ln C$$

$\boxed{\rho_n = C \cdot e^{-\beta E_n}}$ kanonikus sokaságban van egyenlőség

nagykanonikus sokaság:

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

$$\boxed{\Phi \leq \langle \mathcal{H} - \mu N \rangle_\rho - T S_\rho}$$

9. óra

1) Hartree-Fock-közelítés

$$\Phi \le \mathrm{Tr}(\rho K) - TS_\rho = \Phi_\rho$$

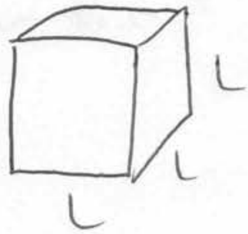
$$K = H - \mu N$$

ρ tetsz. sűrűség op.

$$S_\rho = -k_B \mathrm{Tr}(\rho \ln \rho)$$

H-F. közelítésben

ρ most a kh. nélküli, Fermi-Dirac vagy BE-statisztikából kiszámolt eloszlás, de azt megengedjük, hogy abban $\varepsilon_{k\sigma}$ más legyen! (l. pert. oszcillátoros gyak. példa)



$$\mathcal{H} = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk'q \\ \sigma\sigma'}} v(q)\, a^+_{k+q,\sigma} a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma}$$

próbaeloszlásfv.: $$\rho = \frac{1}{Z_\rho} e^{-\beta\left(\sum_{k\sigma}(\varepsilon_{k\sigma}-\mu) a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}\right)}$$

fermion-gáz

$$S_\rho = -\frac{\partial}{\partial T}\left(-k_B T \ln Z_\rho\right) = -k_B \sum_{k\sigma}\left[\bar{n}_{k\sigma} \ln \bar{n}_{k\sigma} + (1-\bar{n}_{k\sigma}) \ln (1-\bar{n}_{k\sigma})\right]$$

ahol $$\bar{n}_{k\sigma} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}+1} = \langle a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} \rangle_\rho$$

$$\langle \mathcal{H} \rangle_\rho = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \bar{n}_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk'q \\ \sigma\sigma'}} v(q) \langle a^+_{k+q,\sigma} a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma} \rangle \quad (*)$$

mn.:

$$\langle a^+_{k+q,\sigma} a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma} \rangle = \langle a^+_{k+q,\sigma} a_{k\sigma} \rangle \langle a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} \rangle - \langle a^+_{k+q,\sigma} a_{k'\sigma'} \rangle \langle a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k\sigma} \rangle =$$

$$= \delta_{q,0} \bar{n}_{k\sigma} \bar{n}_{k'\sigma'} - \delta_{k+q,k'} \bar{n}_{k'\sigma} \cdot \delta_{\sigma\sigma'} \cdot \bar{n}_{k\sigma}$$ (már láttuk → 81. old)

$$\circledast = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \bar{n}_{k\sigma} + \frac{1}{2V} v(0) \cdot \underbrace{\sum_{k\sigma} \bar{n}_{k\sigma}}_{\bar{N}} \underbrace{\sum_{k'\sigma'} \bar{n}_{k'\sigma'}}_{\bar{N}} - \frac{1}{2V} \underbrace{\sum_{k,q,\sigma} v(q) \bar{n}_{k\sigma} \bar{n}_{k+q\,\sigma}}_{\sum_{kk'\sigma} v(k'-k) \bar{n}_{k\sigma} \bar{n}_{k'\sigma}}$$

(teljes rész. szám)

(megj.: $n_{k\sigma}$ helyett $\varepsilon_{k\sigma}$-t is használhattuk ~~volna~~ volna, de így most kényelmesebb)

$\boxed{\text{variálás}}$:

mn.: $\frac{\partial}{\partial \bar{n}_{k\sigma}} \sum_{k''\sigma''} \bar{n}_{k''\sigma''} = 1$ ← kiválasztja a k,σ indexű ~~tagot~~

$$\frac{\partial \Phi_\rho}{\partial \bar{n}_{k\sigma}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{V} v(0) \sum_{k'\sigma'} \bar{n}_{k'\sigma'} - \frac{1}{V} \sum_{k'} v(k-k') \bar{n}_{k'\sigma} +$$

$\langle N \rangle_\rho = \bar{N} = \sum_{k\sigma} \bar{n}_{k\sigma}$

$\Phi = H - \mu N$

$$+ k_B T \underbrace{\left(\ln \bar{n}_{k\sigma} + \cancel{1} - \ln(1 - \bar{n}_{k\sigma}) - \cancel{1} \right)} - \mu \qquad \frac{\partial \Phi}{\partial \bar{n}_{k\sigma}} = \frac{\partial H}{\partial \bar{n}_{k\sigma}} - \mu$$

S_ρ-ből

$$\ln \frac{\bar{n}_{k\sigma}}{(1-\bar{n}_{k\sigma})} = -\ln\left(\frac{1-\bar{n}_{k\sigma}}{\bar{n}_{k\sigma}}\right) = -\ln\left(\frac{1}{\bar{n}_{k\sigma}} - 1\right) = -\ln\left(e^{\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)} \cancel{+1} \cancel{-1}\right)$$

$$= -\beta (\varepsilon_{k\sigma} - \mu)$$

$$\Phi \leq \mathrm{Tr}(\rho \underset{\substack{\uparrow \\ H-\mu N}}{K}) - T S_\rho \Rightarrow \frac{\partial \Phi_\rho}{\partial n_{k\sigma}} = 0$$ szélsőértékeket keressük

$-\delta f$

$$\cancel{\langle N \rangle_\rho = \sum_{k\sigma} \overline{n}_{k\sigma}}$$

$$\boxed{\varepsilon_{k\sigma} - \cancel{\mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \cancel{\mu} + \frac{v(0)}{V} \underbrace{\sum_{k'\sigma'} \overline{n}_{k'\sigma'}}_{\overline{N}} - \frac{1}{V} \sum_{k'} v(k-k')\, n'_{k\sigma'}}$$

↓

Hartree–Fock-energiák

$$\left.\begin{aligned} \varepsilon_{k\sigma} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \underbrace{v(0)\frac{\overline{N}}{V}}_{(H)} - \frac{1}{V} \sum_{k'} v(k-k')\, \overline{n}_{k'\sigma}, \\ \overline{n}_{k\sigma} &= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1} \end{aligned}\right\}$$ önkonzisztens egyenletrendszer

(H) Hartree-tag: $\overline{n}(r) = \frac{\overline{N}}{V} = \int d^3r\, v(\underline{r}) \frac{\overline{N}}{V} = \int d^3r'\, v(\underline{r}-\underline{r}')\, \overline{n}(r')$
(direkt) sűrűség

szemléletes jelentés: a rész. a többi rész. által létrehozott átlagos térben mozog

(F) Fock-tag kvantummech. effektus
(kicserélődési)

$$\langle H \rangle_\rho = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \overline{n}_{k\sigma} + \frac{1}{2V} v(0) \sum_{k\sigma} \overline{n}_{k\sigma} \sum_{k'\sigma'} \overline{n}_{k'\sigma'} - \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk' \\ \sigma}} v(k-k')\, \overline{n}_{k\sigma} \overline{n}_{k'\sigma} =$$

$$= \sum_{k\sigma} \overline{n}_{k\sigma} \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{v(0)}{2V} \sum_{k'\sigma'} \overline{n}_{k'\sigma'} - \underbrace{\frac{1}{2V} \sum_{k'} v(k-k') \cdot \overline{n}_{k'\sigma}}_{-\beta\beta-} \right\}$$

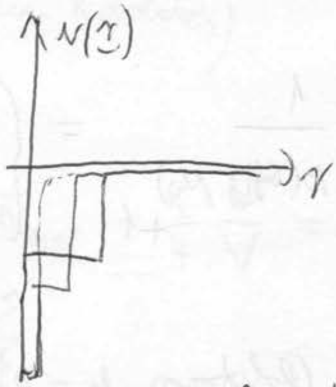
ez majdnem $\sum_{k\sigma} \bar{n}_{k\sigma} \cdot \varepsilon_{k\sigma}$, de a potenciális energiának csak a fele szerepel

↳ ha felösszegezzük, akkor ~~vissza~~ visszakapjuk ~~a teljes~~ kh.-i energiát

Megj.:
a variációszámításban a perturb. szám. V rendje jelen van

Pl.:
2) rövid hatótávolságú, kemény mag

$$v(\underline{r}) = u \cdot \delta(\underline{r}) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \cdot a \cdot \delta(\underline{r})$$



a : szórási hossz

(szórási hatáskeresztmetszet Born-közelítésben : $\sigma = 4\pi a^2$)

$\sim$ (Fourier-tr.)^2

$\boxed{v(q) = u}$ (Fourier-trafó)

ekkor:

$\frac{1}{2}$ spin

$$\varepsilon_{k\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + u\frac{\bar{N}}{V} - \frac{u}{V}\bar{N}_\sigma = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{u}{V}\left(\bar{N} - \bar{N}_\sigma\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{u}{V}\bar{N}_{-\sigma}$$

ahol $\bar{N}_\sigma = \sum_k \bar{n}_{k\sigma}$ $\quad \bar{N} = \bar{N}_\sigma + \bar{N}_{-\sigma}$ (ha 2 fajta spin van)

pl.: $s = \frac{1}{2}$

a kölcsönhatásban csak az ellentétes spinekkel való kh. szerepel!

