STATISZTIKUS FIZIKA 09.15.

(sasvari.web.elte.hu/statfiz/)

Tiszta állapot:

teljes leírása: hullámfv. Ψ normálás $(\Psi,\Psi)=1$

koordináta ábrázolás: $\Psi(\underline{r})$ $\int d^3r\, \Psi^*(\underline{r})\Psi(\underline{r})=1$

$\{\varphi_n\}_{n=1}^{\infty}$ teljes ortonormált rendszer

$\Psi=\sum_n c_n\varphi_n$ $(\varphi_n,\varphi_m)=\delta_{nm}$

$$(\Psi,\Psi)=\Big(\sum_n c_n\varphi_n,\sum_m c_m\varphi_m\Big)=\sum_{nm}c_n^*c_m\delta_{nm}=\sum_n|c_n|^2=1 \qquad c_n=(\varphi_n,\Psi)$$

az operátor várható értéke: $(\Psi,A\Psi)=\sum_{nm}c_n^*c_m\underbrace{(\varphi_n,A\varphi_m)}_{A_{nm}}=$

$$=\sum_{n,m}c_mc_n^*A_{nm}=\langle A\rangle$$

projektor: $P_\Psi\Phi=\Psi(\Psi,\Phi)$

$$(P_\Psi)_{mn}=(\varphi_m,P_\Psi\varphi_n)=(\varphi_m,\Psi)(\Psi,\varphi_n)=c_mc_n^*$$

$\Psi=\sum_n(\Psi,\varphi_n)\varphi_n$

$$\langle A\rangle=\sum_{n,m}(P_\Psi)_{m,n}A_{nm}=\mathrm{Tr}(P_\Psi A)$$

koordináta ábrázolás:

$$A\Psi=\int d^3r'\,A(\underline{r},\underline{r}')\Psi(\underline{r}')$$

$$(\Psi,A\Psi)=\int d^3r\int d^3r'\,\Psi^*(\underline{r})A(\underline{r},\underline{r}')\Psi(\underline{r}')=$$

$$=\int d^3r'\int d^3r\,\Psi(\underline{r}')\Psi^*(\underline{r})A(\underline{r},\underline{r}')$$

$$P_\Psi\Phi=\Psi(\underline{r})\int d^3r'\,\Psi^*(\underline{r}')\Phi(\underline{r}')=$$

$$=\int d^3r'\,P_\Psi(\underline{r},\underline{r}')\Phi(\underline{r}')$$

$$P_\Psi(\underline{r},\underline{r}')=\Psi(\underline{r})\Psi^*(\underline{r}')$$

$$\langle A\rangle=\int d^3r\int d^3r'\,P_\Psi(\underline{r}',\underline{r})A(\underline{r},\underline{r}')$$

Kevert állapot:

nem írható le egy hullámfüggvénnyel

↳ nagy rendszer része

↳ valószínűségi keverék

statisztikusan keverő állapot

lehetséges tiszta állapotok: Ψ_α

p_α valószínűséggel található Ψ_α állapotban

$\sum_\alpha p_\alpha = 1$

$$\langle A \rangle = \sum_\alpha p_\alpha (\Psi_\alpha, A\Psi_\alpha) = \sum_\alpha p_\alpha \, Tr(P_{\Psi_\alpha} A) = Tr\left(\sum_\alpha p_\alpha P_{\Psi_\alpha} A\right)$$

sűrűségoperátor: $\hat{\rho} = \sum_\alpha p_\alpha P_{\Psi_\alpha}$

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

$$\langle A \rangle = \sum_\alpha p_\alpha \left(\sum_{n,m} c_{m,\alpha} c^*_{n,\alpha} A_{nm}\right) = \sum_{n,m} \rho_{mn} A_{nm}$$

$$\rho_{mn} = \sum_\alpha p_\alpha c_{m,\alpha} c^*_{n,\alpha}$$

$$\rho(\underline{r}, \underline{r}') = \sum_\alpha p_\alpha P_\Psi(\underline{r}, \underline{r}') = [illegible]$$

$$= \sum_\alpha p_\alpha \Psi_\alpha(\underline{r}) \Psi^*_\alpha(\underline{r}') =$$

$$= \sum_\alpha p_\alpha \left(\sum_n c_{\alpha,n} \varphi_n(\underline{r})\right)\left(\sum_m c^*_{\alpha,m} \varphi^*_m(\underline{r}')\right) =$$

$$= \sum_{n,m} \left(\sum_\alpha p_\alpha c_{\alpha,n} c^*_{\alpha,m}\right) \varphi_n(\underline{r}) \varphi^*_m(\underline{r}') =$$

$$= \sum_{n,m} \rho_{n,m} \varphi_n(\underline{r}) \varphi_m(\underline{r}')$$

$$\sum_{n,m} c_n c^*_m A_{mn} \longrightarrow \sum_{n,m} \rho_{nm} A_{mn}$$

- ρ tulajdonságai:

klassziku valószínűségsűrűség analógonja

klassziku rendszer:

koordináta $q = (q_1 \dots q_f)$

impulzus $p = (p_1 \dots p_f)$

$2f$ dimenziós fázistér: $(q, p) = (q_1 \dots q_f, p_1 \dots p_f)$

valószínűségsűrűség: $\rho(q, p)$

fizikai mennyiség: $A(q,p)$

$\langle A \rangle = \int d^f q\, d^f p\, \varrho(q,p)\, A(q,p)$

ϱ tulajdonságai:

- hermitikus operátor $(P_\psi)_{nm} = c_n c_m^* = (c_n c_m^*)^* = (P_\psi)^*_{mn}$
- $\mathrm{Tr}\,\varrho = 1$ $\quad \sum_n \varrho_{nn} = \sum_n \left(\sum_\alpha p_\alpha c_{\alpha,n} c^*_{\alpha,n} \right) = \sum_\alpha p_\alpha \underbrace{\left(\sum_n |c_{\alpha,n}|^2 \right)}_{1} = 1$
- $\varrho_{nm} = \sum_\alpha p_\alpha |c_{\alpha,n}|^2$ annak valószínűsége, hogy ψ_α állapotban találjuk
- $\mathrm{Tr}(\varrho^2) \leq 1$, = ha ϱ tiszta állapotot ír le

tiszta állapotban $\varrho^2 = \varrho$

diagonális rendszerben $\varrho_{nm} = \varrho_n \delta_{nm}$ $\varrho_n \geq 0$

$$\mathrm{Tr}(\varrho^2) = \sum_n \varrho_n^2 \leq \underbrace{\left(\sum_n \varrho_n \right)^2}_{(\mathrm{Tr}\,\varrho)^2} = 1$$

$$\rightarrow \sum_n \varrho_n^2 + \sum_{\substack{n,m \\ n \neq m}} \varrho_n \varrho_m$$

<u>időfüggés</u>:

tiszta állapot: $i\hbar \dot{\psi} = H\psi$

skalárszorzatot megtartó:

$$i\hbar \frac{d}{dt}(\psi, \psi') = (-i\hbar \dot{\psi}, \psi') + (\psi, i\hbar \dot{\psi}') =$$

$$= \underbrace{(-H\psi, \psi')}_{-(\psi, H\psi')} + (\psi, H\psi') = 0$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}(\psi, A\psi) = (-i\hbar \dot{\psi}, A\psi) + (\psi, A(i\hbar \dot{\psi})) =$$

$$= (-H\psi, A\psi) + (\psi, AH\psi) = (\psi, (AH - HA)\psi)$$

$$\frac{d}{dt}(\psi, A\psi) = \left(\psi, \frac{i}{\hbar}[H,A]\psi\right) = \mathrm{Tr}\left(P_\psi \cdot \frac{i}{\hbar}[H,A]\right)$$

kevert állapot: $\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\left(\varrho \frac{i}{\hbar}[H,A]\right) = *$

$$Tr(ABC) = Tr(CAB) = \sum_{nme} A_{nm} B_{me} C_{en} = \sum_{nme} C_{en} A_{nm} B_{me}$$

$$* = \frac{i}{\hbar} Tr(\rho HA - \rho AH) = \frac{i}{\hbar} Tr(\rho HA - H\rho A) =$$

$$= Tr\left(\frac{i}{\hbar}[\rho, H] A\right)$$

$$\frac{d}{dt} Tr(\rho A) = Tr(\dot\rho A)$$

$$\boxed{\dot\rho = \frac{i}{\hbar}[\rho, H]}$$ Neumann egyenlet

stacionárius állapotban: $\dot\rho = 0 \rightarrow [\rho, H] = 0$

egyszerre diagonizálhatóak

egyensúlyi statisztikus mechanika:

<u>zárt rendszer</u>, energiaábrázolás:

$$\rho_{nm} = \rho_n \delta_{nm}$$

$$\rho_n = \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E, \delta E)} & E < E_n < E + \delta E \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

(mikrokanonikus sokaság)

$\Omega(E, \delta E)$: $(E, E+\delta E)$ - be eső energiaállapotok száma

<u>kanonikus sokaság</u>: energiaábrázolás

$$\hat\rho_{nm} = \delta_{nm} \rho_n$$

$$\rho_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$\hat\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat H} \rightarrow$$ ábrázolástól független leírás

Z állapotösszeg (normálási tényező)

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$Tr\hat\rho = \frac{1}{Z} Tr(e^{-\beta \hat H}) \Rightarrow Z = Tr(e^{-\beta \hat H})$$

<u>nagykanonikus sokaság:</u>

Fock tér bevezetése

betöltési szám ábrázolás

multitor: p_α, Ψ_α

$\langle A \rangle = Tr(\rho A)$ $\quad \rho = \sum_\alpha p_\alpha P_{\Psi_\alpha}$

$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$

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

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

$\Psi_\alpha(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi_\alpha(0)$ $\quad \rho(t) = \sum p_\alpha P_{\Psi_\alpha(t)}$

$\langle A \rangle_t = \sum_\alpha p_\alpha \left(\Psi_\alpha(0), \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}_{A(t)}\Psi_\alpha(0)\right) = Tr\left(\rho(0)A(t)\right)$

Heisenberg - képbeli operátor

$\langle A \rangle_t = Tr\left(\rho(0)\, e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\right)$

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

Schrödinger - képben

azonos részecskék: megkülönböztethetetlenek

bozon	fermion
egész spin	félegész spin
He^3	He^4
2e 2p 1n	2e 2p 2n
fermion	bozon

H op.: invariáns a részecskék permutálásával szemben

bozonok → szimmetrikus

fermion → antiszimm.

egyrészecske probléma:

$x = (\underline{r}, \sigma)$ $\quad \Psi(x) = \Psi(\underline{r}, \sigma)$

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

teljes ortonormált rendszer: $\{\varphi_\ell\}_{\ell=0}^{\infty}$

$\varphi_\ell(x) = \varphi_\ell(\underline{r}, \sigma)$

$\int dx\, \varphi_\ell^*(x)\varphi_{\ell'}(x) = \sum_\sigma \int d^3r\, \varphi_\ell^*(\underline{r}, \sigma)\varphi_{\ell'}(\underline{r}, \sigma) = \delta_{\ell,\ell'}$

$$\psi(x) = \sum_i c_i \varphi_i(x) \qquad c_i = (\varphi_i, \psi) = \int dx\, \varphi_i^*(x)\psi(x)$$

N részecske bázis

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

<u>bozonok</u>: szimmetrizálni kell

$$\Phi_{\ell_1\dots\ell_N}(x_1,\dots,x_N) = C\cdot\sum_\alpha \varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1})\dots\varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N})$$

↑ normálás

$\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$ $1,2,\dots,N$

egy lehetséges permutációja

2 részecskére: $\varphi_\ell(x_1)\varphi_{\ell'}(x_2) + \varphi_\ell(x_2)\varphi_{\ell'}(x_1)$

n_ℓ betöltési szám: ℓ kvantumszám (index)

n_ℓ-szer szerepel Φ-ben

$\{n_\ell\}_{\ell=0}^{\infty}$ meghatározza Φ-t

normálás: $\int dx_1\dots dx_N \left(\sum_\alpha \varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1})\dots\varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N})\right)\cdot$

$$\cdot\left(\sum_{\alpha'}\varphi_{\ell'_1}(x_{\alpha'_1})\dots\varphi_{\ell'_N}(x_{\alpha'_N})\right) =$$

$$= \int dx_1\dots dx_N \left(\sum_{\bar\alpha}\varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1})\dots\varphi_{\ell_N}(x_{\bar\alpha_N})\right)\cdot$$

$$\cdot\left(\varphi_{\ell'_1}(x_1)\dots\varphi_{\ell'_N}(x_N)\right) N!$$

↳ második tagot mindig standard alakra permutáljuk $N!$ db

$$= \begin{cases} = 0 & \text{ha a betöltési számok különböznek} \\ \text{ha a betöltési számok megegyeznek} & n_\ell = n_{\ell'} \end{cases}$$

$$= N! \prod_{\ell=1}^{\infty} n_\ell!$$

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N!\prod_\ell n_\ell!}} \sum_\alpha \varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1})\dots\varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N})$$

$|n_1 \dots n_2 \dots\rangle$ betöltési számok meghatározzák

fermionok:

$$\Phi_{\ell_1 \dots \ell_N}(x_1 \dots x_N) = C \sum_{\alpha} (-1)^{\delta_\alpha} \varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1}) \varphi_{\ell_2}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N}) =$$

$\delta_\ell = \begin{cases} 0 & \text{páros fermion} \\ 1 & \text{páratlan fermion} \end{cases}$

$$= C \begin{vmatrix} \varphi_{\ell_1}(x_1) & \dots & \varphi_{\ell_1}(x_N) \\ \varphi_{\ell_2}(x_1) & \dots & \varphi_{\ell_2}(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{\ell_N}(x_1) & \dots & \varphi_{\ell_N}(x_N) \end{vmatrix}$$ Slater-determináns

egy ℓ index csak egyszer szerepelhet

→ különben a det két sora egyenlő $\Rightarrow = 0$

$\pm$ előjel eredéig meghatározzák az

$\{n_\ell\}_{\ell=1}^{\infty}$ betöltési számok

normálás: $C = \frac{1}{\sqrt{N!}}$

betöltési számok itt is meghatározzák

$|n_1 \dots n_\ell \dots\rangle$

konvenció: előjel egyértelmű lesz

$\ell_1 < \ell_2 < \ell_3 < \dots$

betöltési szám ábrázolás:

N azonos részecske állapottere

bázis $|n_1 \dots n_\ell \dots\rangle$ → bozonok $n_\ell = 0, 1, 2 \dots$

→ fermionok $n_\ell = 0, 1$

$\sum_\ell n_\ell = N$

Fock-tér: bázis $|n_1 \dots n_\ell \dots\rangle$

(nincs megkötés $\sum_\ell n_\ell = N$ -re)

$N = 0, 1, 2, 3 \dots$

↑

vákuum ($n_\ell = 0 \ \forall \ell$)

a Fock-tér az $N = 1, 2, \dots$ állapotterek és a vákuum

direkt összege

Kelt\H{o}- és eltünteto operátorok:

bozonok: $a_\ell |\dots n_\ell \dots\rangle = \sqrt{n_\ell}\,|\dots n_\ell - 1 \dots\rangle$

$a_\ell^+ |\dots n_\ell \dots\rangle = \sqrt{n_\ell + 1}\,|\dots n_\ell + 1 \dots\rangle$

a_ℓ és a_ℓ^+ egymás adjungáltjai

$A^+_{mn} = A^*_{nm}$

$\langle m | A^+ | n \rangle = \langle n | A | m \rangle^*$

$\langle \dots n_\ell - 1 \dots | a_\ell | \dots n_\ell \dots \rangle = \sqrt{n_\ell}$

$\langle \dots n_\ell \dots | a_\ell^+ | \dots n_\ell - 1 \dots \rangle = \sqrt{n_\ell}$

$[a_\ell, a_{\ell'}] = 0 \qquad a_\ell a_{\ell'} |\dots n_\ell \dots n_{\ell'} \dots\rangle =$

$= \sqrt{n_\ell}\sqrt{n_{\ell'}}\,|\dots n_\ell - 1 \dots n_{\ell'} - 1 \dots\rangle$

$[a_\ell, a_{\ell'}^+] = ?$

$\ell \neq \ell' \qquad a_\ell a_{\ell'}^+ |\dots n_\ell \dots n_{\ell'} \dots\rangle = \sqrt{n_\ell}\sqrt{n_{\ell'}+1}\,|\dots n_\ell - 1 \dots n_{\ell'} + 1 \dots\rangle$

$\ell = \ell' \qquad a_\ell a_\ell^+ |\dots n_\ell \dots\rangle = a_\ell \sqrt{n_\ell + 1}\,|\dots n_\ell + 1 \dots\rangle =$

$= \sqrt{n_\ell + 1}\sqrt{n_\ell + 1}\,|\dots n_\ell \dots\rangle = (n_\ell + 1)\,|\dots n_\ell \dots\rangle$

$a_\ell^+ a_\ell |\dots n_\ell \dots\rangle = a_\ell^+ \sqrt{n_\ell}\,|\dots n_\ell - 1 \dots\rangle =$

$= \sqrt{n_\ell}\sqrt{n_\ell}\,|\dots n_\ell \dots\rangle = n_\ell\,|\dots n_\ell \dots\rangle$

$[a_\ell, a_\ell^+] = n_\ell + 1 - n_\ell = 1$

$$\boxed{\begin{aligned} [a_\ell, a_{\ell'}^+] &= \delta_{\ell\ell'} \\ [a_\ell, a_{\ell'}] &= 0 \end{aligned}}$$ bozonokra

fermionok:

