Felelősséget
NEM vállalok
Hiba esetén a
tájékoztatást
köszönöm...

E-mail:
nikolett@
vipmail.hu

Statisztikus fizika

Fizikus MSc 1. félév

Vizsgatematika, 2011/12 tanév őszi félév

Sűrűségoperátor
Tiszta állapotok: várható értékek kifejezése projektorokkal. Statisztikus kevert állapotok, a sűrűségoperátor definíciója, előállítása koordináta-ábrázolásban. A sűrűségoperátor mozgásegyenlete. Egyensúlyi sokaságok sűrűségoperátorai. Klasszikus rendszer eloszlásfüggvényének mozgásegyenlete

Részecskeszám-ábrázolás
Bozonok, fermionok, betöltési számok. Fock-tér, keltő- és eltüntető operátorok, téroperátorok. Operátorok ábrázolása keltő- és eltüntető operátorokkal. Kölcsönható fermion gáz Hamilton-operátora. Operátor szorzatok várhatóértéke ideális kvantumgázokban

Ideális kvantumgázok
Állapotsűrűség, termodinamikai mennyiségek. Bose–Einstein-kondenzáció. Fermi-gáz alacsony hőmérsékleten, Bethe–Sommerfeld-sorfejtés

Elemi gerjesztések
Rácsrezgések, fononok. He^4 szuperfolyékonysága. Elemi gerjesztések spektruma: fononok és rotonok, fajhő. A szuperfolyékonyság Landau-féle feltétele. A két-folyadék kép alapjai

Perturbáció számítás
Sűrűségoperátor, szabadenergia elsőrendű korrekciója. Fermion-gáz szabadenergiája, alapállapoti energiája. Lineáris izoterm sztatikus válasz

A statisztikus fizika variációs elve

Homogén kölcsönható gáz Hartree–Fock-közelítése
Variációs alapozás: a legjobb független részecske kép. Energia-spektrum, belső energia. Fermion-gáz kontakt kölcsönhatással

Elektron gáz homogén pozitív háttérben
Az elektron gáz Hamilton-operátora. Az alapállapoti energia elsőrendű perturbáció számítása

Klasszikus plazma átlagtér-elmélete
Próba szabadenergia, szelfkonzisztens egyenlet (potenciál, töltés-eloszlás). Töltéssűrűség gyenge külső potenciálban. Árnyékolás. Korrelációs energia, állapotegyenlet

Neutron-szórás hatáskeresztmetszete

Lineáris válasz, fluktuációk korrelációja, disszipáció
Időfüggő perturbáció számítás. Lineáris válasz adiabatikusan bekapcsolt monokromatikus perturbációra. Korrelációs függvény, fluktuáció-disszipáció tétel. Disszipáció

Statisztikus leírás

- Klasszikus rendszerek
- Kevés az információ, de ez a részletesség nagy számú szabadsági foknál elegendő.

Hamiltoni dinamika

konzervatív rendszerek

állapot: $(q,p) = (q_1, q_2, \dots, q_f; p_1, p_2, \dots, p_f)$

Fázistér $2f$ dimenziós.

Időfejlődés a kanonikus-egyenletek alapján.

$$\dot q = \frac{\partial H}{\partial p} \qquad \dot q_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

$$\dot p = -\frac{\partial H}{\partial q} \qquad \dot p_i = \frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad i = 1, 2, \dots, f$$

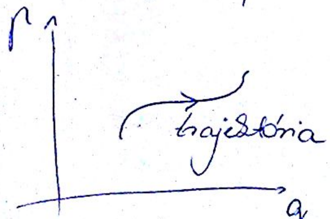
a Hamilton-fv.: $H = K + U$

K: kinetikus, impulzus fv-e derékszögűben

U: potenciális, koordináta fv-e

Trajektóriák olyanok, mint az áramlások (összenyomhatatlan)

Önmozgás: fázisteret önmagába képzi le



$$w = (\dot q, \dot p) = (\dot q_1, \dot q_2, \dots, \dot q_f, \dot p_1, \dot p_2, \dots \dot p_f)$$

$\mathrm{Div}\, w = 0 \Leftarrow$ összenyomhatatlan

$$\mathrm{Div}\, w = \left(\frac{\partial \dot q_1}{\partial q_1} + \frac{\partial \dot q_2}{\partial q_2} + \dots + \frac{\partial \dot q_f}{\partial q_f} + \frac{\partial \dot p_1}{\partial p_1} + \frac{\partial \dot p_2}{\partial p_2} + \dots + \frac{\partial \dot p_f}{\partial p_f}\right) =$$

$$= \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial \dot q_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot p_i}{\partial p_i}\right) = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i}\right) = 0$$

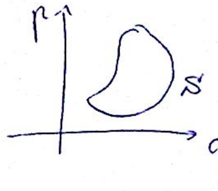
Liouville-tétel (tartomány ugyanakkora térfogatú marad)

Kezdetben együttlévő állapotok persze messze kerülhetnek egymástól

Ez mind a TISZTA állapotokra igaz

Mi van, ha csak valószínűségeket tudok?

$\rho(p,q)$ $\qquad P(S) = \underbrace{\int_S dp\,dq\,\rho(p,q)}_{S\text{-en belüli valószínűség}} =$



$= \int_S dp_1\, dp_2 \dots dp_f\, dq_1\, dq_2 \dots dq_f\, \rho(p_1 \dots p_f, q_1 \dots q_f)$

Teljes fázistérre

$$\int_{\text{„fázistér"}} dq\,dp\,\rho(q,p) = 1$$

Várható érték

$$\langle A \rangle = \int dq\,dp\,\rho(q,p)\,A(q,p)$$

Valószínűségeloszlás időben fejlődik, de a teljes valószínűség (1) megmaradó mennyiség $\Rightarrow$ kontinuitási egyenlet:

$\int dq\,dp\,\rho(q,p)$

$$\frac{\partial \rho(q,p,t)}{\partial t} + \underbrace{\mathrm{Div}\big(\rho(q,p,t)\,w(q,p,t)\big)}_{} = 0$$

$$\sum_i \left(\frac{\partial}{\partial q_i} \rho \dot{q}_i + \frac{\partial}{\partial p_i} \rho \dot{p}_i \right) =$$

$$= \underbrace{\sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right)}_{\mathrm{grad}\rho \cdot w} + \underbrace{\sum_i \rho \Big(\underbrace{\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i}}_{0} \Big)}_{\rho\, \underbrace{\mathrm{div}\, w}_{0}}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underbrace{\sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right)}_{\{\rho,\, H\}\ \text{Poisson-zárójel}} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = 0$$

Statisztikus fizika 2012. 09. 13.

- $\rho(p, q, t)$

Ha p, q helyére egy trajektóriát írunk be, a mozgásegyenlet megoldásait => csak t függő

$$\frac{d}{dt}\rho(p(t), q(t), t) = \Rightarrow \text{szubsztanciális derivált}$$

$$= \frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial\rho}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial\rho}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0 \Rightarrow \text{nem változik}$$

a valószínűségsűrűség a folyamat során.

- Fizikai mennyiség a trajektória mentén:

$A(p(t), q(t))$ $\qquad \frac{d}{dt}A(p(t), q(t)) = \{A, H\}$

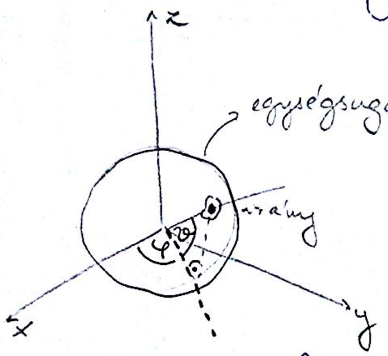
Stacionárius állapotban a valószínűségsűrűség adott helyen nem változhat.

$\rightarrow \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0$ $\qquad \{\rho, H\} = 0$

Konzervatív rendszerben csak az energia a megmaradó mennyiség, csak ettől függhet ρ

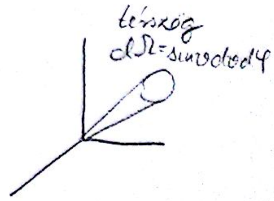
Egyéb klasszikus rendszerek

pl. klasszikus mágneses momentum



egységsugarú gömb => minden irány kiböl rajta 1 pontot

$f(\vartheta, \varphi)$ valószínűségsűrűség
adott térszögbe valószínűség
$P(d\Omega) = f(\vartheta, \varphi)\sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$



normálás: $\int_0^{\pi} d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\, f(\vartheta, \varphi)\sin\vartheta = 1$

diszkrét klasszikus rendszerek

pl.: Ising-spin (ferromágneses állapotban momentumok rendeződnek úgy, hogy 2 állapotba állhatnak fel és le) változó 2 értékű (fel és le)

$S = \pm 1$

valószínűség

$f(+1)$; $f(-1)$

$f(+1) + f(-1) = 1$

klasszikus mágnesesmomentum állandó hosszúságú

$\underline{S}$, $\underline{S}^2 = 1$

$\frac{1}{2}$ spin   z tengely mentén kvantált: $\frac{\hbar}{2}$ és $-\frac{\hbar}{2}$

Ising-spinnél ennyi a leírás, valójában azonban lineárkombináció is előfordulhat

$|+1\rangle$ $S_z = \frac{\hbar}{2}$

$|-1\rangle$ $S_z = -\frac{\hbar}{2}$

$\Downarrow$

szuperpozíció

$c_1|+1\rangle + c_2|-1\rangle$

ilyen nincs az Isingben.

Kvantummechanikai rendszerek

Állapot: Ψ hullámfüggvény

Összes állapot egy absztrakt teret (Hilbert teret) alkot

lineáris

metrikus (skalárszorzat)

teljes (Cauchy-sorozat konvergens benne)

végtelen dim-ban szeparábilis

($\frac{1}{2}$ spinre nem)

Skalárszorzat: (Ψ, Ψ)

Koordináta ábrázolás: $\Psi(\underline{x})$

$$(\Phi, \Psi) = \int dx\, \Phi^*(x)\Psi(x)$$

négyzetesen integrálható (L^2-beli) függvények

$\exists \{\varphi_n\}_1^\infty$ teljes ortonormált rendszer

$$\underbrace{\text{teljes}}_{\Downarrow} \qquad \underbrace{\text{ortonormált}}_{(\varphi_n, \varphi_m) = \delta_{n,m}}$$

$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n$ felírható az állapottérben

$(\varphi_n, \Psi) = c_n$

$\Phi = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \varphi_n$

$$(\Phi, \Psi) = \sum_n \sum_{n'} (b_n \varphi_n, c_{n'} \varphi_{n'}) = \sum_{n,n'} b_n^* c_{n'} \underbrace{(\varphi_n, \varphi_{n'})}_{\delta_{n,n'}} =$$

$$= \sum_n b_n^* c_n$$

A c_n együtthatók elhelyezhetők oszlopvektor formában

$$(b_1^* \ldots b_n^* \ldots) \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$(\Psi, \Psi) = \sum_n c_n^* c_n$ l_2-térnek hívják az oszlopvektorok terét

Statisztikus fizika

Fizikai mennyiségeknek operátorok felelnek meg

pl. $\hat{A}$

$$\langle A\rangle = (\psi, \hat{A}\psi) = \int dx\, \psi^*(x) \int dx' A(x,x')\psi(x') =$$

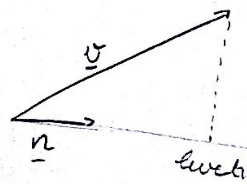
TONR-en: $= \sum_{n,m} (c_n\varphi_n, \hat{A} c_m \varphi_m) = \sum_{n,m} c_n^* c_m \underbrace{(\varphi_n, \hat{A}\varphi_m)}_{A_{nm}} =$

$= \sum_{n,m} c_n^* c_m A_{nm}$ — A_{nm} mátrix elemek

$$(c_1^*, c_2^*, \dots, c_n^*, \dots)\begin{pmatrix} & & \\ & A_{nm} & \\ & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Projektorok

- Véges térben



levetítem: $(\underline{n}\,\underline{v})\underline{n}$

$$P_\psi \Phi = (\psi, \Phi)\psi$$
$$(\psi,\psi) = 1$$

- koordináta ábrázolásban:

$$\psi(x)\int dx' \psi^*(x')\Phi(x') = \int dx' P_\psi(x,x')\Phi(x')$$

$P_\psi(x,x') = \psi(x)\psi^*(x')$ ezzel mint magfüggvénnyel kell megszorozni a vetítendő állapotot.

- $\{\varphi_n\}$ bázison:

$$\Phi = \sum_n b_n \varphi_n \qquad \psi = \sum_n c_n \varphi_n$$

$$\sum_n c_n^* b_n \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}(c_1^* \dots c_n^* \dots)}_{\text{projektor mátrixa}} \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$(P_\psi)_{mn} = c_m c_n^*$$

- Operátor várható értéke

$$\langle A\rangle = \sum_{n,m} c_m c_n^* A_{nm} = \sum_{n,m} (P_\psi)_{mn} A_{nm} = \mathrm{Tr}(P_\psi A)$$

$$\langle A\rangle = \int dx\, \psi^*(x) \int dx' A(x,x')\psi(x') = \int dx \int dx' P_\psi(x',x) A(x,x')$$

koordináta ábrázolás

Dirac-féle jelöléssel: $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$

Kevert állapot

① Rendszernek nincs hullámfv-e

Nagy rendszer részrendszere, melynek közt van kh.

$\underbrace{\text{Nagy rendszer}}_{\text{van hullámfv-e}}$ $\underbrace{\text{részrendszere}}_{\text{nincs}}$

② Statisztikus leírás

$\{\psi_\alpha\}$ állapotok halmaza

p_α állapotok valószínűsége

- Nem vezetem be a Hilbert-térbe a valószínűséget, helyette diszkrét állapotokat veszek fel, melyekben a rendszer valamekkora valószínűséggel megtalálható
- 2 várható érték: statisztikus + kvantummechanikai. mérem a rendszert

$$\langle A\rangle = \sum_\alpha p_\alpha(\psi_\alpha, \hat{A}\psi_\alpha) = \sum_\alpha p_\alpha \operatorname{Tr}(P_{\psi_\alpha}\hat{A}) = \operatorname{Tr}\Big(\underbrace{\sum_\alpha p_\alpha P_{\psi_\alpha}}_{\text{sűrűségoperátor, } \hat\rho}\hat{A}\Big) =$$

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

$\hat\rho = \sum_\alpha p_\alpha P_{\psi_\alpha}$ → ha ismerem, abból nem tudom egyértelműen előállítani a sokaságot, de minden statisztikus sokasághoz tartozik ilyen.

- $\{\varphi_n\}$ bázison

$$\langle A\rangle = \sum_\alpha p_\alpha(\psi, \hat{A}\psi) = \sum_\alpha p_\alpha \sum_{nm}(c_{n\alpha}\varphi_n, A_{nm}c_{m\alpha}\varphi_m) =$$

$$= \sum_\alpha p_\alpha \sum_{nm} c_{n\alpha}^* c_{m\alpha}\underbrace{(\varphi_n, A_{nm}\varphi_m)}_{A_{nm}} = \sum_{nm}\Big(\sum_\alpha p_\alpha c_{m\alpha}c_{n\alpha}^*\Big)A_{nm} =$$

$$\Big(\sum_\alpha p_\alpha P_{\psi_\alpha}\Big)_{mn} = \rho_{mn}$$

$$= \sum_{nm}\rho_{mn}A_{nm}$$

- Koordináta ábrázolás:

$$P_{\psi_\alpha}(x,x') = \psi_\alpha(x)\psi_\alpha^*(x')$$

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

$$\langle A\rangle = \int dx\int dx'\,\rho(x,x')A(x,x')$$

- Dirac-reprezentáció:

$$\hat\rho = \sum_\alpha p_\alpha |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|$$

Statisztikus fizika 2012. 09. 13.

Sűrűségoperátor tulajdonságai

- Önadjungált

$$\rho_{mn} = \sum_\alpha p_\alpha c_{\alpha n}^* c_{\alpha m} = \sum_\alpha p_\alpha c_{\alpha m} c_{\alpha n}^* = \rho_{nm}^*$$

- $Tr\,\hat{\rho} = 1$

$$\sum_n \sum_\alpha p_\alpha \underbrace{c_{\alpha n}^* c_{\alpha n}}_{|c_{\alpha n}|^2} = \underbrace{\sum_\alpha p_\alpha}_{1} \underbrace{\sum_n |c_{\alpha n}|^2}_{1 \text{ (normált)}} = 1$$

- $\rho_{nn} = \sum_\alpha p_\alpha |c_{\alpha n}|^2 \geq 0$

diagonális elemek: milyen valószínűséggel találom az adott állapotban a rendszert n. báziselem mérésekor $\sum_\alpha$(α. állapotban) (φ_n-ben a rendszer)

- $Tr\,\rho^2 \leq Tr\,\rho = 1$

„=" <-> tiszta állapot

diagonális rendszerben: $\sum_n \rho_{nn}^2 \leq (\sum_n \rho_{nn})^2 = 1$

(keresztszorzatokkal több)

keresztszorzatok csak akkor tűnhetnek el, ha csak 1 elem 1 ($Tr\rho = 1$) többi 0 => tiszta állapot

2012.09.20.

$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \sum_\alpha p_\alpha (\psi_\alpha, A\psi_\alpha)$ $\qquad \rho = \sum_\alpha p_\alpha P_{\psi_\alpha}$

emögött van
egy oszlopság

Elöfordulás valószínűsége
tiszta állapot

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{d}{dt}(\psi, A\psi)$$

tiszta állapot

$$i\hbar\dot{\psi} = H\psi$$

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

$$= (\underbrace{-H\psi, \ A\psi}_{H=H^+}) + (\psi, AH\psi) = (\psi, (AH - HA)\psi)$$

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar}(\psi, [H, A]\psi) = \text{operátor idöderiváltja}$$

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

kevert állapot

felcserélhető
$\sum$ lineáris
művelet

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \sum_\alpha p_\alpha \frac{d}{dt}(\psi_\alpha, A\psi_\alpha) = \mathrm{Tr}\left(\sum_\alpha p_\alpha P_\psi \frac{i}{\hbar}[H, A]\right) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}(\rho, [H, A]) = \frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}(\rho HA - \rho AH) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}(\rho HA - H\rho A) = \frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}([\rho, H]A)$$

$\mathrm{Tr}(ABC) = \mathrm{Tr}(CAB)$

$\sum_{m,n,l} C_{mn} A_{nl} B_{lm} = \sum_{m,n,l} A_{nl} B_{lm} C_{mn}$

$$\frac{d}{dt}\mathrm{Tr}(\rho A) = \mathrm{Tr}\left(\frac{d\rho}{dt}A\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\rho, H]$$

Neumann-egyenlet

$\Downarrow$

Stacionárius állapot esetén $[\rho, H] = 0 \Rightarrow$ egyszerre diagonalizálható

Statisztikus fizika 2012. 09. 20.

Egyensúlyi sokaság

bázis: φ_n energiasajátfüggvények

$$\rho = \sum_n p_n P_{\varphi_n} \qquad \rho_{nm} = \delta_{nm} p_n$$

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

Ha H időtől független:

$$i\hbar\dot{\psi} = H\psi \Rightarrow \psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi_0$$

kezdeti állapot hullámfv-e.

$$\langle A \rangle = \sum_\alpha p_\alpha \left(\psi_\alpha(t), A\psi_\alpha(t)\right) = Tr\left(\underset{\text{statisztikus tárgyalás}}{\rho(t)} A\right)$$

$$= \sum_\alpha p_\alpha \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi_{\alpha 0}, A\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi_{\alpha 0}\right) = \sum_\alpha p_\alpha \left(\psi_{\alpha 0}, e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi_{\alpha 0}\right) =$$

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

Mikrokanonikus sokaság

Nagy számú szabadsági fokú zárt rendszer leírására használjuk az egyensúlyi állapotban

Minden állapot azonos valószínűségű

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

Normálás miatt $\Omega = \sum_{\substack{n \\ E<E_n<E+\delta E}} 1$ az intervallumba eső állapotok száma

$$\rho_{nm} = \begin{cases} \delta_{nm} \frac{1}{\Omega} & E < E_n, E_m < E + \delta E \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

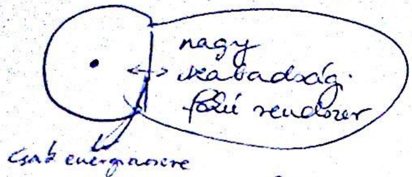
Egyéb sokaság származtatására használjuk

$$S = -k_B \ln \Omega(E, \delta E)$$

$$dS = \frac{1}{T}dE + \frac{p}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN$$

A különböző deriváltak adják meg a termodinamikai mennyiségeket.

Kanonikus sokaság



Állapotát egyedül T határozza meg.

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

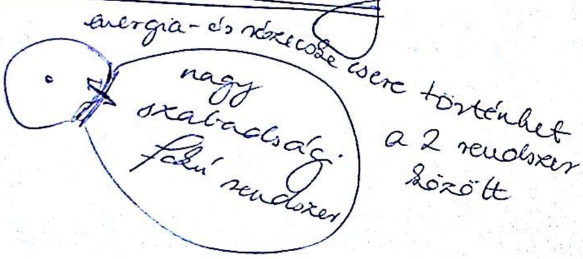
$$\rho_{nm} = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\delta_{nm} = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \qquad Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right)$$

Termodinamikai összefüggések a szabad energián keresztül.

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

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

Nagykanonikus sokaság



Állapot jellemzője: $N, E_n(N)$

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

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \underbrace{Z_N}_{\text{kanonikus állapotösszeg } N \text{ részecskére.}}$$

Olyan sűrűségoperátor kell mely különböző részecskeszámot kezelni tud

Fock-tér, betöltési szám ábrázolás

Azonos részecskék: kvantummechanikailag megkülönböztethetetlenek.

bozonok		fermionok
(egész spin)		(félegész spin)
pl.: ^4He		pl.: $p, e, ^3He$
szimmetrikus	hullámfv. 2 részecske cseréjére	antiszimmetrikus
$\psi(x_1,x_2) = \psi(x_2,x_1)$		$\psi(x_1,x_2) = -\psi(x_2,x_1)$

Statisztikus fizika 2012.09.20.

N azonos részecske állapotteréhez választunk ki egy egyrészecske bázist

Edénybe pakolgatva a részecskéket => gáz

Hogy változik időben a hullámfv.?

Változók: $\underset{\text{hely}}{(r},\ \underset{\text{spin}}{s)} = x$

Hullámfv: $\psi(x) = \psi(r, s)$

Bázis: $\varphi_l(x) = \varphi(r, s) \quad l = 1, 2, \dots$

teljes ortonormált rendszer

$$\int \varphi_l^*(x)\,\varphi_{l'}(x)\,dx = \sum_s \int d^3r\, \varphi_l^*(r, s)\,\varphi_{l'}(r, s) = \delta_{l,l'}$$

$$\psi(x) = \sum_l c_l\,\varphi_l(x) \qquad c_l = \int dx\, \varphi_l^*(x)\,\psi(x)$$

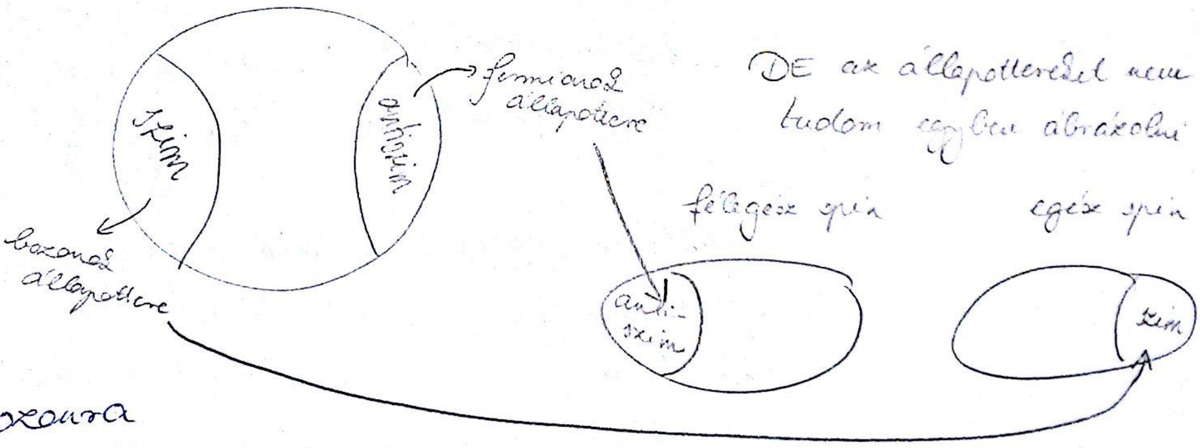
Általában az energiasajátfüggvényeket választjuk bázisnak.

N részecske

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{l_1, \dots, l_N} c(l_1, \dots, l_N)\, \cancel{c_{l_1} \dots c_{l_N}}\, \varphi_{l_1}(x_1) \dots \varphi_{l_N}(x_N)$$

Ebben nincs benne a Pauli-elv.