↓

ennek oka a Fermi-lyuk: azonos spinű részecskék nem

lehetnek azonos térbeli állapotban (és belátható, hogy a valószínűség

(egy helyen sem!)

távolság kis értékeinél a közös megtalálás vsz.-e kicsi)

mivel most a kh. 1 pontban történik, ezért az azonos spinnel

nincs kh.!

$$\langle H \rangle_{\rho} = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \overline{n}_{k\sigma} + \frac{u}{2V} \overline{N}^2 - \frac{u}{2V} \sum_{\sigma} \overline{N}_{\sigma}^2$$

- $T=0$ $(T\to 0)$: $\overline{n}_{k\sigma} = \dfrac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}+1} = \begin{cases} 1 & \text{ha } \varepsilon_{k\sigma} < \mu = \varepsilon_F \\ 0 & \text{ha } \varepsilon_{k\sigma} > \mu = \varepsilon_F \end{cases}$

ha $\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon(k)$ (folytonos közelítés)

$$\varepsilon(k_F) = \mu = \varepsilon_F \Rightarrow k_F$$

$\Rightarrow$ $T=0$ $v(r) = u\delta(r)$, $1/2$ spin:

$$\varepsilon_{k\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{u \cdot N}{2V}$$

Feltevés:

$$N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = \frac{N}{2}$$

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \frac{u}{2} \cdot \frac{N}{V} \qquad u = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a$$

$$N = \sum_{k\sigma} \overline{n}_{k\sigma} = 2 \cdot \sum_{|k|<k_F} 1 = 2 \cdot \int_{k<k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \cdot V = \frac{2V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} k_F^3 = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3$$

$$\frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \longrightarrow N(k_F)$$

$$\Rightarrow \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \frac{u}{2}\cdot\frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \frac{1}{2}\,\frac{4\pi\hbar^2}{m}\,a\,\frac{k_F^3}{3\pi^2} =$$

$$= \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\left(1 + \frac{4}{3\pi}\,a\,k_F\right)$$

• kis paraméter: $a\cdot k_F$ ⇒ akkor jó a közelítés, ha

• k_F kicsi ⇒ $\frac{N}{V} = \rho$ kicsi

• kicsi a szórás erőssége (a)

~~ilyen~~ (ilyenkor $\varepsilon_F \simeq \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$)

$$\bullet\ \underline{\underline{\varepsilon_k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \underbrace{\frac{u}{2}\frac{N}{V}}_{\varepsilon_F - \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}} = \varepsilon_F + \frac{\hbar^2(k^2 - k_F^2)}{2m} \simeq \varepsilon_F + \frac{\hbar^2 k_F}{m}(k - k_F) = \varepsilon_F + \frac{p_F}{m}(p - p_F) =$$

msz.: $k^2 - k_F^2 = (k - k_F)(k + k_F) \simeq 2k_F(k - k_F)$

$$= \underline{\underline{\varepsilon_F + v_F(p - p_F)}} \quad \text{(lin. közelítés)}$$

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\,\bar{n}_{k\sigma} + \frac{u}{4}\frac{N^2}{V} = 2\cdot\frac{V}{(2\pi)^3}\int_{k<k_F} d^3k\,\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{u}{4}\frac{N^2}{V} =$$

$$= 2\,\frac{V}{(2\pi)^3}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\,4\pi\,\overbrace{\int_0^{k_F} dk\,k^4}^{\frac{k_F^5}{5}} = \frac{3}{5}\,\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \frac{u}{4}\frac{N^2}{V}$$

($a\,k_F \ll 1$)

$$\underline{\underline{\frac{E}{N}}} = \frac{3}{5}\,\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \underbrace{\frac{u}{4}}_{u = \frac{4\pi\hbar^2}{m}a}\cdot\underbrace{\frac{N}{V}}_{\frac{k_F^3}{3\pi^2}} = \underline{\underline{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(\frac{3}{5} + \frac{2}{3\pi}\,k_F a\right)}}$$

perturbációszám.-ból is ezt kaptuk volna

3) kölcsönható elektrongáz

semlegesség : pozitív töltésű háttér

egyszerűsítés: homogén pozitív töltésű háttér

Coulomb - kölcsönhatás : $\frac{e^2}{r} \Rightarrow \frac{4\pi e^2}{q^2} \Rightarrow V(q=0) \to \infty$

"megrövidítjük" : $\frac{e^2 \cdot e^{-\mu r}}{r} = \frac{e^2 \cdot 4\pi}{\mu^2+q^2}$ ($\mu \to 0$ -ra ugyanazt adja)

Yukawa - potenciál

nem töltés! nem kémiai potenciál!

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{el-b} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{background (háttér)}}}{\mathcal{H}_{b}}$$

$$\mathcal{H}_{el} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ (i \neq j)}} \frac{e^2}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|} \cdot e^{-\mu |\underline{r}_i - \underline{r}_j|}$$

$$\mathcal{H}_{el,b} = -\int \sum_i^N \frac{e^2}{|r-r_i|} \cdot e^{-\mu |r-r_i|} \, n(\underline{r}) \, d^3\underline{r}$$

a tér $\forall$ pontjával kölcsönható (ellentett háttér)

$$\mathcal{H}_b = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \, \frac{e^{-\mu |r-r'|}}{|r-r'|} \cdot e^2 n(r) \cdot n(r')$$

a háttér sűrűsége

$$\underbrace{n(r) = \frac{N}{V}}_{\text{konstans}} \Rightarrow \mathcal{H}_b = \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \, \frac{e^{-\mu |\underline{r}-\underline{r}'|}}{|\underline{r}-\underline{r}'|} \, \frac{N^2}{V^2} =$$

$$= \frac{e^2}{2} \underbrace{\int d^3R}_{V} \underbrace{\int d^3\tilde{r}\, \frac{e^{-\mu|\tilde{r}|}}{|\tilde{r}|}}_{4\pi \int_0^\infty dr\, r^{\cancel{2}} \frac{e^{-\mu r}}{\cancel{r}} = \frac{4\pi}{\mu^2}} \frac{N^2}{V^2}$$

$\underline{R} = \frac{\underline{r}+\underline{r}'}{2}$

$\underline{r} - \underline{r}' = \underline{\tilde{r}}$

$$\int_0^\infty e^{-\mu r} dr = \frac{1}{\mu}$$

$$\boxed{\mathcal{H}_b = \frac{e^2}{2} \cdot \frac{N^2}{V} \cdot \frac{4\pi}{\mu^2}}$$

$$\boxed{\mathcal{H}_{el,b}} = \frac{N}{V} e^2 \cdot N \int d^3 r \frac{e^{-\mu r}}{r} = -\frac{N^2}{V} e^2 4\pi \overbrace{\int_0^\infty dr\, r^2 \cdot \frac{e^{-\mu r}}{r}}^{1/\mu^2} =$$

$$\boxed{= -\frac{N^2}{V} \cdot e^2 \cdot \frac{4\pi}{\mu^2}}$$

$$\mathcal{H}_b + \mathcal{H}_{el-b} = -\frac{N^2}{2V} \frac{4\pi e^2}{\mu^2}$$ → ha $\mu \to 0$, ez a tag divergál (ch-prob.)

↓

az lenne a jó, ha a $\mathcal{H}_{el}$-ban egy ezt kompenzáló tagot kapnánk

10. óra

(folyt.)

$$H = H_{el} + \underbrace{H_{el-h} + H_{h}}_{-\frac{e^2}{2}\frac{N^2}{V}\cdot\frac{4\pi}{\mu^2}} \qquad \left(\frac{1}{r} \to \frac{e^{-\mu r}}{r}\right)$$

$$H_{el} = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk'q\\ \sigma\sigma'}} \frac{4\pi e^2}{\mu^2+q^2} \cdot a^+_{k+q,\sigma} a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma}$$

pot. energia $q=0$ tag:

$$\frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk'\\ \sigma\sigma'}} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} a^+_{k\sigma} a^+_{k'\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma} = \frac{1}{2V}\frac{4\pi e^2}{\mu^2} \sum_{\substack{kk'\\ \sigma\sigma'}} \Big(a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} a^+_{k'\sigma'} a_{k'\sigma'} - \cancel{a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}}$$

$\cdot(-1)$

$$a^+_{k'\sigma'} a_{k\sigma} = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'} - a_{k\sigma} a^+_{k'\sigma'}$$

$$- a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}\Big) = \frac{1}{2V}\frac{4\pi e^2}{\mu^2}\left(N^2 - N\right)$$

$$\Rightarrow H = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk'q\\ q\neq 0\\ \sigma\sigma'}} \frac{4\pi e^2}{\mu^2+q^2} a^+_{k+q,\sigma} a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k,\sigma}$$

$$+ \underbrace{\frac{1}{2V}\frac{4\pi e^2}{\mu^2}\left(N^2-N\right) - \frac{e^2}{2V}\frac{N^2 4\pi}{\mu^2}}_{-\frac{1}{2V}\frac{4\pi e^2}{\mu^2} N}$$

$-\frac{1}{2V}\frac{4\pi e^2}{\mu^2} N \longrightarrow$ termodinamikai határesetben ez a tag konstans $\to$ az egy részecskére jutó energiát nem befolyásolja

$\longrightarrow$ ezt most kihagyjuk:

majd! • $N \to \infty$ átmenet

• $\mu \to 0$ átmenet (most már lehetséges, egyébként az $\frac{1}{\mu^2}$ tag miatt divergálna)

$T=0$ pert. számítás: perturbálatlan alapállapot: $\bar{n}_{k\sigma}=\begin{cases}1 & |k|<k_F\\ 0 & \text{egyébként}\end{cases}$

- $$E_{kin}=\sum_{k\sigma}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\bar{n}_{k\sigma}=2\cdot\frac{V}{(2\pi)^3}\int_{k<k_F}d^3k\,\frac{\hbar^2k^2}{2m}=2\cdot\frac{V}{(2\pi)^3}4\pi\int_0^{k_F}dk\,\frac{\hbar^2}{2m}k^4=$$

$$=2\cdot\frac{V}{(2\pi)^3}\cdot\cancel{4\pi}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\frac{k_F^5}{5}$$

$$N=\sum_{k\sigma}n_{k\sigma}=2\cdot\frac{V}{(2\pi)^3}\int_{k<k_F}d^3k=2\cdot\frac{V}{(2\pi)^3}\cdot\frac{4\pi k_F^3}{3}$$

$$\boxed{\frac{E_{kin}}{N}=\frac{3}{5}\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}}\qquad\boxed{\frac{N}{V}=\frac{k_F^3}{3\pi^2}}$$

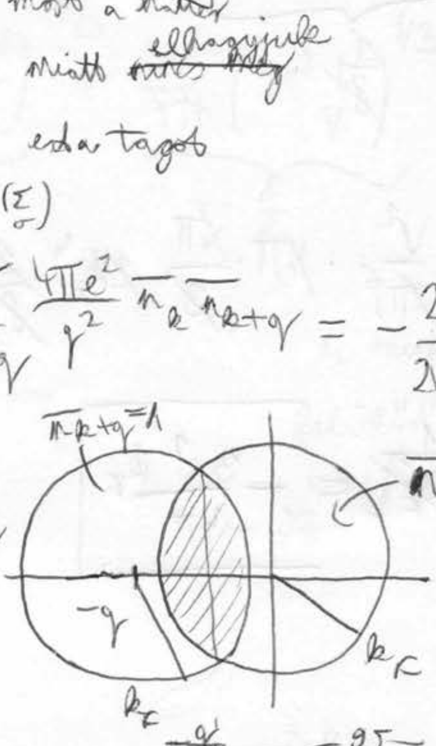
- ált. képlet: $\cancel{\frac{v(0)}{2}\frac{N^2}{V}}-\frac{1}{2V}\sum_{kq\sigma}v(q)\,\bar{n}_{k\sigma}\,\bar{n}_{k+q\,\sigma}$ (pot. energia 1. rendű korrekciója)

most a háttér miatt ~~nincs meg~~ elhagyjuk ezt a tagot

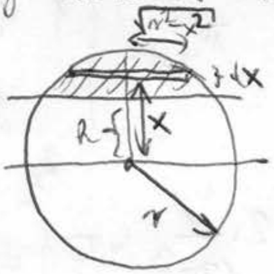
$$E_{pot}=-\frac{\overset{\text{spin miatt }(\sum_\sigma)}{2}}{2V}\sum_{kq}\frac{4\pi e^2}{q^2}\bar{n}_k\bar{n}_{k+q}=-\frac{2}{2V}\int d^3q\int d^3k\,\frac{4\pi e^2}{q^2}\bar{n}_k\bar{n}_{k+q}\cdot\frac{V^2}{(2\pi)^6}=(*)$$

mn.:

$\int d^3k\,\bar{n}_k\,\bar{n}_{k+q}$



gömbszelet térfogata:



$$\int_h^r (r^2-x^2)\pi\, dx = \frac{2\pi}{3}\left(r^3-\frac{3}{2}hr^2+\frac{h^3}{2}\right)$$

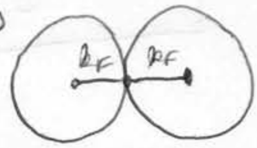
most $h=\frac{q}{2}$, $r=k_F$

$$\Rightarrow \int d^3k\ \overline{n_k}\,\overline{n_{k+q}} = 2\cdot\frac{2\pi}{3}k_F^3\left(1-\frac{3}{2}\frac{q}{2k_F}+\frac{1}{2}\left(\frac{q}{2k_F}\right)^3\right)$$

$$\int d^3q\cdot\frac{1}{q^2}\cdot\int d^3k\ \overline{n_k}\,\overline{n_{k+q}} = \int_0^{2k_F} dq\cdot 4\pi \cancel{q^2}\cdot\frac{1}{\cancel{q^2}}\ \frac{4\pi}{3}k_F^3\left(1-\frac{3}{2}\frac{q}{2k_F}+\frac{1}{2}\left(\frac{q}{2k_F}\right)^3\right)=$$

ha $q=2k_F$ → ekkor már nem érnek össze a körök

$\Rightarrow$



$\frac{q}{2k_F}=x$

$$= 4\pi\cdot\frac{\cancel{4}\pi}{\cancel{3}}\cdot \cancel{2}k_F^4\underbrace{\int_0^1 dx\left(1-\frac{3}{2}x+\frac{1}{2}x^3\right)}_{\frac{\cancel{3}}{\cancel{8}}} = 4\pi^2 k_F^4$$

$$\circledast = E_{pot} = -\frac{\cancel{2}}{\cancel{2}V}\cdot\cancel{4\pi}e^2\cdot\frac{V^2}{(\cancel{2}\pi)^6}\cdot\cancel{4\pi}\cdot\frac{\cancel{4}\pi}{\cancel{3}}\cancel{2}k_F^4\cdot\frac{\cancel{3}}{\cancel{8}_4} = -\frac{e^2k_F^4}{4\pi^3}V$$

$$\boxed{\frac{E_{pot}}{N} = -\frac{e^2k_F^{\cancel{4}\,1}}{4\pi^3}\cancel{V}\cdot\frac{3\pi^2}{\cancel{V}}\frac{1}{\cancel{k_F^3}} = -\frac{3e^2k_F}{4\pi}}$$

$$\Rightarrow \frac{E}{N} = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - \frac{3e^2 k_F}{4\pi}$$

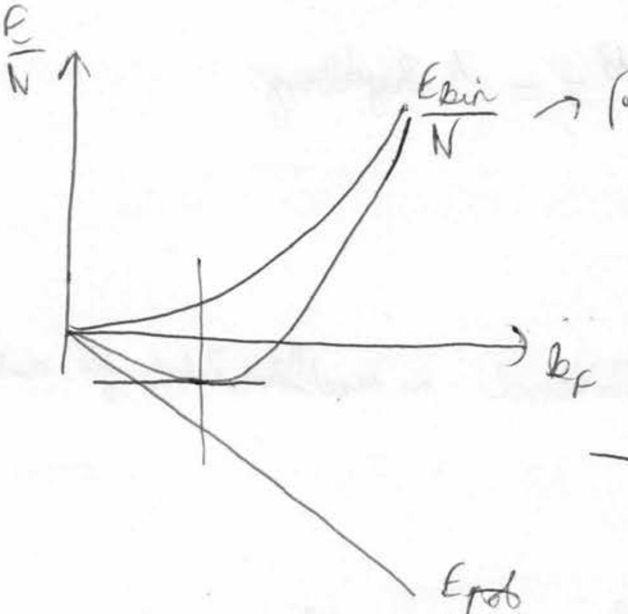
1 részecskére jutó energia a sűrűség ($\sim k_F$) fv.-ben a pert. számítás 1. rendjében

↓

a sűrűséget mi állítjuk be

⇒ milyen magsűrűségnél lesz minimum?

(hasonlóan a Born–Oppenheimer-köz. hez: e⁻ rsz. energiája rögz. magok mellett, majd magok energiájának minimalizálása (egyensúlyi konfig.) kiátlagolt e⁻ energia mellett)



→ (akkor jó a pert. szám., ha a 0. rendű tag ($\frac{E_{kin}}{N}$) nagy, ilyenkor jó az 1. rendű közelítés)

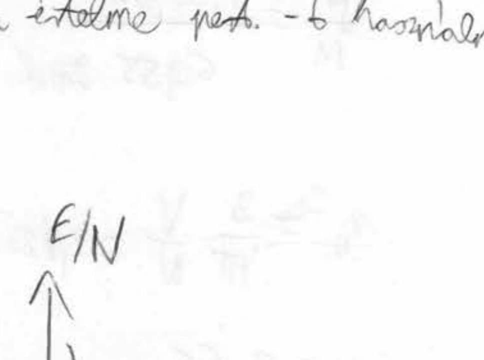
→ de az is látszik, hogy az alapállapoti energia mindenhol kisebb, mint $\frac{E_{kin}}{N}$ ⇒ van értelme pert.-t használni $\forall k_F$-re

↓

van minimum!

$$\frac{E}{N} = \underbrace{\frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{2/3}}_{\sim \frac{1}{R^2}} - \underbrace{\frac{3e^2}{4\pi}\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{1/3}}_{\sim \frac{1}{R}} \longrightarrow$$

$$\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} = R$$



ez mindig felülről becsli az egzakt alapállapotot

$$\frac{V}{N} = \frac{4\pi r_0^3}{3}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$ Bohr-sugár

$$\frac{r_0}{a_0} = r_s \qquad \frac{N}{V} = \frac{3}{4\pi a_0^3 r_s^2}$$

$$\frac{E}{N} = \underbrace{\frac{e^2}{2a_0}}_{\downarrow}\left(\underbrace{\frac{3}{5}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}}_{2{,}21}\frac{1}{r_s^2} - \underbrace{\frac{3}{2\pi}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}}_{0{,}92}\frac{1}{r_s}\right)$$

$$\frac{e^2}{2a_0} = 13{,}6\ \mathrm{eV} = 2{,}18\cdot 10^{-18}\ \mathrm{J} = 1\ \text{Rydberg}$$

$\Rightarrow$ minimum: $\underline{\underline{r_s \approx 4{,}8}}$

Egyezik-e a valósággal? Az elkent háttérrel a vezetőket lehet jól modellezni:

- $\underline{Cu}$: $1e^-$/atom

$$\frac{\rho}{M} = \frac{8{,}96\ g/cm^3}{63{,}55\ g/mol} = 0{,}141\ \frac{mol}{cm^3} = 8{,}46\cdot 10^{28}/m^3 = \frac{N}{V}$$

$$r_0^3 = \frac{3}{4\pi}\frac{V}{N} = 2{,}82\cdot 10^{-30}\ m^3 \qquad r_0 = 1{,}41\cdot 10^{-10}\ m$$

$$r_s = 2{,}66$$

- fémekre vez. elektronok: $1{,}8 < r_s < 6$

$\boxed{\text{baj}}$ ha továbbmegyünk a perturbációs sorban, az együtthatók divergálnak

$\downarrow$

Mi a hiba? Olyan dolgot akartunk sorbafejteni, amit azon a helyen nem lehet (pl. $\sqrt{x}$ a 0 körül)

⇓

a teljes sort fel kell összegezni!

$$\frac{E}{N} = \frac{e^2}{2a_0}\left(\frac{2{,}2099}{r_s^2} - \frac{0{,}9163}{r_s} \underbrace{-0{,}094 + 0{,}0622 \cdot \ln r_s + 0{,}018 r_s \ln r_s + A \cdot r_s + \mathcal{O}(r_s^2)}_{\text{korrelációs energia}}\right)$$

korrelációs energia (ez már túllép a Hartree-Fock közelítésen)

(a korrelációs energia még pozitívba is átmegy → baj, mert távolodunk az egzakt alapállapottól)

ha a potenciális energia dominál a kin. energia felett (pl. nagy a sűrűség)

⇒ újfajta megközelítés kell

Wigner-rács: bcc $\underbrace{E = -\frac{A}{r_s}}_{\text{pot. energia járuléka}}$ $A = 1{,}79186$

ilyenbe rendeződnek a vez. elektronok

(kin. energia ⇒ nullponti rezgések energiája $\sim \frac{1}{r_s^{3/2}}$)

Tanulság:
- az elkent háttér miatt az $e^- - e^-$ kh. leárnyékolódik
- első rendű közelítés e^- gáz képben jó
- magasabb rendig már nem lehet elmenni
- nagyobb sűrűségnél Wigner-rács modell

Klasszikus plazma (Debye – Hückel, 1923)

1) láttuk, hogy a kin. és pot. energia külön kezelhető
↳ most csak a potenciálissal foglalkozunk

2) töltéshordozó: Q_+ N_+ db helyük: $\underline{r}_1^+, \underline{r}_2^+, \ldots \underline{r}_{N_+}^+$

Q_- N_- db $\underline{r}_1^-, \underline{r}_2^-, \ldots \underline{r}_{N_-}^-$

• független részecske eloszlás:

$$f(\underline{r}_1^+, \ldots, \underline{r}_1^- \ldots) = \prod_{i=1}^{N_+} f_+(\underline{r}_i^+) \cdot \prod_{j=1}^{N_-} f_-(\underline{r}_j^-)$$

• sűrűség: $n_+(\underline{r}) = \sum_{i=1}^{N_+} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i^+)$ (tetsz. térfogatban)

$$\overline{n}_+(\underline{r}) = \sum_{i=1}^{N_+} \int d^3 r_i \, \delta(\underline{r} - \underline{r}_i^+) f_+(\underline{r}_i^+) = N_+ f_+(\underline{r})$$

a teljes f eloszlásfv.-t kéne bevenni, de a többi rész. 1-et ad

$$\frac{\overline{n}_+(r)}{N_+} = f_+(\underline{r})$$ ⇒ a sűrűséggel is megadhatom az eloszlásfv.-t

• töltéssűrűség: $\rho(\underline{r}) = Q_+ \overline{n}_+(\underline{r}) + Q_- \overline{n}_-(\underline{r})$