$a_\ell |\dots n_\ell \dots\rangle = n_\ell (-1)^{s_\ell}\,|\dots n_\ell - 1 \dots\rangle \qquad s_\ell = \sum_{\ell' < \ell} n_{\ell'}$

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

$\langle \dots n_\ell = 0 \dots | a_\ell | \dots n_\ell = 1 \dots\rangle = (-1)^{s_\ell}$

$\langle \dots n_\ell = 1 \dots | a_\ell^+ | \dots n_\ell = 0 \dots\rangle = (-1)^{s_\ell}$ egymás adjungáltjai

$a_\ell^+ a_\ell \,|\ldots n_\ell \ldots\rangle$ — $n_\ell = 0 \Rightarrow 0$; $n_\ell = 1$

$a_\ell^+ (-1)^{s_\ell} |\ldots n_\ell = 0 \ldots\rangle =$

$= \underbrace{(-1)^{s_\ell}(-1)^{s_\ell}}_{1} |\ldots n_\ell = 1 \ldots\rangle$

$a_\ell^+ a_\ell \,|\ldots n_\ell \ldots\rangle = n_\ell |\ldots n_\ell \ldots\rangle$

$a_\ell a_\ell^+ |\ldots n_\ell \ldots\rangle$ — $n_\ell = 1 \Rightarrow 0$; $n_\ell = 0$

$a_\ell (-1)^{s_\ell} |\ldots n_\ell = 1 \ldots\rangle =$

$= \underbrace{(-1)^{s_\ell}(-1)^{s_\ell}}_{1} |\ldots n_\ell = 0 \ldots\rangle$

$a_\ell a_\ell^+ |\ldots n_\ell \ldots\rangle = (1 - n_\ell) |\ldots n_\ell \ldots\rangle$

$(a_\ell a_\ell^+ + a_\ell^+ a_\ell) |\ldots n_\ell \ldots\rangle = 1 |\ldots n_\ell \ldots\rangle$

$\{a_\ell, a_\ell^+\} = 1$ anticommutator

$\{a_\ell, a_{\ell'}^+\} = 0$ ha $\ell \neq \ell'$

$a_\ell a_{\ell'}^+ |\ldots n_\ell \ldots n_{\ell'} \ldots\rangle =$

$= a_\ell (-1)^{s_{\ell'}} (1 - n_{\ell'}) |\ldots n_\ell \ldots n_{\ell'} + 1 \ldots\rangle =$

$= (-1)^{s_{\ell'}} (1 - n_{\ell'}) (-1)^{s_\ell} n_\ell |\ldots n_\ell - 1 \ldots n_{\ell'} + 1 \ldots\rangle$

$a_{\ell'}^+ a_\ell \,|\ldots n_\ell \ldots n_{\ell'} \ldots\rangle =$

$= a_{\ell'}^+ n_\ell (-1)^{s_\ell} |\ldots n_\ell - 1 \ldots n_{\ell'} \ldots\rangle =$

$= n_\ell (-1)^{s_\ell} (1 - n_{\ell'}) (-1)^{s_{\ell'} - 1} |\ldots n_\ell - 1 \ldots n_{\ell'} + 1 \ldots\rangle$

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

$$\boxed{\begin{aligned} \{a_\ell, a_{\ell'}^+\} &= \delta_{\ell\ell'} \\ \{a_\ell, a_{\ell'}\} &= 0 \end{aligned}}$$ fermioni ETA

Egyrészecske operátorok ábrázolása

$F^{(1)} = \sum_a f(a) = f(1) + f(2) + \dots + f(N)$ szimmetrikus a felcserélésre

pl: kinetikus energia

$$T = t(1) + \dots + t(N) = \frac{p_1^2}{2m} + \dots + \frac{p_N^2}{2m} =$$

koordináta ábrázolás $= \sum_{a=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_a^2}{2m} \right)$

Keltő - eltüntető operátorokkal szeretnénk ábrázolni!

bozonok: $\sum_a f_a \left(C \sum_\alpha \varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1}) \varphi_{\ell_2}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N}) \right) =$

$$= C \sum_\alpha \left(f(x_1) + \dots + f(x_N) \right) \left(\varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1}) \varphi_{\ell_2}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N}) \right) = *$$

$$f(1)\varphi_\ell = \sum_{\ell'} c_{\ell'} \varphi_{\ell'} = \sum_{\ell'} f_{\ell'\ell} \varphi_{\ell'}$$

$$c_{\ell'} = (\varphi_{\ell'}, f(1)\varphi_\ell) = f_{\ell'\ell}$$

$$* = C \sum_\alpha \left\{ \sum_{\ell'} f_{\ell'\ell_1} \varphi_{\ell'}(x_{\alpha_1}) \varphi_{\ell_2}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N}) \right\} +$$

$$+ \sum_{\ell'} f_{\ell'\ell_2} \varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1}) \varphi_{\ell'}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N}) + \dots$$

$$\dots + \sum_{\ell'} f_{\ell'\ell_N} \varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1}) \varphi_{\ell_2}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{\ell'}(x_{\alpha_N}) \Big\}$$

~~antikommutáció~~ nullától különböző mátrixelemek:

$\langle \dots n_\ell + 1 \dots n_{\ell'} + 1 \dots | F^{(1)} | \dots n_\ell \dots n_{\ell'} \dots \rangle$ nemdiagonális

$\langle \dots n_\ell \dots | F^{(1)} | \dots n_\ell \dots \rangle$ diagonális

diagonális mátrixelem

$$\langle \dots n_\ell \dots | F^{(1)} | \dots n_\ell \dots \rangle = \sum_\ell f_{\ell\ell} n_\ell$$

nemdiagonális mátrixelem

$$\langle \dots n_\ell - 1 \dots n_{\ell'} + 1 \dots | F^{(1)} | \dots n_\ell \dots n_{\ell'} \dots \rangle = f_{\ell\ell'} n_\ell \frac{1}{\sqrt{n_\ell}} \sqrt{n_{\ell'} + 1} = f_{\ell\ell'} \sqrt{n_\ell} \sqrt{n_{\ell'} + 1}$$

$\frac{1}{\sqrt{n_\ell - 1}! \sqrt{n_{\ell'} + 1}!}$ $\qquad$ $\frac{1}{\sqrt{n_\ell!} \sqrt{n_{\ell'}!}}$ ← normálási tényező 5)

$\boxed{F^{(1)} = \sum_{\ell\ell'} f_{\ell\ell'} a_\ell^+ a_{\ell'}}$ vagy a mátrixelemet megegyeznek az előbbiekkel

$\langle \dots n_\ell \dots n_{\ell'} \dots | \sum_{\ell\ell'} f_{\ell\ell'} \underbrace{a_\ell^+ a_{\ell'}}_{n_{\ell'}\delta_{\ell\ell'}} | \dots n_\ell \dots n_{\ell'} \dots \rangle = *$

$a_\ell^+ a_{\ell'} | \dots n_{\ell'} \dots n_\ell \dots \rangle = \sqrt{n_{\ell'}}\sqrt{n_\ell + 1}\, | n_\ell + 1 \dots n_{\ell'} - 1 \dots \rangle \qquad \ell \neq \ell'$

$a_\ell^+ a_\ell | \dots n_\ell \dots \rangle = n_\ell | \dots n_\ell \dots \rangle$

$*$ diagonális elem $= \sum_\ell f_{\ell\ell} n_\ell$

$\langle \dots n_\ell - 1 \dots n_{\ell'} + 1 \dots | \sum_{\ell\ell'} f_{\ell\ell'} a_\ell^+ a_{\ell'} | \dots n_\ell \dots n_{\ell'} \dots \rangle = f_{\ell\ell'} \langle \dots \underbrace{n_\ell - 1 \dots n_{\ell'} + 1}_{1} |$

$| \dots n_\ell - 1 \dots n_{\ell'} + 1 \dots \rangle \sqrt{n_{\ell'}}\sqrt{n_\ell + 1} = \sqrt{n_{\ell'}}\sqrt{n_\ell + 1}\, f_{\ell\ell'}$

Kelő - eltüntető operátorokkal kell az egyrészecske operátorokat ábrázolni

fermionok:

$$\left(\sum_\alpha f(\alpha)\right) C \sum_\alpha (-1)^{\delta_\alpha} \varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1}) \varphi_{\ell_2}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N}) =$$

$$= C \sum_\alpha (-1)^{\delta_\alpha} \left\{ \sum_{\ell'} f_{\ell'\ell_1} \varphi_{\ell'}(x_{\alpha_1}) \varphi_{\ell_2}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N}) + \right.$$

$$+ \sum_{\ell'} f_{\ell'\ell_2} \varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1}) \varphi_{\ell'}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{\ell_N}(x_{\alpha_N}) + \dots$$

$$\left. \dots + \sum_{\ell'} f_{\ell'\ell_N} \varphi_{\ell_1}(x_{\alpha_1}) \varphi_{\ell_2}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{\ell'}(x_{\alpha_N}) \right\}$$

nullától különböző (± 1) mátrixelemek

$\langle \dots \dots \dots | F^{(1)} | \dots \dots \dots \rangle =$ diagonális elem $= \sum_\ell f_{\ell\ell} n_\ell$

nemdiagonális elem $= \langle \dots \underbrace{n_{\ell'} - 1}_{\ell'} \dots n_\ell + 1 | F^{(1)} | \dots n_\ell \dots n_{\ell'} \dots \rangle =$

$(\ell < \ell') \qquad = f_{\ell\ell'} n_{\ell'} (1 - n_\ell) \underbrace{(-1)^{S_\ell} (-1)^{S_{\ell'} - 1}}_{\text{determinánsa kvantumszámok rendezéséből előjel}}$

$\boxed{F^{(1)} = \sum_{\ell\ell'} f_{\ell\ell'} a_\ell^+ a_{\ell'}}$

$\langle \dots | F^{(1)} | \dots \rangle = \langle \dots | \sum_{\ell\ell'} f_{\ell\ell'} \underbrace{a_\ell^+ a_{\ell'}}_{\delta_{\ell\ell'} a_\ell^+ a_\ell} | \dots \rangle = \sum_\ell f_{\ell\ell} \langle \dots | a_\ell^+ a_\ell | \dots \rangle =$

$= \sum_\ell f_{\ell\ell} n_\ell$

$$\langle \dots n_\ell - 1 \dots n_{\ell'} + 1 \dots | \sum_{\ell\ell'} f_{\ell\ell'} a_\ell^+ a_{\ell'} | \dots n_\ell \dots n_{\ell'} \dots \rangle =$$

$$= \langle \dots n_\ell - 1 \dots n_{\ell'} + 1 \dots | \sum_{\ell\ell'} f_{\ell\ell'} a_\ell^+ | \dots n_\ell - 1 \dots n_{\ell'} \dots \rangle (-1)^{s_\ell} n_{\ell'} =$$

$$= \langle \dots n_\ell - 1 \dots n_{\ell'} + 1 \dots | f_{\ell\ell'} | \dots n_\ell - 1 \dots n_{\ell'} + 1 \dots \rangle (-1)^{s_\ell} n_{\ell'} (1 - n_\ell)(-1)^{s_{\ell'}-1}$$

fermionokra és bozonokra egységes az írásmód

a különbség az a_ℓ^+, a_ℓ hatása

összefoglalva:

$$F^{(1)} = \sum_a f(a) \Rightarrow \text{Fock-térben}: \; F^{(1)} = \sum_{\ell\ell'} f_{\ell\ell'} a_\ell^+ a_{\ell'}$$

<u>téroperátorok</u>:

$$\varphi_\ell(x) = \varphi_\ell(\underline{r}, s)$$

$$\hat{\Psi}(x) = \hat{\Psi}(\underline{r}, s) = \sum_\ell \varphi_\ell(\underline{r}, s) a_\ell$$

$$\hat{\Psi}^+(x) = \hat{\Psi}^+(\underline{r}, s) = \sum_\ell \varphi_\ell^*(\underline{r}, s) a_\ell^+$$

<u>bozonok</u>:

$$\left[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^+(x')\right] = \left[\left(\sum_\ell \varphi_\ell(x) a_\ell\right), \left(\sum_{\ell'} \varphi_{\ell'}^*(x') a_{\ell'}^+\right)\right] =$$

$$= \sum_{\ell\ell'} \varphi_\ell(x) \varphi_{\ell'}^*(x') \underbrace{[a_\ell, a_{\ell'}^+]}_{\delta_{\ell\ell'}} = \sum_\ell \varphi_\ell(x) \varphi_\ell^*(x') = \delta(x - x')$$

vagyis $\delta(\underline{r} - \underline{r}') \delta_{ss'}$

$$\left[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x')\right] = 0$$

<u>fermionok</u>:

$$\left\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^+(x')\right\} = \delta(\underline{r} - \underline{r}') \delta_{ss'}$$

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

<u>pl.</u> részecskeszám operátora: $N = \sum_\ell a_\ell^+ a_\ell$

$$\langle | N | \rangle = \sum_\ell n_\ell$$

téroperátorokkal

$$a_\ell = \int dx \, \hat{\Psi}(x) \varphi_\ell^*(x) = \sum_s \int d^3r \, \hat{\Psi}(\underline{r}, s) \varphi_\ell^*(\underline{r}, s)$$

$$N = \sum_\ell \int dx \, \hat{\Psi}^+(x) \varphi_\ell(x) \int dx' \, \hat{\Psi}(x') \varphi_\ell^*(x') =$$

$$= \int dx \int dx' \hat{\Psi}^+(x) \hat{\Psi}(x') \sum_\ell \varphi_\ell(x) \varphi_\ell(x') = \int dx \, \hat{\Psi}^+(x) \hat{\Psi}(x)$$

részecskeszámsűrűségoperátora:

$$n(\underline{r}) = \sum_s \hat{\psi}^+(\underline{r},s)\,\hat{\psi}(\underline{r},s)$$

adott spinre

$$n(\underline{r},s) = \hat{\psi}^+(\underline{r},s)\,\hat{\psi}(\underline{r},s)$$

kinetikus energia:

$$T = \sum_\alpha t(\alpha) = \sum_{\ell\ell'} t_{\ell\ell'}\, a_\ell^+ a_{\ell'}$$

$$t_{\ell\ell'} = \sum_s \int d^3r\, \varphi_\ell^*(\underline{r},s)\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\varphi_{\ell'}(\underline{r},s)$$

$$T = \sum_{\ell\ell'} t_{\ell\ell'} \left(\sum_{s_1} \int d^3r_1\, \varphi_\ell^*(\underline{r}_1,s_1)\hat{\psi}^+(\underline{r}_1,s_1) \right) \left(\sum_{s_2} \int d^3r_2\, \varphi_{\ell'}^*(\underline{r}_2,s_2)\hat{\psi}(\underline{r}_2,s_2) \right)$$

$$= \dots = *$$

$$\sum_\ell \varphi_\ell(\underline{r}_1,s)\,\varphi_\ell^*(\underline{r}_2,s_2) = \delta_{s,s_2}\,\delta(\underline{r}-\underline{r}_2)$$

$$\sum_\ell \varphi_\ell^*(\underline{r}_1,s)\,\varphi_\ell(\underline{r}_2,s_1) = \delta_{s,s_1}\,\delta(\underline{r}-\underline{r}_1)$$

$$* = \sum_s \int d^3r\, \hat{\psi}^+(\underline{r},s)\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\hat{\psi}(\underline{r},s)$$

10.06.