DE az állapottereket nem tudom egyben ábrázolni



bozonra

$$\psi(x_1, x_2) = \sum_{l_1 l_2} c(l_1, l_2)\, \cancel{c_{l_1} c_{l_2}}\, \varphi_{l_1}(x_1)\,\varphi_{l_2}(x_2) \underset{\text{részecskecsere}}{=} \sum_{l_1, l_2} c(l_1, l_2)\,\varphi_{l_1}(x_2)\,\varphi_{l_2}(x_1) \underset{\text{indexcsere}}{=}$$

$$= \sum_{l_1 l_2} c(l_2, l_1)\,\varphi_{l_1}(x_1)\,\varphi_{l_2}(x_2)$$

$$c(l_1, l_2) = c(l_2, l_1)$$

fermionra „−"

N bozon

$$\Phi_{e_1 \dots e_N}(x_1, \dots, x_N) = \overset{\text{normálási tényező}}{C} \underset{\text{összes permutáció}}{} \underbrace{\sum_{\alpha}}_{\text{összes permutációra való összegzés}} \varphi_{e_1}(x_{\alpha_1}) \varphi_{e_2}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi_{e_N}(x_{\alpha_N})$$

x_α-k az x-k permutációja

Meghatározzák a betöltési számok (n_e), hányszor szerepel az l kvantumszám $l_1 \dots l_N$ között.

Két ilyen többrészecske fv. szorzata 0-t ad, ha a betöltési számok eltérnek. => ortogonálisak.

Normálás

$$\int dx_1 \dots dx_N \left(\sum_{\alpha} \varphi^*_{e_1}(x_{\alpha_1}) \varphi^*_{e_2}(x_{\alpha_2}) \dots \varphi^*_{e_N}(x_{\alpha_N}) \right) \left(\sum_{\alpha'} \varphi_{e'_1}(x_{\alpha'_1}) \dots \varphi_{e'_N}(x_{\alpha'_N}) \right) =$$

átjelölve a különböző indexeket mindig 1-től N-ig

$$= \underset{\text{permutációk száma}}{N!} \int dx_1 \dots dx_N \left(\sum_{\alpha} \varphi^*_{e_1}(x_{\alpha_1}) \dots \varphi^*_{e_N}(x_{\alpha_N}) \right) \varphi_{e'_1}(x_1) \dots \varphi_{e'_N}(x_N) =$$

csak akkor lesz 0-tól különböző, ha $l'_i = l_i$

Mindig 0 ha a kvantumszám rendszer nem egyezik meg.

Ha minden kvantumszám 1-szer, akkor 1 permutációra lesz 1

Ha 2-szer szerepel egy kvantumszám, akkor 2 permutációra lesz 1

$$= N! \prod_e n_e!$$

$\prod_e n_e$: hányszor szerepel az l kvantumszám

⟶ Ha az $l_1 \dots l_N$ kvantumszámok megegyeznek $l'_1 \dots l'_N$-vel

⟶ Ha a betöltési számok megegyeznek

Normálás: $C = \dfrac{1}{\sqrt{N! \prod_e n_e!}}$

Fermionok

Olyan kombinációt kell felírni, ami antiszimmetrikus

$$\varphi_e(x_1) \varphi_m(x_2) - \varphi_e(x_2) \varphi_m(x_1) = \left| \begin{pmatrix} \varphi_e(x_1) & \varphi_e(x_2) \\ \varphi_m(x_1) & \varphi_m(x_2) \end{pmatrix} \right|$$

Általában

$$\Phi_{e_1 \dots e_N}(x_1 \dots x_N) = C (-1)^{\delta_\alpha} \varphi_{e_1}(x_{\alpha_1}) \dots \varphi_{e_N}(x_{\alpha_N})$$

Minden permutációnak van paritása

δ_α: paritás (hány cserét végeztünk)

$$\Phi_{e_1 \dots e_N}(x_1 \dots x_N) = \begin{vmatrix} \varphi_{e_1}(x_1) & \dots & \varphi_{e_1}(x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{e_N}(x_1) & \dots & \varphi_{e_N}(x_N) \end{vmatrix}$$ Slater-determinánsok

Ha a determináns 2 sora megegyezik $\Rightarrow 0$
Ha egy kvantumszám 2-szer fordul elő

Kizárási elv: • Nem lehet ugyanabban az állapotban 2 fermion.
• minden kvantumszám csak 1-szer szerepel a különböző kombinációkban $\Rightarrow$ így ad járulékot.

Normálás

$$\int dx_1 \dots dx_N \left(\sum_\alpha (-1)^{\delta_\alpha} \varphi^*_{e_1}(x_{\alpha_1}) \dots \varphi^*_{e_N}(x_{\alpha_N}) \right) \left(\sum_{\alpha'} (-1)^{\delta_{\alpha'}} \underbrace{\varphi_{e_1'}(x_{\alpha_1'}) \dots \varphi_{e_N'}(x_{\alpha_N'})}_{} \right) =$$

1 tagban van egy sorrend a másik összegben a kvantumszámokat meg kell egyezni.

$l_1, \dots, l_N$ megegyezik $l_1', \dots, l_N'$-vel ugyanolyan permutációnak kell, minden tagban állni. Csak 1 taggal ad 1-et.

$= N!$ ha $l_1, \dots, l_N$ megegyezik $l_1', \dots, l_N'$-vel
egyébként 0.

$\Downarrow$

$$C = \frac{1}{\sqrt{N!}}$$

bázis: $l_1 < l_2 < \dots < l_N$
így lesznek egyértelműek a kifejtési együtthatók.
Nem mindegy, mert ha csere $\Rightarrow$ -1-szeres szorzó

egységes jelölés bázisállapotokra: $|n_1, n_2, \dots, n_e, \dots\rangle$

bozonok:
$n_e = 0, 1, 2, \dots$

$$\sum_e n_e = N$$

fermionok
$n_e = 0, 1$
bázisfv: Slater-determináns
ahol $l_1 < l_2 < \dots < l_N$

Ortonormált rendszer

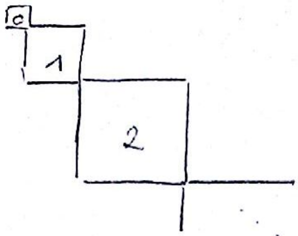
$$\langle \dots n_e' \dots | \dots n_e \dots \rangle = \begin{cases} 1 & n_e = n_e' \text{ minden } l\text{-re} \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

Fock-tér

Összes részecske állapot összegzése

N részecskés állapotterek „összege" + vákuum állapot
direkt összeg   0 részecske

bázis: $|n_1 n_2 \dots n_l \dots\rangle$ nincs megkötés $\sum_l n_l$-re



Operátorok

Részecske eltüntető és keltő operátorok
(velük minden kifejezhető)

Bozonok

$$a_l^+ |n_1 \dots n_l \dots\rangle = \sqrt{n_l+1}\, |n_1 \dots n_l+1 \dots\rangle$$

$$a_l |n_1 \dots n_l \dots\rangle = \sqrt{n_l}\, |\dots n_l-1 \dots\rangle$$

$$(a_l)^{+} = a_l^{+}$$ (adjungáltja)

$$\langle \dots n_l-1 \dots | a_l | \dots n_l \dots \rangle = \sqrt{n_l}$$

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

$$(\varphi_m, A\varphi_l)^* = (\varphi_l, A^+\varphi_m)$$

$$\parallel$$

$$(A\varphi_l, \varphi_m) = (\varphi_l, A^+\varphi_m)$$

$$[a_l, a_{l'}] = 0 \qquad [a_l, a_{l'}^+] = \delta_{ll'}$$

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

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

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

Statisztikus fizika 2012.03.20.

Fermionok

$$a_e|\ldots n_e\ldots\rangle = \begin{cases} 0 & n_e=0 \\ (-1)^{S_e}|\ldots n_e 0\ldots\rangle \end{cases} \qquad S_e=\sum_{e'<e} n_{e'}$$

eltüntetés $\Rightarrow$ első oszlopba hozzuk a determinánsban a törlendő részecskét, majd az oszlopot töröljük

$$a_e|\ldots n_e\ldots\rangle = n_e(-1)^{S_e}|\ldots n_e-1\ldots\rangle$$

$$a_e^+|\ldots n_e\ldots\rangle = \left.\begin{cases} 0 & n_e=1 \\ (-1)^{S_e} & |\ldots n_e=1\ldots\rangle \end{cases}\right\} = (1-n_e)(-1)^{S_e}|\ldots n_e+1\ldots\rangle$$

$$(a_e)^+ = a_e^+$$

$$a_e a_{e'}^+ + a_{e'}^+ a_e = \{a_e, a_{e'}^+\} = \delta_{e,e'}$$

$$\{a_e, a_{e'}\} = 0$$

Fock-tér 2012.09.27.

bázis $|n_1 \dots n_e \dots\rangle$

n_e : φ_e áll-ban lévő részecskék száma

$\{\varphi_e\}_{e=1}^{\infty}$ egyrészecske TONR

Bozonok | **Fermionok**

$n_e = 0, 1, \dots$

$a_e |\dots n_e \dots\rangle = \sqrt{n_e}\, |\dots n_e - 1 \dots\rangle$

$a_e^+ |\dots n_e \dots\rangle = \sqrt{n_e + 1}\, |\dots n_e + 1 \dots\rangle$

$[a_e, a_{e'}^+] = \delta_{e,e'} \quad [a_e, a_{e'}] = 0$

$a_e^+ a_e |\dots n_e \dots\rangle = n_e |\dots n_e \dots\rangle$

Fermionok:

$n_e = 0, 1$

$a_e |\dots n_e \dots\rangle = n_e (-1)^{s_e} |\dots n_e - 1 \dots\rangle$

$a_e^+ |\dots n_e \dots\rangle = (1 - n_e)(-1)^{s_e} |\dots n_e + 1 \dots\rangle$

$s_e = \sum_{e' < e} n_{e'}$

$\{a_e, a_{e'}^+\} = \delta_{ee'} \quad \{a_e, a_{e'}\} = 0$

$a_e^+ a_e |\dots n_e \dots\rangle = n_e |\dots n_e \dots\rangle$

$a_e a_{e'} = -a_{e'} a_e$

Slater-determinánsban 2 sor cseréje

A keltő és eltüntető op-kal bázisvektorok egymásba vihetők

Részecskeszám operátora:

$$N = \sum_e n_e = \sum_e a_e^+ a_e$$

ideális kvantumgáz: $\{\varphi_e\}$ egyrészecske energiasajátállapotok

$$H_1 \varphi_e = \varepsilon_e \varphi_e$$

Fock-tér definiálható az energiaállapotok betöltési számaival.

N részecske: $H_N = H_1(1) + H_1(2) + \dots = \sum_{i=1}^{N} H_1(i)$

szimmetrikus a részecskék felcserélésére

Fock-térben: $\varphi_{e_1}(1) \dots \varphi_{e_N}(N)$

$H_1(1)$ csak $\varphi_{e_1}(1)$-re hat $\Rightarrow$

$$H_N\big(\varphi_{e_1}(1) \dots \varphi_{e_N}(N)\big) = (\varepsilon_{e_1} + \varepsilon_{e_2} + \dots + \varepsilon_{e_N})\big(\varphi_{e_1}(1) \dots \varphi_{e_N}(N)\big)$$

Statisztikus fizika 2012.09.27.

$$H_N(\varphi_{e_1}(1)\dots\varphi_{e_N}(N)) = \left(\sum_e \varepsilon_e n_e\right)\varphi_{e_1}(1)\dots\varphi_{e_N}(N)$$

Spektrum: $\sum_e \varepsilon_e n_e$

$$H = \sum_e \varepsilon_e a_e^+ a_e \qquad N = \sum_e a_e^+ a_e$$

Nagykanonikus sokaság

$$\hat\rho = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta(H-\mu N)} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta\left(\sum_e(\varepsilon_e-\mu)a_e^+a_e\right)}$$

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-\mu N)}\right)$$ teljes Fock-térre vonatkozó összefüggések

Fock-tér tetszőleges bázison definiálható. Ennek összekötése:

$\{\varphi_e\}$ bázisra tetszőleges állapot: $\psi = \sum_e c_e \varphi_e$

Fock-térben: $|0\rangle$ vákuum

$\varphi_e \Rightarrow a_e^+|0\rangle$ (1 részecske φ_e állapotban)

$\psi \Rightarrow \underbrace{\sum_e c_e a_e^+}_{a_\psi^+}|0\rangle$ (1 részecske ψ állapotban)

Általánosítva:

$\{\tilde\varphi_m\}_{m=1}^{\infty}$ $\qquad$ $\{\varphi_e\}_{e=1}^{\infty}$ $\qquad$ TONR

b_m^+, b_m $\qquad$ a_e^+, a_e

$$\tilde\varphi_m = \sum_e c_{me}\varphi_e$$
$$\Downarrow$$
$$b_m^+|0\rangle = \sum_e c_{me} a_e^+|0\rangle$$

$$\left.\begin{aligned} b_m^+ &= \sum_e c_{me} a_e^+ \\ b_m &= \sum_e c_{me}^* a_e \end{aligned}\right\}$$ kanonikus transzformáció: kommutáló és antikommutáló relációkat nem befolyásolja.

Kanonikus transzformáció

$$[b_m, b_m^+] = \sum_e c_{me}^* \sum_{e'} c_{me'} \underbrace{[a_e, a_{e'}^+]}_{\delta_{e,e'}} = \sum_e c_{me}^* c_{me} = \sum_e |c_{me}|^2 = 1$$

bozon

fermionra antikommutátor hasonló

Speciális: téroperátorok

$\{\varphi_e\}_1^\infty$ bázis

$$\psi^+(x) = \sum_e \varphi_e^*(x) a_e^+ \quad \to x \text{ helyen keltett részecske}$$

$$\psi(x) = \sum_e \varphi_e(x) a_e \quad \to x \text{ helyen eltüntetett részecske}$$

Értelmezés: állapot „koordináta sajátvektor" (ami nincs) szerinti kifejtés

bozon:
$$[\psi(x), \psi^+(x')] = \delta(x-x')$$
$$[\psi(x), \psi(x')] = 0$$

fermion:
$$\{\psi(x), \psi^+(x')\} = \delta(x-x')$$
$$\{\psi(x), \psi(x')\} = 0$$

pl: bozon $[\psi(x), \psi^+(x')] = \sum_e \varphi_e(x) \sum_{e'} \varphi_{e'}^*(x') \underbrace{[a_e, a_{e'}^+]}_{\delta_{e,e'}} =$

$= \sum_e \varphi_e(x) \varphi_e^*(x') =$ l. állapotra való vetítés operátora

$= \delta(x-x')$ összes állapotra való vetítés

$$\int dx \underbrace{\psi^+(x)\psi(x)}_{\text{részecskeszám sűrűség}} = \int dx \sum_e \varphi_e^*(x) \sum_{e'} \varphi_{e'}(x) a_e^+ a_{e'} = \sum_e a_e^+ a_e = N$$

$$\int dx\, \varphi_e^*(x) \varphi_{e'}(x) = \delta_{e,e'}$$

felhasználtuk

$\psi^+(x) = \psi^+(\underline{r}, \sigma)$ hozzáadunk egy r helyen lévő σ spinű részecskét

$\psi(x) = \psi(\underline{r}, \sigma)$ eltüntetünk ...

$[\psi(x), \psi^+(x')] = \delta(x-x')$ $\quad [\psi(\underline{r}, \sigma), \psi^+(\underline{r}', \sigma')] = \delta(\underline{r}-\underline{r}')\delta_{\sigma\sigma'}$

Statisztikus fizika 2012. 09. 24.

téroperátor:

$$\psi^+(r,\sigma) = \sum_l \varphi_l^*(r,\sigma)\, a_l^+$$

1 kvantumszámokkal eltünteti és kelteni a lineár kombinációt

<u>T_1 egyrészecske operátor</u>

$\{\varphi_l\}_1^\infty$ TONR megadja a T_1 sajátfv-eit

$$T_1 \varphi_l = t_l \varphi_l \quad \text{sajátérték}$$

Fock-térben:

$$T_N = T_1(x_1) + \dots + T_1(x_N)$$

Az operátor egyes elemei csak 1 részecskére hatnak (pl. kinetikus energia)

Spektrum: $\sum_l t_l n_l$ (H-hoz hasonlóan) $\Rightarrow$ $T = \sum_l t_l a_l^+ a_l \Leftarrow$ bármely részecskeszámra igaz

Mit kell csinálni, ha másik bázison kell kifejezni?

$$t_l = (\varphi_l, T_1 \varphi_l) \quad (\varphi_l \text{ sajátfv.})$$

$$T = \sum_l t_l a_l^+ a_l = \sum_{l,l'} \underbrace{(\varphi_l, T_1 \varphi_{l'})}_{\text{itt } T_1 \text{ diagonális}} a_l^+ a_{l'}$$

$\{\tilde\varphi_m\}_1^\infty$ másik bázis:

$$\varphi_l = \sum_m c_{lm} \tilde\varphi_m$$

$$c_{lm} = (\tilde\varphi_m, \varphi_l) \qquad a_l^+ = \sum_m c_{lm} b_m^+$$

$$a_l = \sum_m c_{lm} b_m$$

$$(\varphi_l, T_1 \varphi_{l'}) = \sum_m c_{lm}^* \sum_{m'} c_{l'm'} (\tilde\varphi_m, T_1 \tilde\varphi_{m'})$$

$$T = \sum_{l,l'} \sum_{m,m'} c_{lm}^* c_{l'm'} (\tilde\varphi_m, T_1 \tilde\varphi_{m'})\, a_l^+ a_{l'}$$

ezt is elhagy lehetne, de MOST NE! MÉGIS

$$\cancel{\tilde\varphi_m = \sum_l c_{ml} \varphi_l} \qquad \tilde\varphi_m = \sum_l (\varphi_l, \tilde\varphi_m)\varphi_l =$$

$$\cancel{b_m^+ = \sum_l c_{ml} a_l^+} \qquad = \sum_l c_{lm}^* \varphi_l$$

$$b_m^+ = \sum_l c_{lm}^* a_l^+$$

$$T = \sum_{\ell,\ell'} \sum_{m,m'} c_{\ell m}^{*} c_{\ell' m'} (\tilde{\varphi}_m, T_1 \tilde{\varphi}_{m'}) a_\ell^+ a_{\ell'} =$$

$$\varphi_m = \sum_\ell (\varphi_\ell, \tilde{\varphi}_m) \varphi_\ell = \sum_\ell c_{\ell m}^{*} \varphi_\ell$$

$$b_m^+ = \sum_\ell c_{\ell m}^{*} a_\ell^+ \qquad b_m = \sum_\ell c_{\ell m} a_\ell$$

$$= \sum_{m,m'} b_m^+ b_{m'} T_{mm'}$$

$T = \sum_{mm'} T_{mm'} b_m^+ b_{m'}$ általános felírás egy tetszőleges TONB-n.

hullámfv helyett egy lineáris kombináció.
Eltüntetünk egy részecskét és létrehozunk egy olyat, ahol megfelelő súllyal szerepelnek a komponensek
$\underbrace{\text{megfelelő súllyal}}_{\text{mátrixelem}}$

egy mobil részecskét

Kinetikus energia

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \longrightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow$$ nincs az operátorban spinfüggés ⇓ szorzatalak

bázisfv.: $\varphi_{\underline{k},\sigma}(r,\sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}\underline{r}} \chi_s(\sigma)$ ⟵ szorzatalak

$\underline{k},\sigma$: kvantumszámok

$$\downarrow$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\underline{r}} \Leftarrow \underline{p} = \hbar\underline{k}$$

$$\chi_s(\sigma) = \begin{cases} \binom{1}{0} & s = 1/2 \\ \binom{0}{1} & s = -1/2 \end{cases}$$

z komponens kvantálása

Periodikus határfeltétel:

$$\underline{k}: \; e^{ik_x(x+L)} = e^{ik_x x} \Leftarrow k_x L = m_x 2\pi$$

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

Kinetikus energia sajátértéke

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

Koordinátaábrázolásban a mátrixelem:

$$\delta(\underline{r}-\underline{r}')\,\delta_{\sigma,\sigma'}\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)$$

$$T=\sum_\sigma\int d^3r\,\psi^+(\underline{r},\sigma)\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\psi(\underline{r},\sigma)$$

Általános eset:

$$T=\sum_{l,l'}t_{ll'}a_l^+a_{l'}=\sum_{l,l'}\sum_\sigma\int d^3r\,\varphi_l^*(\underline{r},\sigma)\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\varphi_{l'}(\underline{r},\sigma)\,a_l^+a_{l'}=$$

$$t_{ll'}=\sum_\sigma\int d^3r\,\varphi_l^*(\underline{r},\sigma)\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\varphi_{l'}(\underline{r},\sigma)$$

$$\psi^+(\underline{r},\sigma)=\sum_l\varphi_l^*(\underline{r},\sigma)a_l^+\quad(\text{def.})$$

$$\Rightarrow T=\sum_\sigma\int d^3r\,\psi^+(\underline{r},\sigma)\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\psi(\underline{r},\sigma)$$

ugyanaz mint feljebb

Kétrészecskés operátor

(Kölcsönhatás

potenciális energia: $\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j\\(i\neq j)}}v(\underline{r}_i,\underline{r}_j)$ ⇒ N részecskére definiálható

szimmetria miatt mindent 2x

⇓

A részecskék felcserélésére (~~invariáns~~) szimmetrikus

(Fock-térbeli alak

bázisok szorzata ⇒ kifejtesíti szorzatok lineárkombinációjával.

együtthatók: mátrixelemek

$$\frac{1}{2}\sum_{l_1,l_2,l_1',l_2'}\langle l_1'l_2'|v|l_1l_2\rangle\,a_{l_2'}^+a_{l_1'}^+a_{l_1}a_{l_2}$$

determináns 2-szorát tölti ki és írja be lineáris kombinációt.

⇒ tetszőleges részecskeszámra definiálható

2012. 10. 04.

Ideális kvantumgázok

Fock-tér

Egyrészecske-probléma

$$H_1 \varphi_\ell = \varepsilon_\ell \varphi_\ell \qquad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Erre építünk Fock-tér (ahányszor adott betöltési szám van

$$H = \sum_\ell \varepsilon_\ell a_\ell^+ a_\ell$$

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

Fock téren: összes bázisállapotra diagonálisok összege

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H-\mu N)} \qquad Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-\mu N)}\right)$$

nagykanonikus, hogy ne legyen kényszerfeltétel a részecskeszám

$$e^{-\beta(H-\mu N)} = e^{-\beta \sum_\ell (\varepsilon_\ell - \mu) a_\ell^+ a_\ell} = \prod_\ell e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu) a_\ell^+ a_\ell}$$

(Betöltési szám operátorok felcserélhetők

$\Downarrow$

Egymástól független fizikai rendszerek

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

összes lehetséges betöltési szám

$$= \sum_{\{n_\ell\}} \prod_\ell e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu) n_\ell} = \prod_\ell \underbrace{\sum_n e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu) n}}$$

bozonok: $n = 0, 1, 2, \dots$

$$\frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu)}}$$ konvergencia, ha

$$e^{-\beta(\varepsilon_\ell - \mu)} < 1 \quad \forall \ell\text{-re.}$$

akkor a legnagyobb, ha ε_0 alapállapotot veszem

Kémiai potenciál kisebb mint az egyrészecske alapállapot energia: $\mu < \varepsilon_0$

Statisztikus fizika 2012. 10. 04.

Fermionok:

$n = 0$ v. 1.

$$1 + e^{-\beta(\varepsilon_e - \mu)}$$

$$\mathcal{Z} = \begin{cases} \prod_e \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_e - \mu)}} & \text{bozon} \\ \prod_e \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_e - \mu)}\right) & \text{fermion} \end{cases}$$

$$\Phi = -k_B T \ln \mathcal{Z} \quad \text{termodinamikai potenciál}$$

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

$$\Phi = \pm k_B T \sum_e \ln\left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_e - \mu)}\right) \quad \left(\begin{smallmatrix}\text{bozon} \\ \text{fermion}\end{smallmatrix}\right)$$

H és N várható értékét a betöltési szám várható értékéből kapom meg

$$\bar{n}_e = \langle a_e^+ a_e \rangle$$

$$\langle a_e^+ a_{e'} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H - \mu N)} a_e^+ a_{e'}\right) =$$

$$= \frac{1}{\mathcal{Z}} \mathrm{Tr}\left(a_{e'} \underbrace{e^{-\beta(H - \mu N)}}_{\prod_e e^{-\beta(\varepsilon_e - \mu) a_e^+ a_e}} a_e^+\right) =$$

$a_{e'}$ felcserélhető az összes a_e^+, a_e-vel,

$$a_{e'} \prod_m e^{-\beta(\varepsilon_m - \mu) a_m^+ a_m}$$

kivéve $e = e'$-re, fermionok előjel szabálya nem jön be, mert 2 csere

$$a_{e'} e^{-\beta(\varepsilon_{e'} - \mu) a_{e'}^+ a_{e'}} = e^{-\beta(\varepsilon_{e'} - \mu)(a_{e'}^+ a_{e'} + 1)} a_{e'}$$

$$a f(a^+ a) = f(a^+ a + 1) a$$

$$= \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta(\varepsilon_{e'} - \mu)} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H - \mu N)} a_{e'} a_e^+\right) =$$

$$\langle a_e^+ a_{e'} \rangle = e^{-\beta(\varepsilon_{e'}-\mu)} \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-\mu N)} a_{e'} a_e^+\right) =$$

$$a_{e'} a_e^+ \mp a_e^+ a_{e'} = \delta_{ee'} \quad \left(\begin{matrix}\text{bozon}\\ \text{fermion}\end{matrix}\right)$$

$$= e^{-\beta(\varepsilon_{e'}-\mu)} \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-\mu N)} \left(\delta_{ee'} \pm a_e^+ a_{e'}\right)\right) \quad \left(\begin{matrix}\text{bozon}\\ \text{fermion}\end{matrix}\right)$$

$$\mathrm{Tr}(A) + \mathrm{Tr}(B) = \mathrm{Tr}(A+B)$$

$$e^{\beta(\varepsilon_{e'}-\mu)} \langle a_e^+ a_{e'} \rangle = \delta_{ee'} \pm \langle a_e^+ a_{e'} \rangle$$

$$\left(e^{\beta(\varepsilon_{e'}-\mu)} \mp 1\right) \langle a_e^+ a_{e'} \rangle = \delta_{ee'}$$

$$\langle a_e^+ a_{e'} \rangle = \frac{\delta_{ee'}}{e^{\beta(\varepsilon_{e'}-\mu)} \mp 1} = \bar{n}_e \delta_{ee'}$$

Muszáj ugyanazt a részecskét leadni, mint, amit elvettünk.