3) Var. számítás:
$$F_f = \frac{1}{2} \int d^3 r \int d^3 r' \rho(\underline{r}) u(\underline{r} - \underline{r}') \rho(\underline{r}') + \overbrace{\int d^3 r \, \rho(\underline{r}) \phi_{ext}(\underline{r})}^{\text{külső pot.}} +$$

$$\underbrace{+k_BTN_+\int d^3r\,\frac{\overline{n}_+(r)}{N_+}\ln\frac{\overline{n}_+(r)}{N_+}+k_BTN_-\int d^3r\,\frac{\overline{n}_-(r)}{N_-}\ln\frac{\overline{n}_-(r)}{N_-}}_{-TS_{inf}}$$

$\rightarrow$ $\overline{n}_+(\underline{r})$ és $\overline{n}_-(\underline{r})$ szerint keressük a minimumot

de ezekre van még egy mellékfeltétel:

$$N_\pm=\int d^3r\,\overline{n}_\pm(\underline{r})$$

Lagr. multiplikátorok

$$\Rightarrow F_f-\mu_+\int d^3r\,\overline{n}_+(r)-\mu_-\int d^3r\,\overline{n}_-(\underline{r})=\text{min.}$$

Deriválás helyett most:

$$\overline{n}_\pm(\underline{r})\Rightarrow\overline{n}_\pm(r)+\delta\overline{n}_\pm(\underline{r})$$

szélsőértékben a $\delta\overline{n}_\pm$-os tag eltűnik

$\downarrow$

a δn-es járulékok:

$$\int d^3r\int d^3r'\,Q_+\,\delta\overline{n}_+u(\underline{r}-\underline{r}')\,\rho(\underline{r}')+\int d^3r\,Q_+\,\delta\overline{n}_+(\underline{r})\,\phi_{ext}(\underline{r})+$$

$\uparrow$

mert kapom $Q_-\delta n_-$-ra, ezért eltűnik az $\frac{1}{2}$ szorzó

$$+k_BTN_+\int d^3r\,\overbrace{\frac{\delta\overline{n}_+(r)}{N_+}\left(\ln\frac{\overline{n}_+(r)}{N_+}+1\right)}^{\frac{\partial}{\partial\overline{n}_+}\left[\frac{\overline{n}_+}{N_+}\cdot\ln\left(\frac{\overline{n}_+}{N_+}\right)\right]\cdot\delta\overline{n}_+}-\mu_+\int d^3r\,\delta\overline{n}_+(\underline{r})=0$$

az $\frac{\overline{n}_+}{N_+}\cdot\ln\left(\frac{\overline{n}_+}{N_+}\right)$ deriváltja

$$\Rightarrow\int d^3r\,\delta\overline{n}_+(r)\cdot\overbrace{\left[\int d^3r'\,Q_+u(r-r')\,\rho(r')+Q_+\phi_{ext}(r)+k_BT\ln\frac{\overline{n}_+(r)}{N_+}+k_BT-\mu_+\right]}^{=0\text{, mert }\delta\overline{n}_+\text{ kicsi, de tetsz.!}}=0$$

el. stat. pot.:

$$\phi(r) \equiv \int d^3r' \; u(r-r')\,\rho(r') + \phi_{ext} \qquad , \rho = Q_+ \bar{n}_+ + Q_- \bar{n}_-$$

$$Q_+\phi(\underline{r}) + k_B T \ln \frac{\bar{n}_+(r)}{N_+} = \mu_+ - k_B T := k_B T \cdot \ln C$$

$$f_+(\underline{r}) = \frac{\bar{n}_+(r)}{N_+} = C \cdot e^{-\frac{Q_+ \phi(r)}{k_B T}}$$

$\downarrow$

az eloszlásfv.-t a többi részecske hat. meg!

$$C^{-1} = \int d^3r \; e^{-\frac{Q_\pm \phi(r)}{k_B T}} = Z_\pm$$

$$\Rightarrow \boxed{f_\pm(\underline{r}) = \frac{1}{Z_\pm}\, e^{-\frac{Q_\pm \phi(r)}{k_B T}}}$$

$\Rightarrow$ önkonzisztens (self-konzisztens) egyenletrsz.:

potenciál $\Rightarrow$ töltéseloszlás $\Rightarrow$ potenciál ...

$(\phi(\underline{r}))$ $\qquad \cancel{\rho(r), f(r)}$

$$f(\underline{r}) \Rightarrow \bar{n}_\pm \Rightarrow \rho(\underline{r})$$

11. óra

0) Ism:

$$\frac{\overline{n}_{\pm}(\underline{r})}{N_{\pm}} = \frac{1}{Z_{\pm}} e^{-\beta Q_{\pm}\phi(\underline{r})}$$

$$Z_{\pm} = \int d^3 r \cdot e^{-\beta Q_{\pm}\phi(\underline{r})}$$

$$\rho(\underline{r}) = Q_+ \overline{n}_+(\underline{r}) + Q_- \overline{n}_-(\underline{r})$$

$$\phi(\underline{r}) = \phi_{ext} + \int d^3 r' \cdot u(\underline{r}-\underline{r}') \cdot \rho(\underline{r}')$$

$$u(\underline{r}) = \frac{1}{|\underline{r}|}$$

önkonzisztens egyenletrendszer $\overline{n} \to \rho \to \phi$

1) Megoldás:

- semlegesség: $N_+ Q_+ + N_- Q_- = 0$

- triviális megoldás: $\rho(\underline{r}) = 0 \Rightarrow \phi(\underline{r}) = 0 \Rightarrow \frac{\overline{n}_{\pm}(\underline{r})}{N_{\pm}} = \frac{1}{V}$

  $\phi_{ext} = 0$ $\quad \overline{n}_{\pm}(\underline{r}) = \frac{N_{\pm}}{V} \Leftarrow$

- gyenge külső potenciál (lin. válaszelmélet: gyenge külső meghajtásra hogyan reagál a rsz.)

  ↓

  felt.: ha ϕ_{ext} gyenge, akkor ρ is gyenge potenciált hoz létre

  $\Rightarrow \underbrace{\phi(\underline{r})}_{\text{egész pot.}}$ gyenge $\to$ sorfejtés

$$\bar{n}_+(\underline{r}) = \frac{1-\beta Q_+ \phi(r)}{\int d^3r \left(1-\beta Q_+ \phi(r)\right)} \cdot N_+ = \frac{N_+}{V} \cdot \frac{1-\beta Q_+ \phi(r)}{1-\frac{\beta Q_+}{V} \cdot \int d^3r\, \phi(\underline{r})} = \uparrow$$

$$\frac{1}{1-x} \simeq 1+x$$

$$= \frac{N_+}{V}\left(1-\beta Q_+ \phi(\underline{r}) + \frac{\beta Q_+}{V}\int d^3r\, \phi(\underline{r})\right)$$

$$\boxed{\delta \bar{n}_+(\underline{r})} = \bar{n}_+(\underline{r}) - \frac{N_+}{V} = \boxed{\left(-\beta Q_+ \phi(\underline{r}) + \frac{\beta Q_+}{V}\int \phi(\underline{r})\, d^3r\right)\frac{N_+}{V}}$$

triviális megoldástól való eltérés

$$\delta\rho(\underline{r}) = Q_+ \delta\bar{n}_+(\underline{r}) + Q_- \delta\bar{n}_-(\underline{r}) = -\beta\underbrace{\left(\frac{N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2}{V}\right)}_{:= \frac{K^2}{4\pi}}\phi(\underline{r}) +$$

$$+ \beta\left(\frac{N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2}{V}\right)\cdot\frac{1}{V}\int \phi(\underline{r})\, d^3r$$

$\leftarrow$ pozitív, ezért lehet ^{2}-ként definiálni

megjegyzés:

$$\left[\frac{Q^2}{V}\right] = \left[\frac{q^2}{L^3}\right] = \frac{J}{m^2} \qquad \left(K^2\right) = \left[\frac{1}{L^2}\right] = \frac{1}{m^2}$$

$$(\beta) = \frac{1}{J}$$

$$\boxed{\delta\rho(\underline{r}) = -\frac{K^2}{4\pi}\phi(\underline{r}) + \frac{K^2}{4\pi}\frac{1}{V}\int \phi(\underline{r})\, d^3r}$$

$$\phi(\underline{r}) = \phi_{ext}(\underline{r}) + \int d^3r'\, u(\underline{r}-\underline{r}')\,\delta\rho(\underline{r})$$

Fourier-tr.:

$$\phi_q = \phi_{ext, q} + \frac{4\pi}{q^2}\delta\rho_q$$

miz: $\leftarrow$

baj: $u(\underline{r}-\underline{r}') = \frac{1}{\underline{r}-\underline{r}'}$ Fourier-tr.-ja $\rightarrow \frac{1}{r}\cdot 4\pi r^2 \sim r \rightarrow \infty$

ezért inkább olyan potenciált veszünk, aminek véges a tr.-ja: Yukawa-pot.

⇓

$$u(\underline{r}) := \frac{e^{-\varepsilon r}}{r} \xrightarrow[\text{F.T.}]{} \frac{4\pi}{\varepsilon^2+q^2} \quad \to \text{ ezután } \varepsilon \to 0$$

$$\Downarrow$$

$$u_q = \frac{4\pi}{q^2}$$

mivel $\delta \rho_q = -\frac{K^2}{4\pi} \phi_q \quad (q \neq 0)$

⇓

$$\phi_q = \phi_{ext,q} + \frac{\cancel{4\pi}}{q^2} \cdot \frac{K^2}{\cancel{4\pi}} \phi_q$$

$$\phi_q \left(1 + \frac{K^2}{q^2}\right) = \phi_{ext,q}$$

$$\boxed{\phi_q = \frac{q^2}{K^2+q^2} \cdot \phi_{ext,q}}$$

$$\boxed{\delta \rho_q = -\frac{K^2}{4\pi} \cdot \frac{q^2}{K^2+q^2} \phi_{ext,q}}$$

→ így már lineárisan függnek ϕ_{ext}-től

2) Példa: töltésárnyékolás

a) külső ponttöltés (origóban) $\phi_{ext} = \frac{Q_0}{r}$

$$\phi_{ext} = \frac{4\pi}{q^2} Q_0$$

$$\delta \rho_q = -\frac{K^2}{4\pi} \frac{q^2}{K^2+q^2} \cdot \overbrace{\frac{4\pi}{q^2}}^{\phi_{ext,q}} \cdot Q_0 = -\underbrace{\frac{K^2}{K^2+q^2}}_{} Q_0$$

ez a Yukawa-pot. F.-tr.-ja $\left(\cdot\frac{1}{4\pi}\right)$

$$\delta \rho(\underline{r}) = -\frac{K^2}{4\pi} \cdot \frac{e^{-Kr}}{r} Q_0$$

↳ kialakul az origóban egy ellentétes töltésű töltésfelhő, aminek a tere exponenciálisan lecseng

$$\underline{\underline{\int \delta_\rho(r)\, d^3r}} = -\frac{K^2}{\cancel{4\pi}} Q_0 \int_0^\infty dr\, \cancel{4\pi r^2} \cdot \frac{e^{-Kr}}{\cancel{r}} = \underline{\underline{-Q_0}}$$

a töltéseloszlás (plazma) ellentétes nagyságú töltést hoz létre

DE feltettük, hogy a plazma semleges volt → hová tűnt (a külső töltés nélkül)

a többi töltés? → Kiment a felületre, de mivel a felületet rosszul kezeltük, ezért azt nem látjuk.