Egyrészecske probléma

$$H_1 \varphi_\ell = \varepsilon_\ell \varphi_\ell$$

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

$$N = \sum_\ell a_\ell^+ a_\ell$$

Nagykanonikus sokaság:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H-\mu N)}$$

$$\langle \dots n_\ell \dots | \frac{1}{Z} e^{-\beta(H-\mu N)} | \dots n_\ell \dots \rangle =$$

$$= \frac{1}{Z} e^{-\beta\left(\sum_\ell \varepsilon_\ell n_\ell - \mu \sum_\ell n_\ell\right)} \quad \text{← mátószámsűrűség}$$

állapotösszeg:

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-\mu N)}\right) = \sum_{\{n_\ell\}} e^{-\beta\sum_\ell(\varepsilon_\ell-\mu)n_\ell}$$

$$Z = \sum_{n_A} \dots \sum_{n_\ell} \dots \prod_\ell e^{-\beta(\varepsilon_\ell-\mu)n_\ell} =$$

$$= \prod_\ell \left(\sum_{n_\ell} e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu) n_\ell} \right)$$

<u>bozon</u>: $\sum_{n_\ell=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu) n_\ell} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu)}}$

$e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu)} < 1$

nőgáz: energiaskálát $\varepsilon_0 := 0$

$e^{-\beta\varepsilon_\ell} e^{\beta\mu} \leq e^{\beta\mu} < 1 \Rightarrow \mu < 0$

<u>fermion</u>: $\sum_{n_\ell=0}^{1} e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu) n_\ell} = 1 + e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu)}$

Termodinamikai potenciál:

$$\Phi = -k_B T \ln Z = -k_B T \sum_\ell \mp \ln\left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu)}\right) =$$

$$= \pm k_B T \sum_\ell \ln\left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu)}\right)$$

felül → bozon

alul → fermion

$$\bar{n}_\ell = \langle a_\ell^+ a_\ell \rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H - \mu N)} a_\ell^+ a_\ell\right) = *$$

$$H - \mu N = \sum_\ell (\varepsilon_\ell - \mu) a_\ell^+ a_\ell$$

$$* = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left(a_\ell e^{-\beta(H - \mu N)} a_\ell^+\right) = *$$

$$a_\ell e^{-\beta \sum_{\ell'} (\varepsilon_{\ell'} - \mu) a_{\ell'}^+ a_{\ell'}} = e^{-\beta \sum_{\ell'} (\varepsilon_{\ell'} - \mu) a_{\ell'}^+ a_{\ell'}} \cdot a_\ell e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu)}$$

tömören ellenőrizhető, hogy a bázisállapotokon ugyanúgy hatnak

$e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu)}$ → kompenzáló tag, mert a jobb oldalon $a_\ell^+ a_\ell$ az $n_\ell - 1$ sajátértéket veszi föl

$$* = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H - \mu N)} \underbrace{a_\ell a_\ell^+}_{1 \pm a_\ell^+ a_\ell}\right) e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu)} =$$

$= \left(1 \pm \langle a_\ell^+ a_\ell \rangle\right) e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu)}$

algebrai egyenlet $\langle a_\ell^+ a_\ell \rangle$ -re

$$\bar{n}_\ell = \langle a_\ell^+ a_\ell \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\ell - \mu)} \pm 1}$$

általános módszer: az utolsó operátort elöre permutáljuk az állításban, majd egyesével hátravisszük

$$E = \langle H \rangle = \sum_\ell \varepsilon_\ell \langle a_\ell^+ a_\ell \rangle = \sum_\ell \varepsilon_\ell \bar{n}_\ell$$

$$N = \sum_\ell \bar{n}_\ell$$

$$d\Phi = -S dT - p dV - N d\mu$$

termodinamikai határeset: ε_ℓ energiaszintek sürüsödnek



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

↑ egyre sürüsödő állapotsürüség

$$\sum_\ell \ldots = \int d\varepsilon D(\varepsilon) \ldots$$

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

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

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

állapotsürüség független a határfeltételektől

periodikus határfeltételek, L élü dobozba zárt gáz

$\ell \to$ index: $\underline{k} = \frac{\underline{p}}{\hbar}$, σ $\quad \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \underline{k} \underline{r}} \chi_\sigma(s)$

$\varepsilon_\ell \to$ energia: $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$

ε-nál kisebb energiájú állapotok száma:

$$\sum_\sigma \sum_{\underline{k}} 1 = (2s+1) \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k$$

$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} < \varepsilon\right)$ $\qquad$ $\left(\frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m} < \varepsilon\right)$ $\qquad$ $k < \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\varepsilon}$

$$\varepsilon_x = \frac{2\pi}{L} n_x \qquad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

1D: $\quad d\varepsilon_x \longleftrightarrow \frac{2\pi}{L}$ on the ε_x axis

$$\frac{d\varepsilon_x}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{L}{2\pi} d\varepsilon_x$$

3D: $$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d\varepsilon_x\, d\varepsilon_y\, d\varepsilon_z = \frac{V}{(2\pi)^3} d\vec{\varepsilon}^3 \qquad V = L^3$$

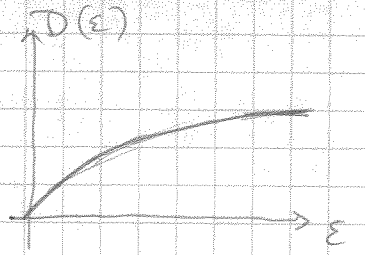
$$\Omega(\varepsilon) = (2s+1)\frac{V}{(2\pi)^3}\,\frac{4\pi}{3}\,\frac{(2m\varepsilon)^{3/2}}{\hbar^3} =$$

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

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

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

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



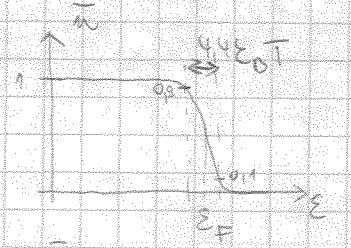
klassikus határeset:

$$\bar{n}_\varepsilon = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \mp 1} \simeq e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu} \ll 1$$

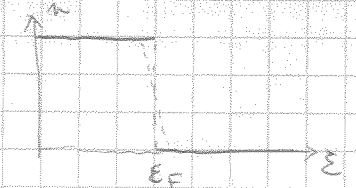
$$e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \gg 1$$

fermionok

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



$T = 0 \qquad \mu = \varepsilon_F > 0$



Bethe - Sommerfeld -

sorfejtés:

$$I = \int_0^\infty F(\varepsilon)\,\bar{n}(\varepsilon)\,d\varepsilon = \int_0^\mu F(\varepsilon)\,d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(\xi_D T)^2 F'(\mu) +$$

$$+ \vartheta((\xi_D T)^4) \qquad \text{aszimptotikus sor}$$

$$N = \int_0^{\mu} d\varepsilon\, D(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 D'(\mu) + \dots \Big\} \ominus$$

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, D(\varepsilon)$$

$$0 = \int_{\varepsilon_F}^{\mu} d\varepsilon\, D(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 D'(\mu)$$

$\int_{\varepsilon_F}^{\mu} d\varepsilon\, D(\varepsilon) \approx (\mu - \varepsilon_F) D(\varepsilon_F)$; $D'(\mu) \approx D'(\varepsilon_F)$

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

$$E = \int_0^{\infty} d\varepsilon\, D(\varepsilon)\,\varepsilon\,\bar{n}(\varepsilon) = \int_0^{\mu} d\varepsilon\, D(\varepsilon)\,\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \left(D(\mu) + \mu D'(\mu)\right) = *$$

$\mu \approx \varepsilon_F$

$$\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, D(\varepsilon)\,\varepsilon + \int_{\varepsilon_F}^{\mu} d\varepsilon\, D(\varepsilon)\,\varepsilon$$

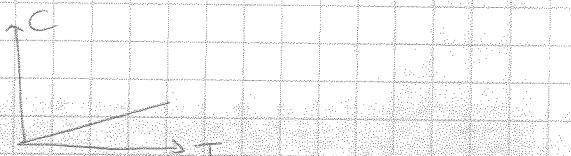
alapállapoti energia

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

$$* = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)\,\varepsilon\, d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 D(\varepsilon_F)$$

$$C = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{\pi^2}{3}(k_B T) D(\varepsilon_F) k_B$$

hőkapacitás ideális fermiongázra alacsony hőmérsékleten lineáris



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

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

$$D(\varepsilon_F) = \frac{3}{2} \frac{N}{\varepsilon_F}$$

$$C = \frac{\pi^2}{2} N \frac{k_B T}{\varepsilon_F} k_B$$

bozonok: Bose-kondenzáció

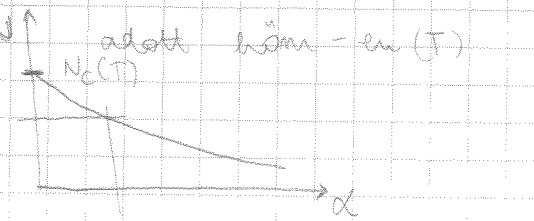
$$N = V A \int_0^{\infty} d\varepsilon \sqrt{\varepsilon} \frac{1}{e^{+\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} = V A (k_B T)^{3/2} \int_0^{\infty} dx \frac{\sqrt{x}}{e^{x+\alpha} - 1}$$

$\beta\varepsilon = x \quad -\beta\mu = \alpha > 0$

α monoton csökkenő f.-e

$\alpha = 0$ -nál véges

$\int_0^{\infty} dx \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} < \infty$



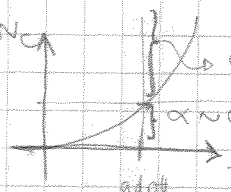
$\alpha \ll 1$ $\quad N_0 = \frac{1}{e^{\beta\mu} - 1} = \frac{1}{e^{\alpha} - 1} \approx \frac{1}{\alpha}$

$\varepsilon_0 = 0$ energiájú részecskék száma

$N_0 \sim \Theta(N)$

$\alpha \sim \vartheta\left(\frac{1}{N}\right) \rightarrow \alpha = 0$ (termodinamikai határesetben)

$N_c(T) = VA(\xi_3 T)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1}$



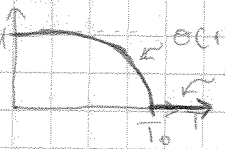
→ makroszkopikus betöltöttség

ugyanúgy rögzített részecskeszámnál T_0 kritikus hőm.

N adott $\quad N = N_c(T_0) = VA(\xi_3 T_0)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1}$

$T < T_0 \quad N = N_0 + N_c(T) = N_0 + \underbrace{N_c(T_0)}_{N}\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}$

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



(pl: ^{87}Rb 1e $\frac{1}{2}$ spin, mag. $\frac{3}{2}$ spin
$\frac{N}{V} \approx 10^{12-14}/cm^3$ mágneses csapda teljes spin 1,2
$T_0 \approx 200\,nK - 2\,\mu K$)

Elemi gerjesztések (kvázirészecskék)

kondenzált anyag, alacsony hőmérsékleten

spektrum $E = \sum_i \varepsilon_i n_i$

hipotetikus ideális kvantumgáz

nem rögzíthető az elemi gerjesztések száma

$N = \sum_i n_i$ nem marad meg

⇒ nincs kémiai potenciál → formálisan $\mu = 0$

rácsrezgések:

l-ik atom: r_l, p_l

$\mathcal{H} = \sum_{l=1}^{N} \frac{p_l^2}{2m_l} + U(\underline{r}_1, \ldots \underline{r}_l, \ldots \underline{r}_N)$

$\underline{r}_l = \underline{R}_l + \underline{u}_l \quad \{\underline{R}_l\}$ U pot. minimum helye

$$\mathcal{H} = \sum_{\ell=1}^{N} \frac{\underline{p}_\ell^2}{2m_\ell} + U(\underline{R}_1, \dots, \underline{R}_N) + \frac{1}{2} \sum \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\ell\alpha} \partial u_{\ell'\alpha'}} u_{\ell\alpha} u_{\ell'\alpha'} +$$

tömbös atom

$+$ anharmonikus tagok

$\Rightarrow$ harmonikus közelítés

$$\underline{P}_\ell = \frac{\underline{p}_\ell}{\sqrt{m_\ell}} \qquad q_{\ell\alpha} = \sqrt{m_\ell}\, u_{\ell\alpha}$$

$$\mathcal{H} = \sum_{\ell=1}^{N} \frac{\underline{P}_\ell^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\ell\alpha,\ell'\alpha'} D_{\ell\alpha,\ell'\alpha'} q_{\ell\alpha} q_{\ell'\alpha'} + \underbrace{U(\underline{R}_1 \dots \underline{R}_N)}_{U_0}$$

$$D_{\ell\alpha,\ell'\alpha'} = \frac{1}{\sqrt{m_\ell m_{\ell'}}} \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\ell\alpha} \partial u_{\ell'\alpha'}}$$

szimmetrikus pozitív definit

diagonalizálás után $\rightarrow \omega^2$ sajátértékek

$$\mathcal{H} = U_0 + \sum_{m=1}^{3N} \left(\frac{\overline{\Pi}_m^2}{2} + \frac{1}{2} \omega_m^2 Q_m^2 \right)$$

6 sajátérték zérus $\rightarrow$ 3 transzlációs
$\rightarrow$ 3 forgatási

rezgési módusok ($\omega_m^2 \neq 0$) $3N-6$ db

lineáris oszcillátorok rendszere

$$E = \sum_{m=1}^{3N-6} \hbar\omega_m \left(n_m + \frac{1}{2} \right) + U_0 \qquad n_m = 0, 1, 2 \dots$$

$$= E_0 + \sum_m \hbar\omega_m n_m \qquad E_0 = U_0 + \sum_m \hbar\omega_m \frac{1}{2}$$

hipotetikus ideális gáz $\rightarrow$ fonon

$\hbar\omega_m$ lehetséges fononenergiák

n_m betöltési szám

harmonikus közelítés addig működik, amíg a betöltési számok nem túl nagyok

$$\left\langle \frac{1}{2} \omega_m^2 Q_m^2 \right\rangle = \frac{E}{2} = \frac{\hbar\omega_m}{2} \left(n_m + \frac{1}{2} \right)$$

emissziós abszorbciós operátorok

$$Q_m = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_m}} \left(a_m + a_m^+ \right)$$

$$\overline{\Pi}_m = i \sqrt{\frac{\hbar\omega_m}{2}} \left(a_m^+ - a_m \right)$$

$[a_m, a_{m'}^+] = \delta_{mm'}$ $\Rightarrow$ Bose-gáz

$\mathcal{H} = \sum_m \hbar\omega_m \left(a_m^+ a_m + \frac{1}{2} \right) + U_0$

$Z = \sum_{\{n_m\}} e^{-\beta E_0} e^{-\beta \sum_m \hbar\omega_m n_m} =$

$= e^{-\beta E_0} \prod_m \underbrace{\left(\sum_{n_m=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega_m n_m} \right)}_{\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega_m}}}$

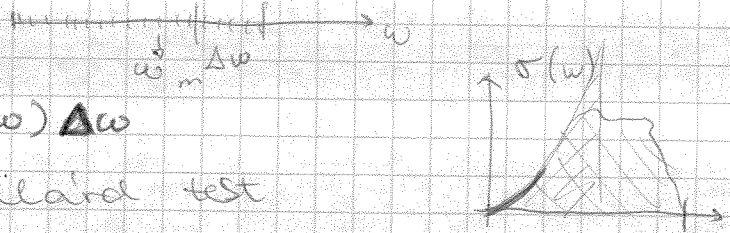
$F = -k_B T \ln Z = E_0 + k_B T \sum_m \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_m}\right)$

$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = E_0 + \sum_m \frac{\hbar\omega_m}{e^{\beta\hbar\omega_m} - 1}$

$\bar{n}_m = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_m} - 1}$

$\langle a_m^+ a_m \rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\left(E_0 + \sum_{m'} \hbar\omega_{m'} a_{m'}^+ a_{m'}\right)} a_m^+ a_m \right) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_m} - 1}$

fonon-állapotsűrűség ($\sigma(\omega)$)



$\sigma(\omega)\,\Delta\omega$

szilárd test

$\sim \omega^2$-től indul $\Rightarrow$ hanghullámok

pl. izotróp hanghullám: $\omega = ck$

$\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} \int 4\pi k^2 \, dk = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int \frac{\omega^2 d\omega}{c^3}$

ha $k_B T \gg \hbar\omega_{max}$, akkor $e^{\beta\hbar\omega} \approx 1 + \beta\hbar\omega + \dots$

$\bar{n}_m \approx \frac{1}{\beta\hbar\omega_m}$

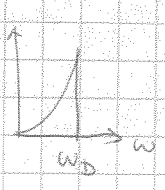
$E = E_0 + \sum_m \frac{\hbar\omega_m}{\beta\hbar\omega_m} = E_0 + k_B T\,(3N - \cancel{6})$

ekvipartíció, Dulong-Petit szabály

$T \to 0$ esetén Debye-törvénye:

$\int_0^{\infty} \sigma(\omega)\, d\omega = 3N$

$$g(\omega) = \begin{cases} \frac{9N}{\omega_D^3}\omega^2 & \omega < \omega_D \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$



$$\frac{9N}{\omega_D^3}\int_0^{\omega_D} d\omega\,\omega^2 = 3N \rightarrow \omega_D \text{ definíciója}$$

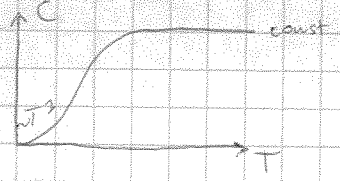
$$E = E_0 + \int_0^{\omega_D} d\omega\,\frac{9N}{\omega_D^3}\omega^2\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} = \qquad \beta\hbar\omega = \eta$$

$$= E_0 + \frac{(k_B T)^4}{\hbar^3}\frac{9N}{\omega_D^3}\int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{k_B T}} d\eta\,\frac{\eta^3}{e^\eta - 1}$$

határát $\rightarrow \infty$ $\qquad \int \rightarrow$ véges

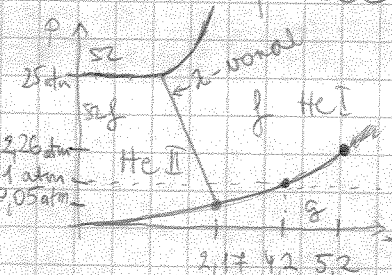
$$T \rightarrow 0 \quad E - E_0 = \frac{9N}{(\hbar\omega_D)^3}(k_B T)^4\int_0^\infty d\eta\,\frac{\eta^3}{e^\eta - 1}$$

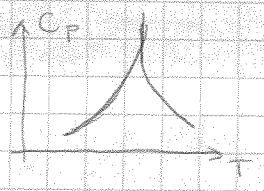
$$C = \frac{\partial E}{\partial T} \sim T^3$$



^{4}He folyadék, szuperfolyékonyság

2n 2p 2e



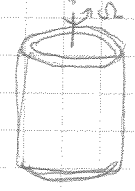


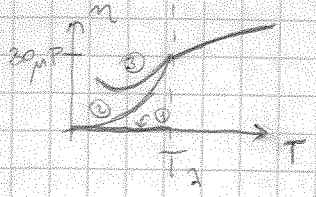
szuperfolyékonyság

- viszkozitás mérése:

① kapillárisi ——— Hagen-Poisseuille-tv.