Bármely operátor várható értéke kiszámítható egy technikával úgy, hogy a betöltési szám operátorral kifejezhető

$$\langle \underbrace{a^+ \dots a^+}_{n} \underbrace{a \dots a}_{n} \rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-\mu N)} a^+ \dots a^+ a \dots a\right) =$$

Ez az egész csak ideális gáz esetén érvényes

$$= e^{-\beta(\varepsilon_e-\mu)} \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-\mu N)} a a^+ \dots a^+ a \dots a\right)$$

a^+-eken átemelve. δ $(n-1)$db pár és odébb ment.

a-kon simán átemelhető

$\downarrow$

$n-2$-re visszavezethető

⋮

1 párra már levezettük.

$$\bar{n}_e = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_e-\mu)} \mp 1}$$

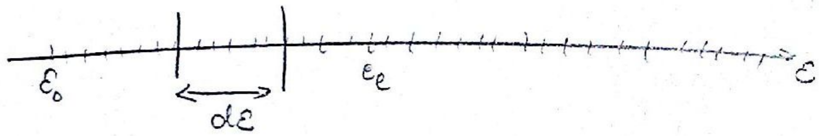
Statisztikus fizika 2012. 10. 04.

$$\boxed{\begin{aligned} \bar{n}_l &= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_l-\mu)} \mp 1} \\ \Phi &= \pm k_B T \sum_l \ln\left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_l-\mu)}\right) \\ E &= \langle H \rangle = \sum_l \varepsilon_l \bar{n}_l \\ N &= \sum_l \bar{n}_l \end{aligned}}$$

$$N(T,\mu) \Rightarrow \mu(T,N) \Rightarrow E(T,\mu(T,N))$$

Termodinamikai határeset: egyrészecske energiaszintek besűrűsödnek.

Állapotsűrűség (egyrészecske-állapotsűrűség)



Energiaszintek száma $d\varepsilon$ tartományban: $D(\varepsilon)d\varepsilon$

Általában:

$$D(\varepsilon) = \sum_l \delta(\varepsilon - \varepsilon_l)$$

formális felírás, de nem jó semmire

termodinamikai határesetre besűrűsödnek

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

$$\sum_l \ldots = \int d\varepsilon\, D(\varepsilon) \ldots$$

kontinuumra való összegzés

$$\boxed{\begin{aligned} \Phi &= \pm k_B T \int d\varepsilon\, D(\varepsilon) \ln\left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right) \\ E &= \int d\varepsilon\, D(\varepsilon)\, \bar{n}(\varepsilon)\, \varepsilon \\ N &= \int d\varepsilon\, D(\varepsilon)\, \bar{n}(\varepsilon) \end{aligned}}$$

Állapotsűrűség meghatározása:

Szabad részecskék V térfogatban
(DE Bloch-elektronok periodikus potenciálban szabadon)

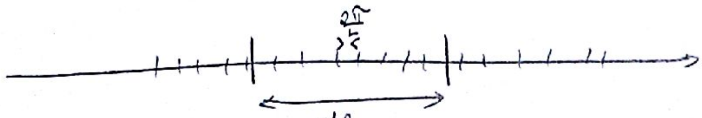
$$l \Rightarrow k, \sigma$$

$$\varepsilon_l \Rightarrow \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

periodikus határfeltétel

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

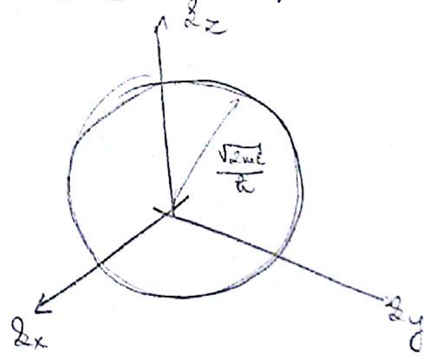
termodinamikai határesetben az impulzus értékek nagyon sűrűn, mert $L \to \infty$



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

$$\sum_k \dots = \underbrace{\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3}_{\frac{V}{(2\pi)^3}} \int d^3k$$

$\Omega(\varepsilon)$ ε-nál kisebb energiájú állapotok száma



$$\Omega(\varepsilon) = \sum_{k,\sigma} 1 =$$

mellékfeltétel: $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} < \varepsilon$

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

spin beállás

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

$$D(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{d\Omega(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon$$

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

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

V: termodinamikai paraméter
ε függő
többi a részecske paraméter.

Hullámszám szerinti integrál változócseréje: energia.

Statisztikus fizika 2012. 10. 04.

$$\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k\, f(\varepsilon(k)) = \frac{V}{(2\pi)^3}\, 4\pi \int_0^\infty dk\, k^2 f(\varepsilon(k)) =$$

$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ $\qquad d\varepsilon = \frac{\hbar^2 k}{m}\, dk$

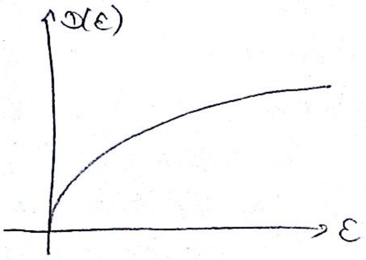
diszperziós reláció

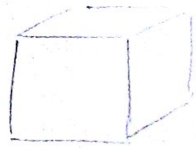
$$= \frac{V}{(2\pi)^3}\, 4\pi \int_0^\infty d\varepsilon \frac{m}{\hbar^2}\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}\, f(\varepsilon) =$$

$$= \frac{V}{h^3}\, 2\pi (2m)^{3/2} \int d\varepsilon\, \varepsilon^{1/2} f(\varepsilon)$$

Periodikus határfeltétel (kocka dobozban)

Az állapotsűrűség a térfogattal arányosan növekszik

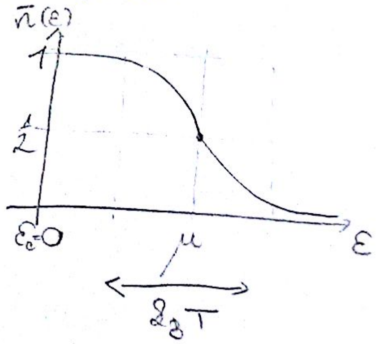




k jó kvantumszám, diszperziós reláció ($\varepsilon(k)$) ismeretében energiára könnyű áttérni.

Ideális fermion-gáz : $D(\varepsilon)$ ismert

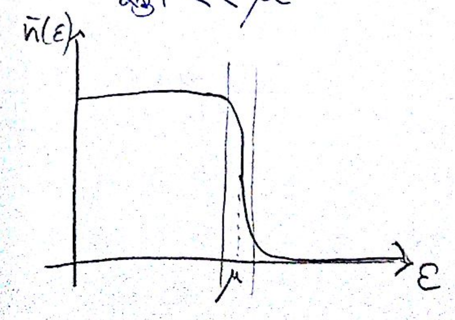
$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$

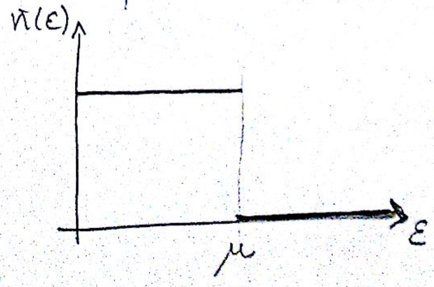


μ is energia ε_0 eltolásával azt is el kell tolni.

Erősen degenerált fermion gáz

$k_B T << \mu$ $\qquad T=0 \quad \beta\to\infty$





$T=0$: a rendszer alapállapota valósul meg

Minden állapotban a legalacsonyabbtól feltöltve részecskék μ-ig. $\Rightarrow$ $\mu(T=0)=\varepsilon_F$ Fermi energia

$$E_0=\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, \varepsilon D(\varepsilon)$$

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

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

Sommerfeld-Bethe-sorfejtés

$$\int_0^\infty d\varepsilon\, F(\varepsilon)\bar{n}(\varepsilon)=\int_0^\mu d\varepsilon\, F(\varepsilon)+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2F'(\mu)$$

$(k_BT)^n$ hatványai szerint haladó aszimptotikus sor

$e^{-\varepsilon_F/k_BT}$ hibákkal

adott közelítésben nem lesz jobb eredmény a magasabb rendekkel csak jobban összesimul

$$\text{I.}\quad N=\int_0^\infty d\varepsilon\, D(\varepsilon)\bar{n}(\varepsilon)=\int_0^\mu d\varepsilon\, D(\varepsilon)+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2D'(\mu)$$

$$E=\int_0^\infty d\varepsilon\, D(\varepsilon)\bar{n}(\varepsilon)\varepsilon=\int_0^\mu d\varepsilon\, D(\varepsilon)\varepsilon+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\left(\mu D'(\mu)+D(\mu)\right)$$

Mit lehet mérni? hőkapacitást

Ehhez E rögzített N melletti meghatározása

$N(\mu,T)\Rightarrow\mu(T,N)\Rightarrow E(N)$

Feltételezés:

$\mu-\varepsilon_F\sim(k_BT)^2$

$$T=0\qquad \text{II.}\quad N=\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, D(\varepsilon)$$

$$\text{I.}-\text{II.}\quad 0=\underbrace{\int_{\varepsilon_F}^{\mu} d\varepsilon\, D(\varepsilon)}_{}+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2D'(\mu)\quad\Rightarrow(k_BT)^2\text{ rendig szeretnénk számolni}$$

legalacsonyabb rendben

$$0=(\underbrace{\mu-\varepsilon_F}_{(k_BT)^2})D(\varepsilon_F)+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2D'(\varepsilon_F)$$

$$(\mu-\varepsilon_F)\,D(\varepsilon_F) = -\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\,D'(\varepsilon_F)$$

$$\mu-\varepsilon_F = -\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\,\frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)}$$

Ha az állapotsűrűség ε_F-nél nő $\Rightarrow \mu$ csökken

$$E = \underbrace{\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, D(\varepsilon)\,\varepsilon}_{} + \underbrace{\int_{\varepsilon_F}^{\mu} d\varepsilon\, D(\varepsilon)\,\varepsilon}_{} + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\left(D(\mu)+\mu D'(\mu)\right) =$$

$(k_BT)^2$ rendben: $= E_0 \quad + \underbrace{(\mu-\varepsilon_F)\,D(\varepsilon_F)}_{-\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2 D'(\varepsilon_F)}\varepsilon_F + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\left(D(\varepsilon_F)+\varepsilon_F D'(\varepsilon_F)\right) =$

$$E = E_0 + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\,D(\varepsilon_F)$$

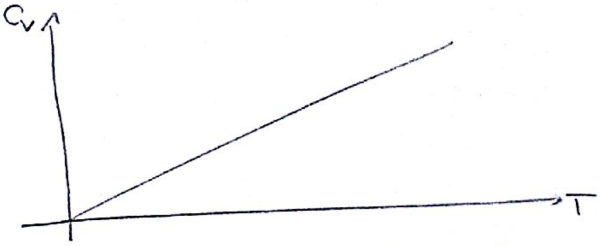
csak a Fermi energiában vett állapotsűrűség számít a hőkapacitásban

(Persze:

Alacsony hőmérsékleten közel a lépcsőhöz minden változás csak a F. felületen történik.

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{\pi^2}{3}k_B^2\,T\,D(\varepsilon_F)$$ $\Rightarrow$ hőmérséklet lineáris fv-ként tart 0-hoz.

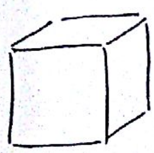
N és V az ε_F-ban



kölcsönható fermionrendszerek úgy viselkednek mint az ideális gáz

vezetési elektrongáz, ^3He folyadék (3 mK felett)

alacsony T: fononok T^3-os függésű fajhőjét a lineáris T alá kell vinni:



$$D(\varepsilon) = A\cdot V\sqrt{\varepsilon}$$
$$D(\varepsilon_F) = A\cdot V\sqrt{\varepsilon_F}$$

$$T=0 \Rightarrow N = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, D(\varepsilon) = AV\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, \varepsilon^{1/2} = AV\,\frac{2}{3}\,\varepsilon_F^{3/2} = \frac{2}{3}\,\varepsilon_F D(\varepsilon_F)$$

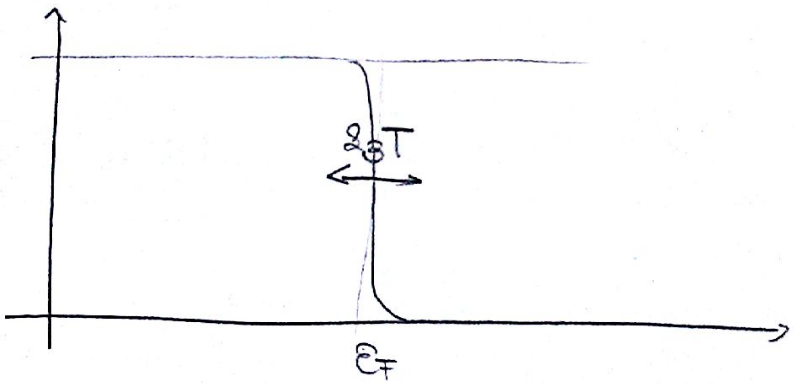
$$\varepsilon_F = \left(\frac{3}{2}\frac{N}{AV}\right)^{2/3}$$

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

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T D(\varepsilon_F) = \frac{\pi^2}{2} k_B \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right) N$$

Olyan mint az egyrészecskére jutó klasszikus hőkapacitás. $\left(\frac{1}{2}k_B\right)$

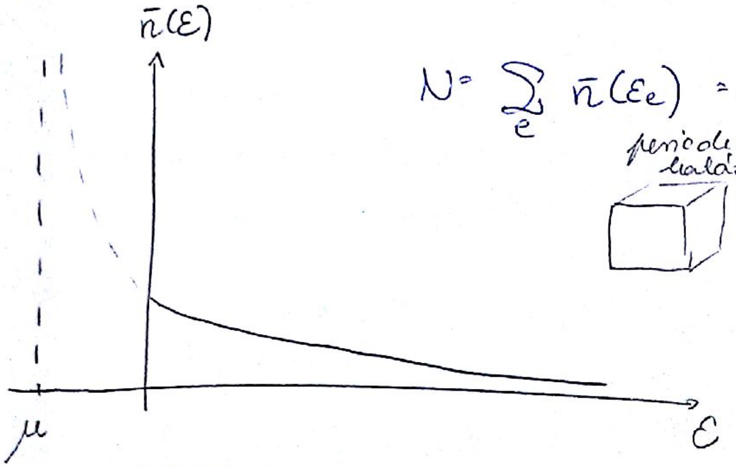
Kvantumos ebben különbözik



$\frac{k_BT}{\varepsilon_F}$ része a részecskéknek gerjeszthető, mindegyik k_B-val járul hozzá

Ideális bozon gáz

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} \qquad \mu<\varepsilon_0 \Rightarrow \text{ne legyen } \bar{n}<0 \qquad \varepsilon_0 \overset{!}{=} 0$$



$$N = \sum_\ell \bar{n}(\varepsilon_\ell) = AV\int_0^\infty d\varepsilon\, \varepsilon^{1/2}\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} + \frac{1}{\underbrace{e^{-\beta\mu}-1}_{N_0}}$$

periodikus határfeltétel dobozban

$\varepsilon=0$ energiájú állapot ebben nem szerepel, pedig a BEC éppen ebben az állapotban lesz makroszkopikus mennyiségben

$\Leftarrow$ kell egy + tag

$\varepsilon_0=0$ nem látszik, de $\mu=\varepsilon_0$-nál van divergálás

dimenziótlanítás, hogy lássuk a paraméterektől való függést.

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

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

azt lehetne hinni, hogy termodin. hat. esetben 0.

$\alpha \to 0$ végtelen nagy lenne, de $\frac{N}{V}$ véges

Egyre nagyobb α-ra egyre kisebb

$I(\alpha)$ α monoton csökkenő fv-e.

$\alpha=0$-ban is véges $I(\alpha)$

$$I(0) = \int_0^\infty dx\, x^{1/2}\frac{1}{e^x-1} = \int_0^\infty dx\, x^{1/2}\frac{e^{-x}}{1-e^{-x}} =$$

geometriai sor összege

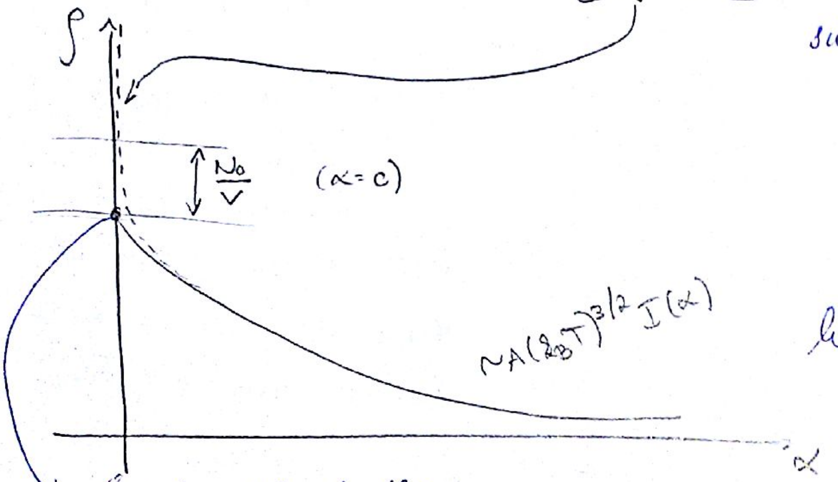
$$= \int_0^\infty dx\, x^{1/2} e^{-x}\sum_{\ell=0}^\infty e^{-\ell x} = \int_0^\infty dx\, x^{1/2}\sum_{\ell=1}^\infty e^{-\ell x} \underset{s=\ell x}{=}$$

$$= \sum_{\ell=1}^\infty \frac{1}{\ell^{3/2}}\int_0^\infty ds\, s^{1/2} e^{-s} = \sum \frac{1}{\ell^{3/2}}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \sum \frac{1}{\ell^{3/2}}\frac{1}{2}\overbrace{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}^{\frac{\sqrt{\pi}}{2}}$$

$$I(c) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \underbrace{\sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{1}{\ell^{3/2}}}_{\text{Riemann-féle } \zeta\text{-függvény}} \qquad \zeta\left(\tfrac{3}{2}\right) = 2{,}612$$

$$\zeta(x) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{1}{\ell^{x}}$$

$$\rho = \frac{N}{V} = A(k_B T)^{3/2} I(\alpha) + \underbrace{\frac{1}{V} \frac{1}{e^{\alpha}-1}}$$



sűrűséget növelve az α egyre kisebb

$\frac{N_0}{V}$ összemérhető a teljes sűrűséggel

hőmérsékletet csökkentve egyszercsak $\frac{N_0}{V}$ újból összemérhető lesz ρ-val

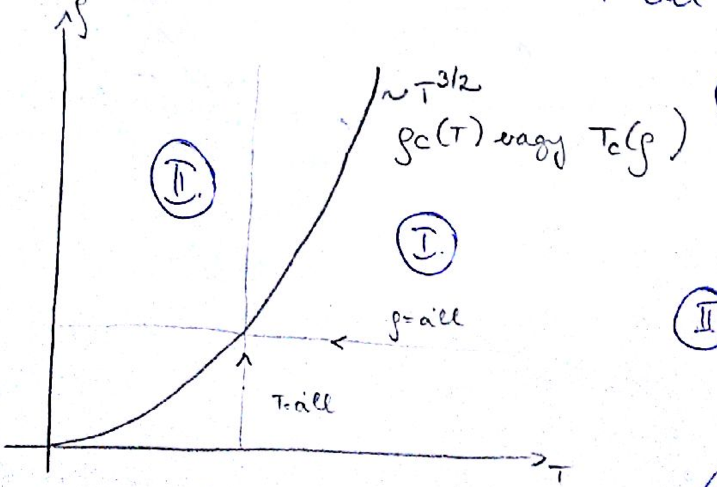
határ hőmérséklet

$$\rho = \frac{N}{V} = A(k_B T_c)^{3/2} I(\alpha = 0)$$

$\rho =$ áll mellett csökken a T akkor van egy T_c

határsűrűség $\rho_c = A(k_B T)^{3/2} I(\alpha = 0)$

$T =$ áll ρ növekszik



I. $\frac{N_0}{V} = \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\alpha}-1} \sim \frac{1}{V}$

$\alpha < 0$

II. $\frac{N_0}{V} = \frac{N}{V}$

$\alpha = 0$

(persze igazából sose 0)

$$\frac{N_0}{V} = \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\alpha}-1} \underset{\alpha \to 0}{\simeq} \frac{1}{V} \frac{1}{\alpha} \Rightarrow \frac{1}{\alpha} \sim N \Rightarrow \alpha \sim \frac{1}{N}$$

Olyan mintegy fázisátalakulás

Kritikus görbe választja el a 0 és véges paramétert (α)

$T=T_c$

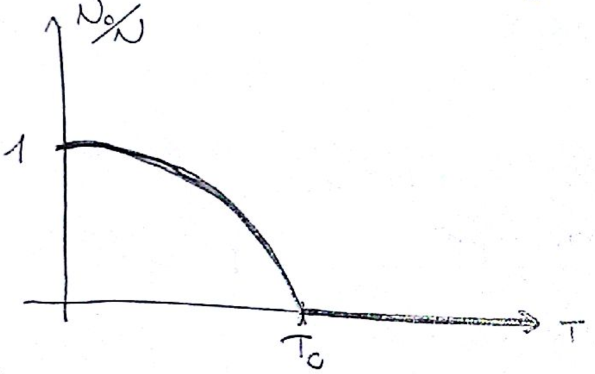
$$N = VA\,(k_B T_c)^{3/2}\, I(0)$$

$T<T_c$

$$N = VA\,(k_B T)^{3/2}\, I(0) + N_0 = \frac{N}{(k_B T_c)^{3/2}}(k_B T)^{3/2} + N_0$$

$$VA\,I(0) = \frac{N}{(k_B T_c)^{3/2}}$$

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



BEC

1 db kvantumáll-ban makroszkopikus menny. részecske gyűlik össze (az alapállapotban)

És az 1. gerj. áll-ban nem gyűlnek így össze?

$$\varepsilon_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\pi^2}{L^2} \sim \frac{1}{L^2} \sim \frac{1}{V^{2/3}}$$

k $\frac{2\pi}{L}$-ként nő

betöltési szám $\quad \beta(\varepsilon_1-\mu) \ll 1$

$$\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_1-\mu)}-1} \approx \frac{1}{\beta(\varepsilon_1-\mu)-1} \overset{\mu=0}{\approx} \frac{1}{\beta\varepsilon_1} \sim V^{2/3}$$

$T<T_c(\rho)$ $\quad \mu \sim \frac{1}{V} \qquad \varepsilon_1 - \mu$, $\varepsilon_1 \to \frac{1}{V^{2/3}}$, $\mu \to \frac{1}{V}$ $\quad \to \mu=0$

sűrűség: $\frac{V^{2/3}}{V} = V^{-1/3}$

nem dúsul fel úgy, mint az alapállapot már az 1. gerjesztett állapot se.

$$N_0 \sim \frac{1}{-\beta\mu} \sim V \qquad \frac{N_0}{V} \sim 1$$

1. gerjesztett állapot.

$$N_1 \sim \frac{1}{\beta(\varepsilon_1-\mu)} \sim \frac{1}{1/V^{2/3}} \sim V^{2/3} \qquad \frac{N_1}{V} \sim \frac{1}{V^{1/3}}$$

kondenzáció (gáz $\xrightarrow[\text{nyomás}]{\text{össze-}}$ folyadék alul)

BEC impulzustérben 0 impulzus állapotban jelennek meg nagy sűrűséggel részecskék

Megfigyelhetőség:

1. • ^4He bozon

• alacsony hőmérsékleten folyadék ⇒ erősen kh-ó
• nem ideális Bose-gáz
• kondenzáció lejátszódik
• $\frac{N_0}{N} \sim$ 8-10%

2. $\underbrace{\text{Csapdázott}}$ ritka bozon-gáz

időben váll.-ó mágn. tér ⇒ harm. pot.
⇓
optikai hűtés

^{87}Rb magspin: 3/2, külső elektron: 1/2 } zárt héj: L = 0, S = 0; teljes spin: 2 v 1 bozon

$\frac{N}{V} \sim 10^{12}$-10^{14} $1/cm^3$ ⇒ kh szerepe lecsökken atom méretéhez képest nagy távra.

$T_c \sim$ 200 nK - 2 μK

(Mint a lézer ott is egy állapotban a fotonok :))

Eddig 0 spinű. Nem 0 spinű: megfelelő szorzó

0 spinű Hamilton-operátor

$$\Downarrow$$

$$H = \sum_k \left(\varepsilon_k a_k^+ a_k\right) + \nu a_0 + \underbrace{\nu^* a_0^+}$$

azért kell ez is, mert $H = H^+$!