$$\boxed{\underline{\underline{\phi_q}} = \frac{q^2}{K^2+q^2} \cdot \underbrace{\frac{4\pi}{q^2} Q_0}_{\phi_{ext,q}} = \underline{\underline{\frac{e^{-Kr}}{r} \cdot Q_0}}}$$

$\downarrow$

a teljes potenciál az árnyékolás miatt egy effektív rövid hatótávolságú potenciál lesz

b) szabadenergia, nyomás:

$$F = \frac{1}{2}\int d^3r \int d^3r'\, \rho(r)\, u(r-r')\, \rho(r') + k_B T N_+ \int d^3r\, \frac{\bar{n}_+(r)}{N_+} \ln \frac{\bar{n}_+(r)}{N_+} +$$

$$+ k_B T N_- \int d^3r\, \frac{\bar{n}_-(r)}{N_-} \ln \frac{\bar{n}_-(r)}{N_-}$$

triviális megoldás: $\rho = 0$, $\dfrac{\bar{n}_\pm}{N_\pm} = \dfrac{1}{V}$

$$F = k_B T (N_+ + N_-) \cdot \int d^3r\, \frac{1}{V} \ln \frac{1}{V} = -k_B T (N_+ + N_-) \ln V$$

$$\underline{\underline{p}} = -\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{(N_+ + N_-) k_B T}{V} = \underline{\underline{\frac{N k_B T}{V}}}$$ → ez az id. gáz nyomása

||

az átlagtérközelítésben nem jelenik meg a kh. a nyomásban

2) korrelációs energia: a töltéseloszlás egymással való kh.-a

~~az átlagtérelméletben figyelembe nem vett tagokat~~

(ezt az átlagtérelméletben az előbb nem vettük figyelembe)

láttuk, hogy ilyen teljes tér alakul ki az ion körül

$$\text{ion } Q \text{ töltéssel}: \Phi(\underline{r}) = \frac{Q}{r} e^{-\kappa r} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{sorbafejtjük}}}{\simeq} \frac{Q}{r}(1-\kappa r) = \underbrace{\frac{Q}{r}}_{\text{ion tere}} \underbrace{-\kappa Q}_{\boxed{\text{többi töltés tere}}}$$

$$E_{corr} = \frac{1}{2} N_+ Q_+ (-\kappa Q_+) + \frac{1}{2} N_- Q_- (-\kappa Q_-) =$$

plazmarész. egymással való kh.

$$\left(\frac{\kappa^2}{4\pi} = \frac{1}{k_B T} \cdot \frac{N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2}{V} \text{ volt} \right)$$

$$= -\frac{\kappa}{2}\left(N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2\right) = -\frac{1}{\cancel{2}} \cancel{2} \sqrt{\frac{\pi}{k_B T}} \left(\frac{N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2}{\sqrt{V}}\right)^{3/2}$$

(ha $T \to \infty$ ($\beta \to 0$), nem jelenik meg a kh.)

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \qquad \ln Z = -\int_0^\beta d\beta' \, E_{corr}(\beta') + \underbrace{N \cdot \ln V}_{\text{kh. nélküli tag}} =$$

$$= + N \ln V + \frac{2}{3} \frac{\sqrt{\pi}}{(k_B T)^{3/2}} \frac{\left(N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2\right)^{3/2}}{\sqrt{V}}$$

mx:

$$\int_0^\beta \beta'^{1/2} d\beta' = \frac{2}{3} \beta^{3/2}$$

korrekció a korrelációból

$$\underline{\underline{p}} = -\frac{\partial F}{\partial V} = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial V} = \frac{N k_B T}{V} \underbrace{+ \frac{\cancel{2}}{3}\left(-\frac{1}{\cancel{2}}\right)\sqrt{\frac{\pi}{k_B T}} \left(\frac{N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2}{V}\right)^{3/2}}$$

Debye-Hückel-formulája

elektron gáz, elkent pozitív háttér előtt

$$p = \frac{Nk_BT}{V} - \frac{1}{3}\sqrt{\frac{\pi}{k_BT}}\left(\frac{Ne^2}{V}\right)^{3/2} = \frac{Nk_BT}{V}\left(1 - \frac{\sqrt{\pi}}{3}\left(\frac{e^2}{k_BT}\right)^{3/2}\cdot\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{2}}\right)$$

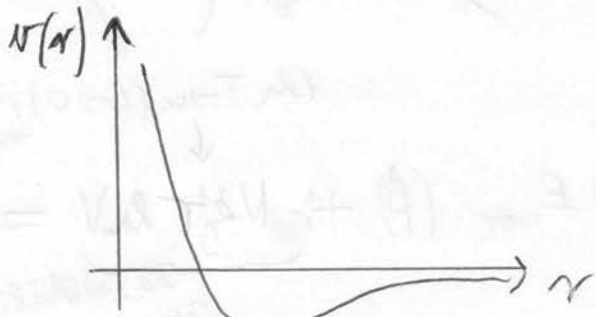
ez olyan, mint egy sorfejtés első 2 tagja!

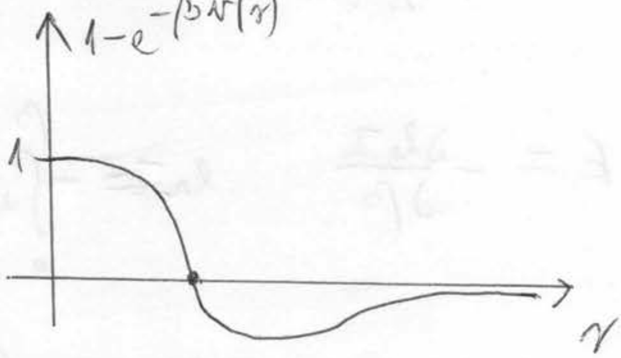
viriál sorfejtés:

$$p = \frac{N}{V}\,k_BT\cdot f\left(T, \frac{N}{V}\right) = \frac{N}{V}\,k_BT\left(1 + \underbrace{B(T)}_{\text{2. viriálegyüttható}}\cdot\frac{N}{V} + \dots\right)$$

klasszikus gáz:

$$B(T) = \frac{1}{2}\int d^3r\left(1 - e^{-\beta \overbrace{v(r)}^{\text{potenciál}}}\right)$$





$$B(T) = 2\pi\cdot\int_0^\infty dr\cdot r^2\left(1 - e^{-\beta v(r)}\right)$$

$$r \not\to \infty$$

$$\int_R^\infty dr\cdot r^2\cdot\beta v(r) < \infty$$

↑ ha $v(r)$ rövid hatótávolságú ($\frac{1}{r^3}$-nél gyorsabban tart 0-hoz

ha e^- gázunk van, hosszú távú a kh. → a sűrűség $\left(\frac{N}{V}\right)$ hatványaiban nem sorfejthető eredményt kapunk $B(T)$-re
($\sqrt{\frac{N}{V}}^{-1}$ nem sorfejthető 0 körül)

Átlagtér elm.-ben árnyékolást kaptunk a plazmára, de a kh.-t a rész.-k között nem vettük figyelembe (k. közel.)

↳ alkalmazás feltétele: árnyékolási hossz: $\frac{1}{\kappa}$

↓

Mikor jó ez a közelítés?

$$\frac{1}{\kappa} \gg \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \qquad \kappa^2 = \frac{1}{k_B T}\left(\frac{NQ^2}{V}\right)$$

$$\frac{1}{\kappa^2} \gg \left(\frac{V}{N}\right)^{2/3}$$

↓

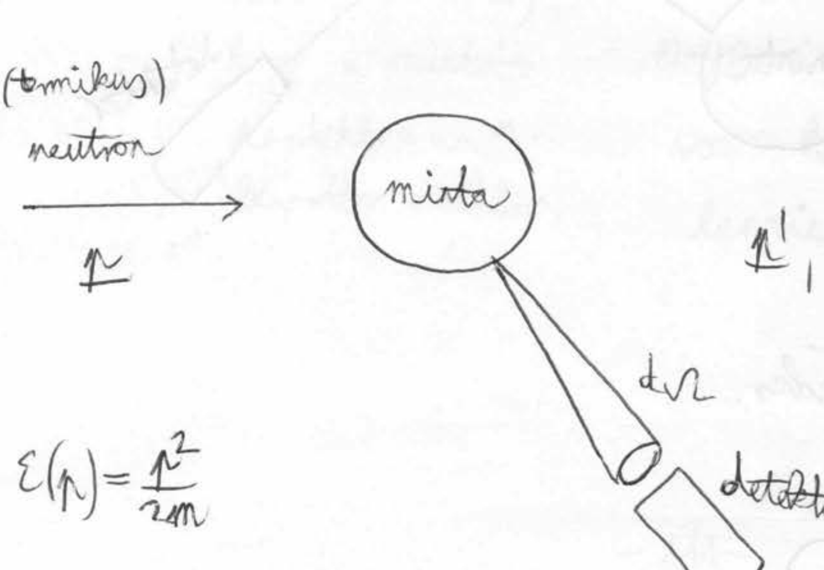
$$k_B T \cdot \frac{V}{NQ^2} \gg \left(\frac{V}{N}\right)^{2/3}$$

$$\boxed{k_B T \gg \frac{Q^2}{\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}}}$$

ha kicsi a sűrűség és a potenciál, akkor teljesül → alkalmazható az átlagtér közelítés

vagy ha magas a hőmérséklet → $\cancel{\frac{\cos(2k_F r)}{r^3}}$ (ilyenkor a rész.-k közötti kh.-t elhanyagolhatjuk)

Neutron-szórás hatáskeresztmetszete



$$p', \quad \varepsilon(p') = \frac{p'^2}{2m}$$

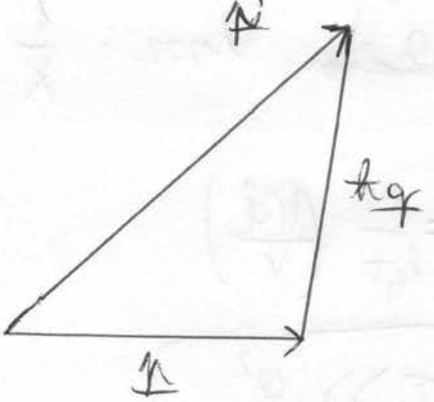
$$\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$$

energialeadás:

$$\hbar\omega = \varepsilon(p) - \varepsilon(p')$$

imp. leadás:

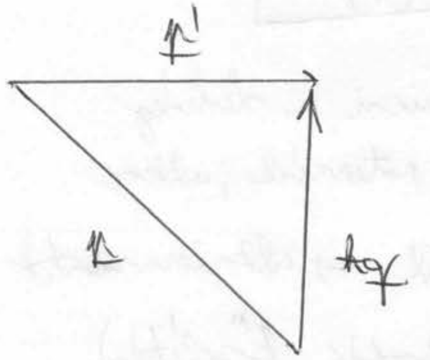
$$\hbar q = p - p'$$



anti - Stokes - komponens

$\hbar\omega < 0$

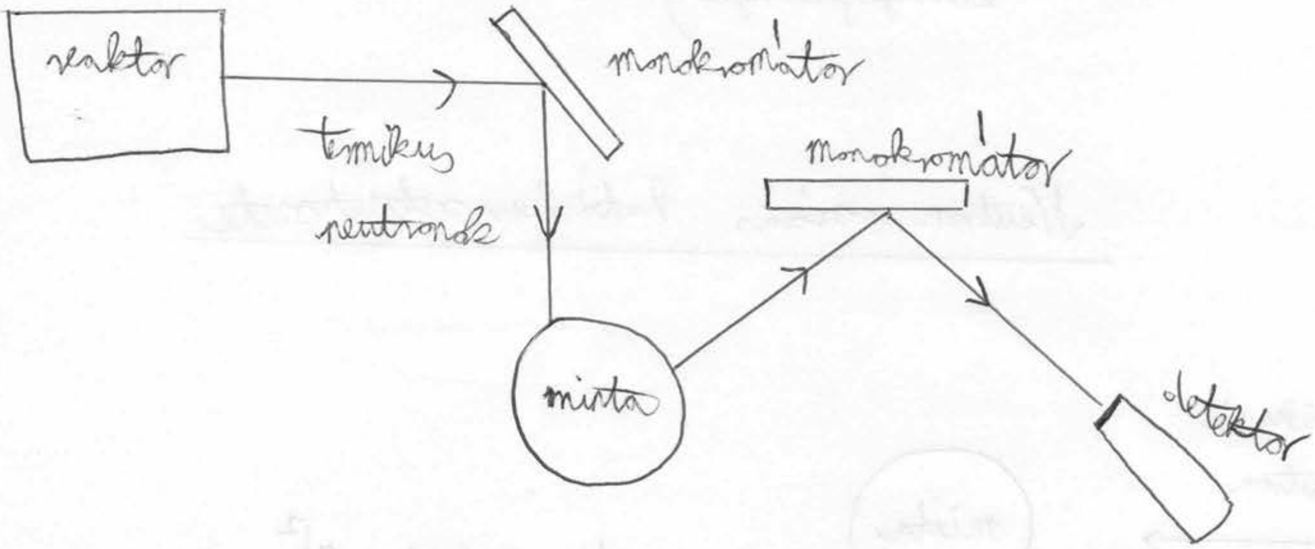
(a minta adott át energiát a n°-nak)



Stokes - komponens

$\hbar\omega > 0$

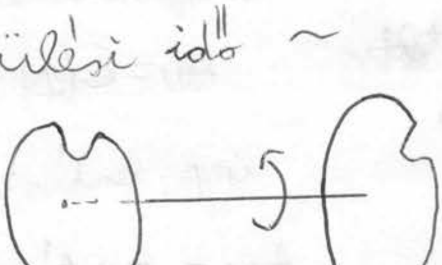
(a n° energiát vett fel a mintától)



monokromátor:

· pl. egykristály monokr.

· repülési idő ~



$$\Delta N(d\Omega, dE) = I_{be} \underbrace{\frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\,\partial E}}_{\substack{\text{kétszer differenciális}\\ \text{hatáskeresztmetszet}}} d\Omega\, dE$$

- Born-közelítés (1. rendű pert. számítás)

- $\mathcal{P}(\underline{p}, n \Rightarrow \underline{p}', m)$

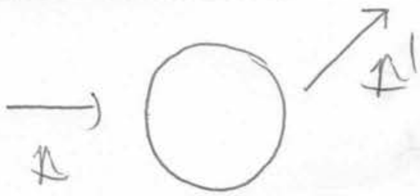
mi a vsz.-e hogy átmenet lesz a 2 állapot között ($\underline{p}$ imp.-ú n°, minta n. állapotban volt, $\rightarrow \underline{p}'$ –"– kimenő rész., minta m. állapotba kerül)

minta:

$$H\phi_n = E_n\phi_n \Rightarrow H\phi_m = E_m\phi_m$$

$$\underset{\substack{\text{szóródó}\\ \text{rész.}}}{N} = \sum_{n,m} \underbrace{\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}}_{\substack{\text{annak a vsz.-e,}\\ \text{hogy a mintát}\\ \text{kezdetben az n.}\\ \text{állapotban találom}}} \underbrace{\mathcal{P}(\underline{p}, n \Rightarrow \underline{p}', m)}_{\substack{\text{az energia és imp.}\\ \text{megmaradásnak az átmeneti}\\ \text{vsz.-ben benne kell}\\ \text{lennie (Fermi-féle aranyszabály} \rightarrow \delta(\ldots))}} \cdot \overbrace{\frac{V}{(2\pi)^3} \underbrace{d^3\underline{p}'}_{p'^2 d\Omega dp'}}^{\text{rész. állapotok száma a végállapotban}} = j_{be} \cdot \frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\, dE} d\Omega\, dE$$

Neutronszórás (folyt.)

1) 

$$\Delta N(d\Omega, dE) = I_{be} \cdot \frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\,\partial E}\Big)_E \cdot d\Omega\, dE$$

$$P(p \to p')\,\frac{V}{h^3}\,d^3p' = j_{be}\,\frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\,\partial\Omega}\,d\Omega\, dE$$

kezdőállapot: n^o: p, minta: E_n

$$\frac{1}{\sqrt{V}}\,e^{\frac{i}{\hbar}pr}, \quad \phi_n$$

végállapot: p', E_m

$$\frac{1}{\sqrt{V}}\,e^{\frac{i}{\hbar}p'r}, \quad \phi_m$$

$$\sum_{\substack{n\\m}} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\cdot \underbrace{P(p, n \Rightarrow p', m)} = P(p \to p')$$

a n^o gyengén hat kölcsön $\Rightarrow$ Born közelítés (1. rendű pert. számítás)
$\Downarrow$ egyszeres szóródás

$$P(p, n \Rightarrow p', m) = \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta\left(E_n + \frac{p^2}{2m} - E_m - \frac{p'^2}{2m}\right) \cdot |\langle p, n|U|p', m\rangle|^2$$

Kölcsönhatás: neutron: $\lambda \sim 10^{-8}$ cm
mag mérete: $\sim 10^{-13}$ cm $\Big\} \Rightarrow$ pontszerű potenciál

$$U = \sum_{\alpha=1}^{N} u_0\, \delta(\underline{r}-\underline{r}_\alpha)$$

$u_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b$ b: szórási hossz

$$\langle p, n | U | p', m\rangle = \frac{1}{V}\int d^3r\, e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)\underline{r}} \langle n | \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \sum_{\alpha=1}^{N} \delta(r-r_\alpha) | m\rangle =$$

$$= \frac{1}{V}\, \frac{2\pi\hbar^2}{m} \langle n | \sum_{\alpha=1}^{N} e^{-iq\underline{r}_\alpha} | m\rangle \cdot b$$

$$p - p' = \hbar q \qquad \hbar\omega = \frac{p^2}{2m} - \frac{p'^2}{2m}$$

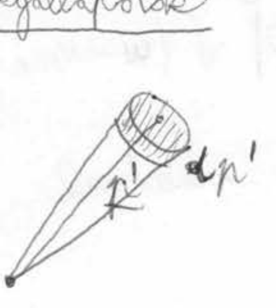
$$P(p, n \Rightarrow p'\, m) = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_n - E_m + \hbar\omega)\frac{1}{V^2}\frac{4\pi^2\hbar^4}{m^2} b^2 \left|\langle n | \sum_\alpha e^{-iq\underline{r}_\alpha} | m\rangle\right|^2$$

$$P(p \to p') = \frac{\hbar^3}{V^2}\cdot\frac{b^2}{m^2}\cdot\sum_{nm}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\left|\langle n | \sum_\alpha e^{-iq\underline{r}_\alpha} | m\rangle\right|^2 \cdot \frac{1}{\hbar}\delta(\omega-\omega_{mn})$$

ahol

$$\hbar\omega_{mn} := E_m - E_n$$

<u>végállapotok</u>



$$\underbrace{\frac{V}{h^3}}_{\text{állapotok száma a végáll.ban}} d^3p' = \frac{V}{h^3} p'^2\, d\Omega\, dp' = \frac{V}{h^3} p' m\, d\Omega\, dE$$

$$2mE = p'^2$$

$$\cancel{2} m\, dE = \cancel{2} p'\, dp'$$

bemenő áramsűrűség: $j_{be} = \frac{p}{m}\cdot\frac{1}{V}$

$$\left(j = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right),\ \psi_{be} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar}p\underline{r}}\right)$$

$$\cancel{\frac{\hbar^3}{V^2}}\cancel{\frac{b^2}{m^2}}\sum_{nm}\left(\dots\right)\cancel{\frac{V}{\hbar^3}}\,p'\cdot\cancel{m}\,\cancel{d\Omega}\,dE=\frac{p}{\cancel{m}}\cdot\frac{1}{\cancel{V}}\frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\,\partial E}\,\cancel{d\Omega\,dE}$$

$$\boxed{\frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\,\partial E}=\frac{p'}{p}\cdot\frac{b^2}{\hbar}\underbrace{\sum_{nm}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\left|\langle n|\sum_\alpha e^{-iqr_\alpha}|m\rangle\right|^2\cdot\delta(\omega-\omega_{mn})}_{\text{dinamikai szerkezeti tényező}}}$$

ahol $\hbar q=p'-p$

$\hbar\omega=\frac{p'^2}{2m}-\frac{p^2}{2m}$

2) szerkezeti tényező

- sűrűség: $\rho(\underline{r})=\sum_\alpha\delta(\underline{r}-r_\alpha)$

  ↘ Fourier-tr.: $\rho_q=\frac{1}{\sqrt{V}}\int d^3r\,e^{-iqr}\rho(\underline{r})$

  ↑ minta térfogata! (az előzőekben a n° által érzett ~~detektortérfogat~~ más!)

$$\rho_q=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_\alpha e^{-iqr_\alpha}$$

⇓

szerkezeti tényező: $\overset{\text{minta térfogata}}{V}\cdot\sum_{nm}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\left|\langle n|\rho_q|m\rangle\right|^2\cdot\delta(\omega-\omega_{mn})$