②  torziós szál és korong rezgése csillapításából $\rightarrow \eta$

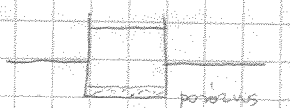
③  forgatónyomaték mérése $\rightarrow \eta$



Poise 1 g/cms (víz 0,01 P)

mérési módszertől függ η

- termodinamikai hatás



$\frac{\Delta p}{\Delta T} = 10 \frac{He\ cm}{mK}$ (2K)

szökőkutat lehet csinálni

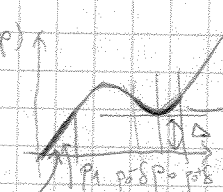
hőmérséklet terjedés: hullámforma (második hang)

- elemi gerjesztések

mérése neutron szórással



$\varepsilon(p) = \frac{p_n^2}{2m_n} - \frac{p_n'^2}{2m_n}$, $p = p_n - p_n'$ kinthagyott ε, p



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

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

$\frac{p_0}{\hbar} = 1,9 \cdot 10^8 \frac{1}{cm}$

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

fonon $\varepsilon(p) = up$ → hanghullámok → sűrűségingadozás

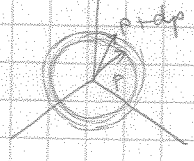
u = hangsebesség ~ 239 $\frac{m}{s}$

legalacsonyabb energiájú gerjesztések

roton → nagyon nagy állapotsűrűség

ahol min v. max a diszp.-rel

ott az állapotsűrűség szingulláris



$\frac{V}{h^3} 4\pi p^2 dp$

$dp = \left|\frac{dp}{d\varepsilon}\right| d\varepsilon$ $\quad \frac{d\varepsilon}{dp} = \frac{p-p_0}{m^*} \sim (\varepsilon - \Delta)^{1/2}$

$k_B \sim \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \Delta}}$

$E = \sum_p \varepsilon(p) \bar{n}(p) \rightarrow \frac{V}{h^3} \int d^3p\, \varepsilon(p)\, \bar{n}(p) + E_0$

$+E_0$

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

$$F = E_0 + k_B T \frac{V}{h^3} \int d^3p \ln\left(1 - e^{-\beta\varepsilon(p)}\right)$$

– hőkapacitás, fajhő:

$$E = E_0 + E_f + E_r$$

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} \qquad C = T\frac{\partial S}{\partial T} \qquad S = -\frac{\partial F}{\partial T}$$

fonon gáz:

$$E_f = \frac{V}{h^3} \int_{(p<p_1)} d^3p \frac{up}{e^{\beta up} - 1} = \frac{V}{h^3} 4\pi \int_0^{p_1} dp\, p^2 \frac{up}{e^{\beta up} - 1} = \frac{V}{h^3} 4\pi \int_0^{\beta u p_1} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \frac{(k_B T)^4}{u^3}$$

$\beta up = x$

$\beta up_1 \to \infty$ véges, ha $T \to 0$

$$E_f = \frac{V}{h^3} 4\pi \frac{(k_B T)^4}{u^3} \underbrace{\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1}}_{\frac{6T^4}{90} = \zeta(4)\Gamma(4)}$$

$$= \frac{V}{h^3} \frac{\pi^2}{30} \frac{(k_B T)^4}{u^3}$$

$$C_f = \frac{V}{h^3} \frac{2\pi^2}{15} \frac{(k_B T)^3}{u^3} k_B$$

fajhő $\qquad c_f = \frac{C_f}{N m_{4He}}$

rotон gáz:

$$F_r = \frac{V}{h^3} \int d^3p \ln\left(1 - e^{-\beta\varepsilon(p)}\right) k_B T \qquad \varepsilon(p) = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2m^*}$$

$$\bar{n}(p) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(p))} - 1} \simeq e^{-\beta\varepsilon(p)} \quad \text{(klasszikus)}$$

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

$$F_r = -\frac{V}{h^3} k_B T \int d^3p\, e^{-\beta\varepsilon(p)} = -k_B T N_r$$

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

$p \approx p_0$, éles Gauss

$$\frac{m^* k_B T}{p_0^2} = 3{,}6 \cdot 10^{-3} \quad \text{ha } T = 1\,K$$

$$\frac{\sqrt{m^* k_B T}}{p_0} = 0{,}06$$

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

$$= \frac{V}{h^3} 4\pi p_0^2 \sqrt{2m^*\pi k_B T}\, e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}$$

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

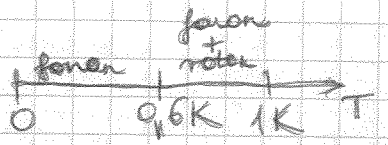
$$= -k_B N_r \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{k_B T} \right)$$

$$C_r = T \frac{\partial S_r}{\partial T} = k_B N_r \left[\frac{3}{4} + \frac{\Delta}{k_B T} + \left(\frac{\Delta}{k_B T} \right)^2 \right]$$ exponenciálisan csökkenő $(T \to 0)$

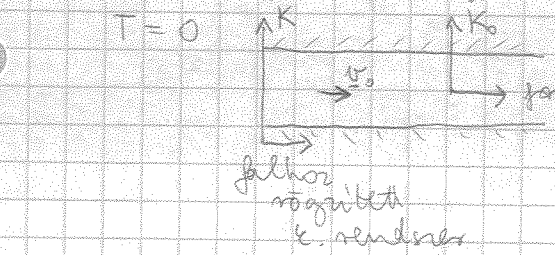
$$e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \frac{\sqrt{T}}{T^2}$$

$$C = C_f + C_r$$

$$\sim T^3 \quad \sim e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}$$



- szuperfolyékonyság feltétele (Landau):



K_0-ban folyadék impulzusban

elemi gerjesztések $\varepsilon(p)$ ismert

K-ba Galilei-transzformáció K_0-ban

$$\underline{P}_0 = \sum_i m_i \underline{v}_i \qquad E_0 = \sum_i m_i \frac{\underline{v}_i^2}{2}$$

K-ban $\underline{P} = \sum_i m_i (\underline{v}_0 + \underline{v}_i) = M \underline{v}_0 + \underline{P}_0$

↑ K_0 sebessége

$$E = \sum_i m_i \frac{(\underline{v}_0 + \underline{v}_i)^2}{2} = \sum_i m_i \frac{v_0^2}{2} + \sum_i m_i (\underline{v}_i \underline{v}_0) + E_0 =$$

$$= M \frac{v_0^2}{2} + \underline{P}_0 \underline{v}_0 + E_0$$

K_0-ban elemi gerjesztések

$E_0 = \varepsilon(p)$

$P_0 = p$

K-ban

$$E = M \frac{v_0^2}{2} + \underbrace{\underline{p}\underline{v} + \varepsilon(p)}$$

elemi gerj. nélkül — elemi gerj. energiája K-ban

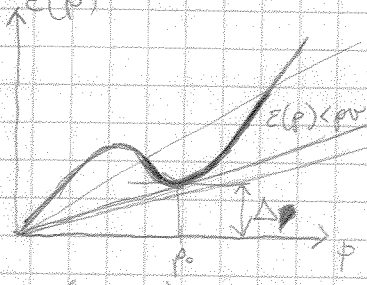
nem szuperfolyékony, ha $\underline{p}\underline{v} + \varepsilon(p) < 0$ lehetséges

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

legkedvezőbb $\xrightarrow{\quad} v$

$\xleftarrow{F}$ $\quad \varepsilon(p) < pv$

ha van p, hogy $\varepsilon(p) < pv$, akkor nem szuperfolyékony



$\min_p \left(\frac{\varepsilon(p)}{p} \right) < v \Rightarrow$ nem szuperfolyékony

határsebesség becslése: $v_c \simeq \frac{\Delta}{p_0} \approx 60 \frac{m}{s}$

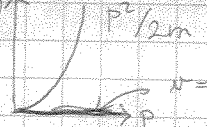
mérésekből v_c függ a kapilláris átmenőjétől (d)

$v_c \sim \frac{1}{d^4}$

makroszkópikus gerjesztéseket = örvénygyűrűk nem voltak figyelembe véve

$d = 10^{-6}$ cm $\Rightarrow v_c \simeq 30 \frac{cm}{s}$

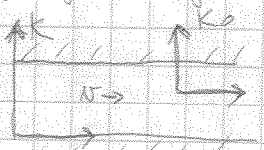
ideális Bose-gázban nincs szuperfolyékonyság



$v = 0$ a határsebesség

Fermi-folyadékban sem lehet szuperfolyékonyság általában

- szuperfolyékonyság feltétele teljesül $T \neq 0$



elemi gerjesztések egyensúlyban vannak a fallal (K-ban)

elemi gerjesztések impulzusa K_0-ban

$$P_0 = \frac{V}{h^3} \int d^3p \; p \, \bar{n} \left(\varepsilon(p) + pv \right)$$

$$\bar{n} \left(\varepsilon(p) + pv \right) = \bar{n} \left(\varepsilon(p) \right) + \frac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon} (pv) + \dots$$

$$P_0 = \underbrace{\frac{V}{h^3} \int d^3p \; p \bar{n}(\varepsilon(p))}_{=0} + \frac{V}{h^3} \int d^3p \; \underbrace{p (pv) \frac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon}}_{\neq 0}$$

$$\int d^3p \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} (p_z v) \frac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon} = \quad x, y \text{ komponens } 0$$

$$\underline{P}_0 = \frac{V}{h^3} \underline{v} \int d^3p \, p_z^2 \frac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon} = \underline{v} \frac{V}{h^3} \int dp \, p^2 \int d\Omega \; p^2 \cos^2\vartheta \frac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon}$$

$\int d\Omega = \frac{4\pi}{3}$

$$= \underline{v} \frac{V}{h^3} \underbrace{\int dp \, p^4 \frac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon}}_{<0} \frac{4\pi}{3} = -\underline{v} V \varrho_n$$

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

$$\underline{P} = \underbrace{M\underline{v}}_{\varrho V} + \underbrace{\underline{P}_0}_{-\varrho_n V \underline{v}} = \underbrace{(\varrho - \varrho_n)}_{\varrho_s} V \underline{v} = \varrho_s V \underline{v}$$

olyan mintha 2 komponensű folyadék lenne

- szuperfolyékony: sűrűsége $\varrho_s = \varrho - \varrho_n$
- normál ϱ_n

(munkahipotézis)

11.03.

- ϱ_n hőmérséklet függése $T \to 0$ esetben:

elegendő a fonon adj járuléka rtt is mert a rotonok járuléka exponenciálisan lecseng

$$\varrho_{nf} = -\frac{4\pi}{3h^3} \int_0^{p_1} dp \, p^4 \left(-\frac{e^{\beta\varepsilon}}{(e^{\beta\varepsilon} - 1)^2} \right) \beta$$

$\varepsilon = up$

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

$x = \beta u p$ új változó

$$\varrho_{nf} = \frac{4\pi}{3h^3} \int_0^{\beta u p_1 \to \infty} dx \, \frac{1}{\beta^4 u^5} x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} =$$

$$= \frac{4\pi}{3h^3} \underbrace{\left(\frac{1}{\beta}\right)^4}_{\sim T^4} \frac{1}{u^5} \int_0^\infty dx \, \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}$$

$\varrho_{nf} \sim T^4$ $\qquad \varrho_{nr} \sim e^{-\frac{\Delta}{kT}}$

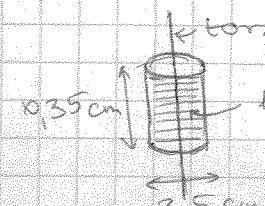
- a normál komponens egyensúlyba kerül a fallal

viszkózus disszipáció karakterisztikus ideje: $\frac{d^2}{\nu}$

$\nu = \frac{\eta}{\rho}$ dinamikai viszkozitás

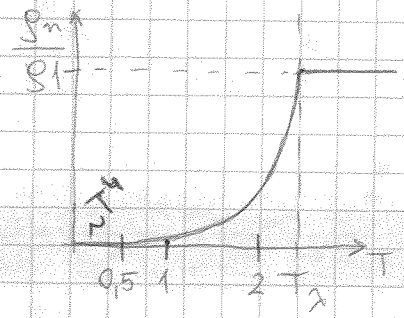
$\longleftrightarrow d$

Andronikasvili (1946)



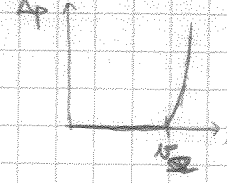
vastagság 0,0013 cm
távolság 0,021 cm $\Rightarrow$ idő $\ll \frac{1}{\omega}$

rezonanciafrekvenciából $\rightarrow$ normál komponens sűrűsége meghatározható



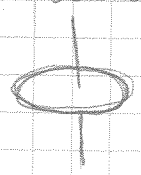
- kétfolyadék képpel magyarázható, hogy a különböző viszkozitás méréseket miért adtak különböző eredményt

① kapilláris, Hagen-Poiseuille törvény



csak a szuperfolyékony komponens áramlik át

② torziós szál



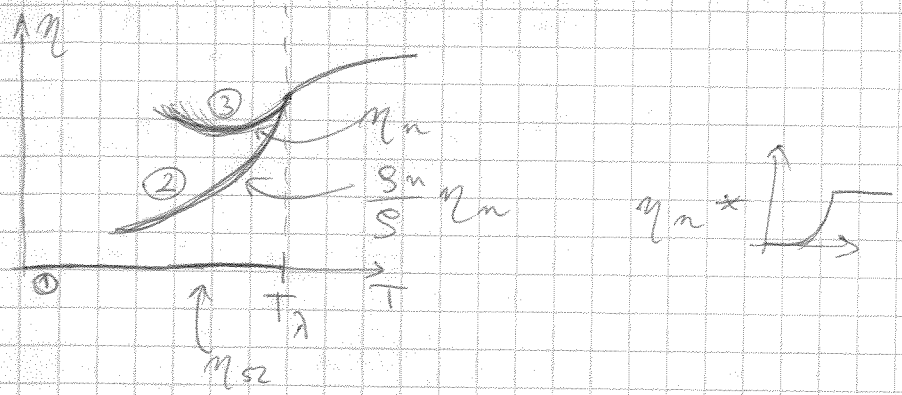
hidrodinamika $\Rightarrow$ csillapítás $\sim \sqrt{\rho \eta}$

normálkomponens együtt mozog

csillapítás $\sim \sqrt{\rho_n \eta_n} = \sqrt{\rho \left(\frac{\rho_n}{\rho} \eta_n\right)}$

ezt mérték

③ $\omega\Omega$ R_1 R_2 $\quad M = 4\pi\eta\Omega \frac{R_1^2 R_2^2}{R_1^2 - R_2^2} \rightarrow \eta_n$



- első hang: kompressziós hullámot (adiabatikus)

$u_1^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_S$ $\quad \rightarrow v_s$ $\quad \rightarrow v_n$ $\quad v_s = v_n$

második hang: entrópia (hőm.) hullámot

$\leftarrow v_s$ $\quad \rightarrow v_n$ de anyagáramsűrűség = 0

$\rho_n v_n + \rho_s v_s = 0$

hullám formában terjed a hő

$T = 0 \quad u_1 = 239 \frac{m}{s} \qquad u_2 \approx \frac{u_1}{3}$

↑ erősen hőmérséklet függő

- perzisztens áramlás

relaxációs idő $> 10^6$ s (normál folyadékhoz képest 11 nagyságrenddel nagyobb)

- sok jelenség magyarázható a kétfolyadék képpel
- itt is lejátszódik kondenzáció

erősen kölcsönható rendszer → nem lehet mindenki $p = 0$ -ban, de 8-10 % $p = 0$ állapotban van $T \neq 0$ hőm-en

v sebességű folyadékban $e^{\frac{i}{\hbar} m v x}$

$e^{i\varphi(x)} \approx e^{i[\varphi(x_0) + \nabla\varphi(x - x_0)]}$

$\frac{mv}{\hbar} = \nabla\varphi(x)$

↳ áramlása a szuperfolyadéknak komponensnek önveszteség

$\Gamma = \oint \underline{v}\, d\underline{s} = \begin{cases} 0, & \text{ha egyszeresen összefüggő tartomány} \\ \text{nem } 0 & \text{mindenféle esetben} \end{cases}$

Γ kvantált $\rightarrow$ kvantált örvényfonalak jönnek létre szuperfolyékony folyadékban

Kölcsönhatás operátorok:

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{a a' \\ (a \neq a')}} f(a, a')$$

pl.: $\frac{1}{2} \sum_{aa'} v(\underline{r}_a \underline{r}_{a'})$

Fock-térben: $F^{(2)} = \underbrace{f_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4}}_{\rightarrow} a^+_{\ell_1} a^+_{\ell_2} a_{\ell_4} a_{\ell_3}$

$$\langle \ell_1 \ell_2 | f | \ell_3 \ell_4 \rangle =$$

$$\int\int dx_1' dx_2' \varphi^*_{\ell_1}(x_1') \varphi^*_{\ell_2}(x_2') \int\int dx_1 dx_2 \underbrace{f(x_1', x_2', x_1, x_2)}\, \varphi_{\ell_3}(x_1) \varphi_{\ell_1}(x_2)$$

párkölcsönhatás spinfüggetlen $v(\underline{r}_1 - \underline{r}_2)$

szabad részecskék, periodikus határfeltételekkel

kvantumszámuk: $\underline{\xi}, \sigma$

$$\varphi_{\underline{\xi}\sigma}(\underline{r}, \underline{s}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \underline{\xi} \underline{r}} \chi_\sigma(\underline{s})$$

$$\langle \xi_1 \sigma_1, \xi_2 \sigma_2 | \underline{v}(\underline{r}_1 - \underline{r}_2) | \xi_1' \sigma_1', \xi_2' \sigma_2' \rangle =$$

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

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

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

$\underline{r} = \underline{r}_1 - \underline{r}_2$ (relatív) $\qquad \underline{R} = (\underline{r}_1 + \underline{r}_2) \frac{1}{2}$ (TKP)