- $[H, N] \neq 0$

Fock-térben összekötöl kül. rész. számhoz tartozó op-kat

$$\Downarrow$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H-\mu N)} \qquad [\hat{\rho}, N] \neq 0$$

Sajátállapotok: kül. rész. számhoz tartozók

- $\nu \neq 0 \Rightarrow \langle a_0 \rangle \neq 0$

$$\nu \to 0 \quad \begin{cases} \langle a_0 \rangle \to 0 & \frac{N}{V} < \rho_c(T) \\ \langle a_0 \rangle \to \text{véges} & \frac{N}{V} > \rho_c(T) \Rightarrow \text{BEC mögött } \langle a_0^+ \rangle \text{ is véges} \end{cases}$$

$\nu = 0$ és $\nu \to 0$ nem cserélhető fel $\Rightarrow \nu \to 0$ aszim.

Sérti a részecskeszám megmaradás törvényét

Gyengén kölcsönható rendszerek

Csak a legalsó gerjesztett áll.-t kell figyelembe venni

úgy viselkednek a gerjesztések, mint az ideális gáz

gerjesztések <-> kvázirészecskék

Egyensúly körüli rezgések

lineáris oszcillátor:

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

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

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

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

$$[a, a^+] = \frac{m\omega_0}{2\hbar}\left[\left(x + i\frac{p}{m\omega_0}\right), \left(x - i\frac{p}{m\omega_0}\right)\right] =$$

$$= \frac{m\omega_0}{2\hbar}\left\{ -\left[x, i\frac{p}{m\omega_0}\right] + i\left[\frac{p}{m\omega_0}, x\right]\right\} =$$

$$= \frac{i}{2\hbar}\left\{ -\underbrace{[x, p]}_{-\frac{\hbar}{i}} + \underbrace{[p, x]}_{\frac{\hbar}{i}} \right\} = 1$$

$$[a, a] = 0 \qquad [a^+, a^+] = 0$$

a^+a sajátfv-ei egész számokkal jellemezhetők

$$a^+a\,|n\rangle = n\,|n\rangle$$

$$a\,|0\rangle = 0$$

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 = \frac{\hbar\omega_0}{2}(\underbrace{aa^+}_{1+a^+a} + a^+a) = \hbar\omega_0(a^+a + 1/2)$$

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

<u>Adott hőmérsékleten az energia várható értéke:</u>

energia $\sim a^+a$

$$\langle a^+a\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}}\, Tr\left(e^{-\beta\hbar\omega_0 a^+a}\, a^+a\right)\underbrace{e^{-\beta\frac{\hbar\omega_0}{2}}}_{} =$$

$\mathcal{Z}$-ben is benne van

$$\mathcal{Z} = Tr\left(e^{-\beta\hbar\omega_0 a^+a}\right)e^{-\beta\frac{\hbar\omega_0}{2}}$$

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

$$\bar{E} = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

olyan mint az ideális gázban a betöltési szám várható értéke, csak mivel gerjesztett állapotok olyanok, mintha a bepakolt részecskék számát vizsgálnánk.

Szilárd test alacsony hőmérsékleten

Egyensúly körüli kis rezgéseknek felelnek meg a gerjesztések

$\underline{r}_i$: i. atom helyvektora

$\underline{R}_i$: i. atom egyensúlyi helyzete $\Big\}\ \underline{r}_i = \underline{R}_i + \delta\underline{r}_i$

Összes koordinátát is meg tudom sorszámozni

$$\underbrace{1\ 2\ 3}_{\underline{r}_1}\ \underbrace{4\ 5\ 6}_{\underline{r}_2}\ \dots \qquad \delta\underline{r}_i \Rightarrow u_l \qquad i=1,\dots,N \quad l=1,\dots,3N$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{3N}\frac{p_l^2}{m_l} + U_0 + \frac{1}{2}\sum_{l,l'}\Phi_{ll'}u_l u_{l'} \qquad \Phi_{ll'} = \frac{\partial^2 U}{\partial u_l \partial u_{l'}}$$

minimum körül sorfejtés

szimmetrikus mátrix

pozitív definit (?)

(lehet 0 sajátértékei)

$$P_l = \frac{p_l}{\sqrt{m_l}} \qquad U_l = \sqrt{m_l}\,u_l \quad \Bigg\}\ \text{kanonikus transzf.} \quad [U_l, P_l] = \frac{\hbar}{i}$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{3N}\underbrace{P_l^2}_{} + \frac{1}{2}\sum_{ll'=1}^{3N}\underbrace{D_{ll'}}_{} U_l U_{l'} + U_0 \qquad D_{ll'} = \frac{\Phi_{ll'}}{\sqrt{m_l m_{l'}}}$$

diagonális marad

szim. mátrix ortogonális trafóval diagonalizálható

$$\mathcal{H} = \sum_{l=1}^{3N}\left(\frac{\Pi_l^2}{2} + \frac{1}{2}\underbrace{\omega_l^2}_{} Q_l^2\right) + U_0$$

$D_{ll'}$ sajátértékei.

Az egyensúly körüli kis rezgések mindig felírhatók harmonikus oszcillátorként $\Rightarrow$ annyi, ahányféle kitérés lehetséges.

Szilárd test: transzláció + forgásszimmetria
(1.) (2.)

(1.) 3 irány, ahol pot. e. sajátértékei nem változnak
elmozduláshoz tartozó sajátérték: 0

(2.) 3 irány — —

(1.) + (2.) 6 db sajátérték = 0

3N-6 rezgési módus marad.

$$\mathcal{H} = \sum_{e=1}^{3N-6} \hbar\omega_e \left(a_e^+ a_e + \frac{1}{2}\right) + U_0 = \qquad \left(\mathcal{H} = \sum_{e=1}^{3N} \left(\frac{\Pi_e^2}{2} + \frac{1}{2}\omega_e^2 Q_e^2 \right) + U_0 \right)$$

$$a_e = \sqrt{\frac{\omega_e}{2\hbar}} \left(Q_e + i\frac{\Pi_e}{\omega_e} \right)$$

$$= \underbrace{\sum_{e=1}^{3N-6} \hbar\omega_e a_e^+ a_e}_{} + \underbrace{E_0}_{\text{alapállapot}} \qquad E_0 = U_0 + \sum_{e=1}^{3N-6} \frac{\hbar\omega_e}{2}$$

$\Downarrow$ $\rightarrow$ Olyan mint az ideális kvantumgáz Hamilton-operátora

Hipotetikus ideális gáz H-operátora

Nem igazi részecskék $\Rightarrow$ kvázirészecskék (fononok)

Kémiai potenciál nem jelenik meg, mert a fononok száma nincs korlátozva, nincs megmaradás, termikus gerjesztéssel bármennyi keltható.

Állapotösszeg:

$$\mathcal{Z} = Tr\left(e^{-\beta H}\right) = Tr\left(e^{-\beta \sum_{e=1}^{3N-6} \hbar\omega_e a_e^+ a_e + E_0}\right) =$$

$$= \underbrace{Tr\left(e^{-\beta \sum_e \hbar\omega_e a_e^+ a_e}\right)}_{\text{Nagykanonikus sokaság ideális Bose-gáz állapotösszeg, } \mu \text{ nincs.}} e^{-\beta E_0}$$

$$Z = \underbrace{Tr\left(e^{-\beta \sum_e \hbar\omega_e a_e^+ a_e}\right)}_{\prod_e \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega_e}}} e^{-\beta E_0}$$

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

formálisan olyan, mintha $\mu = 0$

de igazából nincs μ!

$$E = E_0 + \sum_e \hbar\omega_e \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_e}-1}$$

Egyrészecske energiaszintek $\hbar\omega_e$

l rezgési szinteken, módusokon fut végig

ideális Bose-gáz.

Látható a kvázirészecske fogalma.

Hőmérséklet emelése: egyre nagyobb amplitúdójú rezgés

$\Downarrow$ érzik, hogy a potenciál „sorba van fejtve", igazából nem harmonikus

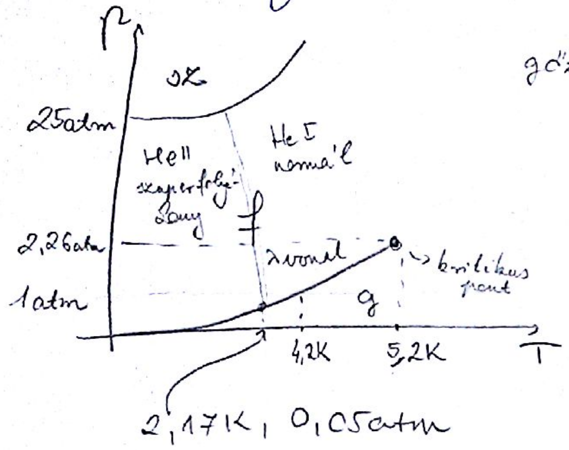
Erős gerjesztéssel $\Rightarrow$ sok fonon $\Rightarrow$ nem jó modell akkor a kvázirészecske-kép.

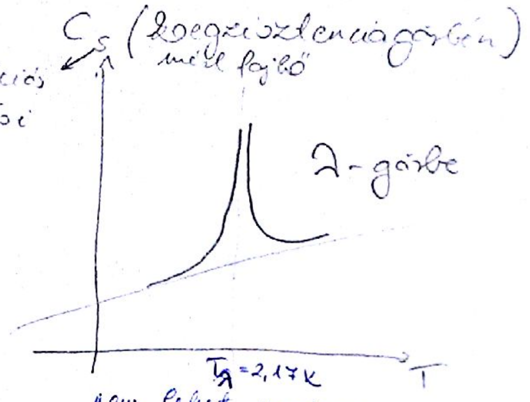
Generated by CamScanner from intsig.com

2012.10.18.

Műhely: ^4He $2p + 2n + 2e$ bozon

Fázisdiagram





nem lehet pontosan a $\underbrace{T_\lambda\text{-re állni}}_{\text{súlytalanság} \to \text{űr} \Rightarrow \text{éles görbe}}$

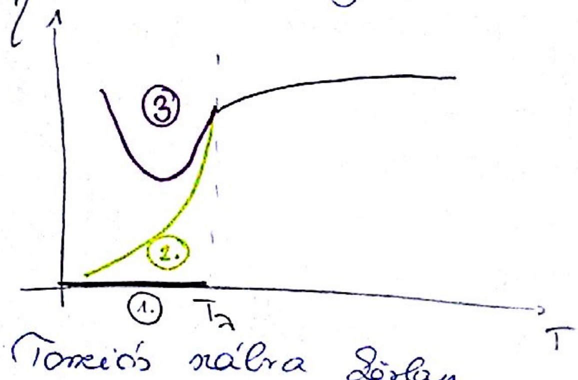
pontos hőmérséklet beállítás $\Rightarrow$ nyomás állítás, majd megvárom a folyadék-gőz egyensúlyt

Viszkozitás mérés

1. Bizonyos nyomáskülönbség adott hozamot eredményez

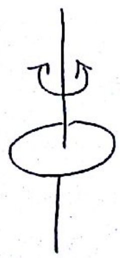
hozam: $Q = \frac{\pi a^4}{8\eta}\rho\frac{\Delta p}{\ell}$

He II akadály nélkül megy át a kapillárison



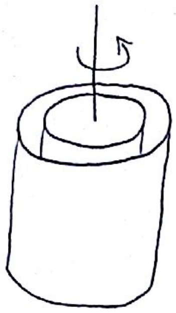
2. Torziós szálra körlap

rezgetés $\Rightarrow$ viszkozitás miatt csillapítás



csillapítás: $\sim\sqrt{\rho\eta}$

(3.) forgatókunyomatek



$M \sim \eta \omega$

Edényben He : kimászik

He folyadékba, ahol belső szint alacsonyabban => bemászik

Egyensúlyban => He-gáz lecsúszás => forr => He lehűl =>

=> T_λ teljesen sima lesz a felület => párolgás

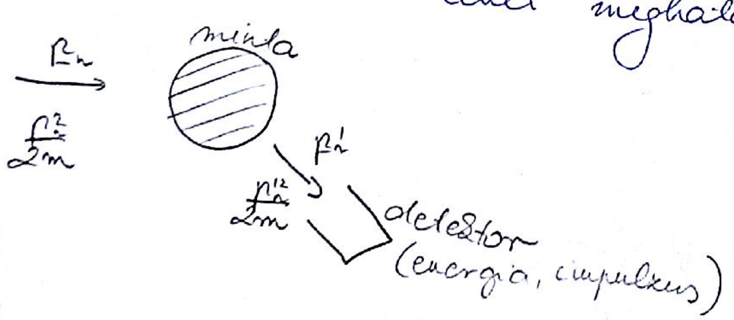
hőmérsékletkiegyenlítés: hullámokkal

azonnal megjelenik a hőm. változás, mint máskor a folyadékban a Pascal-tv. szerint a nyomás

Máskor csak egy hullámhossztól függő mélységig megy be a hőmérsékletváltozás

Elemi gerjesztések spektruma

neutronszórással lehet meghatározni



Impulzusmegmaradás:

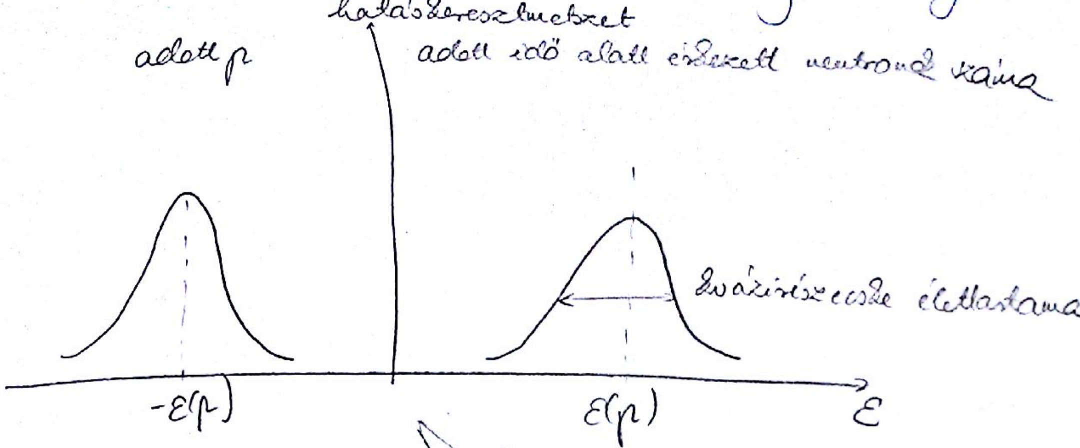
~~$p_n' - p_n = p$~~ minta által felvett impulzus

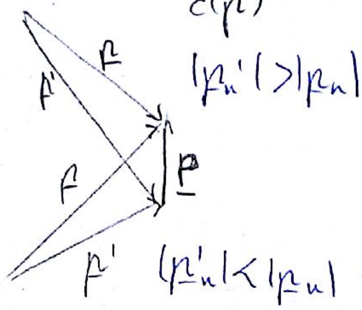
$p_n - p_n' = p$

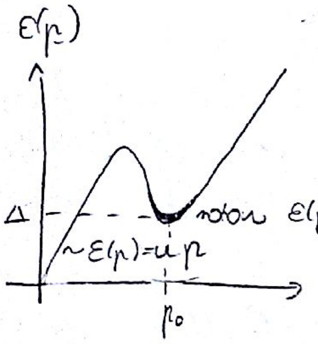
Energiamegmaradás:

$\frac{p^2}{2m} - \frac{p'^2}{2m} = \varepsilon(p)$ mintának átadott energia csak adott $\varepsilon(p)$ fordulhat elő ⇒ elemi gerjesztések,

kvázirészecskék energiaspektrumát adják meg.







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

parabolával közelítem

hanghullámnak impulzussal arányos frekvenciája van.

$u=239\,m/s$ hanghullámok (sűrűséghullámok) → fononok

$\frac{p_0}{\hbar}=1{,}9\cdot10^8\,\frac{1}{cm}$ $\qquad \frac{\Delta}{k_B}=8{,}7\,K$ $\qquad m^*=0{,}16\,m_{He}$

Bárhová állítom az energiát, mindig lesz alacsonyabb energiás fonon.

nagy energia miatt

$e^{-\beta\cdot E}\sim e^{-8{,}7}$ nagyon pici

kicsi a gerjesztés valószínűsége, de nagyon sok állapot van, mert vízszintes érintővel megy az állapot sűrűség

$$D(\varepsilon)d\varepsilon=4\pi p^2dp=4\pi p^2\frac{dp}{d\varepsilon}d\varepsilon$$

$$\frac{d\varepsilon}{dp}=\frac{1}{m^*}(p-p_0)=\frac{1}{m^*}\sqrt{2m^*(\varepsilon-\Delta)}$$

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

Statisztikus fizika 2012. 10. 18.

energiaspektrummal az elemi gerjesztések ideális gázaként kezelhető. gerjesztések ⇒ energia, szabadenergia, fajhő

Elemi gerjesztések (kvázirészecskék) gáza: energia: $\sum_p \varepsilon(p) n(p)$

Lehet ilyen energiát átadni ⇒ gerjesztünk 1 részecskét.

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

$$\bar{E} = \sum_p \varepsilon(p)\,\bar{n}(p)$$ nincs megmaradás a részecskeszámra ⇓ nincs μ

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

$$p = \hbar k$$

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

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

Kvázirészecskék száma:

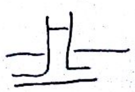
(Betöltési számok összege:

$$\bar{N} = \frac{V}{h^3}\int d^3p\, \bar{n}(p)$$

$$\bar{E} = E_0 + \overbrace{E_f + E_r}^{\text{fonon és roton járulék}}$$ $$\bar{F} = E_0 + F_f + F_r$$

$$\bar{N} = \bar{N}_f + \bar{N}_r$$

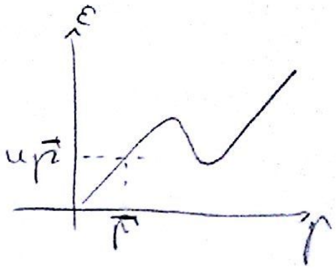
többi rész járuléka kicsi lesz a magas energia miatt alacsony hőmérsékleten.

Kapitza-kapilláris  (1.)

fonon

$$E_f = \frac{V}{h^3}\int d^3p\, \varepsilon(p)\,\bar{n}(p)$$

Spektrum nem függ p irányától => polárkoord.



$$E_f = \frac{V}{h^3}\int_0^{\bar{p}} dp\, 4\pi p^2\, up\, \frac{1}{e^{\beta up}-1} =$$

$$\beta up = x$$

$$= \frac{V}{h^3}\int_0^{u\bar{p}\beta} dx\, \frac{(k_BT)^4}{u^3}\, 4\pi\, x^3\, \frac{1}{e^x-1} =$$ alacsony hőmérsékleten a vezető rend

$$= \frac{V}{h^3}\,\frac{(k_BT)^4}{u^3}\,4\pi\, \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x-1}\,dx}_{\frac{\pi^4}{15}}$$ véges

$$E_f \sim T^4 \Rightarrow C_f \sim T^3$$

$$E_f = \frac{4\pi V}{h^3}\,\frac{(k_BT)^4}{u^3}\,\frac{\pi^4}{15} = \frac{4\pi^5(k_BT)^4}{15(h\underset{\text{hangseb.}}{u})^3}$$

$T \to 0$-ban így változik a fononok energiája

Ez összhangban van a méréssel

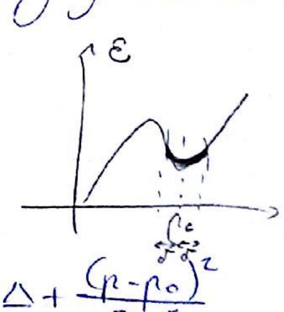
Korábban: • fotongáz volt hasonló

Elektromágneses tér elemi gerjesztése

• fonon: rácsrezgések elemi gerjesztése

roton

Az egész azon múlik, hogy $\varepsilon \sim p$



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

$$F_r = k_BT\,\frac{V}{h^3}\int d^3p\, \ln\left(1-e^{-\beta\varepsilon(p)}\right)$$

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

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

$$e^{-\beta\varepsilon(p)} \ll 1 \qquad \ln\left(1-e^{-\beta\varepsilon(p)}\right) \simeq -e^{-\beta\varepsilon(p)}$$

polárkoord.

$$F_r = -k_BT\,\frac{V}{h^3}\int_{p_0-\delta}^{p_0+\delta} dp\, 4\pi\, e^{-\beta\varepsilon(p)}$$

$$\bar{N}_r = \frac{V}{h^3}\int d^3p \frac{1}{e^{\beta\varepsilon(p)}-1} \simeq \frac{V}{h^3}\int_{p_0-\delta}^{p_0+\delta} dp\, 4\pi p^2 e^{-\beta\varepsilon(p)}$$

$$e^{-\beta\varepsilon(p)} << 1 \to e^{\beta\varepsilon(p)} >> 1$$

$$F_r = -\bar{N}_r k_B T = -k_B T \frac{V}{h^3} e^{-\beta\Delta}\int_{p_0-\delta}^{p_0+\delta} dp\, 4\pi p^2 \underbrace{e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2m^*}\beta}}_{\text{Gauss - eloszlás}}$$

szélesség : $m^*/\beta \Rightarrow \frac{\overbrace{m^* k_B T}^{\sigma^2}}{p_0^2} = 3{,}6\cdot 10^{-3}$ ↑ 1K hőm.

nagyon keskeny Gauss görbe

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

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

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

$$S_r = -\frac{\partial F}{\partial T} = k_B \bar{N}_r + k_B T\frac{\partial \bar{N}_r}{\partial T} = k_B\bar{N}_r + \bar{N}_r\left(\frac{k_B}{2} + \frac{\Delta}{T}\right) = k_B\bar{N}_r\left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{k_B T}\right)$$

$$\frac{\partial \bar{N}_r}{\partial T} = \frac{1}{2T}\bar{N}_r + \bar{N}_r\frac{\Delta}{k_B T^2} = \bar{N}_r\left(\frac{1}{2T} + \frac{\Delta}{k_B T^2}\right)$$

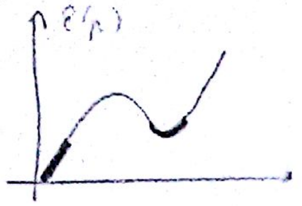
$$C_r = T\frac{\partial S_r}{\partial T} = T k_B \bar{N}_r\left(-\frac{\Delta}{k_B T^2}\right) + \bar{N}_r\left(\frac{1}{2T} + \frac{\Delta}{k_B T^2}\right) k_B\left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{k_B T}\right)T =$$

$$= \bar{N}_r k_B\left(\frac{3}{4} + \frac{\Delta}{k_B T} + \frac{\Delta^2}{(k_B T)^2}\right)$$ exponenciálisan eltűnő fajhő

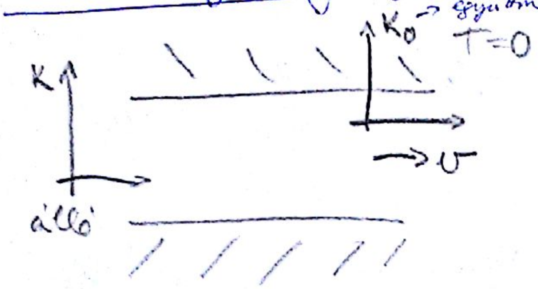
1K-től már mindkettő fajhő számít

2012.10.25.

Kvázirészecske-kép $\Rightarrow \varepsilon(p) \Rightarrow E(r) \Rightarrow c(T)$



Szuperfolyékonyság Landau-elmélete



$\underline{v}$-vel mozgó koordinátarendszerben a folyadék alapállapotban van.

Galilei-transzformáció

pot. energia csak relatív koordinátáktól függ
nem változik

kinetikus energia:

$$\frac{1}{2}\sum_i m_i \underline{v}_i^2 = \frac{1}{2}\sum_i m_i (\underline{v}+\underline{v}_i')^2 = \frac{1}{2}\sum_i m_i \underline{v}^2 +$$

$$\underline{v}_i = \underline{v} + \underline{v}_i'$$

$$+ \sum_i m_i \underline{v}\,\underline{v}_i' + \frac{1}{2}\sum_i m_i \underline{v}_i'^2 =$$

$$\underline{P}_0 = \sum_i m_i \underline{v}_i'$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2} M \underline{v}^2}_{\text{transzlációs mozgása az anyagnak}} + \underbrace{\underline{P}_0\, \underline{v}}_{\text{együttmozgó beli impulzus}} + \underbrace{E_0}_{\text{együttmozgó beli kin. energia}}$$

$$\underline{P} = M\underline{v} + \underline{P}_0$$

Nyugvó folyadékban létrehozunk egy kvázirészecskét

$$E_0 = \varepsilon(\underline{p}) \qquad \underline{P}_0 = \underline{p}$$

$$E = \frac{1}{2} M v^2 + \underbrace{\underline{p}\,\underline{v} + \varepsilon(\underline{p})}$$

elemi gerjesztést létrehozva az álló koordinátarendszerben plusz tagokat hoz be $\Rightarrow$ ez lesz a kvázirészecske energiája

Kvázirészecske energiája

K_0-ban : $\varepsilon(p)$

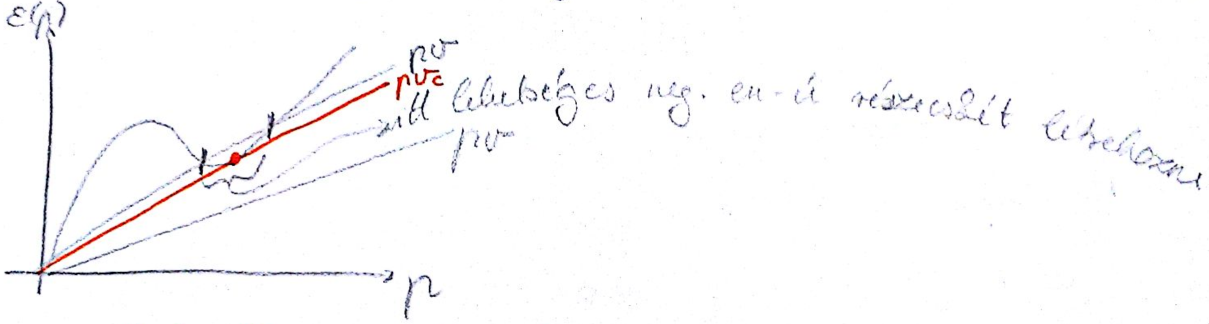
K-ban : $\varepsilon(p) + p\underline{v}$

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

$\varepsilon(p) < -p\underline{v} \Rightarrow \max \xrightarrow[v]{\measuredangle p} pv$

$\varepsilon(p) < pv$

Ekkor létrejöhet negatív energiájú kvázirészecske.



pont érinti az $\varepsilon(p)$ görbét pv_c

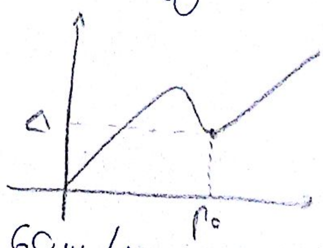
$v < v_c$ szuperfolyékony áramlás

$v > v_c$ fékeződés $\Rightarrow$ nem szuperfolyékony áramlás

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

Becslés: az érintési pont legyen a minimum.