→ a hatáskeresztmetszet arányos a szórócentrumok számával

- $\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt}{2\pi}e^{i\omega t}=\delta(\omega)$

$\Rightarrow\delta(\omega-\omega_{mn})=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt}{2\pi}e^{i\omega t}e^{-i\cdot\frac{E_m-E_n}{\hbar}t}$

$\Rightarrow$ szerk. t.: $V\cdot\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\cdot\langle n|\rho_q|m\rangle\langle m|\rho_{-q}|n\rangle\cdot\int\frac{dt}{2\pi}e^{i\omega t}e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t}=$

$$= V \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} \sum_{n,m} e^{i\omega t} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \underbrace{\underbrace{\langle n | e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}}_{\langle n | e^{\frac{i}{\hbar}Ht}} \rho_q \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} |m\rangle}_{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|m\rangle}}_{\langle n | e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \rho_q e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|m\rangle} \langle m | \rho_{-q} | n\rangle =$$

$$\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \rho_q e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}_{\rho_q(t)}$$ (Heisenberg-képbeli sűrűség(op.))

$$= V \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \langle n | \rho_q(t) | m\rangle \langle m | \rho_{-q}(0) | n\rangle e^{i\omega t} =$$

$$= V \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega t} \underbrace{\sum_n \langle n | \frac{e^{-\beta H}}{Z} \rho_q(t) \rho_{-q}(0) | n\rangle}_{\text{termikus várható érték}} = \underline{\underline{V \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega t} \langle \rho_q(t) \rho_{-q}(0)\rangle}}$$

$\Rightarrow$ a szórócentrumok Fourier-tr.-nak korrelációs fv.-e adja meg a szerkezeti tényezőt

3) <u>Spinfüggő szórás</u>

$$\rightarrow \left| \langle n | \sum_\alpha b_\alpha e^{-iqr_\alpha} | m\rangle \right|^2$$

$\uparrow$

<u>spinfüggő szórási hossz</u> (a magok spinje eltérhet)

$$\overline{b_\alpha b_{\alpha'}} = \begin{cases} \overline{b_\alpha} \cdot \overline{b_{\alpha'}} & \alpha \neq \alpha' \\ \overline{b_\alpha^2} & \alpha = \alpha' \end{cases}$$

(szórási hosszak

$$\overline{b_\alpha b_{\alpha'}} = \begin{cases} \overline{b}^2 & \alpha \neq \alpha' \\ \overline{b^2} & \alpha = \alpha' \end{cases}$$

$$\overline{b_\alpha b_{\alpha'}} = \overline{b}^2 + \delta_{\alpha\alpha'} \left(\overline{b^2} - \overline{b}^2 \right)$$

$$\Rightarrow \overline{\left| \langle n | \sum_\alpha b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} | m \rangle \right|^2} = \underbrace{\overline{b}^2 \cdot \left| \langle n | \sum_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} | m \rangle \right|^2}_{\text{koherens szórás}} + \underbrace{\left(\overline{b^2} - \overline{b}^2 \right) \cdot \sum_\alpha \left| \langle n | e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} | m \rangle \right|^2}_{\text{inkoherens szórás}}$$

koherens szórás
(megőrzi a fázist)
⇓
információt tartalmaz
a rendszerről

inkoherens szórás
⇓
elkent háttér, kevés inform.
a rsz.-ről

(a spinek össze-vissza állnak ⇒ $\overline{b^2} - \overline{b}^2$ adja az elkentséget)

4) $\underline{P}$ minta impulzusa $\quad \underline{P} = \frac{\hbar}{i} \sum_\alpha \nabla_\alpha$

$$\left[\underline{P}, \sum_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} \right] = \underbrace{\frac{\hbar}{i} (-i\underline{q})}_{-\hbar\underline{q}} \sum_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}$$

$$\underline{P} | m \rangle = P_m | m \rangle \qquad \left(\underline{P}, \sum_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} \right)$$

$$\underline{P} \left(\sum_q e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} \right) | m \rangle = \sum_q e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} \underbrace{\underline{P} | m \rangle}_{P_m | m \rangle} + (-\hbar\underline{q}) \sum_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} | m \rangle =$$

$$= \left(\underline{P}_m - \hbar\underline{q} \right) \sum_q e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} | m \rangle \Rightarrow$$ impulzus sajátállapot $\sum_q e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} | m \rangle$ is $\underline{P}_m - \hbar\underline{q}$ sajátértékkel!

$$\underbrace{\langle n | \sum_\alpha e^{-iqx_\alpha} | m \rangle}_{} \neq 0 \quad \text{ha} \quad \boxed{\underline{p}_n = \underline{p}_m - \hbar q} \Rightarrow$$ impulzus-megmaradás is teljesül

$\underline{p}$ sajátállapota $\underline{p}_m - \hbar q$ impulzussal (de nem feltétlenül energia sajátállapot)

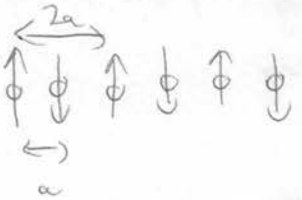
⇒ akkor nem 0 a skalárszorzat, ha n állapotnak is ennyi az impulzusa (egyébként merőlegesek az állapotok)

5) Más szórások:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E} \sim \frac{\partial^2 \sigma_1}{\partial \Omega \partial E} \cdot \underbrace{S(q, \omega)}_{\text{szórócentrumok sűrűség-korr. fv.-e}}$$

- e^- szórás: az e^--ok sűrűsége jelenik meg (a magok is mozognak a bejövő EM tér hatására, de csak kicsit)
- γ szórás: a fény a törésmutató ingadozása miatt szóródik, ami az atomok sűrűségének ingadozása miatt van

mágneses szórás: spinhullámok vizsgálata



⇒ 2-szeres rácsáll. ⇒ fele akkora impulzusnál jelenik meg egy újabb Bragg-csúcs

Időfüggő perturbációszámítás

$$H' = H + V(t)$$

H ↑ időtől független; $V(t)$ ↑ időfüggő perturbáció

perturbálatlan ~~rendszer~~:

$$i\hbar \dot{\Psi} = H\Psi \qquad \Psi(t=0) = \Psi_0$$

$$\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \cdot \Psi_0$$

perturbált rsz.:

$$i\hbar \dot{\Psi} = H'\Psi = (H + V(t))\Psi$$

$$\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\tilde{\Psi}(t)$$

$$i\hbar\left(\cancel{-\frac{i}{\hbar}He^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\tilde{\Psi}} + e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\dot{\tilde{\Psi}}\right) =$$

$$= (\cancel{H} + V(t))\,e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\tilde{\Psi}$$

$$i\hbar\dot{\tilde{\Psi}} = \Big(\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,V(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}_{:=\,\tilde{V}(t)}\Big)\cdot\tilde{\Psi}$$

$\tilde{\Psi}$ időfejlődését a pert. latlan rsz. szerinti Heisenberg-képbeli $V(t)$ hat. meg

$$\boxed{i\hbar\dot{\tilde{\Psi}} = \tilde{V}(t)\cdot\tilde{\Psi}}$$

$$\tilde{\Psi}(t=0) = \Psi_0$$

elsőrendig: $i\hbar\dot{\tilde{\Psi}} = \tilde{V}(t)\cdot\Psi_0 \qquad \tilde{\Psi}(t=0)$

$$\tilde{\Psi} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\,\tilde{V}(t')\,\Psi_0 + \Psi_0 = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\,\tilde{V}(t')\right)\Psi_0$$

Mi van, ha egy t_0 időpillanatban adjuk meg Ψ-t?

$$\boxed{\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\left(1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t dt'\,\tilde{V}(t')\right)e^{\frac{i}{\hbar}Ht_0}\cdot\Psi(t_0)}$$

Időfüggő pert. szám. (folyt.)

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} + \underbrace{V(t)}_{\text{perturbáció}} \qquad i\hbar\dot{\Psi} = \mathcal{H}'\Psi$$

$$\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\tilde{\Psi}(t)$$

$$t=0: \quad \tilde{\Psi}(0) \overset{\Downarrow}{=} \Psi(0)$$

$$i\hbar\dot{\tilde{\Psi}} = \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,V(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}_{V_i(t)}\,\tilde{\Psi} = V_i(t)\,\tilde{\Psi}$$

– múltkor iterációval oldottuk meg, most integrálegyenletet csinálunk:

$$i\hbar\int_{t_0}^{t}\dot{\tilde{\Psi}}(t')\,dt' = i\hbar\left(\tilde{\Psi}(t) - \tilde{\Psi}(t_0)\right)$$

$$\tilde{\Psi}(t) = \tilde{\Psi}(t_0) - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,V_i(t')\,\tilde{\Psi}(t')$$

↳ ezt is jól lehet iterálni $\tilde{\Psi}(t_0),\ \tilde{\Psi}(t') \Rightarrow \tilde{\Psi}(t)$

- perturbáció nélkül: $\tilde{\Psi}(t) = \tilde{\Psi}(t_0)$
- első rend: $\tilde{\Psi}(t) = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,V_i(t')\right)\tilde{\Psi}(t_0)$
- magasabb rendek: $\tilde{\Psi}(t) = \tilde{\Psi}(t_0) - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,V_i(t')\left(\tilde{\Psi}(t_0) - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t'}dt''\,V_i(t'')\,\tilde{\Psi}(t'')\right)$

$$\boxed{\Psi(t)} = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\left(1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,V_i(t')\right)\tilde{\Psi}(t_0) = \boxed{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\left(1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,V_i(t')\right)e^{\frac{i}{\hbar}Ht_0}\,\Psi(t_0)}$$

$$\tilde{\Psi}(t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht_0}\,\Psi(t_0)$$

↳ ez csak formális megoldás, az operátorok hatását még ki kell számolni. De átl.ban nem is a hfv.-re, hanem mérhető mennyiségekre vagyunk kíváncsiak:

$$\langle B\rangle = \langle \Psi|B|\Psi\rangle = (\Psi, B\Psi)$$

kezdeti állapot: $\Psi(t_0)=\varphi_n \quad |n\rangle$

$$H\varphi_n = E_n\varphi_n \qquad \cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t_0}}$$

$$\langle \Psi(t)|B|\Psi(t)\rangle = \langle n| e^{-\frac{i}{\hbar}Ht_0}\left(1+\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_i(t')\right) \overbrace{e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\cdot B\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}^{B(t)}\cdot$$

$$\cdot\left(1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_i(t')\right) e^{\frac{i}{\hbar}Ht_0}|n\rangle =$$