Jacobi-determináns: $x = x_1 - x_2$, $X = (x_1 + x_2) \frac{1}{2}$

$$\begin{vmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1 & -1 \end{vmatrix} = -1$$

$$d^3 r_1 d^3 r_2 = 1 \cdot d^3 R\, d^3 r$$

behelyettesít $\quad \underline{x}_1 = \underline{R} + \frac{\underline{r}}{2} \quad , \quad \underline{x}_2 = \underline{R} - \frac{\underline{r}}{2}$

$$\frac{1}{V^2} \int d^3R \int d^3r \; v(\underline{r}) \, e^{-i\left(\underline{\xi}_1 + \underline{\xi}_2 - \underline{\xi}_1' - \underline{\xi}_2'\right)\underline{R}} \; e^{-i\left(\underline{\xi}_1 - \underline{\xi}_2 - \underline{\xi}_1' + \underline{\xi}_2'\right)\frac{\underline{r}}{2}} = *$$

$$\int d^3R \; e^{-i\left(\underline{\xi}_1 + \underline{\xi}_2 - \underline{\xi}_1' - \underline{\xi}_2'\right)\underline{R}} = \begin{cases} V, & \underline{\xi}_1 + \underline{\xi}_2 = \underline{\xi}_1' + \underline{\xi}_2' \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases} = V \delta\left(\underline{\xi}_1 + \underline{\xi}_2 - \underline{\xi}_1 - \underline{\xi}_2'\right)$$

$$\underline{\xi}_1 = \underline{\xi}_1' + \underline{q} \qquad \underline{\xi}_1 - \underline{\xi}_2 - \underline{\xi}_1' + \underline{\xi}_2' =$$

$$\underline{\xi}_2 = \underline{\xi}_2' - \underline{q} \qquad = \underline{\xi}_1' + \underline{q} - \underline{\xi}_2' + \underline{q} - \underline{\xi}_1' + \underline{\xi}_2' = 2\underline{q}$$

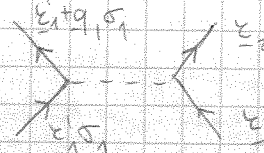
$$* = \frac{1}{V} \delta_{\underline{\xi}_1 + \underline{\xi}_2, \underline{\xi}_1' + \underline{\xi}_2'} \underbrace{\int d^3r \; v(\underline{r}) \, e^{-i\underline{q}\underline{r}}}_{v(\underline{q})}$$

$$\langle \underline{\xi}_1 \sigma_1 \, \underline{\xi}_2 \sigma_2 \, | \, v(\underline{r}_1 - \underline{r}_2) \, | \, \underline{\xi}_1' \sigma_1' \, \underline{\xi}_2' \sigma_2' \rangle =$$

$$= \delta_{\sigma_1 \sigma_1'} \delta_{\sigma_2 \sigma_2'} \delta_{\underline{\xi}_1 + \underline{\xi}_2, \underline{\xi}_1' + \underline{\xi}_2'} \frac{1}{V} v(\underline{q})$$

$$\frac{1}{2} \sum_{\underline{\xi}_1 \underline{\xi}_2 \underline{\xi}_1' \underline{\xi}_2'} \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_1' \sigma_2'} \langle \underline{\xi}_1 \sigma_1 \, \underline{\xi}_2 \sigma_2 \, | \, v \, | \, \underline{\xi}_1' \sigma_1' \, \underline{\xi}_2' \sigma_2' \rangle \, a^+_{\underline{\xi}_1 \sigma_1} \, a_{\underline{\xi}_2 \sigma_2}^+ \, a_{\underline{\xi}_2' \sigma_2'} \, a_{\underline{\xi}_1' \sigma_1'} =$$

$$= \frac{1}{2V} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\underline{\xi}_1 \underline{\xi}_2} v(\underline{q}) \, a^+_{\underline{\xi}_1 + \underline{q}, \sigma_1} \, a^+_{\underline{\xi}_2 - \underline{q}, \sigma_2} \, a_{\underline{\xi}_2 \sigma_2} \, a_{\underline{\xi}_1 \sigma_1}$$



Perturbációszámítás

klassziku statisztika:

fázistér + eloszlásfüggvény
↳ $\frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z}$

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

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H}$
≈ perturbáció

$e^{-\beta\mathcal{H}} = e^{-\beta\mathcal{H}_0} e^{-\beta\delta\mathcal{H}} = e^{-\beta\mathcal{H}_0}(1 - \beta\delta\mathcal{H} + \dots)$

$Z = \int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}_0} - \beta \int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}_0}\delta\mathcal{H} + \dots = Z_0(1 - \beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0 + \dots)$

$Z_0 \frac{1}{Z_0}\int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}_0}\delta\mathcal{H}$

$\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0$

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

$\ln(1+x) \approx x$, ha $x \ll 1$

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

kvantumrendszer:

$\varrho = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z}$

(nagykanonikus sokaság $\varrho = \frac{e^{-\beta K}}{Z}$ $K = \mathcal{H} - \mu N$)

$e^{-\beta\mathcal{H}} = e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H})} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^\ell}{\ell!}(\mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H})^\ell =$

$\mathcal{H}_0$ és $\delta\mathcal{H}$ általában nem felcserélhető

$= 1 - \beta(\mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H}) + \frac{1}{2}\beta^2(\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}_0\delta\mathcal{H} + \delta\mathcal{H}\mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H}^2) + \dots$
$+ \frac{1}{\ell!}(-\beta)^\ell(\mathcal{H}_0^\ell + \underbrace{\delta\mathcal{H}\mathcal{H}_0^{\ell-1} + \mathcal{H}_0\delta\mathcal{H}\mathcal{H}_0^{\ell-2} + \dots + \mathcal{H}_0^{\ell-1}\delta\mathcal{H}}_{\text{lineáris tag}} + \dots)$
↑ magasabb rendű tagok

$Z = \mathrm{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}}) = \mathrm{Tr}\left(\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{(-\beta)^\ell}{\ell!}\mathcal{H}_0^\ell\right) -$

↳ spurképzésben ciklikusan cserélhető

$\underbrace{\mathrm{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}_0})}$

$-\beta\,\mathrm{Tr}\left(\sum_{\ell=1}^{\infty}\frac{(-\beta)^\ell}{\ell!}\delta\mathcal{H}\mathcal{H}_0^{\ell-1}\right)$

$\ell' = \ell - 1$

$-\beta\,\mathrm{Tr}\left(\delta\mathcal{H}\sum_{\ell'=0}^{\infty}\frac{(-\beta)^{\ell'}}{\ell'!}\mathcal{H}_0^{\ell'}\right)$

$$Z = Z_0 - \beta \frac{1}{Z_0} \mathrm{Tr}(\delta\mathcal{H} e^{-\beta\mathcal{H}_0}) Z_0 + \dots =$$
$$= Z_0 (1 - \beta \langle \delta\mathcal{H} \rangle_0 + \dots)$$
$$F = F_0 + \langle \delta\mathcal{H}_0 \rangle_0$$

másodrendben már nem lehet ezt a módszert folytatni

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

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} = \mathcal{H}_0 e^{\beta\mathcal{H}_0} e^{-\beta\mathcal{H}} + e^{\beta\mathcal{H}_0}(-\mathcal{H}) e^{-\beta\mathcal{H}} =$$
$$= e^{\beta\mathcal{H}_0} \underbrace{(\mathcal{H}_0 - \mathcal{H})}_{-\delta\mathcal{H}} e^{-\beta\mathcal{H}} =$$
$$= -e^{\beta\mathcal{H}_0} \delta\mathcal{H} e^{-\beta\mathcal{H}} \underbrace{e^{\beta\mathcal{H}_0} e^{-\beta\mathcal{H}}}_{S(\beta)}$$

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} = - \underbrace{e^{\beta\mathcal{H}_0} \delta\mathcal{H} e^{-\beta\mathcal{H}_0}}_{\delta\mathcal{H}(\beta)} S(\beta)$$

$$\left(A(\beta) = e^{\beta\mathcal{H}_0} A e^{-\beta\mathcal{H}_0} \right) \qquad S(\beta \to 0) = 1$$

$$\underbrace{\int_0^\beta \frac{\partial S(\tau)}{\partial \tau} d\tau}_{S(\beta) - S(0)} = - \int_0^\beta \delta\mathcal{H}(\tau) S(\tau) d\tau$$

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

ha $\delta\mathcal{H} = 0$ $\quad S(\beta) = 1$ $\quad$ iteráljuk

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

ez az első rend

elsőrendben: $e^{\beta\mathcal{H}} = e^{-\beta\mathcal{H}_0} \left(1 - \int_0^\beta d\tau\, \delta\mathcal{H}(\tau)\right)$

és mostmár lehet folytatni az integrálokkal

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}}\right) = \underbrace{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}\right)}_{\text{első rend}} - \int_0^\beta \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0} \delta\mathcal{H}(\tau)\right) d\tau$$
$$\underbrace{\qquad\qquad}_{Z_0}$$

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

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

fizikai mennyiség várható értéke:

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

$Z_0 = \mathrm{Tr}\,e^{-\beta\mathcal{H}_0}$

$$= \frac{\frac{1}{Z_0}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}B\right) - \frac{1}{Z_0}\int_0^\beta d\tau\,\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}\delta\mathcal{H}(\tau)B\right)+\dots}{\frac{1}{Z_0}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}\right) - \frac{1}{Z_0}\int_0^\beta d\tau\,\underbrace{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}\delta\mathcal{H}(\tau)\right)}_{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}_0}\delta\mathcal{H}\right)}+\dots} =$$

$-\beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0$

$$\langle B\rangle \overset{\text{első rendig}}{\uparrow} \frac{\langle B\rangle_0 - \int_0^\beta d\tau\langle\delta\mathcal{H}(\tau)B\rangle_0}{1-\beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0} = \qquad \frac{1}{1-x}\approx 1+x$$

$$\left[\langle B\rangle \cong \langle B\rangle_0 - \int_0^\beta d\tau\langle\delta\mathcal{H}(\tau)B\rangle_0 + \beta\langle B\rangle_0\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0\right] - \text{~~másodrendig~~}$$

gyakran $\delta\mathcal{H}$ alakja: $\delta\mathcal{H} = -Af$ ← paraméter

fizikai mennyiség

(f-ben lineáris rendig számolunk) pl. - polarizációs és d.térerősség
- mágnesezettség és mágneses térerősség

f-re adott lineáris választ lehet számolni

lineáris válasz:

$\delta\mathcal{H} = -Af$ (visszahatást nem vesszük figyelembe)

↑ klassz. a külső tér

$$\langle B\rangle - \langle B_0\rangle = \int_0^\beta d\tau\,\langle A(\tau)B\rangle f - \beta\langle A\rangle_0\langle B\rangle_0 f =$$

$$= \int_0^\beta d\tau\left[\langle A(\tau)B\rangle_0 - \langle A\rangle_0\langle B\rangle_0\right]f =$$

$$= \int_0^\beta d\tau\,\underbrace{\left\langle\left(A(\tau)-\langle A\rangle_0\right)\left(B-\langle B\rangle_0\right)\right\rangle_0}_{\chi_{BA}} f$$

$$\langle B\rangle - \langle B_0\rangle = \chi_{BA} f$$

$$\chi_{BA} = \int_0^\beta d\tau\left\langle\left(A(\tau)-\langle A\rangle_0\right)\left(B-\langle B\rangle_0\right)\right\rangle_0$$ lineáris válaszfv (statikus, izoterm) (szuszceptibilitás)

$$\langle\delta B\rangle = \int_0^\beta d\tau\,\langle\delta A(\tau)\delta B\rangle_0 f$$

$$\chi_{AB} = \int_0^\beta d\tau \langle \delta B(\tau)\, \delta A \rangle_0 = \chi_{BA}$$

szuszceptibilitás mátrix szimmetrikus

$[A, \mathcal{H}_0] = 0$ A megmaradó v. $[B, \mathcal{H}_0] = 0$ B megmaradó mennyiség esetén.

v. $[A, \mathcal{H}_0] \neq 0$ $A(\tau) = e^{\tau \mathcal{H}_0} A e^{-\tau \mathcal{H}_0} = A$ felcserélés

$$\chi_{BA} = \int_0^\beta d\tau \langle \delta A \delta B \rangle_0 = \beta \langle \delta A \delta B \rangle_0 = \frac{\langle \delta A \delta B \rangle}{\varepsilon_B T}$$

Korreláció fv. $\langle \delta A \delta B \rangle_0$

fluktuáció-válasz tétel: $\chi_{BA} = \frac{\langle \delta A \delta B \rangle_0}{\varepsilon_B T} = \frac{\langle \delta B \delta A \rangle_0}{\varepsilon_B T}$

alkalmazás:

rácsszerkezet, párkölcsönhatás (spinfüggetlen), fermionok

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

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

$$\langle a^+_{k+q,\sigma} a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma} \rangle_0 = ?$$

$$\langle \dots \rangle_0 = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0} \dots\right)$$

$$K_0 = \mathcal{H}_0 - \mu N = \sum_{k\sigma} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu\right) a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}$$

$a^+ a^+ a a$

$$\langle a^+_i a^+_j a_\ell a_\ell \rangle_0 = \langle a^+_i a_\ell \rangle \langle a^+_j a_\ell \rangle \overset{\text{boson}\to}{\underset{\text{fermion}\to}{\pm}} \langle a^+_i a_\ell \rangle \langle a^+_j a_\ell \rangle = \delta_{il} \bar{n}_i \delta_{j\ell} \bar{n}_j \pm \delta_{i\ell} \bar{n}_i \delta_{jl} \bar{n}_j$$

$$? = \underbrace{\delta_{k',k+q}}_{\delta_{q0}} \bar{n}_{k\sigma} \underbrace{\delta_{k',k-q}}_{\delta_{q0}} \bar{n}_{k\sigma'} - \delta_{k',k+q} \delta_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{k\sigma} \delta_{k,k'-q} \delta_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{k\sigma} =$$

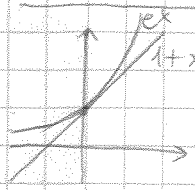
$$= \delta_{q0} \bar{n}_{k\sigma} \bar{n}_{k\sigma'} - \delta_{k',k+q} \delta_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{k\sigma} \bar{n}_{k\sigma}$$

$$\langle \delta \mathcal{H}_0 \rangle_0 = \underbrace{\frac{1}{2V} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{kk'} v(0) \bar{n}_{k\sigma} n_{k'\sigma'}}_{\frac{1}{2V} v(0) \sum_{k\sigma} \bar{n}_{k\sigma} \sum_{k'\sigma'} \bar{n}_{k'\sigma'}} - \frac{1}{2V} \sum_\sigma \sum_{kq} v(q) \bar{n}_{k\sigma} \bar{n}_{k+q,\sigma}$$

$$\left[\langle \delta \mathcal{H} \rangle_0 = \underbrace{\frac{1}{2V} v(0) N^2}_{N \quad N} - \frac{1}{2V} \sum_{kq} \sum_\sigma v(q) \bar{n}_{k\sigma} \bar{n}_{k+q,\sigma}\right]$$

$$\bar{n}_{\varepsilon\sigma} = \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu\right)} + 1}$$

Variációs elv



$e^x \geq 1 + x$

$(= \Leftrightarrow x = 0)$

x valószínűségi változó $\quad \langle e^x \rangle \geq 1 + \langle x \rangle$

$$e^{-\lambda\Phi} = e^{-\lambda\langle\Phi\rangle} e^{-\lambda(\Phi - \langle\Phi\rangle)} \geq e^{-\lambda\langle\Phi\rangle} \left(1 - \lambda(\Phi - \langle\Phi\rangle)\right)$$

Φ valószínűségi változó

$\langle \Phi - \langle\Phi\rangle \rangle = 0$

$$\boxed{\langle e^{-\lambda\Phi} \rangle \geq e^{-\lambda\langle\Phi\rangle}}$$

→ klassszikus statisztikus fizikában

ϱ tetszőleges eloszlás, $\int \varrho(\Gamma)\, d\Gamma = 1$ normált

$$e^{-\beta F} = Z = \int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}} \frac{\varrho}{\varrho} e^{-\ln\varrho} = \int d\Gamma\, \varrho\, e^{-(\beta\mathcal{H} + \ln\varrho)} \geq e^{-\beta\langle\mathcal{H}\rangle_\varrho - \langle\ln\varrho\rangle_\varrho}$$

$$\beta F \leq \beta\langle\mathcal{H}\rangle_\varrho + \langle\ln\varrho\rangle_\varrho$$

$$F \leq \langle\mathcal{H}\rangle_\varrho + k_B T\langle\ln\varrho\rangle_\varrho$$

$$\langle\mathcal{H}\rangle_\varrho = \int d\Gamma(\mathcal{H}\varrho)$$

$$-k_B\langle\ln\varrho\rangle_\varrho = -k_B \int d\Gamma\, \varrho\ln\varrho = S_\varrho \quad \text{(információs entrópia)}$$

$$F \leq \langle\mathcal{H}\rangle_\varrho - TS_\varrho$$

(=) ha $\beta\mathcal{H} + \ln\varrho = \ln C$

$$\varrho = Ce^{-\beta\mathcal{H}} \xrightarrow{C = \text{const}} \text{kanonikus eloszlás}$$

elfajulás, hogy eloszlásból - ből osztályokból választjuk ki a legjobbat

→ kvantummechanikai rendszer

A: fizikai mennyiség operátora

$|n\rangle$: tetszőleges állapot

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

$A|p\rangle = a_p|p\rangle$ sajátállapotok a_p sajáterték

$\langle p|A|p\rangle = a_p$

$$\langle n|e^{-\lambda A}|n\rangle = \sum_{pp'}\langle n|p\rangle\underbrace{\langle p|e^{-\lambda A}|p'\rangle}_{\delta_{pp'}e^{-\lambda a_p}}\langle p'|n\rangle = \sum_p |\langle n|p\rangle|^2 e^{-\lambda a_p} \cdot$$