$v_c = \dfrac{\Delta}{p_0}$

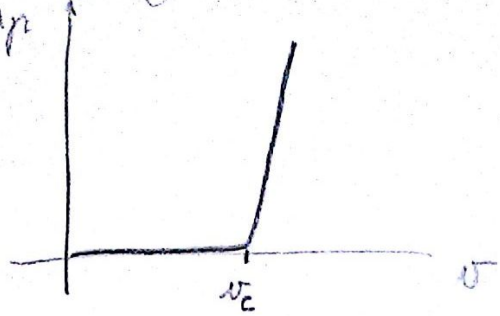


$\Delta = 8{,}7\,K$

$\left.\begin{array}{l} \Delta = 8{,}7\,K \\ \frac{p_0}{\hbar} = 1{,}9 \cdot 10^{10}\ 1/m \end{array}\right\} \Rightarrow v_c \approx 60\ m/s$

Kísérlet: túl nagy ez a v_c. ennél kisebbre is megszűnik a szuperfolyékonyság, mert lehetnek makroszkopikus gerjesztések (örvények) is.

nyomáskülönbség az áramlási feladatokhoz



v_c függ az átmérőtől

$v_c \sim d^{-1/4}$

összefügg a létrejövő örvények átmérőjével d.

v_c messze 60 m/s-tól

$v_c \sim 30$ cm/s ← $d = 10^{-6}$ cm

Minimum nem kell a szuperfolyékonysághoz.
legyen egy véges meredekségű egyenes.

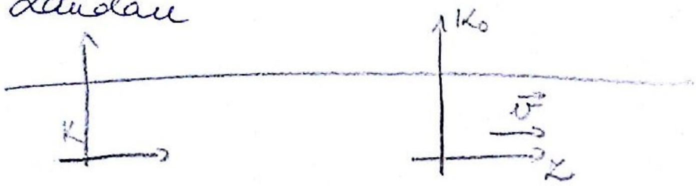
He úgy viselkedik, mintha 2 folyadékkomponense lenne.

<u>Két-folyadék kép</u>

Landau (1941), Tisza László (1940)

valójában nincs szó atomi szétválásról

° Landau



$T \neq 0$

fal együtt megy a folyadékkal, majd megáll.
falban nincsenek negatív energiás rezgések, de
$T \neq 0$ miatt már vannak benne kvázirészecskék.
Ezek kivétele lehetséges

„Kvázirészecskék gáza: egyensúlyba kerül a fallal
K_0-ban a kvázirészecskék impulzusa

$$P_0 = \frac{V}{h^3}\int d^3p\, \underline{p}\, \bar{n}\,(\epsilon(p) + \underline{p}\underline{v})$$

Kvázirészecskék K rendszerben vannak egyensúlyban

itt $\bar{n} = \dfrac{1}{e^{\beta\varepsilon} - 1}$

$$\underline{P_0} = \underbrace{\frac{V}{h^3}\int d^3p \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}}_{\substack{\text{integrálás} \\ \text{után: 0} \\ \text{páratlan fv.} \\ \text{a p-k}}} \left[\bar{n}(\varepsilon(p)) + \frac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon} \underbrace{(p \cdot v)}_{} \right] =$$

$p\underline{v} = p_z v$

$$= \underline{P_0} = \frac{V}{h^3}\int dp\, p^2 \int d\Omega \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} p_z v \frac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon} =$$

z kivételével páratlanok $\Rightarrow 0$

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

$$\int d\Omega \cos^2\vartheta = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \cos^2\vartheta =$$

$$= 2\pi \left[\frac{-\cos^3\vartheta}{3} \right]_0^{\pi} = \frac{4\pi}{3}$$

*

$$\underline{P_0} = \underline{v} V \left(\frac{4\pi}{3h^3} \int dp\, p^4 \underbrace{\frac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon}}_{<0} \right) = -\rho_n V \underline{v}$$

betöltési szám az energia fv-ében mindig csökkenő.

$\rho_n = -\dfrac{4\pi}{3h^3} \int dp\, p^4 \dfrac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon}$ => normál komponens sűrűsége.

mintha egy ρ_n sűrűségű folyadék állna a falhoz képes K-ban. K'-ben mintha visszafelé menne.

K-ban:

áramló folyadék kevesebb tömeget visz magával.

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

ρ_s szuperfolyékony komponens sűrűsége

Kiszámíthatjuk a normál komponensét ρ_n hőm. függése fononokra:

$$\rho_{nf} = -\frac{4\pi}{3h^3}\int_0^{\infty} dp\, p^4 \frac{-e^{\beta u p}\beta u p}{(e^{\beta u p}-1)^2}\,\rho = \frac{4\pi}{3h^3}\frac{1}{\beta^4}\frac{1}{u^5}\int_0^{\beta u \tilde{p}} dx \frac{e^{+x}x^4}{(e^x-1)^2} =$$

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\beta u p}-1} \qquad \frac{\partial \bar{n}}{\partial \varepsilon} \qquad x = \beta u p$$

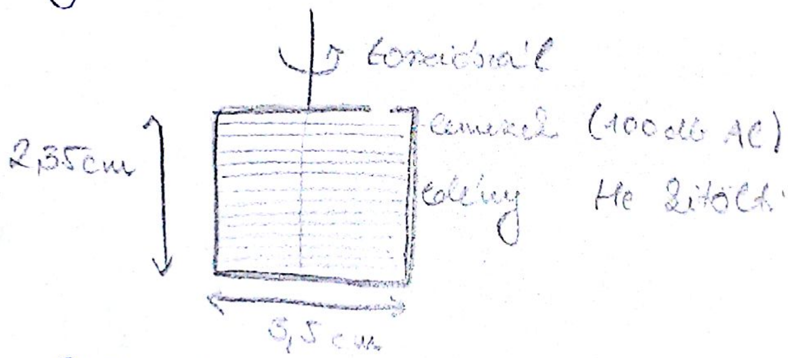
$T \to 0$
$\beta \to \infty$ felső határ integrál véges oka is.

$$= \frac{4\pi}{3h^3}\frac{(k_B T)^4}{u^5}\int_0^{\infty} dx \frac{e^x x^4}{(e^x-1)^2} \qquad \rho_{nf} \sim T^4$$

$$\rho_{nr} \sim e^{-\beta\Delta}$$

Mérés: Andronikasvili

He II. folyadék



1 lemez 0,0013 cm vastag
távolságuk: 0,021 cm $\sim d$

Mi történik, ha megforgatjuk?

Normál komponens is forog

$\frac{d^2}{\nu}$ karakterisztikus ideje annak, hogy a lemezek viszkozitás sebességét a folyadék felvegye.

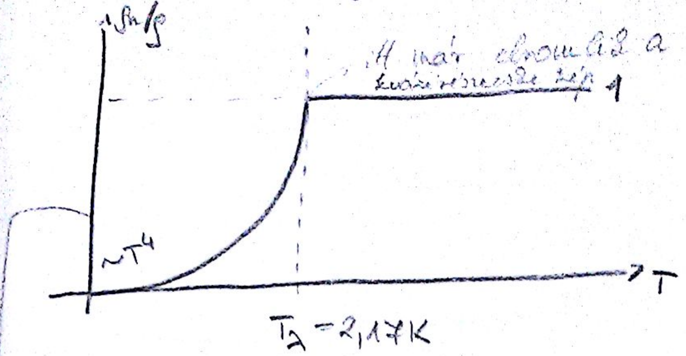
Az kell, hogy a torziós rezgések periódusideje $\gg \frac{d^2}{\nu}$

Szuperfolyadék követse a lemezek mozgását, persze csak a normál komponens $\Rightarrow$ rezonancia

tehetetlenségi nyomatékok $\Rightarrow$ tömege a folyadéknak

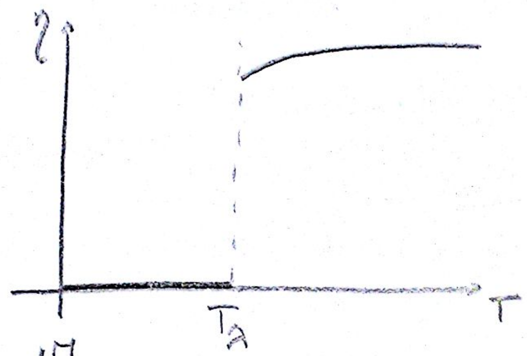
Statisztikus fizika 2012. 10. 05.

ρ_n ~~hőmérséklet függése: fononokra~~



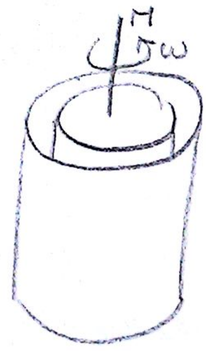
A két-folyadék képpel a viszkozitásmérések értelmezhetőek:

1. kapilláris

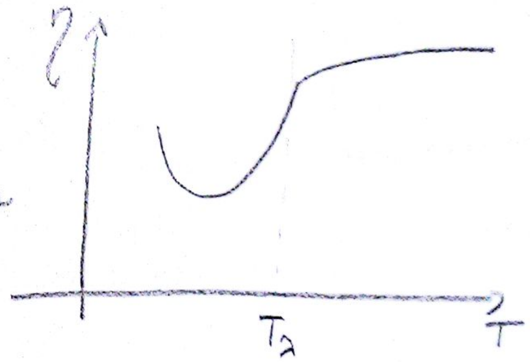


csak a szuperfolyékony komponens, másik bentragad a csőben

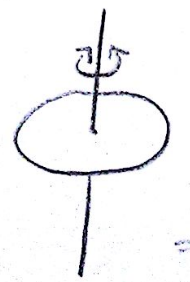
2.



$M \sim \eta^{\omega} \to \eta_n$

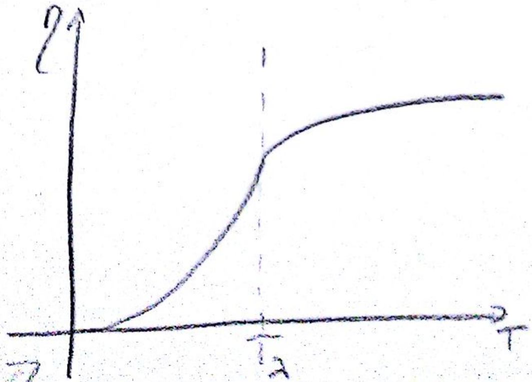


3. csak a normális komponens vesz részt a csillapításban



$\sim \sqrt{\eta_n \rho_n} = \sqrt{\eta_n \frac{\rho_n}{\rho} \rho}$

csillapítás $\sim \sqrt{\eta \rho}$

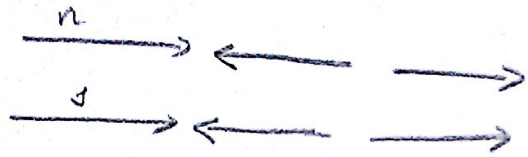


Hullámok:

- Adiabatikus, kompressziós hullámok: 1. hang

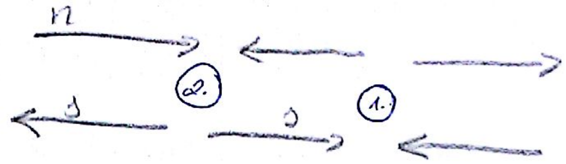
$$j = \rho_n v_n + \rho_s v_s$$

$$v_n = v_s$$



- 2. hang $\quad j = 0$

$$v_n = -v_s$$

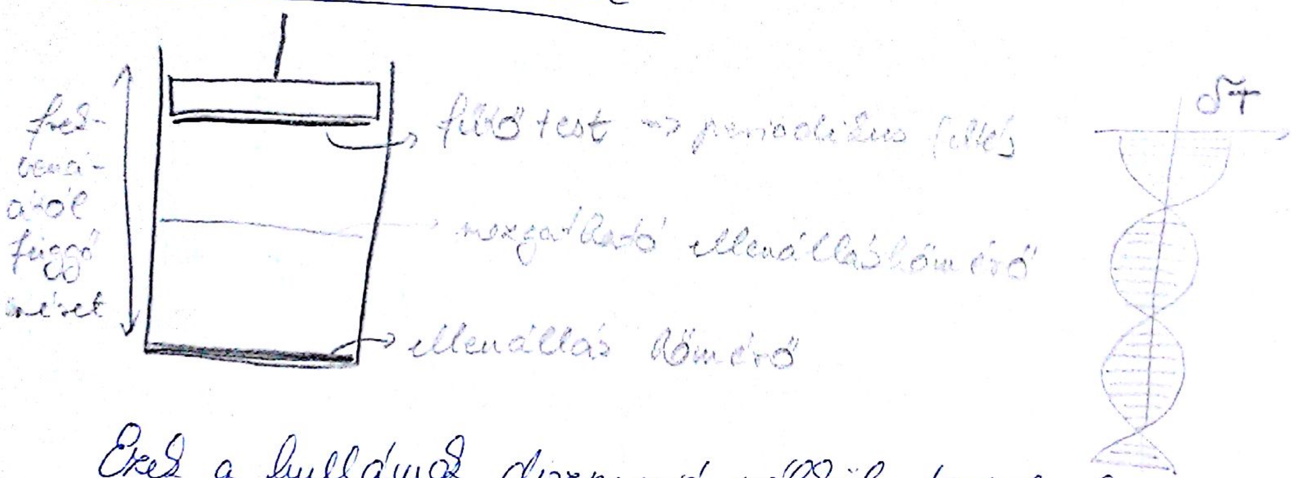


(1.) normálkomponens sűrűségének csökkenése => hűl

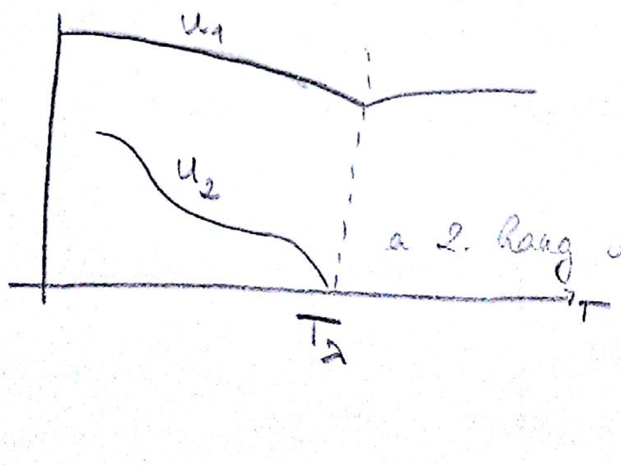
(2.) — " — növekedése => melegszik

Entrópia (hőmérsékleti hullámok)

Álló hullám létrehozása



Ezek a hullámok diszperzió nélkül terjednek.



a 2. hang szerepét átveszi a hőmérsékleti hullám pl.: • ferromágnesben a spin kiállás köröz => átveszi a másik => terjedés => spinhullámok

Kvantuma: magnon

$\omega(k) = Dk^2$

antiferromágnesben $\omega(k) = v k$

• exciton: atomtörzs elektronja gerjesztődik magasabb szintű állapotra, majd lemegy úgy, hogy közben a szomszédját gerjeszti => így terjed

• elektron - lyuk pár

Fermi gömbön kívül állapotba viszi ez a gerjesztés, helyén lyuk pont annyi, amennyi e^- a Fermi gömbön kívül.

Perturbációszámítás

„Ki tudunk ~~mit~~ számolni, de nem az az érdekes, hanem amit nem tudunk kiszámolni; de a 2 nincs messze egymástól."

Klasszikus rendszer: Hamilton-fv.

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

integrál a fázistéren

$Z_0 = \int d\Gamma e^{-\beta H_0}$ kiszámítható

$H = H_0 + \delta H$

$$Z = \int d\Gamma\, e^{-\beta \mathcal{H}} = \int d\Gamma\, e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H})} = \int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}_0} e^{-\beta\delta\mathcal{H}} \underset{=}{\text{sorfejtés}}$$

$$= \underbrace{\int d\Gamma\, e^{-\beta\mathcal{H}_0}}_{Z_0} \left(1 - \beta\delta\mathcal{H} + \frac{1}{2}\beta^2\delta\mathcal{H}^2 - \frac{1}{3!}\beta^3\delta\mathcal{H}^3 + \dots\right)$$

Minden tagra el kell végezni az átlagolást a perturbálatlan $\mathcal{H}_0$-lal.

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

$\delta\mathcal{H}$ várható értéke a perturbálatlan esetben

$$Z = Z_0 \left(1 - \beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0 + \frac{1}{2}\beta^2\langle\delta\mathcal{H}^2\rangle_0 - \frac{1}{3!}\beta^3\langle\delta\mathcal{H}^3\rangle_0 + \dots\right)$$

Mi okozza kvantummechanikában a nehézséget?

Tr-ek $\qquad \langle\delta\mathcal{H}\rangle_0$ hatványok $\Rightarrow$ momentumok

$$F = -k_BT\ln Z \underset{\substack{\uparrow \\ \text{1. rendig}}}{=} -k_BT\ln\left(Z_0\left(1 - \beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0\right)\right) = -k_BT\ln Z_0 -$$

$$-k_BT\ln\left(1 - \beta\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0\right) \cong -k_BT\ln Z_0 + \cancel{k_BT}\cancel{\beta}\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0 = F_0 + \langle\delta\mathcal{H}\rangle_0$$

$$\ln(1-x) \overset{\text{sorfejtés}}{\simeq} -x + \frac{x^2}{2}$$

Magasabb rendben persze a sorfejtés módosul

$$F = \underbrace{F_0 + \underbrace{\langle\delta\mathcal{H}\rangle_0}_{\substack{\text{várható} \\ \text{érték}}} + \frac{1}{2}\Big(\underbrace{\langle\delta\mathcal{H}^2\rangle_0 - \langle\delta\mathcal{H}\rangle_0^2}_{\text{szórásnégyzet}}\Big)}_{\text{kumulánsok (kumuláns-sor}} + \dots$$

Statisztikus fizika 2012. 11. 08.

ism.

$$H = H_0 + \delta H \Rightarrow e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} e^{-\beta \delta H} = e^{-\beta H_0}(1 - \beta \delta H)$$

$$Z = Z_0 (1 - \beta \langle \delta H \rangle_0 + \dots) \qquad F = F_0 + \langle \delta H \rangle_0 + \dots$$

Kvantum rendszerekben: $[H_0, \delta H] \neq 0$

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

ha $[\hat{H}_0, \delta \hat{H}] = 0 \Rightarrow \hat{S}(\beta) = e^{-\beta \delta \hat{H}}$

Határozzuk meg $\hat{S}(\beta)$-t.

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

Definíció: $A(\beta) := e^{\beta H_0} A e^{-\beta H_0}$

kezdeti feltétel: $S(\beta = 0) = 1$ Csináljunk integrálegyenletet.

Most $\int_0^{\beta} d\beta'$:

$$\int_0^{\beta} \frac{\partial \hat{S}}{\partial \beta'} d\beta' = \hat{S}(\beta) - \hat{S}(0) = \hat{S}(\beta) - \mathbb{1} = -\int_0^{\beta} d\tau \, \delta \hat{H}(\tau) \hat{S}(\tau)$$

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

$$= \underbrace{\mathbb{1} - \int_0^{\beta} d\tau \, \delta \hat{H}(\tau)}_{\text{lineáris } \delta \hat{H}\text{-ban}} + \underbrace{\int_0^{\beta} d\tau \, \delta \hat{H}(\tau) \int_0^{\tau} d\tau' \, \delta \hat{H}(\tau') \hat{S}(\tau')}_{\delta \hat{H}\text{-ban kvadratikus}} = \dots$$

folytatva a behelyettesítést

$$= \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n \, \delta \hat{H}(\tau_1) \delta \hat{H}(\tau_2) \dots \delta \hat{H}(\tau_n)$$

ez egy perturbációs sor

1. rend:

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

$$Z = \mathrm{Tr}(e^{-\beta H}) = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H_0}\left(1 - \int_0^{\beta} d\tau \, \delta H(\tau)\right)\right)$$

$$Z = Tr\left(e^{-\beta\hat{H}_0}\left(1-\int_0^\beta d\tau\, \delta\hat{H}(\tau)\right)\right) = Tr\left(e^{-\beta\hat{H}_0}\right)\left[1 - \underbrace{\frac{Tr\left(e^{-\beta\hat{H}_0}\int_0^\beta d\tau\,\delta\hat{H}(\tau)\right)}{Tr\left(e^{-\beta\hat{H}_0}\right)}}\right] =$$

$$= Z_0\left(1-\int_0^\beta d\tau \langle\delta\hat{H}(\tau)\rangle_0\right) = Z_0\left(1-\beta\langle\delta H\rangle_0\right)$$ ez pont egy átlagolás

$$Tr\left(e^{-\beta\hat{H}_0}\delta\hat{H}(\tau)\right) = Tr\left(e^{-\beta H_0} e^{\tau H_0}\delta H e^{-\tau H_0}\right) = \underbrace{Tr\left(e^{-\beta H_0}\delta H\right)}_{\tau\text{-tól független}}$$

Tehát elsőrendben visszakapjuk a klasszikus eredményt.
Ekkor nyilván $F = F_0 + \langle\delta\hat{H}\rangle_0$, mert

$$Z = Tr\left(e^{-\beta(\hat{H}_0+\delta\hat{H})}\right) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\beta)^n}{n!}\left(Tr(H_0+\delta H)^n\right) \overset{1.\text{ rend}}{=} (*)$$

$$n=2: \quad (H_0+\delta H)^2 = H_0^2 + H_0\delta H + \delta H H_0 + \underbrace{(\delta H)^2}_{1.\text{ rendben nincs}}$$

$Tr(H_0^2 + H_0\delta H + \delta H H_0) = Tr(H_0^2 + 2H_0\delta H)$ ugyanígy:

$$Tr\left((H_0+\delta H)^n\right) = Tr(H_0^n) + n\,Tr(H_0^{n-1}\delta H) + \mathcal{O}((\delta H)^2)$$

$$(*) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\beta)^n}{n!}\left[Tr(H_0^n)\right] + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\beta)^n}{n!}n\cdot Tr(H_0^{n-1}\delta H) =$$

$$= Tr\left(e^{-\beta H_0}\right) - \beta\,Tr\left(e^{-\beta H_0}\delta H\right) = Z_0\left(1-\beta\langle\delta H\rangle_0\right)$$

Várható érték számítás:

$\hat{B}$ operátorra:

$$\langle\hat{B}\rangle = \frac{Tr\left(e^{-\beta H}\hat{B}\right)}{Tr\left(e^{-\beta H}\right)} \overset{1.\text{ rend}}{=} \frac{Tr\left(e^{-\beta H_0}\left(1-\overbrace{\int_0^\beta d\tau\,\delta H(\tau)}^{S}\right)\hat{B}\right)}{Z_0\left(1-\beta\langle\delta H\rangle_0\right)} =$$

$$= \frac{Tr\left(e^{-\beta H_0}B\right) - \int_0^\beta d\tau\, Tr\left(e^{-\beta H_0}\delta H(\tau)\hat{B}\right)}{Z_0\left(1-\beta\langle\delta H\rangle_0\right)} =$$

$$\frac{1}{1-x} \simeq 1+x, \quad x \ll 1$$

$$= \frac{\langle B\rangle_0 - \int_0^\beta d\tau\langle\delta H(\tau)B\rangle_0}{1-\beta\langle\delta H\rangle_0} = \left[\langle B\rangle_0 - \int_0^\beta d\tau\langle\delta H(\tau)B\rangle_0\right]\left(1+\beta\langle\delta H\rangle_0\right) =$$

$$= \langle B\rangle_0 - \int_0^\beta d\tau \langle \delta\mathcal{H}(\tau) B\rangle_0 + \underset{\overset{\parallel}{\int_0^\beta d\tau}}{\beta} \langle \delta\mathcal{H}\rangle_0 \langle B\rangle_0 =$$

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

vagy ez: $\langle (\delta\mathcal{H}(\tau) - \langle \delta\mathcal{H}(\tau)\rangle)(B - \langle B\rangle)\rangle$

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

akkor

$$\langle B\rangle = \langle B_0\rangle - \frac{\langle \delta\mathcal{H} B\rangle_0 - \langle \delta\mathcal{H}\rangle_0 \langle B\rangle_0}{k_B T} \text{ és ez} =$$

$$= \frac{\int d\Gamma e^{-\beta\mathcal{H}} B}{\int d\Gamma e^{-\beta\mathcal{H}}} \text{ ha sorba fejtjük itt}$$

Ha $[B, \mathcal{H}_0] = 0$, akkor is igaz

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

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

$\hat{A}$: fizikai mennyiség operátora

f: perturbáció erőssége, paraméter

pl: $-\overset{\hat{A}}{M}\overset{f}{B}$

M: mágnesezettség

Ebben a közelítésben nincs visszahatás a környezetre

Klasszikus külső hatás: f

pl.: homogén elektromos térben

$$\sum_i e_i \Phi(r_i) = -\underbrace{\left(\sum_i e_i r_i\right)}_{\underline{P}} \underline{E} = -\underline{P}\,\underline{E}$$

$\underline{P}$ dipólmomentuma a töltött rendszernek

$\phi = -\underline{E}\underline{r}$ homogén potenciálja egyszerű (polarizáció)

pl: mechanikai erő:

csatolás: $-xF$ potenciál

Formális okból is bevezethető ilyen operátor, nem muszáj, hogy fizikai realizációja legyen.

$$\langle B\rangle = \langle B\rangle_0 + \underbrace{\int_0^{\beta} d\tau \left(\langle A(\tau) B\rangle_0 - \langle A\rangle_0 \langle B\rangle_0\right) f}_{\text{„külső" perturbációra adott lineáris válasz}} + \mathcal{O}(f^2) =$$

Lineáris közelítés f-ben.

$$= \langle B\rangle_0 + \underbrace{\chi_{BA}} \cdot f + \mathcal{O}(f^2)$$

Statikus lineáris válaszfüggvény → szuszceptibilitás

(f^2-ig számolva persze a nemlineáris rész is előjön

→ Adott hőmérsékleten levő egyensúlyi értékeket hasonlítunk össze

pl.: mágnesezettség

Időfüggő f-re is létezik válaszfüggvény

Statisztikus fizika 2012. 11. 08.