$\cancel{e^{\frac{i}{\hbar}E_n t_0}}$ ← a V_i-ben másodrendű tagokat elhagyjuk

$$\langle B\rangle_t = \underbrace{\langle n| \overset{\cancel{e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}}}{e^{\frac{i}{\hbar}Ht}}\, B\, \overset{\cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}}{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}|n\rangle}_{\text{mert } |n\rangle \text{ energia sajátállapot}} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \langle n|B(t)V_i(t') - V_i(t')B(t)|n\rangle$$

$$\langle B\rangle_t = \langle n|B|n\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \langle n|\underbrace{[B(t), V_i(t')]}|n\rangle$$

(ehhez valójában sokat kell számolni)

↓

ezt még kezdeti statisztikus állapot miatt átlagolni kell

termikus egyensúlyból kiindulva $\dfrac{e^{-\beta E_n}}{Z}$ kanonikus eloszlás

- Stat. átlagolás után:

$$\boxed{\langle B\rangle_t} = \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\langle n|B|n\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\left(\sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\langle n|[B(\cancel{t}),V_i(t')]|n\rangle\right) =$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}\cdot B\right) - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}[B(t),V_i(t')]\right) =$$

$$= \langle B\rangle_{eq} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\langle [B(t),V_i(t')]\rangle_{eq}$$

egyensúlyi várh. érték

- Legyen a perturbáció a köv. alakú:

$$V(t) = -A\cdot f(t)$$

$f(t)$: klasszikus tér

A: rendszer fiz. mennyisége (operátor)

$-M\overbrace{B(t)}^{\text{klassz. tér}}$ nincs benne pl.:

$-PE(t)$

- rendszer visszahatása a külső térre
- EM tér kvantálása

$$V_i(t) = -e^{\frac{i}{\hbar}Ht}A\,e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}f(t) = -A(t)f(t)$$

$$\langle B\rangle_t = \langle B\rangle_{eq} + \frac{i}{\hbar}\int_{\cancel{t_0}\,-\infty}^{t} dt'\langle [B(t),A(t')]\rangle f(t') + \mathcal{O}(f^2)$$

általános lineáris összefüggés:

$$\langle B\rangle_t = \langle B\rangle_{eq} + \int_{-\infty}^{+\infty} dt'\,\overbrace{\chi(t-t')}^{\text{lin. válaszfv.}}\cdot f(t')$$

$$\boxed{\chi(t-t') = \begin{cases} \frac{i}{\hbar}\langle [B(t), A(t')]\rangle & t>t' \\ 0 & t<t' \end{cases}}$$

(kauzalitás: $B(t)$ nem függhet a jövőtől)

Kubo-formula

__Áll.:__ $\langle [B(t), A(t')]\rangle$ tényleg csak $(t-t')$-től függ.

__Biz.:__ $\langle B(t) \cdot A(t')\rangle = \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} B e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} e^{\frac{i}{\hbar}Ht'} \cdot A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Ht'}\right) =$

H fv-e mindkettő

Tr miatt

$$= \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H} e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t')} \cdot B \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t')} \cdot A\right) = \langle B(t-t') \cdot A(0)\rangle$$

– Példa: időfüggő elektromos tér: $V(t) = -\underbrace{\sum_{\alpha=1}^{N} e\, \underline{r}_\alpha}_{\underline{P}} \underline{E}(t) = -\underline{P}\,\underline{E}$

$(\phi = -\underline{r}\,\underline{E}(t))$

$\underline{P}$ (dipólmom., polarizáció)

tfh.:

$\underline{E} \parallel x \quad \underline{E} = (E, 0, 0)$

$\underline{P} = (P, 0, 0)$ $\quad \langle P\rangle_{eq}$ ált. ban 0 (kivéve piroelektromos és ferroelektromos anyagokban)

$$\langle P\rangle_t = \int \chi_{PP}(t-t')\, E(t')$$

$$\chi_{PP}(t) = \frac{i}{\hbar}\langle \underbrace{[P(t), P(0)]}\rangle \quad t>0$$

ezek kül. időben vannak, ez ált. ban nem 0!

áramerősség: $\underline{I} = \sum_{\alpha=1}^{N} e\, \underline{v}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N} e \frac{\underline{p}_\alpha}{m} = \underline{\dot{P}}$ áramsűrűség:

$$\underline{j} = \frac{\underline{I}}{V}$$

$$\langle \underline{I} \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{IP}(t-t')\, E(t')\, dt' \Rightarrow \chi_{IP} = \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[I(t), P(0) \right] \right\rangle \quad (t>0)$$

$$\langle j \rangle_t = \frac{\langle I \rangle_t}{V} = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(t-t')\, E(t')\, dt'$$

$$\sigma(t) = \frac{1}{V} \cdot \chi_{IP}(t)$$

$\uparrow$ vezetőképesség

- monokromatikus zavar: (adott frekvenciás)

$$f(t) = f_0 \cdot e^{-i\omega t} \qquad 2 f_0 \cos(\omega t) = f_0 \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right)$$

$\downarrow$ baj: $t=-\infty$-nél nem akarunk zavart

elég az egyiket vizsgálni, mert úgyis az $\int$-nál összeadódnak

$\Downarrow$

adiabatikus bekapcsolás: $f(t) = f_0 \cdot e^{-i\omega t} e^{\varepsilon t}$, számolás végén $\varepsilon \to 0$

$$\langle B \rangle_t = \langle B \rangle_{eq} + \int_{-\infty}^{t} dt'\, \chi_{BA}(t-t') \cdot f_0\, e^{-i\omega t'} \cdot e^{\varepsilon t'} =$$

$$\tau = t - t' \qquad 0 < \tau < \infty$$

$$d\tau = -dt' \to \text{határok} \quad -\int_{\infty}^{0} = \int_{0}^{\infty}$$

$$= \langle B \rangle_{eq} + \underbrace{\int_0^\infty d\tau \cdot \chi_{BA}(\tau)\, e^{i\omega\tau} \cdot e^{-\varepsilon\tau}}\, f_0\, e^{-i\omega t} \cdot e^{\varepsilon t}$$

$$\boxed{\chi_{BA}(\omega) = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_0^\infty d\tau\, \chi_{BA}(\tau)\, e^{i\omega\tau} e^{-\varepsilon\tau}}$$

lin. oszcillátor kényszerrezgései

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2 \qquad m\omega_0^2 = D$$

$$V = -x \cdot f(t)$$

$$\langle x \rangle_t = \int_{-\infty}^{t} dt' \cdot \underbrace{\chi(t-t')}_{\frac{i}{\hbar}\langle [x(t),\, x(0)] \rangle} f(t')$$

$$\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p}{m}$$ (ezeket most operátoroknak is tekinthetjük, ha rendesen elvégezzük a számolást, ugyanezt kapjuk)

$$\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} = -m\omega_0^2 x$$

operátor időderiváltja, ...

$$\ddot{x} = \frac{\dot{p}}{m} = -\omega_0^2 x$$

Schr.-képbeli p

$$x(t) = x(0) \cdot \cos \omega_0 t + \frac{p(0)}{m\omega_0} \sin(\omega_0 t)$$ ← kezdeti feltétel: $t=0$-ban kapjuk vissza a Schr.-képbeli op.-okat

Schr.-képbeli x

$$[x(t), x(0)] = \frac{1}{m\omega_0} \overbrace{[p(0), x(0)]}^{\frac{\hbar}{i}} \sin \omega_0 t = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{m\omega_0} \sin(\omega_0 t)$$

$$\chi(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [x(t), x(0)] \rangle = \frac{1}{m\omega_0} \sin(\omega_0 t)$$ (klasszikusan is ugyanezt kaptuk)

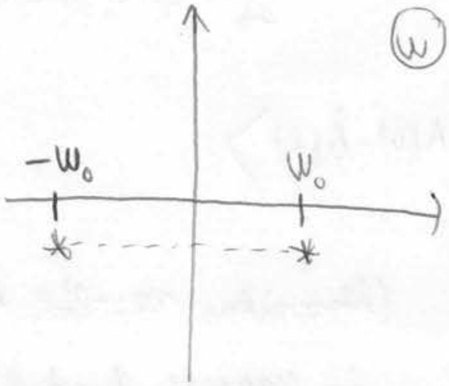
$$\int_0^\infty dt \frac{1}{m\omega_0} \sin(\omega_0 t)\, e^{i\omega t} e^{-\varepsilon t} = \frac{1}{m\omega_0} \int_0^\infty \frac{e^{i\omega_0 t} - e^{-i\omega_0 t}}{2i} \cdot e^{i\omega t} \cdot e^{-\varepsilon t}\, dt =$$

$$= \frac{1}{2m\omega_0 i}\left(\frac{1}{\varepsilon - i\omega_0 - i\omega} - \frac{1}{\varepsilon - i\omega + i\omega_0}\right) =$$

mx.: $\int_0^\infty e^{-\alpha t}\,dt = \frac{1}{\alpha}$

$$= \frac{1}{2m\omega_0}\left(\frac{1}{\omega + \omega_0 + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\varepsilon}\right)$$

ω (komplex sík)



← a kauzalitással van kapcsolatban, hogy az alsó félsíkra kerül

↓

átt. ban is igaz, hogy ha egy zavarral támadunk meg a rendszert, azok a gerjesztési átmenetek jelennek meg, melyek nincsenek tiltva

(harm. oszcillátornál a szomszédos energiaszintek között vannak csak megengedett absz. átmenetek, ezek gerj. energiája pont $\hbar\omega_0$)

klasszik rendszer : $\hbar \to 0$

$$\langle B(t)\,A(0)\rangle = \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}\cdot e^{+\frac{i}{\hbar}Ht}\cdot B\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} A\right) =$$

$e^{\beta H} e^{-\beta H}$

$$= \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z} A\cdot \underbrace{e^{-\beta H} e^{\frac{i}{\hbar}Ht}}_{e^{\frac{i}{\hbar}H(t+i\beta\hbar)}} B\, \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} e^{\beta H}}_{e^{-\frac{i}{\hbar}H(t+i\beta\hbar)}}\right) =$$

$$= \langle A(0)\, B(t + i\beta\hbar) \rangle$$

$t > 0$ -ra

$$\frac{i}{\hbar}\Big(\langle B(t)\, A(0)\rangle - \langle A(0)\, B(t)\rangle\Big) = \frac{i}{\hbar}\Big\langle A(0)\,\underbrace{\big(B(t+i\beta\hbar) - B(t)\big)}_{\frac{\partial B}{\partial t}\cdot i\beta\hbar \text{ ha } \hbar\to 0}\Big\rangle \overset{\hbar\to 0}{=}$$

$$= \frac{i}{\cancel{\hbar}}\langle A(0)\, \dot{B}(t)\rangle\, i\beta\cancel{\hbar} = -\beta\cdot \langle A(0)\cdot \dot{B}(t)\rangle$$

$$\chi_{BA}(t) = \begin{cases} -\dfrac{A(0)\,\dot{B}(t)}{k_B T} & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$

(klasszikus sz.-ből kiindulva is ugyanezt kaptuk volna)