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

$$= e^{-\lambda\langle n|A|n\rangle}\sum_p |\langle n|p\rangle|^2 e^{-\lambda a_p + \lambda\langle n|A|n\rangle} \geq \sum_p |\langle n|p\rangle|^2 (1 - \lambda a_p + \lambda\langle n|A|n\rangle)$$

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

$\sum_p |\langle n|p\rangle|^2 = 1$ (elővételsz.) ↗ alkalmazás

$$= \Big(1 - \lambda\underbrace{\sum_p \langle n|p\rangle a_p \langle p|n\rangle}_{\lambda\langle n|A|n\rangle} + \lambda\langle n|A|n\rangle\Big) e^{-\lambda\langle n|A|n\rangle} =$$

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

$e^{-\beta F} = Z = \mathrm{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}})$

ρ = tetszőleges sűrűségoperátor, de $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$

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

$$\mathrm{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}}) = \sum_n \langle n|e^{-\beta\mathcal{H}}|n\rangle \geq \sum_n e^{-\beta\langle n|\mathcal{H}|n\rangle}\rho_n e^{-\ln\rho_n} \geq$$

$$\geq \exp\Big\{-\beta\sum_n \rho_n\langle n|\mathcal{H}|n\rangle - \sum_n \rho_n \ln\rho_n\Big\}$$

$$F \leq \sum_n \rho_n\langle n|\mathcal{H}|n\rangle + k_B T\sum_n \rho_n \ln\rho_n =$$

$$= \mathrm{Tr}(\rho\mathcal{H}) + k_B T\,\mathrm{Tr}(\rho\ln\rho) =$$

$$= \langle\mathcal{H}\rangle_\rho - TS_\rho \qquad S_\rho = -k_B\mathrm{Tr}(\rho\ln\rho) = -k_B\sum_n \rho_n\ln\rho_n$$

Kölcsönható Fermi-gáz: $s = \frac{1}{2}$

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

V térfogatú edény, periodikus határfeltételek



legjobb független részecske közp.:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu N)} \qquad \hat{\mathcal{H}} = \sum_{q\sigma} \varepsilon_{q\sigma} a^+_{q\sigma} a_{q\sigma}$$

$$\left(\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_{\hat{\rho}} - T S_{\hat{\rho}} = \min \right)$$ kanonikus sorozásjegyzet lemma)

$$\bar{n}_{q\sigma} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{q\sigma} - \mu)} + 1} \qquad \mathcal{Z} = \mathrm{Tr}\, \tilde{\rho} = \prod_{q\sigma} \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_{q\sigma} - \mu)}\right)$$

$$\tilde{\Phi} = -k_B T \ln \mathcal{Z} = -k_B T \sum_{q\sigma} \ln\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_{q\sigma} - \mu)}\right)$$

$$S_{\tilde{\rho}} = -\frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial T} = -k_B \sum_{q\sigma} \left(\bar{n}_{q\sigma} \ln \bar{n}_{q\sigma} + (1 - \bar{n}_{q\sigma}) \ln(1 - \bar{n}_{q\sigma}) \right)$$

$\langle \mathcal{H} \rangle_{\tilde{\rho}} = ?$

$\langle a^+_{q\sigma} a_{q\sigma} \rangle = \bar{n}_{q\sigma}$ $\qquad \langle a^+_{k+q,\sigma} a^+_{\xi-q,\xi'} a_{\xi\sigma} a_{\xi\sigma} \rangle_{\tilde{\rho}} = \delta_{q,0} \bar{n}_{\xi\sigma} \bar{n}_{\xi'\sigma'} -$

$$- \delta_{\xi+q,\xi'} \bar{n}_{\xi\sigma} \bar{n}_{\xi\sigma} \delta_{\sigma,\sigma'}$$

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{\tilde{\rho}} - T S_{\tilde{\rho}} = \sum_{q\sigma} \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \bar{n}_{q\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\xi\xi'} v(q=0) \bar{n}_{\xi\sigma} \bar{n}_{\xi'\sigma'} +$$

$$\left(-\mu\right) \sum_{\xi\sigma} \bar{n}_{\xi\sigma} \qquad - \frac{1}{2V} \sum_{\xi\xi'} \sum_{\sigma} v(q = \xi' - \xi)\, \bar{n}_{\xi\sigma} \bar{n}_{\xi\sigma} +$$

$$+ k_B T \sum_{q\sigma} \left(\bar{n}_{q\sigma} \ln \bar{n}_{q\sigma} + (1 \mp \bar{n}_{q\sigma}) \ln(1 \mp \bar{n}_{q\sigma}) \right)$$

ennek

kell a minimumát keresni, ez $\bar{n}_{q\sigma}$-t fogja helyettesíteni F helyett Φ a potenciál tehát $\tilde{\mathcal{H}}$ helyett $\tilde{\mathcal{H}} - \mu N = \tilde{K}$

$$\left(\langle \mathcal{H} - \mu N \rangle_{\tilde{\rho}} - T S_{\tilde{\rho}} = \min. \right)$$ nagykanonikus sorozásjegyzet

$$\langle \mathcal{H} - \mu N \rangle_{\tilde{\rho}} - T S_{\tilde{\rho}} = \sum_{q\sigma} \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \mu \right) \bar{n}_{q\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\xi\xi'} v(0)\, \bar{n}_{\xi\sigma} \bar{n}_{\xi\sigma'} -$$

$$- \frac{1}{2V} \sum_{\xi\xi'} \sum_{\sigma} v(\xi - \xi')\, \bar{n}_{\xi\sigma} \bar{n}_{\xi\sigma} + k_B T \sum_{q\sigma} \left[\bar{n}_{q\sigma} \ln \bar{n}_{q\sigma} + (1 - \bar{n}_{q\sigma}) \ln(1 - \bar{n}_{q\sigma}) \right]$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial \bar{n}_{q\sigma}} \left[\langle \mathcal{H} - \mu N \rangle_S - T S_S \right] = \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \mu \right) + \frac{v(0)}{V} \sum_{\xi\sigma'} \bar{n}_{\xi\sigma'} - \frac{1}{V} \sum_{\xi'} v(q-\xi') \bar{n}_{\xi'\sigma} +$$

$$+ k_B T \left(\ln \bar{n}_{q\sigma} + 1 - \ln(1-\bar{n}_{q\sigma}) - 1 \right) \qquad \frac{e^{\beta(\varepsilon_{q\sigma}-\mu)}}{e^{\beta(\varepsilon_{q\sigma}-\mu)}+1}$$

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

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

$$\bar{n}_{\xi\sigma} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}+1} \Rightarrow \text{implicit egyenlet}$$

Ezt önkonzisztens megoldás $\varepsilon_{\xi\sigma}$-ra

Hartree-Fock közelítés

① Hartree-tag (direkt tag): 1 részecske potenciális energiája a többi átlagos terében

$$\int v(r-r') n(r') d^3r' = \frac{N}{V} \int v(r-r') d^3r' = v(0) \frac{N}{V}$$

egyenletes eloszlás ↑ $v(0)$ Fourier komponense

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

② Fock-tag (kicserélődési tag): kvantumos effektus azonos részecskék megkülönböztethetetlensége

energia várható értéke

$$\langle \mathcal{H} \rangle_S = \sum_{\xi\sigma} \frac{\hbar^2 \xi^2}{2m} \bar{n}_{\xi\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\xi\xi'\sigma\sigma'} v(0) \bar{n}_{\xi\sigma} \bar{n}_{\xi'\sigma'} - \frac{1}{2V} \sum_{\xi\xi'\sigma} v(\xi-\xi') \bar{n}_{\xi\sigma} \bar{n}_{\xi'\sigma}$$

nem a Hartree-Fock energiát összege → $\frac{1}{2}$ faktorok

alkalmazás:

$v(r) = u\,\delta(r)$ kontakt potenciál → nagyon nagy hatótávú taszító ($u>0$) potenciál

$= \frac{4\pi\hbar^2}{m} a\,\delta(r)$ ↑ szórási hossz (Born közelítésben a szórási h. $2m, 4\pi a^2$)

$$v(q) = u = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a \qquad \sum_{k\sigma} \bar{n}_{k\sigma} = N_\sigma$$

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

$\frac{1}{2}$ spinű $N = N_\sigma + N_{-\sigma}$

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle_S = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \bar{n}_{k\sigma} + \frac{u}{2} \frac{N^2}{V} - \frac{u}{2V} \sum_\sigma N_\sigma^2$$

$$\frac{v(0)}{2V} \left(\sum_{k\sigma} \bar{n}_{k\sigma} \right)^2 - \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk' \\ \sigma}} v(k-k') \bar{n}_{k\sigma} \bar{n}_{k'\sigma}$$

magneses tér nélkül $\bar{n}_{k\sigma} = \bar{n}_{k-\sigma} \Rightarrow N_\sigma = N_{-\sigma} = \frac{N}{2}$

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

$$E = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \bar{n}_{k\sigma} + \underbrace{\frac{u}{2} \frac{N^2}{V} - \frac{u}{2V} 2 \left(\frac{N}{2} \right)^2}_{\frac{u}{4} \frac{N^2}{V}}$$

11.23.

$T = 0$ határeset

$$N_\sigma = N_{-\sigma} = \frac{N}{2} \qquad \varepsilon_{k\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{uN}{2V}$$

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

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \frac{uN}{2V} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \frac{u}{2} \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{a k_F^3}{3\pi^2} =$$

$$\frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \qquad u = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a$$

$$= \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \left[1 + \frac{4}{3\pi} k_F a \right]$$

$k_F a \ll 1$ kis paraméter a problémánál

→ vagyis kis sűrűség $\left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \sim k_F$

→ vékony gyenge sávos

$$E = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k<k_F} d^3k \, \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{u}{4} \frac{N^2}{V}$$

$$\underbrace{2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{k_F} dk \, k^2 \, 4\pi k^2}$$

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \frac{4\pi\hbar^2}{m} a \frac{N}{4V} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \left(\frac{3}{5} + \frac{2}{3\pi} k_F a \right)$$

Plazma • Hartree-Fock közelítésben

Q_+ és Q_- töltésű részecskék

N_+ és N_- db

semlegesség: $N_+ Q_+ + N_- Q_- = 0$

legjobb független részecske modell

$f(\underline{r}_1^+, \underline{r}_i^+, \dots, \underline{r}_1^-, \dots \underline{r}_j^-, \dots)$

$e^{-\beta H} = e^{-\beta K} \; e^{-\beta U}$

$$K = \sum_\alpha \frac{p_\alpha^2}{2m} \qquad U(\underline{r}_1 \dots, \underline{r}_\alpha, \dots, \underline{r}_N)$$

$$Z_{conf} = \int d^3 r_1 \dots d^3 r_N \, e^{-\beta U}$$

$$F_{conf} = -k_B T \ln Z_{conf}$$

$\beta \to 0$ esetben $Z_{conf} = V^N$

$$f(\dots) = \prod_{i=1}^{N_+} \varrho_+(\underline{r}_i^+) \prod_{j=1}^{N_-} \varrho_-(\underline{r}_j^-)$$

$$n_+(\underline{r}) = \sum_{i=1}^{N_+} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i^+)$$

$$\bar{n}_+(\underline{r}) = \sum_{i=1}^{N_+} \varrho_+(\underline{r}) = N_+ \varrho_+(\underline{r})$$

$$\varrho_+(\underline{r}) = \frac{\bar{n}_+(\underline{r})}{N_+} \qquad \varrho_-(\underline{r}) = \frac{\bar{n}_-(\underline{r})}{N_-}$$

$$\varrho_a = Q_+ \bar{n}_+(\underline{r}) + Q_- \bar{n}_-(\underline{r})$$

$$F_\varrho = \frac{1}{2} \int d^3 r \, d^3 r' \, \varrho_a(\underline{r}) u(\underline{r} - \underline{r}') \varrho_a(\underline{r}') + \int d^3 r \, \varrho_a(\underline{r}) \Phi_{ext}(\underline{r}) - T S_{mf}$$

↑ Coulomb ↑ külső pot.

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{Q^2}{|\underline{r}_i^+ - \underline{r}_j^+|} = \frac{1}{2} \int d^3 r \, d^3 r' \Big(\underbrace{\sum_i \delta(\underline{r} - \underline{r}_i^+)}_{n_+(\underline{r})} \Big) \Big(\underbrace{\sum_j \delta(\underline{r}' - \underline{r}_j^+)}_{n_+(\underline{r}')} \Big) \frac{Q_+^2}{|\underline{r} - \underline{r}'|}$$

$$u(\underline{r} - \underline{r}') = \frac{1}{|\underline{r} - \underline{r}'|}$$

$$-TS_{mf} = k_B T \, N_+ \int d^3 r \, \frac{\bar{n}_+(\underline{r})}{N_+} \ln \frac{\bar{n}_+(\underline{r})}{N_+} + k_B T N \int d^3 r \, \frac{\bar{n}_-(\underline{r})}{N_-} \ln \frac{\bar{n}_-(\underline{r})}{N_-}$$

$$S_{ind} = -k_B \sum_i p_i \ln p_i$$

$F_g - \mu_+ N_+ - \mu_- N_- = \min$

$\bar{n}_+(\underline{r}) \to \bar{n}_+(\underline{r}) + \delta\bar{n}_+(\underline{r})$ variáljuk

$$\delta F = \int d^3r\, d^3r'\; Q_+ \delta\bar{n}_+(\underline{r})\, u(\underline{r}-\underline{r}')\, \rho_Q(\underline{r}') + \int d^3r\, Q_+ \delta\bar{n}_+(\underline{r})\, \phi_{ext}(\underline{r}) +$$
$$+ k_B T N_+ \int d^3r \left(\frac{\delta\bar{n}_+(\underline{r})}{N_+} \ln \frac{\bar{n}_+(\underline{r})}{N_+} + \frac{\delta\bar{n}_+}{N_+} \right) - \mu_+ \int d^3r\, \delta\bar{n}_+(\underline{r}) = 0$$

↑ tetszőleges $\delta\bar{n}_+(\underline{r})$

$$\int d^3r \Big[\underbrace{\int d^3r'\, Q_+ u(\underline{r}-\underline{r}')\, \rho_Q(\underline{r}') + Q_+ \phi_{ext}(\underline{r}) + k_B T \ln \frac{\bar{n}_+(\underline{r})}{N_+} + k_B T - \mu_+}_{=0} \Big] \delta\bar{n}_+(\underline{r}) = 0$$

$$\phi(\underline{r}) = \phi_{ext}(\underline{r}) + \int d^3r\, u(\underline{r}-\underline{r})\, \rho_Q(\underline{r}')$$

$$Q_+ \phi(\underline{r}) + k_B T \ln \left(\frac{\bar{n}_+(\underline{r})}{N_+} \right) = \mu_+ - k_B T = k_B T \ln C$$

$$\frac{\bar{n}_+(\underline{r})}{N_+} = C\, e^{-\frac{Q_+ \phi(\underline{r})}{k_B T}}$$

$$\frac{1}{C} = \int d^3r\, e^{-\frac{Q_+ \phi(\underline{r})}{k_B T}} = Z_+$$

$$\frac{\bar{n}_\pm(\underline{r})}{N_\pm} = \frac{1}{Z_\pm} e^{-\frac{Q_\pm \phi(\underline{r})}{k_B T}}$$

önkonzisztens megoldás

triviális m.o: $\phi_{ext} = 0$

$$\bar{n}_+(\underline{r}) = \frac{N_+}{V} \qquad \bar{n}_-(\underline{r}) = \frac{N_-}{V}$$

$$\rho_Q = Q_+ \frac{N_+}{V} + Q_- \frac{N_-}{V} = 0$$

$$\phi(\underline{r}) = 0$$

egyenge külső potenciál: ϕ_{ext} – ben lineáris rendű m.o.