Állítás: $\chi_{BA} = \chi_{AB}$

χ_{BA}: $\delta\mathcal{H} = -Af$ χ_{AB}: $\delta\mathcal{H} = -Bf$

$\langle B\rangle = \langle B\rangle_0 + \chi_{BA} f$ $\langle A\rangle = \langle A\rangle_0 + \chi_{AB} f$

Biz.: legyen $\langle B\rangle_0 = \langle A\rangle_0 = 0$

szimmetria miatt úgyis az átlagtól való eltérés az érdekes.

$$\chi_{BA} = \int_0^\beta d\tau \langle A(\tau)B\rangle_0 = \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z_0} Tr\left(e^{-\beta H_0} e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0} B\right) =$$

$$= \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z_0} Tr\left(e^{-(\beta-\tau)H_0} A \, e^{-\tau H_0} e^{\beta H_0} e^{-\beta H_0} B\right) =$$

$$= \cancel{\int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z_0} Tr\left(e^{-\beta H_0} B e^{-(\beta-\tau)H_0} A e^{(\beta-\tau)H_0}\right)}$$

$$= \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z_0} Tr\left(e^{-\beta H_0} e^{(\beta-\tau)H_0} B e^{-(\beta-\tau)H_0} A\right) =$$

$$= \int_0^\beta d\tau \langle B(\beta-\tau)A\rangle_0 = \int_0^\beta d\tau' \langle B(\tau')A\rangle_0 = \chi_{AB}$$

$\beta - \tau = \tau'$

$$\begin{pmatrix} \chi_{AA} & \chi_{BA} \\ \chi_{AB} & \chi_{BB} \end{pmatrix} \Rightarrow \text{szimmetrikus mátrix.}$$

χ_{AB}: B-hez csat. perturb. A-t mérem

$$\underbrace{[A, H_0] = 0 \quad \text{vagy} \quad [B, H_0] = 0}$$

$$\langle B\rangle = \langle B\rangle_0 + \underbrace{\underbrace{\frac{\langle AB\rangle_0 - \langle A\rangle_0\langle B\rangle_0}{k_B T}}_{\frac{\text{korrelációs fv}}{k_B T}}}_{\chi_{BA}} f \Rightarrow \text{Fluktuáció-válasz tétel}$$

~~disszipáció~~

Részecskék közötti kölcsönhatás

Többnyire szinte csak kétrészecske kh., háromrészecske kh. is van, csak elhanyagolhatóan kicsi

Párkölcsönhatás

$$\underbrace{v(\underline{r}-\underline{r}')}$$

sokszor csak $|r-r'|$-től függ

N részecske: $\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j \\ (i\neq j)}} v(r_i-r_j)$

$$H=\sum_i \frac{p_i^2}{2m}+\underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j \\ (i\neq j)}} v(r_i-r_j)}$$

részecske felcserélésre szimmetrikus ($H^{\text{általános}}$ is).

Két-részecske operátorok:

$$F_2=\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j \\ (i\neq j)}} f(x_i,x_j)$$

spintől is függhetne

Coulomb-kh pl. nem függ.

Fock-térben ez hogy írható fel?

$\{\varphi_l\}_1^\infty$ bázis

$\varphi_{l_1}(x_1)\varphi_{l_2}(x_2)$ báziselemek a kétrészecskés Fock-térben.

$f(x_1,x_2)$ hatása:

$$\sum_{l_3,l_4}\underbrace{\langle l_3 l_4|f|l_1 l_2\rangle}_{f\ \text{mátrixeleme}}\varphi_{l_3}(x_1)\varphi_{l_4}(x_2)$$

f mátrixeleme: $\int dx_1 dx_2\, \varphi^*_{l_3}(x_1)\varphi^*_{l_4}(x_2) f(x_1,x_2)\varphi_{l_1}(x_1)\varphi_{l_2}(x_2)$

Hullámfv.:

N részecske: $C\sum_\alpha (\pm 1)^{\delta_\alpha}\varphi_{l_1}(x_{\alpha_1})\varphi_{l_2}(x_{\alpha_2})\dots\varphi_{l_N}(x_{\alpha_N})$

$\Downarrow$ összes lehetséges permutáció

Bármilyen koordinátát nézve az operátorok összegében lehet találni olyat ami ezt tartalmazza.

Eltűnik 2 kvantumszám és kell helyette 2 másikat, együtthatók: mátrixelemek.

Ilyenek lineárkombinációja lesz a vége.

Fock-térben

$$F_2 = \frac{1}{2}\sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \langle l_3 l_4 | f | l_1 l_2 \rangle a^+_{e_4} a^+_{e_3} a_{e_1} a_{e_2}$$

összegzésnél mivel l_1, l_2 végigfut, mindent 2×

Ez lesz az általános alak.

Nem mindegy, h. l_1, l_2 eltüntetés után $a^+_{e_3} a^+_{e_4}$ v. $a^+_{e_4} a^+_{e_3}$ fermionokra.

Fermionokra:

$|\ldots n_{e_1} \ldots n_{e_2} \ldots\rangle$

eltüntetés: $(-1)^{S_{e_2}} (-1)^{S_{e_1}}$ ugyanennek kell kijönni ~~az eltüntetésre~~ a keltésre

azt kell először kelteni, amit másodszorra tüntetünk el.

Ez persze csak a fermionoknál lényeges

Fock-térben Hamilton-op. koordináta ábr.-ban

koordinátákban és spinben diagonális

$$H = \int d^3r \sum_\sigma \psi^+_\sigma(\underline{r}) \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\psi_\sigma(\underline{r}) + \frac{1}{2}\int d^3r_1 \int d^3r_2' \sum_{\sigma\sigma'} \psi^+_\sigma(\underline{r})\psi^+_{\sigma'}(\underline{r}')\, v(\underline{r}-\underline{r}')\, \psi_{\sigma'}(\underline{r}')\psi_\sigma(\underline{r})$$

2012.11.15.

Kétrészecskés operátorok

N részecske $\quad F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i\neq j}} f(x_i, x_j)$

játékos szegény
törölt táblát, amit a
TOMI írt el!!!
De megrajzolgatta és
most lél :)

Fock-térben:

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \underbrace{\langle l_1 l_2 | f | l_3 l_4 \rangle}_{\text{mátrixelem jelentése:}} a^+_{l_1} a^+_{l_2} a_{l_4} a_{l_3}$$

$$\int dx_1 \int dx_2 \int dx_1' \int dx_2' \, \varphi^*_{l_1}(x_1') \varphi^*_{l_2}(x_2') \, f \, \varphi_{l_3}(x_1) \varphi_{l_4}(x_2)$$

Periodikus határfeltétel

$$\varphi_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \chi_\sigma(s) \qquad s = \frac{1}{2} \quad \chi_\uparrow(s) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\chi_\downarrow(s) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Kölcsönhatás: párkölcs. $v(r - r')$ ⇒ nem változtat ⇒
⇒ csak szorzófaktor ⇒
⇒ elég 2 térbeli vált-ra integrálni

$$\sum_{s_1 s_2} \int d^3r \int d^3r' \frac{1}{V} e^{-ik_1 r} e^{-ik_2 r'} \chi^*_{\sigma_1}(s_1) \chi^*_{\sigma_2}(s_2) v(r - r') \frac{1}{V} e^{ik_1' r} e^{ik_2' r'} \chi_{\sigma_1'}(s_1) \chi_{\sigma_2'}(s_2) = (\#)$$

$\delta_{\sigma_1 \sigma_1'}$

$\delta_{\sigma_2 \sigma_2'}$

Most Fúri fog történni
(Fourier ⇒ fáradt vok)

$$\frac{r + r'}{2} = R \qquad r - r' = \tilde{r} \qquad \frac{\tilde{r}}{2} + R = r$$

$$R - \frac{\tilde{r}}{2} = r'$$

$$\begin{pmatrix} r \\ r' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R + \frac{\tilde{r}}{2} \\ R - \frac{\tilde{r}}{2} \end{pmatrix}$$

Jacobi-determináns változócseréhez

$$x = X + \frac{\tilde{x}}{2} \qquad x' = X - \frac{\tilde{x}}{2} \qquad J = \begin{vmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{1}{2} \end{vmatrix} = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1 \qquad |J| = 1$$

$$d^3r \, d^3r' \overset{!!}{=} d^3R \, d^3\tilde{r}$$

$$-ik_1 r - ik_2 r' + ik_1' r + ik_2' r' = -i(k_1+k_2-k_1'-k_2') - i\frac{\tilde{r}}{2}(k_1-k_2-k_1'+k_2')$$

$$\int d^3R\, d^3\tilde{r}\; e^{-i(k_1+k_2-k_1'-k_2')R}\;\underbrace{e^{-i\frac{\tilde{r}}{2}(k_1-k_2-k_1'+k_2')}}_{e^{-i\tilde{r}q}}\cdot v(\tilde{r}) =$$

$$= V\,\delta_{k_1+k_2,\,k_1'+k_2'} \qquad k_1-k_1' = k_2'-k_2 = q$$

$$\int d^3\tilde{r}\; e^{-i\tilde{r}q}\, v(\tilde{r}) = V\cdot v(q)$$

$$(*) = \frac{1}{V^2}\,\delta_{\sigma_1\sigma_1'}\,\delta_{\sigma_2\sigma_2'}\; V\,\delta_{k_1+k_2,\,k_1'+k_2'}\, v(q) = \langle k_1 k_2 | f | k_1' k_2'\rangle$$

pot. energia: $\frac{1}{2}\sum_{k_1k_2k_1'k_2'}\sum_{\sigma_1\sigma_1'\sigma_2\sigma_2'}\frac{v(q)}{V}\,\delta_{\sigma_1\sigma_1'}\,\delta_{\sigma_2\sigma_2'}\,\delta_{k_1+k_2,\,k_1'+k_2'}\, v(q)\,\cdot$

$$\cdot\; a^+_{k_1\sigma_1}\, a^+_{k_2\sigma_2}\, a_{k_2'\sigma_2'}\, a_{k_1'\sigma_1'} =$$

$$= \frac{1}{2V}\sum_{k_1k_2k_1'k_2'} v(q)\,\delta_{k_1+k_2,\,k_1'+k_2'}\; a^+_{k_1\sigma_1}\, a^+_{k_2\sigma_2}\, a_{k_2'\sigma_2}\, a_{k_1'\sigma_1} =$$

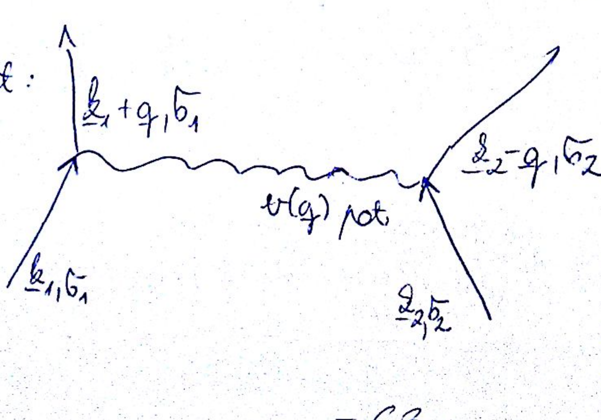
$$q = k_1 - k_1' = k_2' - k_2$$

· k_1' és k_2' maradjon meg

$$k_1 = k_1' + q$$
$$k_2 = k_2' - q$$

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

Történet:



kb. $\sim |v(q)|^2$ impulzusátadásnál részecskék szórt

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

Mágneses térben E spin beállástól is függ (példa a belső szab. fokok megjelenésére)

Dobozba zárt részecskék Hamiltonija párkh.-k esetén

(Perturbáció számítás: nagykanonikus sokaság

$$\frac{e^{-\beta(H-\mu N)}}{Z} = \frac{e^{-\beta(H_0-\mu N+\delta H)}}{Z}$$

pontosan tudjuk kezelni

$H = H_0 + \underbrace{\delta H}_{\text{perturbáció}}$

ugyanazt meg lehet tenni, mint korábban. ($H_0 \Rightarrow H_0 - \mu N$)

$$\Phi(T,V,\mu) = \Phi_0(T,V,\mu) + \underbrace{\langle \delta\mathcal{H} \rangle_0}_{\frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H_0-\mu N)}\delta H\right)}$$

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

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

$$\delta_{\underline{k}+q,\underline{k}}\, \delta_{\underline{k}'-q,\underline{k}'} \underbrace{\langle a^+_{\underline{k}\sigma} a_{\underline{k}\sigma} \rangle_0}_{\bar{n}_{\underline{k}\sigma}} \underbrace{\langle a^+_{\underline{k}'\sigma'} a_{\underline{k}'\sigma'} \rangle_0}_{\bar{n}_{\underline{k}'\sigma'}} \pm$$

$$\pm\, \delta_{\underline{k}+q,\underline{k}'}\, \delta_{\sigma\sigma'} \underbrace{\langle a^+_{\underline{k}'\sigma} a_{\underline{k}'\sigma} \rangle_0}_{\bar{n}_{\underline{k}'\sigma}} \delta_{\underline{k}'-q,\underline{k}}\, \delta_{\sigma\sigma'} \underbrace{\langle a^+_{\underline{k}\sigma} a_{\underline{k}\sigma} \rangle_0}_{\bar{n}_{\underline{k}\sigma}}$$

$$\langle \delta\mathcal{H} \rangle_0 = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\underline{k},\underline{k}' \\ \sigma,\sigma'}} \bar{n}_{\underline{k}\sigma} \bar{n}_{\underline{k}'\sigma'} v(q=0) \pm \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\underline{k},\underline{k}' \\ \sigma}} v(\underline{k}'-\underline{k}) \bar{n}_{\underline{k}\sigma} \bar{n}_{\underline{k}'\sigma} =$$

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

$$= \underbrace{\frac{1}{2V} \bar{N}^2 v(q=0)}_{\text{direkt}} \pm \underbrace{\frac{1}{2V} \sum_{\underline{k},\underline{k}',\sigma} v(\underline{k}'-\underline{k}) \bar{n}_{\underline{k}\sigma} \bar{n}_{\underline{k}'\sigma}}_{\text{kicserélődési}}$$

2012. 11. 15.

$$\Phi(T,V,\mu) = \Phi_0(T,V,\mu) + \langle \delta H \rangle_0 \approx$$

$$\Phi_0 = \pm k_B T \sum_{k\sigma} \ln\left(1 \mp e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu\right)}\right)$$

≈ Bozonokra elromlik a kondenzációs hőmérséklet alatt a perturbációszámítás

$$\Phi = E - TS - \mu N$$

(számolóknak-e vett valahol ekt. ??? alapáll. en.)

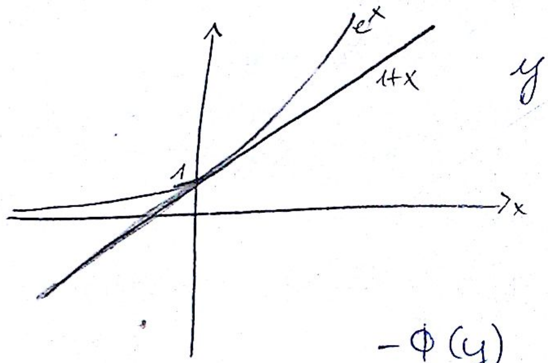
Variációs elv

Kapott dif. ≥ termodin pot.

Lemma

$$e^x \geq 1 + x \qquad " = " \iff x = 0$$

felülről konvex fv. => mindig az érintője felett van



y valószínűségi változó

$\Phi(y)$ függvény

$$\langle \Phi(y) \rangle = \int dy\, p(y) \Phi(y)$$

$$e^{-\Phi(y)} = e^{-\langle \Phi(y) \rangle} e^{-[\Phi(y) - \langle \Phi(y) \rangle]} \geq$$

$$\geq e^{-\langle \Phi(y) \rangle}\left(1 - [\Phi(y) - \langle \Phi(y) \rangle]\right)$$

$$" = " \iff \Phi(y) = \langle \Phi(y) \rangle$$

$$\langle 1 \rangle = 1 \qquad \langle \Phi(y) \rangle \qquad \langle \Phi(y) \rangle$$

$$\langle e^{-\Phi(y)} \rangle \geq e^{-\langle \Phi(y) \rangle} \qquad " = " \iff \Phi(y) = \langle \Phi(y) \rangle$$

$\forall y$-ra

konstans

$$e^{-\beta F} = Z \Leftarrow F = -k_B T \ln Z$$

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

Legyen ρ tetsz. valószínűségi sűrűség a fázistéren úgy, hogy $\left(\int d\Gamma \rho = 1\right)$

$$e^{-\beta F} = Z = \int d\Gamma e^{-\beta \mathcal{H}} = \int d\Gamma \underbrace{e^{-\beta\mathcal{H}} e^{-\ln\rho}}\rho \geq e^{-\beta\langle\mathcal{H}\rangle_\rho} e^{-\langle\ln\rho\rangle_\rho}$$

$\langle\mathcal{H}\rangle_\rho = \int d\Gamma \rho \mathcal{H}$ átlaga ennek a kif-nek ρ valószínűséggel átlagolva

$\langle\ln\rho\rangle_\rho = \int d\Gamma \rho \ln\rho$

$$\langle e^{-\Phi(y)}\rangle \geq e^{-\langle\Phi(y)\rangle}$$

$$-\beta F \geq -\beta\langle\mathcal{H}\rangle_\rho - \langle\ln\rho\rangle_\rho$$

$\beta F \leq \beta\langle\mathcal{H}\rangle_\rho + \langle\ln\rho\rangle_\rho$ $\Big\}$ $F \leq \langle\mathcal{H}\rangle_\rho + k_B T\langle\ln\rho\rangle_\rho$

mikor állhat fent „="

$\langle\ln\rho\rangle_\rho$ ρ információs entrópia $: -\int d\Gamma \rho\ln\rho$

$$\underbrace{F \leq \langle\mathcal{H}\rangle_\rho - T S_\rho \qquad „=" \Leftrightarrow -\beta\mathcal{H} - \ln\rho = \text{konstans} = -\ln C}$$

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

Eloszlásfv-kel kijelölve $\langle\mathcal{H}\rangle_\rho$ minimuma a paraméterek fv-ében megkereshető

Ez megcsinálható nagykanonikus sokaságban is.

$$e^{-\beta\Phi} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \int d\Gamma_N e^{-\beta H_N}$$

Olyan eloszlásfv kell, melynek a részecskeszám is paramétere.

$$\Phi \leq \langle\mathcal{H} - \mu N\rangle_\rho + k_B T\langle\ln\rho\rangle_\rho$$

Kvantummechanikában bonyolult, mert 2 átlagolást kell elvégezni: kvantummechanikait, és statisztikust.

2012.11.15.

Statisztikus fizika

Lemma:

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

$\Downarrow$

önadjungált $\Rightarrow$ sajátfv. rendszere: $\underbrace{|p\rangle}_{\text{teljes rsz}}$

$$\hat{A}|p\rangle = a_p|p\rangle$$

$$\langle p|\hat{A}|p\rangle = a_p$$

$$|n\rangle = \sum_p |p\rangle\langle p|n\rangle$$

$$\langle n|n\rangle = 1 \Rightarrow \sum_p |\langle p|n\rangle|^2 = 1$$

$$\langle n|e^{-\lambda\hat{A}}|n\rangle = \cancel{\sum_p \langle p| \langle n|p\rangle e^{-\lambda\hat{A}} \langle p|n\rangle |p\rangle}$$

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

$$= \sum_p |\langle p|n\rangle|^2 e^{-\lambda\langle n|A|n\rangle} =$$

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

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

1. tag: $1 \cdot e^{-\lambda\langle\ \ \rangle}$

~~2,3. tag~~

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

2012. 11. 22.

Variáció-elv

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

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

$|n\rangle = \sum_p \langle p | n \rangle |p\rangle$

$\sum_p |\langle p | n \rangle|^2 = 1$

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

$$= \sum_p |\langle n | p \rangle|^2 e^{-\lambda a_p} =$$

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

$e^{x} \geq 1 + x \Rightarrow$ 2-szer alkalmazom (2 átlagolás)

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

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

annak a valószínűsége, hogy p áll-ban van a rsz és ott a_p az eredmény

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

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

„=" $\Leftrightarrow -\lambda a_p + \lambda \langle n | A | n \rangle = 0 \Leftrightarrow |n\rangle$ sajátvektor a_p sajátértékkel

$e^{-\beta F} = Z = Tr\,(e^{-\beta \mathcal{H}})$ $\qquad F = -k_B T \ln Z$

$\hat{\rho}$ tetszőleges sűrűségoperátor : $Tr\,\hat{\rho} = 1$

sfv rsz-e : $\hat{\rho}|n\rangle = \rho_n |n\rangle$

n. áll. ρ_n valséggel valósul meg

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

$$= \sum_n \rho_n e^{-\beta\langle n|H|n\rangle - \ln \rho_n} \geq e^{-\beta \sum_n \rho_n \langle n|H|n\rangle - \sum_n \rho_n \ln \rho_n} \leq e^{-\beta F}$$

„=" $\Leftrightarrow$ $\forall$ n-re sfv. megegyezik a várható értékkel => konstans

$$F \leq \sum_n \rho_n \langle n|H|n\rangle - k_B T\left(-\sum_n \rho_n \ln \rho_n\right) =$$

$$= \langle H\rangle_\rho - T\underbrace{(-k_B \langle \ln \rho\rangle_\rho)}_{\rho \text{ információs entrópiája}} \quad \left(= \langle H\rangle_\rho - T\langle S\rangle_\rho\right)$$

„=" $\Leftrightarrow$ $\mathcal{H}$ és $\hat{\rho}$ közös sfv. rendszere van

$$-\beta\langle n|H|n\rangle - \ln \rho_n = -\ln C$$

(állandó, n-től független)

$$\rho_n = C e^{-\beta\langle n|H|n\rangle}$$

kanonikus eloszlás

Nagykanonikus sokaság

$H \to K = H - \mu N$

$F \to \Phi$

$$\Phi \leq \langle K\rangle_\rho - T(-k_B \langle \ln \rho\rangle_\rho)$$

Fock téren kell a variációszámítást végrehajtani.

2012. 11. 29.