$$\frac{\bar{n}_+(\underline{r})}{N_+} = \frac{1}{Z_+} e^{-\frac{Q_+ \phi(\underline{r})}{k_B T}} = \frac{1 - \frac{Q_+ \phi(\underline{r})}{k_B T}}{\int d^3r \left(1 - \frac{Q_+ \phi(\underline{r})}{k_B T}\right)}$$

$$\to V - \underbrace{\int d^3r\, \frac{Q_+ \phi(\underline{r})}{k_B T}}_{\text{termodinamikai határesetben } \sqrt{} \text{ mellett elhanyagolható}}$$

$$\bar{n}_+(x) = \frac{N_+}{V} - \frac{N_+}{V}\frac{1}{k_B T} Q_+ \Phi(x)$$

$$\delta\bar{n}_+(x) = -\beta \frac{N_+ Q_+}{V} \Phi(x)$$

$$\delta\bar{n}_-(x) = -\beta \frac{N_- Q_-}{V} \Phi(x)$$

$$\rho_Q = Q_+ \delta\bar{n}_+(x) + Q_- \delta\bar{n}_-(x) =$$

$$= -\beta \underbrace{\left(\frac{N_+ Q_+^2}{V} + \frac{N_- Q_-^2}{V}\right)}_{\frac{\varkappa^2}{4\pi}} \Phi(x)$$

$$\rho_Q = -\frac{\varkappa^2}{4\pi}\Phi(x)$$

$$-\frac{4\pi}{\varkappa^2}\rho_Q(x) = \Phi_{ext}(x) + \int d^3x' u(x-x')\rho_Q(x')$$

lineáris $\Rightarrow$ Fourier

$$-\frac{4\pi}{\varkappa^2}\rho_Q(q) = \Phi_{ext}(q) + u(q)\rho_Q(q)$$

$$\rho_Q(q) = \frac{1}{u(q) + \frac{4\pi}{\varkappa^2}}\left(-\Phi_{ext}(q)\right)$$

$$u(x) = \frac{1}{|x|} \rightsquigarrow u(q) = ?$$

$$\bar{u}(x) = \frac{e^{-\alpha r}}{r} \rightsquigarrow \frac{4\pi}{\alpha^2 + q^2} \xrightarrow{\alpha \to 0} u(q) = \frac{4\pi}{q^2}$$

$$\rho_Q(q) = -\frac{1}{\frac{4\pi}{q^2} + \frac{4\pi}{\varkappa}}\left(-\Phi_{ext}(q)\right) = \frac{\varkappa^2}{4\pi}\frac{q^2}{q^2+\varkappa^2}\left(-\Phi_{ext}(q)\right)$$

$$\Phi_{ext}(x) = \frac{Q_0}{r} \rightsquigarrow \Phi_{ext}(q) = \frac{4\pi}{q^2} Q_0$$

$$\Phi(q) = -\frac{4\pi}{\varkappa^2}\rho(q) = +\frac{4\pi}{\varkappa^2}\frac{\varkappa^2}{4\pi}\frac{q^2}{q^2+\varkappa^2}\left(+\frac{4\pi}{q^2}Q_0\right) =$$

$$= \frac{4\pi Q_0}{q^2+\varkappa^2}$$

Külső ponttöltés által keltett potenciálból a plazmában Yukawa-potenciál $\Rightarrow$ leárnyékolás

$$\Phi(r) = \frac{e^{-\varkappa r}}{r} Q_0$$

$$\rho_Q = -\frac{\varkappa^2}{4\pi}\frac{e^{-\varkappa r}}{r} Q_0$$

$$\int d^3r\, \rho_Q(r) = -\frac{\varkappa^2}{4\pi} Q_0 \int_0^\infty dr\, 4\pi r^2 \frac{e^{-\varkappa r}}{r} =$$

$$= -\varkappa^2 Q_0 \underbrace{\int_0^\infty r e^{-\varkappa r}}_{\frac{1}{\varkappa^2}} = -Q_0$$

STATISZTIKUS FIZIKA

plazma állapotegyenlete: $p = ?$

$e^{-\beta K}$ $e^{-\beta U}$

$Z = Z_{kin} \, Z_{konf}$

$Z_{konf} = \int d^3 r_1 \dots d^3 r_N \, e^{-\beta U}$

$p = -\frac{\partial F}{\partial V} = \xi_B T \frac{\partial \ln Z_{konf}}{\partial V}$

$F_S = \frac{1}{2} \int d^3 r \, d^3 r' \, \varrho_Q(\underline{r}) \, u(\underline{r} - \underline{r}') \, \varrho_Q(\underline{r}') +$

$+ \xi_B T N_+ \int d^3 r \, \frac{\langle n_+(r) \rangle}{N_+} \ln \frac{\langle n_+(r) \rangle}{N_+} +$

$+ \xi_B T N_- \int d^3 r \, \frac{\langle n_-(r) \rangle}{N_-} \ln \frac{\langle n_-(r) \rangle}{N_-}$

ha $\phi_{ext} = 0$ $\quad \bar{n}_+(r) = \frac{N_+}{V}$

$\bar{n}_-(r) = \frac{N_-}{V}$

$\varrho_Q(\underline{r}) = 0$

$F_S = \xi_B T N_+ \int d^3 r \, \frac{1}{V} \ln \frac{1}{V} + \xi_B T N_- \int d^3 r \, \frac{1}{V} \ln \frac{1}{V} =$

$= -\xi_B T (N_+ + N_-) \ln V = -\xi_B T N \ln V$

$p = -\frac{\partial F_S}{\partial V} = \frac{N \xi_B T}{V}$

korrelációs energia: $\quad \phi(r) = \frac{e^{-\varkappa r}}{r} Q_+$ ponttöltés

$E_{korr} = \frac{1}{2} (Q_+^2 \varkappa N_+ + Q_-^2 \varkappa N_-)$ ha $\varkappa r \ll 1$ $\quad \approx \frac{Q_+}{r} - Q_+ \varkappa + \dots$

$\varkappa^2 = \frac{4\pi}{\xi_B T} \frac{N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2}{V}$ energiája $(-Q_+ \varkappa) Q_+$ (↑ saját tér, ↳ kölcsönös ható tere)

$E_{korr} = -\frac{4\pi}{2} \sqrt{\frac{1}{\xi_B T V}} \left(N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2 \right)^{3/2}$

$\bar{E} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \Rightarrow E_{korr} = -\frac{\partial \ln Z_{korr}}{\partial \beta}$

$\ln Z_{korr} = -\int_0^\beta d\beta \, E_{korr}(\beta) + N \ln V$ (konfigurációs állapotösszeg, $p = 0$ – ban)

$\int_0^\beta d\beta \, A \sqrt{\beta} = \frac{2}{3} A \beta^{3/2}$

$$\ln Z_{korr} = -\frac{2}{3}\sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon_B T V}}\left(N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2\right)^{3/2}\frac{1}{\varepsilon_B T} + N \ln V$$

$$F_{korr} = -\varepsilon_B T \ln Z_{korr} = -\varepsilon_B T N \ln V + \frac{2}{3}\sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon_B T V}}\left(Q_+^2 N_+ + N_- Q_-^2\right)^{3/2}$$

$$p = -\frac{\partial F_{korr}}{\partial V} = \frac{N \varepsilon_B T}{V} + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon_B T V^3}}\left(Q_+^2 N_+ + N_- Q_-^2\right)^{3/2}$$

(Debye - Hückel)

$r \ll 1/\kappa$ volt a feltétel

$1/\kappa \gg \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}$

↳ részecskék közötti átlagos távolság

$1/\kappa^2 \gg \left(\frac{V}{N}\right)^{2/3}$

$\varepsilon_B T \frac{V}{N Q^2} \gg \left(\frac{V}{N}\right)^{2/3}$

↑ közelítés nagyságrendileg megegyezik

$\varepsilon_B T \gg \frac{Q^2}{\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}}$ ← két töltés közötti potenciális energia ⇒ átlagos taszítóhatási energia

↓ kinetikus energia >> egy részecskére jutó pot. en.

magas hőmérsékleten érvényesül a közelítés

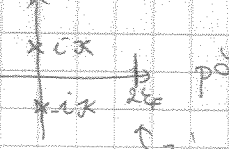
$$p = \frac{N \varepsilon_B T}{V}\left(1 + \frac{1}{3}\frac{V}{N \varepsilon_B T}\sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon_B T}}\underbrace{\left(\frac{N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2}{V}\right)^{3/2}}_{\sim \left(\frac{N}{V}\right)^{1/2}}\right)$$

⇒ nem lehet virial sorfejtéssel tárgyalni

zérus hőmérsékleten

$\frac{\cos(2k_F r)}{r^3}$ Friedel - oszcilláció a töltés körüli felhő lecsengése (hosszú távú)

$\frac{e^{-\kappa r}}{r} \xrightarrow{FT} \frac{1}{\kappa^2 + q^2} = \frac{1}{(q + i\kappa)(q - i\kappa)}$



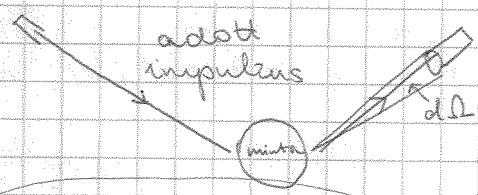
pólusok

↑ zérus hőm.-en singularitás dominál

minden óra az első Fermi - szint

Szórásfizika → neutronszórás

neutronforrás (reaktor, ...)



$$\Delta N = \underline{I} \cdot \frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\partial\varepsilon} \cdot d\Omega \cdot d\varepsilon$$

ΔN: egységnyi idő alatt érkező neutronok száma

$\underline{I}$: neutronforrás intenzitása $\left(\frac{db}{sm^2}\right)$

$\frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\partial\varepsilon}$ kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet = ?

integrálás $\Delta N = \underline{I}_{bc}\,\sigma$ $\quad [\sigma] = m^2$

energia- és impulzusmegmaradás

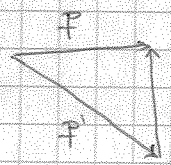


$$\underline{p} = \underline{p}' + \hbar\underline{q}$$

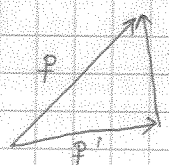
$$\hbar\underline{\xi} = \hbar\underline{\xi}' + \text{átadott impulzus}$$

$$\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2\xi^2}{2m}$$

$$\varepsilon(p) = \varepsilon(p') + \hbar\omega \rightarrow \text{átadott energia}$$



$|\underline{p}| < |\underline{p}'|$ $\quad \hbar\omega < 0$ elvett energiát



$|\underline{p}| > |\underline{p}'|$ $\quad \hbar\omega > 0$ átadott energiát

$|\underline{p}| = |\underline{p}'|$ rugalmas ütközés $\hbar\omega = 0$

kezdeti állapot:

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{\xi}\underline{r}} \qquad \hbar\underline{\xi} = \underline{p}$$

végállapot: $\psi_{p'} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{\xi}'\underline{r}}$ $\qquad \hbar\underline{\xi}' = \underline{p}'$

ϕ_n E_n energiájú állapot
ϕ_m E_m energiájú állapot

$$E_n + \varepsilon(p) = E_m + \underbrace{\varepsilon(p')}_{\varepsilon(p) - \hbar\omega}$$

$$\hbar\omega = E_m - E_n$$

mi a valószínűsége hogy p, n állapotból p', m állapotba jut a rendszer?

$$P(p,n \to p',m) = \underbrace{\frac{2\pi}{\hbar}}_{\text{elsőrendű perturbációsz.}} \delta\Big(\underbrace{\varepsilon(p) + E_n - \varepsilon(p') - E_m}_{(\hbar\omega - E_m + E_n)}\Big) |\langle p,n | U | p',m\rangle|^2$$

kölcsönhatás:

neutron deBroglie hullámhossza: $\lambda \sim 10^{-8}$ cm

kölcsönhatás atommagokkal: $d \sim 10^{-13}$ cm

$\Rightarrow$ potenciál pontszerűnek közelíthető

$$U = U_0 \delta(\underline{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b\, \delta(\underline{r})$$

$$U = \sum_{\alpha=1}^{N} U_0 \delta(\underline{r} - \underline{r}_\alpha) \qquad \text{azonos magok}$$

$$\langle p,n | U | p',m\rangle = \int \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\underline{k}\underline{r}} \langle n | \sum_{\alpha=1}^{N} U_0 \delta(r - \underline{r}_\alpha) | m\rangle \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}'\underline{r}}\, d^3r =$$

V nem a minta térfogata $\to$ normálási tényező

$\hbar\underline{k} = \hbar\underline{k}' + \hbar\underline{q}$ $\quad e^{i(\underline{k}'-\underline{k})\underline{r}} = e^{-i\underline{q}\underline{r}}$

$$= \frac{1}{V} \langle n | U_0 \sum_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} | m\rangle$$

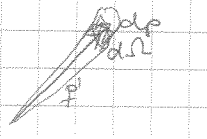
$$P(\;) = \ldots = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\hbar\omega - E_m + E_n) \frac{U_0^2}{V^2} \left| \langle n | \sum_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} | m\rangle \right|^2$$

kezdeti állapotokra összegzünk

végállapotokra is $\quad -u-$

$$\tilde{P}(p,p') = \sum_{n,m} \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} P(p,n \to p',m)$$

p' végállapotot



$$\frac{V}{\hbar^3} d^3p' = \frac{V}{\hbar^3} p'^2\, d\Omega\, dp' = \frac{V}{\hbar^3} \underbrace{p'}_{\sqrt{2m\varepsilon}} m\, d\varepsilon\, d\Omega$$

$$\varepsilon(p) = \frac{p'^2}{2m} \qquad d\varepsilon = \frac{p'}{m} dp'$$

Szórt részecskén szóródó egy neutronra:

$$\tilde{P}(p \to p')\frac{V}{h^3} m p' d\varepsilon d\Omega = I_{in} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \varepsilon \partial \Omega} d\Omega d\varepsilon$$

$$I_{in} = \frac{p}{m}\frac{1}{V} \qquad \underline{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi\right) = \ldots = \frac{1}{V}\frac{p}{m}$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$$

$$= \frac{p}{m}\frac{1}{V}\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \varepsilon \partial \Omega} d\Omega d\varepsilon$$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \varepsilon \partial \Omega} = \frac{mV}{p}\frac{V}{h^3} m p' \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\hbar\omega - E_m + E_n) \frac{1}{V^2}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\right)^2 b^2 \left|\langle m|\sum_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|n\rangle\right|^2$$

$$= \frac{p'}{p}\sum_{n,m}\left(\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\left|\langle m|\sum_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|n\rangle\right|^2 b^2 \delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right)\frac{1}{\hbar}\right)\frac{1}{h^3}(2\pi)^2\hbar^2\frac{2\pi}{\hbar}$$

$$= \frac{p'}{p} b^2 \frac{1}{\hbar}\underbrace{\sum_{n,m}\left(\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\left|\langle m|\sum_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|n\rangle\right|^2 \delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right)\right)}_{\text{dinamikai szerkezeti tényező}}$$

12.08.

$$U(\underline{r}) = \sum_\alpha \frac{2\pi\hbar^2}{m} b_\alpha \delta(\underline{r} - \underline{r}_\alpha)$$

↳ minden részecske esetén más szórási hossz

pl. különböző magspin

$\Rightarrow b_\alpha$ bele a $\sum_\alpha$ - ba

$$\left|\langle u|\sum_\alpha b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|m\rangle\right|^2 =$$

$$= \langle u|\sum_\alpha b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|m\rangle \cdot \langle m|\sum_{\alpha'} b_{\alpha'} e^{i\underline{q}\underline{r}_{\alpha'}}|u\rangle =$$

$$= \sum_{\alpha\alpha'} b_\alpha b_{\alpha'} \langle m|e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|u\rangle\langle u|e^{i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|u\rangle$$

átlagolás a magspin állapotokra $\Rightarrow$ azért lehet mert a magspinek nem hatnak közvetlen egymással és a többi mennyiséggel sem végül

$$\overline{b_\alpha b_{\alpha'}} = \begin{cases} \overline{b_\alpha^2} = \overline{b^2} & \text{ha } \alpha = \alpha' \\ \overline{b_\alpha}\,\overline{b_{\alpha'}} = (\overline{b})^2 & \text{ha } \alpha \neq \alpha' \end{cases}$$

$$\overline{b_\alpha b_{\alpha'}} = \bar{b}^2 + \delta_{\alpha\alpha'}(\overline{b^2} - \bar{b}^2)$$

(strukturális info)

ugy

$$|\langle n|\sum_\alpha b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|m\rangle|^2 = \bar{b}^2 \overbrace{\langle n|\sum_\alpha e^{i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|m\rangle\cdot\langle m|\sum_{\alpha'} e^{-i\underline{q}\underline{r}_{\alpha'}}|n\rangle}^{\text{koherens szórás}} +$$

$$+ \underbrace{(\overline{b^2} - \bar{b}^2)\sum_\alpha \langle n|e^{-i\underline{q}\underline{r}}|m\rangle\langle m|e^{i\underline{q}\underline{r}}|n\rangle}_{\text{inkoherens szórás}}$$

(sima háttér $\Rightarrow$ fázis info elveszett)

$$\sum_{nm}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\underbrace{\langle n|\sum_\alpha e^{i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|m\rangle\langle m|\sum_{\alpha'} e^{i\underline{q}\underline{r}_{\alpha'}}|n\rangle}\,\delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right) = *$$

részecskesűrűség operátor

$$\varrho(\underline{r}) = \sum_\alpha \delta(\underline{r} - \underline{r}_\alpha) \xrightarrow{\text{Fourier}} \frac{1}{V}\int d^3r\, e^{-i\underline{q}\underline{r}}\varrho(\underline{r}) = \frac{1}{V}\sum_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}$$

$$V\langle n|\varrho_q|m\rangle\langle m|\varrho_{-q}|n\rangle$$

$$* = \sum_{nm}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}V\langle n|\varrho_q|m\rangle\langle m|\varrho_{-q}|n\rangle\,\delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right) = *$$

$$\left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} = \delta(\omega)\right]$$

$$\frac{1}{2\pi}\int dt\, e^{i\omega t} e^{\frac{i}{\hbar}E_n t} e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} = \delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right)$$

$$* = \frac{V}{2\pi}\sum_{nm}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t}\langle n|\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}\varrho_q e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}|m\rangle\langle m|\varrho_{-q}|n\rangle =$$

$\hat{\varrho}_q(t)$ Heisenberg kép

$e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}$ $\quad e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}$

mert $\mathcal{H}$ sajátállapotok $\langle n|$ és $|m\rangle$

$$= \frac{V}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t}\sum_{nm}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\langle n|\varrho_q(t)|m\rangle\langle m|\varrho_{-q}(0)|m\rangle =$$

$$= \frac{V}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t}\underbrace{\sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\langle n|\varrho_q(t)\varrho_q(0)|n\rangle}$$

sűrűség autokorr. f-e

$$\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z}\varrho_q(t)\varrho_{-q}(0)\right) = \langle\varrho_q(t)\varrho_{-q}(0)\rangle$$

energiamegmaradás $\delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right)$ - ha van benne,

na de van impulzus megmaradás

$$\langle n | \sum_\alpha b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} | m \rangle$$

$\underline{P} = \sum_\alpha \underline{p}_\alpha = \frac{\hbar}{i} \sum_\alpha \underline{\nabla}_\alpha$ $\quad [P, \mathcal{H}] = 0$ ha nincs külső pot.