Hartree-Fock-közelítés

(Független részecskékre variációszámítás (legjobb ~~[illegible]~~ kép))

Kölcsönható Fermi-gáz

Független részecskék, szabad gáz

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

nem egzakt áll. összeg, hanem valószínűségi normálási tényező

$$Z_\rho = \prod_{k,\sigma} \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)}\right)$$

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

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

Ha $K = H - \mu N = \sum_{k\sigma} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu\right) a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \overset{\text{párok}}{\sum_{\substack{kk'q \\ \sigma\sigma'}}} v(q) \cdot$

$$\cdot\, a^+_{k+q\,\sigma} a^+_{k'-q\,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma}$$

$$\langle K \rangle_\rho - T S_\rho =$$

$$\langle K \rangle_\rho = \sum_{k\sigma} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu\right) \bar{n}_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk'q \\ \sigma\sigma'}} v(q) \underbrace{\langle a^+_{k+q,\sigma} a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma} \rangle_\rho}$$

$$\langle a^+_{k+q\sigma} a_{k\sigma} \rangle_\rho \langle a^+_{k'-q\sigma'} a_{k'\sigma'} \rangle_\rho -$$

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

$$= \underset{q=0}{\delta_{k+q,k}}\, \bar{n}_{k\sigma}\, \underset{-q=0}{\delta_{k'-q,k'}}\, \bar{n}_{k'\sigma'} - \delta_{k+q,k'} \delta_{\sigma\sigma'} n_{k'\sigma'} \delta_{k'-q,k} n_{k\sigma} \Rightarrow$$

Statisztikus fizika 2012. 11. 22.

$$\cancel{\overline{n_{k\sigma}}\,\overline{n_{k\sigma}}}\ \ \delta_{k+q,k}\,\bar n_{k\sigma}\bar n_{k'\sigma'} - \delta_{k+q,k'}\delta_{\sigma\sigma'}\bar n_{k'\sigma'}\bar n_{k\sigma}$$

$$= \cancel{\delta_{k+q,k}}$$

$$\langle K\rangle_\rho = \sum_{k\sigma}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\right)\bar n_{k\sigma} + \frac{1}{2V}v(0)\sum_{\substack{k,k'\\ \sigma,\sigma'}}\bar n_{k\sigma}\bar n_{k'\sigma'} -$$

$$-\frac{1}{2V}\sum_{\substack{k,k'\\ \sigma}} v(\underline{k}'-\underline{k})\,\bar n_{k'\sigma}\bar n_{k\sigma}$$

$\bar n_{k\sigma}$ és $\varepsilon_{k\sigma}$ egymást meghatározzák

$$\frac{\partial}{\partial \bar n_{k\sigma}}\left(\langle K\rangle_\rho - TS_\rho\right) = \frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu + \frac{v(0)}{V}\sum_{k'\sigma'}\bar n_{k'\sigma'} -$$

$$-\frac{1}{V}\sum_{k'} v(k'-k)\,\bar n_{k'\sigma} + k_BT\left(\ln\bar n_{k\sigma} + 1 - \ln(1-\bar n_{k\sigma}) \cancel{-1}\right)$$

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu + \frac{v(0)}{V}\sum_{k'\sigma'}\bar n_{k'\sigma'} - \frac{1}{V}\sum_{k'}v(k'-k)\,\bar n_{k'\sigma} + k_BT\underbrace{\underbrace{\left(\ln\frac{\bar n_{k\sigma}}{1-\bar n_{k\sigma}}\right)}_{-\ln\frac{1-\bar n_{k\sigma}}{\bar n_{k\sigma}}}}_{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}$$

$$\frac{1-\bar n_{k\sigma}}{\bar n_{k\sigma}} = \frac{1-\frac{1}{e^{\beta x}+1}}{\frac{1}{e^{\beta x}+1}} = e^{\beta x} = e^{\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}$$

$$\varepsilon_{k\sigma} = \underbrace{\frac{\hbar^2k^2}{2m} + \frac{v(0)}{V}N}_{\text{Hartree-tag}} - \underbrace{\frac{1}{V}\sum_{k'}v(\underline{k}'-\underline{k})\,\bar n_{k'\sigma}}_{\text{Fock-tag}}$$

klasszikus — kvantummechanika (részecskék azonossága, szimmetria)

Homogén rendszer

$$n(\underline{r}) = \frac{N}{V} \qquad \int d^3r'\, v(\underline{r}-\underline{r}')\underbrace{n(\underline{r}')}_{\substack{\text{homogén}\\ \text{eloszlás } \frac{N}{V}}} = \frac{N}{V}\int d^3r'\,\underbrace{v(\underline{r}-\underline{r}')}_{\substack{\text{szimmetrikus,}\\ \text{mind a határon}}} = \frac{N}{V}v(0)$$

$$v(0) = \int d^3r\, v(r)$$

$$\langle H\rangle_g = \sum_{\underline{k}\sigma}\left\{\frac{\hbar^2k^2}{2m} + \frac{1}{2V}v(0)N - \frac{1}{2V}\sum_{\underline{k}'} v(\underline{k}'-\underline{k})\,\bar{n}_{\underline{k}'\sigma}\right\}\bar{n}_{\underline{k}\sigma}$$

Egyrészecske energia : $\varepsilon_{\underline{k}\sigma} = \frac{\hbar^2k^2}{2m} + \frac{1}{V}v(0)N - \frac{1}{V}\sum_{\underline{k}'} v(\underline{k}'-\underline{k})\,\bar{n}_{\underline{k}'\sigma}$

A rendszer energiavárhatóértéke nem az egyrészecske energiák összege. => A többi részecske átlagos terében a részecske energiája. A rendszer energiájában $\forall$ kh 2-szer => $\frac{1}{2}$.

Spec. példa:

$v(\underline{r}) = u\,\delta(\underline{r})$

$v(q) = u$

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

2 azonos beállású fermion nem lehet 1 helyen (Fermi-lyuk => Dirac-δ kh azonos spinek közt nincs. Ezért van, h a kh tagban a nem σ spinűek számát veszem $(N-N_\sigma)$

Ehrenfest-tétel: klasszikus mozgásegyenletek akkor érvényesek, ha a hullámcsomag szélessége << potenciál szélessége (legyen az egész hullámcsomagra nagyobb). Dirac-δ pot esetén ez sose teljesül -> megvan a Fock-tag $\forall$ hőmérsékleten.

Bozonokra az eredmény: $v(\underline{k}'-\underline{k})\,\bar{n}_{\underline{k}'\sigma}$-s tag előjele +.

Töltött fermion-gáz (e^--k) $s=1/2$

Töltött rendszer önmagában nem lehet stabil. e^--gáz-t akkor lehet csak vizsgálni, ha mellette poz. töltés is ott van (periodikus pot., v. elkent)

Statisztikus fizika 2012. 11. 22.

Elektrongáz + „elkent" pozitív töltéssűrűség (semlegesség)

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{b} + \mathcal{H}_{el-b}$

↳ háttér elektrosztatikus energiája:

$$\mathcal{H}_b = \frac{1}{2}\int d^3r\, d^3r' \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \underbrace{n(\vec{r})n(\vec{r}')}_{\text{háttér sűrűsége}}$$

$$\mathcal{H}_{el-b} = -\int d^3r \sum_{i=1}^{N} \frac{e^2}{|r_i - r|}\, n(\vec{r})$$

elektron kh-a az elkent háttérrel

$$\mathcal{H}_{el} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j \\ i\neq j}} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

Coulomb-tagnak nincs Fourier-trafója közönségesen kezeljük meg!

Cseréljük le a pot-t rövidhatótávolságúra, számoljunk, majd növeljük meg a hatótávol.

$$\frac{e^{-\mu r}}{r} \Leftarrow \frac{1}{r}$$

$\Downarrow$

termodin. hat. eset $\left(N\to\infty\ \frac{N}{V} = \text{áll}\right)$

$\Downarrow$

$\mu \to 0$ $\Rightarrow$ az itt kapott eredmény írja le az elektrongázt.

$$\int d^3r\, e^{-iqr} \frac{e^{-\mu r}}{r} = \frac{4\pi}{\mu^2+q^2}$$

$\int dr\, r^2 \int d\cos\vartheta \int d\varphi\, e^{-iqr\cos\vartheta} \frac{e^{-\mu r}}{r}$

háttér energiája:

$n(r) = \frac{N}{V}$

$$\mathcal{H}_b = \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d^3r_1 \int d^3r_2 \frac{e^{-\mu|r_1-r_2|}}{|r_1 - r_2|} = \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d^3R \int d^3r \frac{e^{-\mu r}}{r}$$

$$H_b = \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 \underbrace{\int d^3R}_{V} \underbrace{\int d^3r \frac{e^{-\mu r}}{r}}_{4\pi \underbrace{\int_0^\infty dr\, r^2 e^{-\mu r}}_{1/\mu^2}} = \frac{4\pi}{2} e^2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 \frac{V}{\mu^2}$$

$$H_{el-b} = -e^2 \frac{N}{V} \sum_{i=1}^{N} \int d^3r \frac{e^{-\mu |\underline{r}-\underline{r}_i|}}{|\underline{r}-\underline{r}_i|} = -e^2 \frac{N^2}{V} \underbrace{\int d^3r \frac{e^{-\mu r}}{r}}_{\frac{4\pi}{\mu^2}}$$

$\underline{r}-\underline{r}_i$ csak $\frac{1}{\mu}$ távban ad járulékot, de ez a kezdeti ponttól független

$$-\frac{e^2}{2} \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2} = H_b + H_{el-b}$$

$$H_{el} = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{k,k',q \\ \sigma,\sigma'}} \overbrace{\frac{4\pi}{\mu^2+q^2}}^{\text{kh. pot Fourier trafója}} a^+_{k+q,\sigma} a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma}$$

$\underline{q=0}$ $\quad \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk' \\ \sigma\sigma'}} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} a^+_{k\sigma} a^+_{k'\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma}$

$$-a^+_{k\sigma} \underbrace{a^+_{k'\sigma'} a_{k\sigma}}_{\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'} - a_{k\sigma} a^+_{k'\sigma'}} a_{k'\sigma'} = -a^+_{k\sigma} \overset{\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}}{\cancel{\ldots}} a_{k'\sigma'} + a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} a^+_{k'\sigma'} a_{k'\sigma'}$$

$$= \frac{1}{2V} \cancel{\sum_{\substack{kk' \\ \sigma\sigma'}}} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} \left(N^2 - \underbrace{\sum_{k\sigma} n_{k\sigma}}_{N}\right) = \frac{1}{2V} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} \left(N^2 \cancel{\ldots} - N\right)$$

termodinamikai határesetben állandó 1 részecskére jutó energiát nem változtatja

Így a $q=0$-s tag kiejtődik

H_{el}-ben marad a V a $q=0$-s tag nélkül $\Rightarrow$ itt már elvégezhető a $\mu \to 0$ határeset.

$$H = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{k,k',q \\ \sigma\sigma' \\ (q\neq 0)}} \frac{4\pi e^2}{q^2} a^+_{k+q,\sigma} a^+_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma}$$

Háttérrel való kh. azt jelenti, hogy $q=0$-t kihagyjuk

Alapállapoti energia (perturbációszámítás 1. rend)

$$\langle H \rangle_0 = \underbrace{\langle H_0 \rangle_0}_{\text{kinetikus energia}} + \underbrace{\langle H_1 \rangle_0}_{\text{potenciális energia}}$$

Alapállapot: $\underbrace{\text{Fermi-energiáig}}_{\text{attól függ, hány részecske van}}$ betöltött állapotok

Kinetikus energia: $E_{kin} = \sum_{k,\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} n_{k\sigma} =$

$$n_{k\sigma} = \begin{cases} 1 & k < k_F \\ 0 & k > k_F \end{cases} \qquad E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

$$= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

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

Egy részecskére jutó energia:

$$N = \sum_{k\sigma} n_{k\sigma} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|k|<k_F} d^3k = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k_F^3}{3}$$

$$\frac{E_{kin}}{N} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}.$$

Potenciális energia

(várható értéke)

$$\underbrace{\frac{v(0)}{2}\frac{N^2}{V}}_{\text{Hartree tag}} \underbrace{- \frac{1}{2V}\sum_{kk'\sigma} v(k-k')\, n_{k\sigma}\, n_{k'\sigma}}_{\text{Fock tag}}$$

Fock tag: $k-k'=q\neq 0$

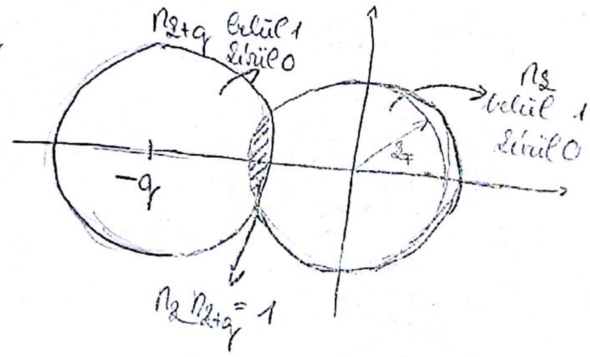
$$-\frac{1}{2V}\sum_{kq\sigma} v(q)\, n_{k\sigma}\, n_{k+q\sigma} \qquad v(-q)=v(q)$$

Ezt elviszi a háttér most $\Rightarrow$ NINCS

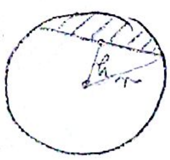
$$E_{pot} = -\frac{1}{2V}\sum_{\substack{kq\sigma \\ q\neq 0}} \frac{4\pi e^2}{q^2} n_{k\sigma} n_{k+q,\sigma} = -2\frac{1}{2V}\frac{V^2}{(2\pi)^6}\int d^3q \int d^3k \frac{4\pi e^2}{q^2} n_k n_{k+q} =$$

σ-tól független a betöltési szám

$$\int_0^{k_F} d^3k\, n_k n_{k+q}$$



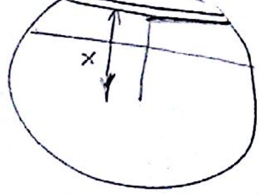
gömbsüveg térfogata:



$$\frac{2\pi}{3}\left(r^3-\frac{3}{2}hr^2+\frac{h^3}{2}\right)$$

$r\to k_F \quad h\to \frac{q}{2}$

Ha nincs Bronstein:



$$\int_h^r \pi(r^2-x^2)\,dx$$

$$\int_0^{k_F} d^3k\, n_k n_{k+q} = \frac{4\pi}{3}\left(k_F^3-\frac{3}{2}\frac{q}{2}k_F^2+\frac{1}{2}\left(\frac{q}{2}\right)^3\right) =$$

$$= \frac{4\pi}{3}k_F^3\left(1-\frac{3}{2}\frac{q}{2k_F}+\frac{1}{2}\left(\frac{q}{2k_F}\right)^3\right)$$

addig míg $q<2k_F$ előtt a.

$$\int d^3q\,\frac{1}{q^2}\dots = \int_0^{2k_F} dq\, 4\pi q^2 \frac{1}{q^2}\frac{4\pi}{3}k_F^3\left(1-\frac{3}{2}\frac{q}{2k_F}+\frac{1}{2}\left(\frac{q}{2k_F}\right)^3\right) =$$

$$= 4\pi\frac{4\pi}{3}k_F^3\, 2k_F\int_0^1\Big(\overset{1}{1}-\overset{-\frac{3}{4}}{\frac{3}{2}x}+\overset{\frac{1}{8}}{\frac{1}{2}x^3}\Big)dx = 4\pi\frac{4\pi}{3}k_F^3\, 2k_F\,\frac{3}{8}$$

$x=\frac{q}{2k_F} \qquad q=2k_F x \qquad dq=2k_F\,dx$

Statisztikus fizika 2012. 11. 29.

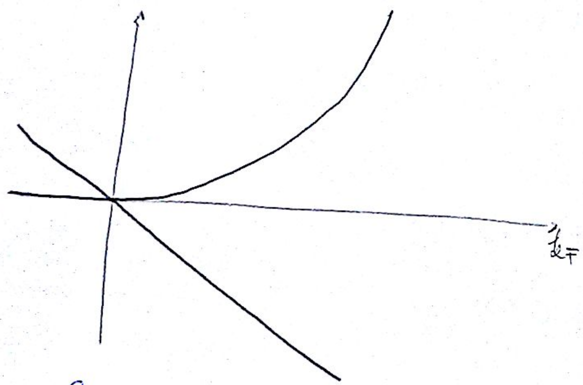
$$E_{pot} = -2\,\frac{1}{2V}\frac{V^2}{(2\pi)^6}\,4\pi e^2\,4\pi\,\frac{4\pi}{3}k_F^3\,2k_F\,\frac{3}{8} = -V\,\frac{e^2k_F^4}{4\pi^3}$$

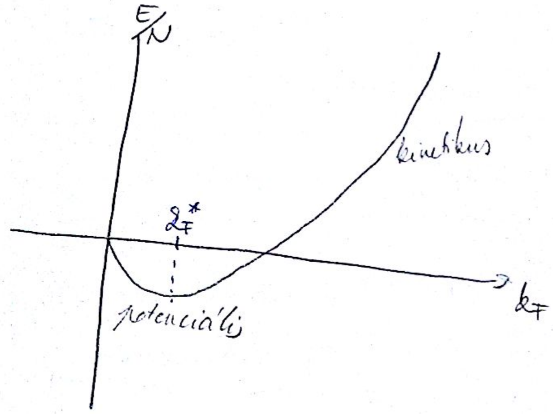
$$\frac{E_{pot}}{N} = -\frac{V}{N}\,\frac{e^2k_F^4}{4\pi^3} = \qquad N = 2\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}k_F^3 = \frac{V}{3\pi^2}k_F^3 \qquad \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

$$= -\frac{3\pi^2}{k_F^3}\,\frac{e^2k_F^4}{4\pi^3} = -\frac{3}{4}\,\frac{1}{\pi}\,e^2k_F$$

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5}\,\frac{\hbar^2k_F^2}{2m} - \frac{3}{4\pi}e^2k_F$$

k_F lényegében a sűrűségre utal





Szabad paraméterként bennmaradt a sűrűség.
Kényszer nélkül a k_F^*-nak megfelelő értéket veszi fel az energia (=> minimum)

Legegyszerűbb: fix magok helye => elektronok helyzete úgy, hogy energia = min

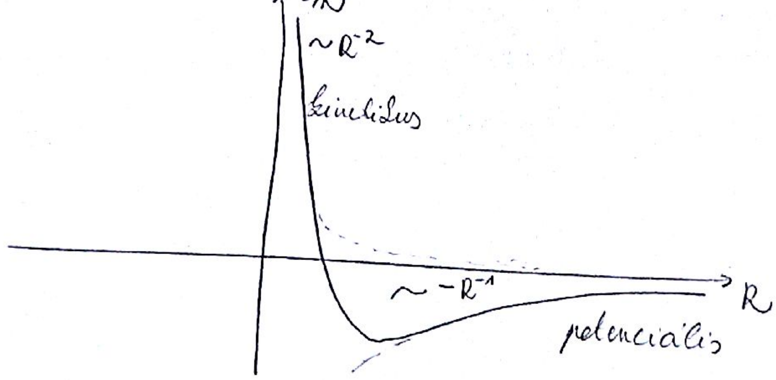
Háttér sűrűsége ugyanolyan, mint az elektronoké

$\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ mindig nagyobb, mint az alapállapoti energia
Mikor hiteles ez a perturbációszámítás?
nagy k_F-re => akkor a kinetikus energia dominál
máshol annyit tudunk, hogy az ábrázolt feljebb van a valóságos görbénél

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - \frac{3}{4\pi} e^2 k_F = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2)^{2/3}\underbrace{\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}}_{1/R^2} - \frac{3e^2}{4\pi}(3\pi^2)^{1/3}\underbrace{\left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}}_{\frac{1}{R}}$$

$$k_F = (3\pi^2)^{1/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}$$

$R = \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}$ átlagos távolság



Dimenziótlanítás

$V = \frac{4\pi}{3} r_0^3 N$ dimtlan: $r_s = \frac{r_0}{a_0}$ $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$

R: kockákra osztva a térfogatot: él.
r_0^3: gömbnek tekintve

$$\frac{V}{N} = \frac{4\pi}{3} r_0^3 = \frac{4\pi}{3}(a_0 r_s)^3$$

$$\frac{E}{N} = \underbrace{\frac{e^2}{2a_0}}_{1\,Ry = 13{,}6\,eV}\left(\underbrace{\frac{3}{5}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}}_{2{,}21}\frac{1}{r_s^2} - \underbrace{\frac{3}{2\pi}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}}_{0{,}92}\frac{1}{r_s}\right) =$$

$$= \frac{e^2}{2a_0}\left(\frac{2{,}21}{r_s^2} - \frac{0{,}92}{r_s}\right)$$

Minimumot adó r_s érték: 4,8

közönséges fémekben: 1,8 és 6 között van a mért.

Perturbációszámítás magasabb rendben

következő tag divergál. ⇒ az együttható végtelen
Abban a sorban, melynek eh-i <u>nem léteznek</u> rézösszeg
amelynek már léteznek eh-i. r_s-ben nem analitikus

perturbációszámítás 1. rend = zérus hőm.-en HF

HF-en túl: korrelációs energiák

nem tudjuk sorfejteni

$$\frac{E}{N} = \frac{e^2}{2a_0}\left(\frac{2{,}2099}{r_s^2} - \frac{0{,}9163}{r_s} \boxed{- 0{,}094 + 0{,}0622 \ln r_s + 0{,}018\, r_s \ln r_s + A r_s + \mathcal{O}(r_s^2)}\right)$$

$\underbrace{\text{korrelációs energia}}_{\text{mindig negatív}}$

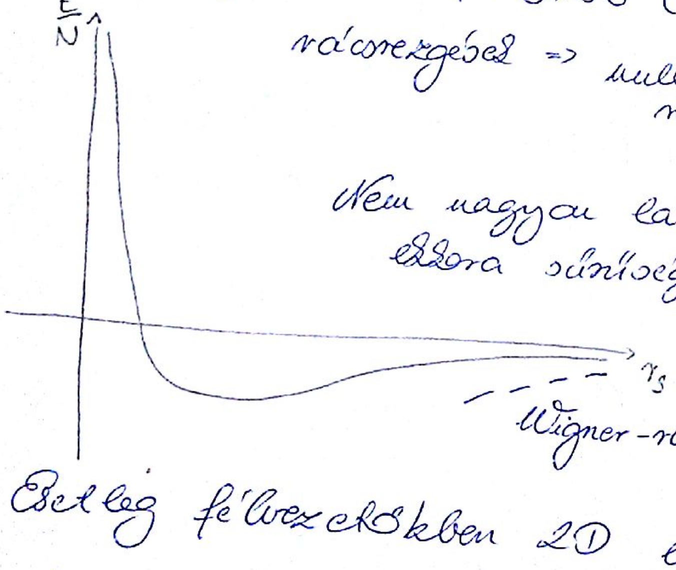
Negatív töltés betéve: eltaszítja az elektronokat, körülötte kitöltés miatt pozitív => árnyékolás
Ez a benn lévő e^--ok közti kh-ra is igaz =>
ezt figyelembe véve ⇒ összegzés

Wigner-rács

$r_s \to \infty$ esetén rácsba rendeződnek az elektronok (nem gáz)

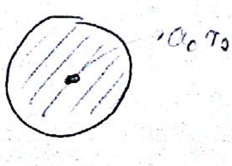
$$\frac{E}{N} \simeq -\frac{A}{r_s} \qquad A = 1{,}79186 \text{ (bcc rács)}$$

rácsrezgések => nullponti rezgési energia $\frac{1}{r_s}$-nél $\underbrace{\text{gyengébb}}_{1/r_s^{3/2}}$



Nem nagyon látunk ilyet, mert nem tudunk akkora sűrűséget létrehozni.

Esetleg félvezetőkben 2D elektrongázban.
Madelung összegzéshez hasonlóban (ionkristály)



elektrosztatikus energia 1 elektronra

Perturbációszámítás

$\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 e^{\varepsilon t}$

$-\infty$ - ben $\Rightarrow \mathcal{H}_0$

∞ - ben $\Rightarrow \mathcal{H}_1$

Az idő teltével növelem a $\mathcal{H}_1$ jelenlétét

$t=0$ -ban $\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1$ várható értéke

Klasszikus plazma:

N_+ db Q_+ töltésű részecske és N_- db Q_- töltésű részecs-ke alkot egy gázt.

Semlegesség: $N_+ Q_+ + N_- Q_- = 0$

Kinetikus + pot $\Rightarrow$ energia

→ ugyanahhoz csak ez kell.

$e^{-\beta \dots}$ felbontható az impulzus és a koordiná-tára vonatkozó párnlészra $\Rightarrow$ függetlenek

próbaeloszlás

csak a pot. energiával foglalkozunk: Coulomb-kh.

$$f(r_1^+ \dots r_{N_+}^+, r_1^- \dots r_{N_-}^-) = \prod_{i=1}^{N_+} \underbrace{\rho_+(r_i^+)}_{} \prod_{j=1}^{N_-} \rho_-(r_j^-)$$

minden részecske uo.

$\Rightarrow$ eloszlású

Szorzatalakban az eloszlás fv.

Próba szabad energia: F_f

+ töltésű részecskék sűrűsége: $n_+(\underline{r}) = \left\langle \sum_{i=1}^{N_+} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i^+) \right\rangle$

Összeszámolja a részecskéket adott tartományban.

Statisztikus fizika

2012. 12. 06.
2012. 11. 29.