↳ koordináta ábrázolás

$\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

$\underline{P}|n\rangle = \underline{P}_n|n\rangle$

$$\underline{P}\left(\sum_\alpha b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|m\rangle\right) = \sum_\alpha b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} \underbrace{\underline{P}|m\rangle}_{\underline{P}_m|m\rangle} + \underbrace{\left[\underline{P}, \sum_\alpha b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}\right]|m\rangle}_{*} =$$

$$= (\underline{P}_m - \hbar\underline{q}) \underbrace{\sum_\alpha b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}|m\rangle}_{\text{impulzus sajátállapot } \underline{P}_m - \hbar\underline{q} \text{ s.é.-ével}}$$

$$\left(* \sum_{\alpha'} \sum_\alpha \left[\underline{P}_{\alpha'}, b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}\right] = \right.$$

$$= \sum_\alpha \left[\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}_\alpha, b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha}\right] =$$

$$= \sum_\alpha b_\alpha \frac{\hbar}{i}(-i\underline{q}) e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} =$$

$$\left. = -\hbar\underline{q} \sum_\alpha b_\alpha e^{-i\underline{q}\underline{r}_\alpha} \right)$$

$\langle n | \ldots | m \rangle \neq 0$ ha $\underline{P}_n = \underline{P}_m - \hbar\underline{q}$

↳ $\underline{P} - \underline{P}'$

benne van az impulzus megmaradás is

Lineáris válasz elmélete

$\mathcal{H}' = \mathcal{H} + V(t)$ ← időfüggő perturbáció

↑

időtől független

tfh. $V(t) \to 0$ ha $t \to -\infty$

és $t \to -\infty$ lom a rendszer termikus egyensúlyban volt

legyen $V(t) = -A f(t)$
↓ ↳ zavar erőssége (külső tér)
rendszert jellemző fizikai operátor

$\langle A \rangle = 0$ termikus egyensúlyban

$\langle A \rangle_t = \int_{-\infty}^{t} \chi(t-t') f(t') dt' = \int_0^{\infty} \chi(\tau) f(t-\tau) d\tau$
válasz ↳ konvolúció
↓ ↳ válaszfüggvény
lineáris választ feltételezve

Fourier-transzformált: $\chi(\omega) = \int_0^{\infty} d\tau\, e^{i\omega\tau} \chi(\tau) \in \quad \chi^*(\omega) = \chi(-\omega)$
↳ valós $\quad Re(\omega) = Re(-\omega)$
$\quad Im(\omega) = -Im(-\omega)$

$\langle A \rangle_\omega = \chi(\omega) f(\omega)$

$V(t) = -A\left(f_0 e^{-i\omega t} + f_0^* e^{i\omega t}\right)$ → ez $t \to -\infty$-re nem tart 0-hoz

$\cdot e^{\varepsilon t}$ majd $\varepsilon \to 0$
(adiabatikus bekapcsolás)

perturbáció nélkül:

$\mathcal{H}\phi_n = E_n \phi_n \Rightarrow \Psi = \sum_n a_n \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}}_{\Psi_n^\circ(t)} \phi_n$

perturbációval: $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{H}\Psi$

$\Psi(t) = \sum_n a_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \phi_n = \sum_n a_n(t) \Psi_n^\circ(t)$

behelyettesítjük Schrödingerbe:

$\sum_n \left(i\hbar \dot{a}_n(t) \Psi_n^\circ + a_n \cancel{i\hbar \dot{\Psi}_n^\circ}\right) - \sum_n a_n(t) \underbrace{\left(\mathcal{H}_0 + V\right) \Psi_n^\circ}_{\mathcal{H}\Psi_n^\circ = E_n \Psi_n^\circ \quad E_n \Psi_n^\circ}$

$\sum_n i\hbar \dot{a}_n(t) \Psi_n^\circ = \sum_n V a_n(t) \Psi_n^\circ \quad / \Psi_m^\circ \cdot$

$i\hbar \dot{a}_m \Psi_m^\circ = \sum_n a_n(t) \underbrace{\left(\Psi_m^\circ, V \Psi_n^\circ\right)}_{e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} \left(\phi_m, V \phi_n\right) = e^{i\omega_{mn} t} V_{mn}}$

most jöhet a perturbációszámítás

↳ perturbáció következménye

$a_n = \delta_{nk} + c_{nk}(t)$

↳ V-vel egyenlő nagyságrendű (tfh)

↳ kiválasztott hullámfv.

$$i\hbar \dot{c}_{mk} = \left(\psi_m^\circ, V\psi_k^\circ\right) = e^{i\omega_{mk}t} V_{mk}(t) = *$$

$$V = -A\left(f_0 e^{-i\omega t} + f^* e^{i\omega t}\right) \qquad (\varepsilon \to 0)$$

$$* = -A_{mk}\left(f_0 e^{i(\omega_{mk}-\omega)t} + f_0^* e^{i(\omega_{mk}+\omega)t}\right) e^{\varepsilon t}$$

$\int dt$

$$c_{mk} = \frac{i}{\hbar} A_{mk}\left(\frac{f_0 e^{i(\omega_{mk}-\omega)t+\varepsilon t}}{i(\omega_{mk}-\omega)+\varepsilon} + \frac{f_0^* e^{i(\omega_{mk}+\omega)t+\varepsilon t}}{i(\omega_{mk}+\omega)+\varepsilon}\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar} A_{mk}\left(f_0 \frac{e^{i(\omega_{mk}-\omega)t+\varepsilon t}}{(\omega_{mk}-\omega)-i\varepsilon} + f_0^* \frac{e^{i(\omega_{mk}-\omega)t+\varepsilon t}}{\omega_{mk}+\omega-i\varepsilon}\right)$$

$$\Psi(t) = \sum_n \left(\delta_{nk} + c_{nk}(t)\psi_n^\circ(t)\right) = \psi_k^\circ(t) + \sum_n c_{nk}(t)\psi_n^\circ(t)$$

$$\langle A\rangle = \left(\Psi(t), A\Psi(t)\right) = \left(\psi_k^\circ(t) + \sum_n c_{nk}(t)\psi_n^{(\circ)}(t),\ A\left(\psi_k^\circ(t) + \sum_m c_{mk}\psi_m^\circ(t)\right)\right) =$$

$$= \left(\psi_k^\circ(t), A\psi_k^\circ(t)\right) + \sum_n c_{nk}^*(t) e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}\left(\phi_m, A\phi_k\right) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} +$$

$$+ \sum_m c_{mk}(t) e^{\frac{i}{\hbar}E_k t}\left(\phi_k, A\phi_m\right) e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} + \mathcal{O}(c^2) =$$

$$= \left(\phi_k, A\phi_k\right) + \sum_m \left(A_{mk} e^{i\omega_{mk}t} c_{mk}^*(t) + A_{km} e^{-i\omega_{mk}t} c_{mk}(t)\right) =$$

$$= \left(\phi_k, A\phi_k\right) + \sum_m \left[\frac{1}{\hbar} A_{mk} A_{km} f_0 \frac{e^{-i\omega t+\varepsilon t}}{\omega_{mk}+\omega+i\varepsilon} + \frac{1}{\hbar} A_{km} A_{mk} f_0 \frac{e^{-i\omega t+\varepsilon t}}{\omega_{mk}-\omega-i\varepsilon} + \right.$$

$$\left. + \text{c.c.}\right]$$

átlagolás kerdeti állapotokra: $\rightarrow \langle A\rangle = 0$

$$\sum_k \frac{e^{-\beta E_k}}{Z} \ldots \Rightarrow \langle A\rangle_\omega = \sum_k \frac{e^{-\beta E_k}}{Z}\left(\phi_k, A\phi_k\right) +$$

$$+ \sum_{k,m} \frac{|A_{mk}|^2}{\hbar}\left(\frac{1}{\omega_{mk}+\omega+i\varepsilon} + \frac{1}{\omega_{mk}-\omega-i\varepsilon}\right)\frac{e^{-\beta E_k}}{Z} f_0 e^{-i\omega t+\varepsilon t} + \text{c.c.} =$$

$\chi(\omega)$ $\qquad\qquad \chi(-\omega)$

$$- \chi(\omega) f_0 e^{-i\omega t + \varepsilon t} + \chi(-\omega) f_0^* e^{i\omega t + \varepsilon t}$$

$$\chi(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} |A_{nm}|^2 \left(\frac{1}{\omega_{mn} + \omega + i\varepsilon} + \frac{1}{\omega_{mn} - \omega - i\varepsilon} \right) \qquad A_{nm} = \langle n|A|m\rangle$$

$$\omega_{nm} = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_m)$$

$$\langle A \rangle_\omega = \chi(\omega) f_0 e^{-i\omega t} e^{\varepsilon t} \qquad (\varepsilon \to 0)$$

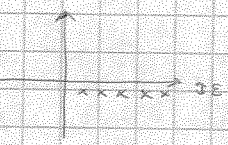
$$\omega_{nm} = -\omega_{mn}$$

$$\frac{1}{\omega_{nm} - \omega - i\varepsilon}$$

első tagban $n \leftrightarrow m$ összegzési indexek

$$\chi(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} |A_{nm}|^2 \left(\frac{1}{\omega + i\varepsilon - \omega_{mn}} \right)$$

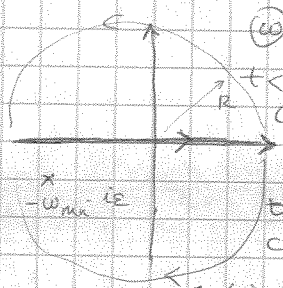
pólus: $\omega = \omega_{mn} - i\varepsilon$



$\chi(t)$ időfüggő válasz alapján érdekel

$$\langle A \rangle_t = \int_{-\infty}^{t} \chi(t - t') f(t')\, dt'$$

$$\chi(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \chi(\omega) e^{-i\omega t}$$



$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{mn} + \omega + i\varepsilon}$$

$e^{-t\,\mathrm{Re}(\omega)} e^{\mathrm{Im}(\omega) t}$ ⇒ ha $t<0$ ⇒ $e^{\mathrm{Im}(\omega)t} \to 0$, ha $\mathrm{Im}(\omega) \to \infty$

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{C\,(R\to\infty)} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{mn} + \omega + i\varepsilon}$$

ha $t>0$ ⇒ $e^{\mathrm{Im}(\omega) t} \to 0$, ha $\mathrm{Im}(\omega) \to -\infty$

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{C'} e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega_{mn} + \omega + i\varepsilon} = \frac{1}{2\pi}(2\pi i)\, e^{-i(-\omega_{mn} - i\varepsilon)t} =$$

$$= -i e^{i\omega_{mn} t} e^{-\varepsilon t}$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \omega_{mn} + i\varepsilon} = \begin{cases} 0, & \text{ha } t<0 \\ -\frac{1}{2\pi}(-2\pi i)\, e^{-i(\omega_{mn} - i\varepsilon)t} = i e^{-i\omega_{mn} t} e^{-\varepsilon t}, & \text{ha } t>0 \end{cases}$$

$$\chi(t) = \frac{i}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \langle n|A|m\rangle\langle m|A|n\rangle \left(e^{-i\omega_{mn} t} - e^{i\omega_{mn} t} \right)$$

$$e^{-i\omega_{mn} t} = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} = e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}\, e^{\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

$$\langle n|A|m\rangle e^{-i\omega_{nm}t} = \langle n| e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} A e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |m\rangle$$

$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ ↑ , $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ ↑ , $A(t)$

$$\langle m|A|n\rangle \underbrace{e^{i\omega_{nm}t}}_{e^{-i\omega_{mn}t}} = \langle n|A(t)|n\rangle$$

$$\chi(t) = \frac{i}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\left(\langle n|A(t)|m\rangle\langle m|A|n\rangle - \langle n|A|m\rangle\langle m|A(t)|n\rangle\right)$$

$$\chi(t) = \frac{i}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\langle n|(A(t)A - AA(t)|n\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle [A(t), A(0)]\right\rangle$$

Korrelációs függvény:

$$C(t-t') = \frac{1}{2}\left[\left\langle A(t)A(t')\right\rangle + \left\langle A(t')A(t)\right\rangle\right] = \frac{1}{2}\left\{\left\langle A(t-t')A(0) + A(0)A(t-t')\right\rangle\right.$$

$$C(t) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[\frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z}(A(t)A(0) + A(0)A(t))\right] = \frac{1}{2}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\Big(\langle n|A(t)|m\rangle\langle m|A|n\rangle +$$

$$+\langle n|A|m\rangle\langle m|A(t)|n\rangle\Big) =$$

$$= \sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{Z} e^{-i\omega_{mn}t}\langle n|A|m\rangle\langle m|A|n\rangle$$

$\langle m| e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} A e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |m\rangle$ ←

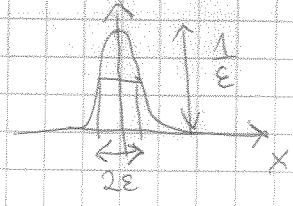
majdnem mint a vallaqfv. csak ⊕ → ⊖ jel

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{+i\omega t} = \delta(\omega)2\pi$$

$$C(\omega) = \frac{1}{2}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{Z}|A_{nm}|^2 2\pi\delta(\omega - \omega_{mn})$$

$$\chi(\omega) = -\frac{1}{\hbar}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z}|A_{nm}|^2\frac{1}{\omega + i\varepsilon - \omega_{mn}} \qquad (\varepsilon\to 0)$$

$$\frac{1}{x+i\varepsilon} = \frac{x - i\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} \to \mathrm{Im}\left(\frac{1}{x+i\varepsilon}\right) = -\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}$$



$$\lim_{\varepsilon\to 0}(\quad) = \begin{cases} 0 & \text{ha } x\neq 0 \\ \infty & \text{ha } x = 0 \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}dx = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)^2+1}\frac{dx}{\varepsilon} = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{s^2+1} = \left[\mathrm{arctg}\right]_{-\infty}^{\infty} = \pi$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \mathrm{Im}\left(\frac{1}{x+i\varepsilon}\right) = -\pi\,\delta(x)$$

$$\mathrm{Im}(\chi(\omega)) = \frac{1}{\hbar}\sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} |A_{nm}|^2\, \pi\,\delta(\omega+\omega_{mn})$$

$$e^{-\beta E_n} \pm e^{-\beta E_m} = e^{-\beta E_n}\left(1 \pm e^{-\beta(E_m-E_n)}\right)$$

összegben $e^{-\beta\hbar\omega}$

$$C = \frac{1}{2}\left(1+e^{-\beta\hbar\omega}\right)\sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} |A_{nm}|^2\, \delta(\omega-\omega_{nm})\,\pi$$

$$\mathrm{Im}\,\chi = \frac{1}{\hbar}\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)\sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} |A_{nm}|^2\, \delta(\omega-\omega_{nm})\,\pi$$

$$\frac{C(\omega)}{\mathrm{Im}\,\chi(\omega)} = \hbar\,\frac{1+e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = \text{független a fizikai rendszertől és a ravartól}$$

$$= \hbar\,\mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)$$

$$\boxed{C(\omega) = \hbar\,\mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\mathrm{Im}\,\chi(\omega)}$$ fluktuáció - disszipáció tétel

disszipáció

$-A f_0 e^{-i\omega t} - A f_0^* e^{i\omega t}$

$n \longrightarrow m$ $\quad \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\,\frac{2\pi}{\hbar}\,|A_{nm}|^2 |f_0|^2\,\delta(\hbar\omega-(E_m-E_n))$ átmenet valószínűsége

szorozzuk (E_m-E_n) annyi energiát belevarunk

összegzünk $\sum_{n,m}$ ment sor kiindulós és

végállapot lehet

$$\sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\,\frac{2\pi}{\hbar}\,|A_{nm}|^2 |f_0|^2\,\delta\left(\hbar\omega-(E_m-E_n)\right)\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta E_m}}{Z}\,\frac{2\pi}{\hbar}\,|A_{nm}|^2 |f_0|^2\,\delta\left(\hbar\omega-(E_m-E_n)\right)$$

$\frac{1}{\hbar}\,\delta(\omega-\omega_{mn})\,(E_m-E_n)\,\hbar\omega_{mn}$ $\qquad (E_m-E_n)$

$n \leftrightarrow m$

$$\frac{2\pi}{\hbar}\,\frac{e^{-\beta E_m}}{Z}\,|A_{mn}|^2 |f_0|^2\,(E_m-E_n)\,\delta(\underbrace{\hbar\omega-(E_m-E_n)}_{-\omega_{mn}\hbar})$$

$\frac{1}{\hbar}\,\delta(\omega-\omega_{mn})$

$$= |f_0|^2\,2\,\frac{\omega}{\hbar}\sum_{n,m} |A_{mn}|^2\,\delta(\omega-\omega_{mn})\,\pi\left(\frac{e^{-\beta E_n}}{Z} - \frac{e^{-\beta E_m}}{Z}\right)$$

$= 2|F_0|^2 \omega \, \mathrm{Im}(\chi(\omega))$ egyszeginyi idő alatt betáplált energia

disszipáció

pozitív mindig

lineáris válasz tőrelitében, perturbáció első rendjében, időátlagban mindig passzív a rendszer

$$-\frac{1}{\pi}\int d\omega' \frac{\mathrm{Im}\chi(\omega')}{\omega - \omega' + i\varepsilon} = \frac{1}{\hbar}\sum_{nm} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} |A_{nm}|^2 \frac{1}{\omega - \omega_{nm} + i\varepsilon}$$

ha tudjuk $\mathrm{Im}\chi(\omega)$-t akkor tudjuk a

- valószínűség-t
- korrelációs fv-t
- disszipációt

elég egyet ismerni

- VÉGE -