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

töltéssűrűség: $\rho = Q_+ n_+(\underline{r}) + Q_- n_-(\underline{r})$

$$F_\rho = \frac{1}{2}\int d^3r\, d^3r'\, \rho(\underline{r}) \overbrace{}^{u(\underline{r}-\underline{r}')} \rho(\underline{r}') \quad (\text{elektrosztatikus e.}) +$$

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

$$+ (\text{külső pot}) \int d^3r\, \rho(\underline{r})\, \phi_{ext}(\underline{r}) + \underbrace{k_B T}_{-T(-S)\,=\,-T\sum(-k_B \rho \ln \rho)} \left\{ \sum_{i=1}^{N^+} \int d^3r_i\, \rho_+(\underline{r}_i^+) \ln \rho_+(\underline{r}_i^+) + \right.$$

inf. entrópia

$$\left. + \sum_{j=1}^{N_-} \int d^3r_j\, \rho_-(\underline{r}_j^-) \ln \rho(\underline{r}_j^-) \right\}$$

részecskék nem -k $\Rightarrow \sum \Rightarrow N^\pm$

$$\rightarrow N_+ \int d^3r \frac{n_+(\underline{r})}{N_+} \ln \frac{n_+(\underline{r})}{N_+} + N_- \int d^3r \frac{n_-(\underline{r})}{N_-} \ln \frac{n_-(\underline{r})}{N_-}$$

Sűrűségfunkcionál minimuma úgy, hogy a részecskék száma ne változzon.

$$F_\rho - \mu_+ N_+ - \mu_- N_- = \min$$

Variálás ~~[illegible]~~ $n_+(\underline{r}) \rightarrow n_+(\underline{r}) + \delta n_+(\underline{r})$

$$\delta(F_\rho - \mu_+ N_+ - \mu_- N_-) = \int d^3r \int d^3r'\, Q_+\, \delta n_+(\underline{r})\, u(\underline{r}-\underline{r}')\, \rho(\underline{r}') +$$

először csak δn_+

$$+ \int d^3r\, \{Q_+ \delta n_+(\underline{r})\, \phi_{ext}(\underline{r}) + k_B T \cancel{N_+} \left\{ \int d^3r \frac{\delta n_+(\underline{r})}{\cancel{N_+}} \ln \frac{n_+(\underline{r})}{N_+} + \int d^3r \frac{\delta n_+(\underline{r})}{\cancel{N_+}} \right\} - \mu_+ \int d^3r\, \delta n_+(\underline{r}) = 0$$

$$\delta F = \int d^3r\, \delta n_+(\underline{r}) \underbrace{\left[\int d^3r'\, Q_+ u(\underline{r}-\underline{r}') \rho(\underline{r}') + Q_+ \phi_{ext}(\underline{r}) + k_B T \ln \frac{n_+(\underline{r})}{N_+} + k_B T - \mu_+ \right]}_{\text{tetsz. } \delta n_+(\underline{r})\text{-re} \;\; -\!\!\!-\!\!\!- \;\; 0} = 0$$

$$\left\{Q_+\int d^3r'\,u(\underline{r}-\underline{r}')\rho(\underline{r}') + Q_+\Phi_{ext}(\underline{r}) + k_BT\ln\frac{n_+(\underline{r})}{N_+} + k_BT - \mu_+\right\} = 0 =$$

$\Phi(\underline{r}) = \int d^3r'\,u(\underline{r}-\underline{r}')\rho(\underline{r}') + \Phi_{ext}(\underline{r})$ " teljes elektrosztat pot.

$$= Q_+\Phi(\underline{r}) + k_BT\ln\frac{n_+(\underline{r})}{N_+} + k_BT - \mu_+ = 0$$

Ebből n_+ kifejezhető (persze self-consistent marad)

$$Q_+\Phi(\underline{r}) + k_BT\ln\frac{n_+(\underline{r})}{N_+} = \underbrace{\mu_+ - k_BT}_{\underline{r}\text{-től független}} = k_BT\ln C$$

$$\frac{n_+(\underline{r})}{N_+} = C e^{-\frac{Q_+\Phi(\underline{r})}{k_BT}}$$ $\to$ Q_+ töltés elektrosztatikus energiája

hely szerinti sűrűségeloszlás

DE Φ-ben benne van $n_+(\underline{r})$

~~Viriál-együtthatók csak akkor konvergensek, ha rövid hatótávolságú a kh. De most nem az.~~

~~Sűrűség az 1/2-iken 0 körül nem fejthető sorba.~~

~~Használhatatlan a fenti mű~~

Statisztikus fizika 2012. 12. 06.

Q_+ töltés N_+ db

Q_- töltés N_- db

$N_+ Q_+ + N_- Q_- = 0$ semleges anyag $\rho(\underline{r}) = \underbrace{Q_+ n_+(\underline{r}) + Q_- n_-(\underline{r})}_{\text{töltéssűrűség}}$

Szabad-energia

$$F_\rho = \frac{1}{2}\int d^3r \int d^3r' \rho(\underline{r})\, u(\underline{r}-\underline{r}')\, \rho(\underline{r}') + \int d^3r\, \rho(\underline{r})\, \phi_{ext}(\underline{r}) +$$

$$+ k_B T N_+ \int d^3r \frac{n_+(\underline{r})}{N_+} \ln \frac{n_+(\underline{r})}{N_+} + k_B T N_- \int d^3r \frac{n_-(\underline{r})}{N_-} \ln \frac{n_-(\underline{r})}{N_-}$$

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

$$\frac{n_\pm(\underline{r})}{N_\pm} = \underbrace{\frac{1}{Z_\pm}}_{C \text{ miatt}} e^{-\beta Q_\pm \phi(\underline{r})}$$

$Z_\pm$ állítja be, hogy integrálva a jobb oldalt 1-el kapjuk

$$\int d^3r\, n_\pm(\underline{r}) = N_\pm$$

$$Z_\pm = \int d^3r\, e^{-\beta Q_\pm \phi(\underline{r})}$$

A fentieket úgy kell megoldani, hogy önkonzisztensek legyenek

1. Triviális megoldása a fenti egyenleteknek:

$\phi_{ext}(\underline{r}) = 0 \qquad \phi(\underline{r}) = 0 \Rightarrow Z_\pm = V$

$$n_\pm = \frac{N_\pm}{V}$$

$$\rho(\underline{r}) = \frac{Q_+ N_+}{V} + \frac{Q_- N_-}{V} = 0 \Rightarrow \phi(\underline{r}) = 0$$

ez egy önkonzisztens megoldás

2. Gyenge külső potenciál

Φ_{ext} „gyenge" $\Rightarrow$ $\phi(\underline{r})$ „gyenge" potenciál

$$\frac{n_\pm(\underline{r})}{N_\pm} = \frac{e^{-\beta Q_\pm \phi(\underline{r})}}{\int d^3r\, e^{-\beta Q_\pm \phi(\underline{r})}} \overset{\text{sor.}}{\simeq} \frac{1-\beta Q_\pm \phi(\underline{r})}{V\left(1-\frac{1}{V}\int d^3r\, \beta Q_\pm \phi(\underline{r})\right)} =$$

$$= \frac{1}{V}\left(1-\beta Q_\pm \phi(\underline{r})\right)\left(1+\frac{1}{V}\int d^3r\, \beta Q_\pm \phi(\underline{r})\right) \overset{\text{csak } \phi\text{-ben lineáris tagok}}{\simeq}$$

$$= \frac{1}{V}\Big(1 - \underbrace{\beta Q_\pm \phi(\underline{r}) + \frac{\beta}{V}\int d^3r\, Q_\pm \phi(\underline{r})}_{\text{töltések száma ne változzon}}\Big)$$

töltések száma ne változzon } ahhoz kell

$\frac{1}{V}$ integrálja 1. ✓

Beírva a töltéssűrűségbe:

$$\rho(\underline{r}) = \underbrace{Q_+\left(\frac{N_+}{V}\right) + Q_-\left(\frac{N_-}{V}\right)}_{\text{semlegesség miatt } 0} - \beta\frac{N_+ Q_+^2}{V}\phi(\underline{r}) - \beta\frac{N_- Q_-^2}{V}\phi(\underline{r}) + \left(\frac{N_+}{V^2}Q_+^2\beta + \frac{N_-}{V^2}Q_-^2\beta\right)\int d^3r\, \phi(\underline{r})$$

integrálva kijön $\int d^3r\, \phi(\underline{r})$ } „=" -k az előjelek eltérnek

integrálva $\frac{1}{V^2} \to \frac{1}{V}$

$\int d^3r\, \rho(\underline{r}) = 0$ ✓

$$\frac{1}{k_B T}\left(\frac{N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2}{V}\right) = \frac{\kappa^2}{4\pi}$$

$[\kappa] = \frac{1}{\text{hosszúság}}$

$$\rho(\underline{r}) = -\frac{\kappa^2}{4\pi}\phi(\underline{r}) + \frac{\kappa^2}{4\pi}\underbrace{\frac{1}{V}\int d^3r\, \phi(\underline{r})}_{\sim \phi_q|_{q=0}}$$

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

$\Rightarrow \phi(\underline{r})$ Fourier-transzformáltja $q=0$-ra

$q \neq 0$ $\quad \rho_q = -\frac{\kappa^2}{4\pi}\phi_q \quad \phi_q = -\frac{4\pi}{\kappa^2}\rho_q$

$$\phi_q = \phi_{ext,q} + \frac{4\pi}{q^2}\rho_q$$

$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q^2}{r}$

Statisztikus fizika 2012. 12. 06.

Egyrészt:

$$\underbrace{-\frac{4\pi}{\kappa^2}\rho_q}_{\phi_q} = \phi_{ext,q} + \frac{4\pi}{q^2}\rho_q$$

$$\rho_q = \frac{-\phi_{ext,q}}{4\pi\left(\frac{1}{\kappa^2}+\frac{1}{q^2}\right)} = \frac{1}{4\pi}\overbrace{\frac{q^2\kappa^2}{q^2+\kappa^2}}^{\text{dielektromos szuszceptibilitás}}(-\phi_{ext,q})$$

lineáris kapcsolat a potenciál megváltozása és a töltéssűrűség megváltozása között

Másrészt:

$$\phi_q = \phi_{ext,q} + \frac{4\pi}{q^2}\left(-\frac{\kappa^2}{4\pi}\right)\phi_q$$

$$\phi_q\left(1+\frac{\kappa^2}{q^2}\right) = \phi_{ext,q}$$

$$\phi_q = \frac{q^2}{q^2+\kappa^2}\phi_{ext,q}$$ csak $q\neq 0$-ra igaz!

Fourier-komponens: hullám: amennyi pozitív töltés keletkezik, annyi negatív is => semleges marad.

Ponttöltést helyezzünk be

Persze itt a potenciál nem lesz kicsi, de nem baj

Q_0

$$\left.\begin{aligned}\phi_{ext} &= \frac{Q_0}{r} \\ \phi_{ext} &= \frac{Q_0 4\pi}{q^2}\end{aligned}\right\} \rho_q = \frac{\kappa^2}{\kappa^2+q^2}(-Q_0)$$

(FT)

Yukawa pot. Fourier-transzformáltja

Kialakul egy ellentétes töltésű töltésfelhő a behelyezett töltés körül, mely szépen lecseng.

$$\rho(\mathbf{r}) = \kappa^2\frac{e^{-\kappa r}}{4\pi r}(-Q_0)$$

$$\int d^3r\, \rho(r) = \frac{\gamma^2}{4\pi}\underbrace{\int_0^\infty dr\, 4\pi r^2 \frac{e^{-\gamma r}}{r}}_{\int_0^\infty r e^{-\gamma r} = \frac{1}{\gamma^2}}(-Q_0) = -Q_0 \qquad \rho(r) = \gamma^2 \frac{e^{-\gamma r}}{4\pi r}(Q_0)$$

$\Downarrow$

teljes árnyékolást csinál ez az összegyűlt töltésfelhő.

$$\phi_q = -\frac{4\pi}{\gamma^2}\frac{\gamma^2}{\gamma^2+q^2}(-Q_0) = Q_0 \frac{e^{-\gamma r}}{r}$$

ellentétes töltésből felhője az eredeti potenciált rövid hatótávolságúvá teszi $\Rightarrow$ exponenciálisan cseng le.

$\phi_{ext} = 0$ állapotegyenlet $\Rightarrow$ Hartree-Fock

$\rho(r) = 0 \qquad n_\pm(r) = \frac{N_\pm}{V}$

$$F_\rho = \overbrace{\frac{1}{2}\int d^3r \int d^3r'\, \rho(r)\, u(r-r')\rho(r')}^{0,\text{ mert } \rho=0} + \overbrace{\int d^3r\, \rho(r)\, \phi_{ext}(r)}^{0 \text{ mert } \rho=0} +$$

$$+ k_B T N_+ \int d^3r \frac{n_+(r)}{N_+} \ln \underbrace{\frac{n_+(r)}{N_+}}_{\frac{\cancel{N_+}}{V\cancel{N_+}}} + k_B T N_- \int d^3r \frac{n_-(r)}{N_-} \ln \frac{n_-(r)}{N_-} =$$

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

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

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{k_B T N}{V}$$

Nem kapjuk meg a töltések hatását így, a korrelációs energia hatása nincs benne.

Generated by CamScanner from intsig.com

Statisztikus fizika 2012. 12. 06.

Továbblépés: Korrelációs energia számítása

töltés körül a többi dipól felhőt alakít ki.

Potenciál: $\phi(r) = Q_+ \dfrac{e^{-\kappa r}}{r} \simeq Q_+ \dfrac{1-\kappa r}{r} =$

$(r \ll 1/\kappa)$

$$= \overbrace{\frac{Q_+}{r}}^{\text{töltésé}} - \underbrace{\kappa Q_+}_{\substack{\text{körülötte pot}\\ \text{többi töltés járuléka}}}$$

$$E_{corr} = -\frac{\kappa Q_+^2}{2} N_+ - \frac{\kappa Q_-^2 N_-}{2} = -\frac{\kappa}{2}\left(Q_+^2 N_+ + Q_-^2 N_-\right)$$

kh → kiválasztott töltés szemszögéből is számoltuk ⇒ $\frac{1}{2}$

$$\frac{\kappa^2}{4\pi} = \beta \frac{N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2}{V} \quad (\kappa \text{ def.})$$

$$E_{corr} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{4\pi}{k_B T V}}\left(N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2\right)^{3/2} = -\underbrace{A}_{\text{konst}} \beta^{1/2}$$

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

⇓

$$-(\ln Z)_{corr} = -A \beta^{3/2} \frac{2}{3}$$

$$-\ln Z = -\frac{2}{3}\beta \sqrt{\frac{\pi}{k_B T V}}\left(N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2\right)^{3/2} \underbrace{+ N \ln \frac{1}{V}}_{\substack{\text{integrálási állandó,}\\ \text{korábbról}}}$$

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

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

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{N k_B T}{V} - \underbrace{\frac{1}{3}\sqrt{\frac{\pi}{k_B T}}\left(\frac{N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2}{V}\right)^{3/2}}_{\text{korrelációs energia}}$$

plazma nyomása ebben a közelítésben

Debye-Hückel-féle elmélete a klasszikus plazmának

Viriál együtthatók csak akkor konvergensek, ha rövid hatótávolságú a kh. De most nem az.

Különbség az 1/2-iden 0 körül nem fejthető sorba.
Hosszútávúra a fenti működik

Nagyságrendi becslések a feltételre

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

$$\kappa^2 = \frac{4\pi}{k_B T}\,\frac{(N_+ Q_+^2 + N_- Q_-^2)}{V}$$

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

Rayrayridoo!

1 részecskére jutó kinetikus energia

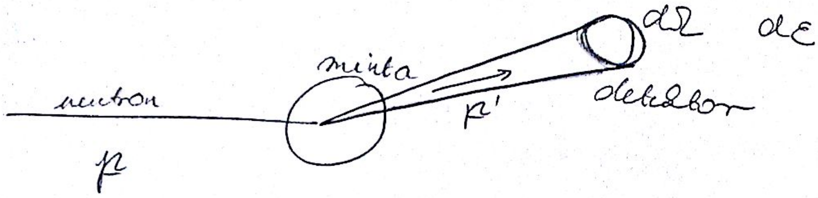
$$\sim k_B T \gg \frac{Q^2}{\underbrace{(V/N)^{1/3}}_{\text{átlagos távolság}}} \to \text{1 részecskére jutó pot. energia}$$

Debye Hückel elmélet a Fermi-hőmérséklethez képest magas hőmérsékletű e^--gázban is megkapható ∞-sok perturbációs tagot felösszegezve

Alacsony hőmérsékleten nagy távolságokon a kompenzációs töltéssűrűség oszcillálva $\rho(\underline{r}) \sim \frac{\cos(2k_F r)}{r^3}$ cseng le (nem exponenciálisan, hosszútávú)

Statisztikus fizika 2012. 12. 06.

Neutron-szórás



$p = p' + \underbrace{\hbar q}_{\text{minta által felvett impulzus}}$

$\frac{p^2}{2m} = \frac{p'^2}{2m} + \underbrace{\hbar\omega}_{\text{minta által felvett energia}}$

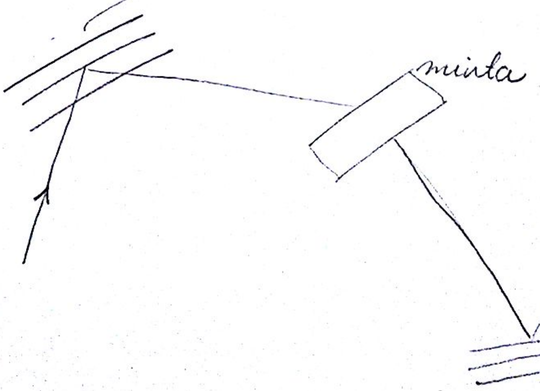
$\Delta N(d\Omega, dE) = I \frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE} d\Omega\, dE$

egységnyi idő alatt szórt neutronok száma a meghatározott térszögbe meghatározott energia-intervallumban.

I: bejövő neutron fluxus egységnyi idő alatt egységnyi felületen érkező neutronok száma

Neutronok gyengén hatnak kölcsön az anyaggal. Csak maggal, ha elég közel. → Born-közelítés használható, perturbációban számolható

Impulzuskiválasztó: Bragg-reflexió



Kezdő állapot:
- neutron: szabad részecske $p, \frac{p^2}{2m}$
- minta: energiasajátállapotban E_n

Végállapot
- neutron: szabad részecske $p', \frac{p'^2}{2m}$
- minta: E_m energiasajátáll, v. kifejthető

Energia megmaradás

$$E_n + \frac{p^2}{2m} = E_m + \frac{p'^2}{2m}$$

1 neutron jön be

Valószínűsége a folyamatnak:

$$\sum_n \underbrace{P(p, E_n \to p', E_m)}\ \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\ \overbrace{\frac{V}{h^3} d^3 p'}^{*} = j_p \frac{d\sigma}{d\Omega dE} d\Omega dE$$

A rendszer tetsz. energiasajátáll-ban lehet súlyozva a Boltzmann-tényezővel ⇒ összegzés

- végállapotok száma (neutronra)

állapotsűrűség: $\frac{V}{h^3}$ p-térben *

j_p = 1 neutron síkhullám állapotában az áramsűrűség

Fermi-féle aranyszabály

Nézzük az átmeneti valószínűséget, ehhez kell a kh-i potenciál!

$U = \sum_{\alpha=1}^{N} u\,\delta(\underline{r} - \underline{r}_\alpha)$ rövid hatótávolságú potenciál, magokon szóródik a neutron, ezek picik rácsállandó nagyságú neutron hullámhosszhoz képest. + ✓ magot olyannak vesszük, pedig lehetne heterogén + izotópok + spinállapotok. $u = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b$ b: ún. szórási hossz.

minta sajátállapota

$$\underbrace{\sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} P(p, E_n \rightarrow p', E_m)}_{\text{Fermi-féle aranyszabály (1.)}} \underbrace{\frac{V}{h^3} d^3 p'}_{\text{imp-térbeli áll. sűrűség (2)}} = \underbrace{j\,r}_{\text{1 neutron síkhullámállapotban az áramsűrűség (3.)}} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} d\Omega dE$$

szóródó imp.

Aranyszabály

$$P(p, E_n \rightarrow p', E_m) = \frac{2\pi}{\hbar} \delta\left(\frac{p^2}{2m} + E_n - \frac{p'^2}{2m} - E_m\right) \cdot$$
$$\cdot |\langle p, n | U | p', m \rangle|^2$$

$\frac{p^2}{2m} - \frac{p'^2}{2m} = \hbar\omega$ ennyi energiát ad át a mintának a neutron

$\delta(\hbar\omega - E_m + E_n)$

$|p, n\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar} p r} |n\rangle$ kiindulási szabad állapot

$|p', m\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar} p' r} |m\rangle$ szabad végállapot

V: nagy normálási térfogat, melyben minden benne van.

$$\langle n| \int d^3r \, \frac{1}{V}\sum_{\alpha=1}^{N} u\, \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\alpha)\, \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}p r}\, e^{\frac{i}{\hbar}p' r}}_{*} |m\rangle =$$

ezt az átlagolást csak kijelölni tudom, számolni nem, mert a minta részleteiről nem volt szó.

(*) e^{-iqr} $\quad q = p - p'$

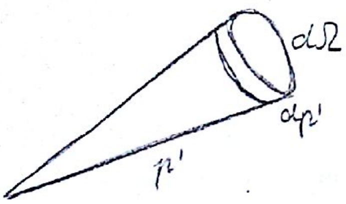
$$= \langle n| \frac{u}{V}\sum_{\alpha=1}^{N} e^{-iqr_\alpha}|m\rangle = \frac{u}{V}\langle n|\sum_{\alpha=1}^{N} e^{-iqr_\alpha}|m\rangle$$

Átmeneti valószínűség:

$$\mathcal{P} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(\hbar\omega - E_m + E_n)\frac{u^2}{V^2}\langle n|\sum_\alpha e^{-iqr_\alpha}|m\rangle\langle m|\sum_\alpha e^{iqr_\alpha}|n\rangle$$

2.)

$$\frac{V}{h^3}d^3p = \frac{V}{h^3}p'^2\, d\Omega\, dp' = \frac{V}{h^3}p' m\, d\varepsilon\, d\Omega$$



$\varepsilon = \frac{p'^2}{2m} \quad d\varepsilon = \frac{p'}{m}dp'$

3.)

$$|j_p| = \frac{p}{m}\frac{1}{V}$$

$$j_1 = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\vec\nabla\psi^* - \psi^*\vec\nabla\psi) = j_p$$

kvantummechanika $\quad \psi = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec p\vec r}$

$$\frac{1}{V}\frac{i\hbar}{2m}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\vec p\vec r}\left(-\frac{i}{\hbar}\vec p\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\vec p\vec r} - e^{-\frac{i}{\hbar}\vec p\vec r}\left(\frac{i}{\hbar}\vec p\right)e^{\frac{i}{\hbar}\vec p\vec r}\right) = \frac{\vec p}{V}\frac{1}{m}$$

$$\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\cancel{\frac{2\pi}{\hbar}}\delta(\hbar\omega-E_m+E_n)\cancel{\frac{1}{V^2}}\cancel{\frac{4\pi^2\hbar^4}{m^2}}b^2\langle n|\sum_\alpha e^{-iqr_\alpha}|m\rangle \cdot$$

$$\cdot\langle m|\sum_\alpha e^{iqr_\alpha}|n\rangle \cancel{\frac{V}{h^3}}p'\cancel{m}\,\cancel{d\varepsilon\, d\Omega} = \cancel{\frac{p}{m}}\cancel{\frac{1}{V}}\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\cancel{d\Omega\, d\varepsilon}$$

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon} = \frac{p'}{p}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\delta(\hbar\omega-E_m+E_n)\left|\langle n|\sum_\alpha e^{-iqr_\alpha}|m\rangle\right|^2$$

Statisztikus fizika 2012. 12. 13. (1)

$$\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x) \qquad \frac{1}{a}\int a\,dx\,\delta(ax) = \frac{1}{a}\int dx'\,\delta(x')$$

$$\delta(\hbar\omega - E_m + E_n) = \frac{1}{\hbar}\delta\left(\omega - \frac{E_m}{\hbar} + \frac{E_n}{\hbar}\right) = \frac{1}{\hbar}\delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right)$$

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{p'}{p} b^2 \frac{1}{\hbar} \underbrace{S(q,\omega)}$$

dinamikai szerkezeti tényező
(dynamical structure factor)

$$\rho(\underline{r}) = \sum_\alpha \delta(\underline{r} - \underline{r}_\alpha) \qquad \rho_q = \frac{1}{\sqrt{V}}\int d^3r\, e^{-iqr}\rho(\underline{r}) =$$

V: minta térfogata

$$= \frac{1}{\sqrt{V}}\int d^3r\, e^{-iqr}\sum_\alpha \delta(r - r_\alpha) =$$

sűrűség Fourier-trafója: $= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_\alpha e^{-iqr_\alpha}$

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

⇒ Dirac-δ inv. Fourier-transzformáltja konstans fv.

közönséges integrálként nem létezik ⇒ regularizálni kell: $\infty \Rightarrow 0$, $-\infty \Rightarrow 0$

ehelyett

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{0} dt\, e^{+i\omega t}e^{\varepsilon t}}_{t=-t'} + \int_0^\infty dt\, e^{+i\omega t}e^{-\varepsilon t} = \frac{-1}{\varepsilon - i\omega} + \frac{-1}{\varepsilon + i\omega} =$$

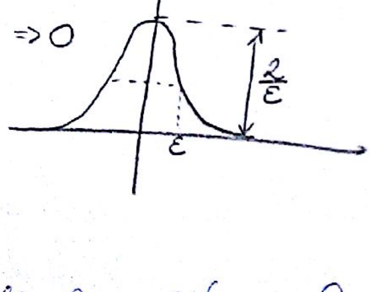
$$\int_0^\infty dt'\, e^{i\omega t'}e^{-\varepsilon t'}$$

$$= \frac{-2\varepsilon}{\varepsilon^2 + \omega^2}$$ Ez egy Lorentz-görbe

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2\varepsilon\, d\omega}{\varepsilon^2 + \omega^2} = 2\pi$$
↑ arctan...

$\omega \to 0$ $\varepsilon \to 0 \Rightarrow \infty$

$\omega \to \infty$ $\varepsilon \to 0 \Rightarrow 0$



$$\frac{2\varepsilon}{\varepsilon^2 + \omega^2} \xrightarrow[0]{\varepsilon} 2\pi\delta(\omega)$$

Regularizálás kis paraméterrel, melyet utána 0-hoz tartunk.

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

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{p'}{p}\frac{b^2}{\hbar}V\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dt}{2\pi}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\underline{\langle n|\rho_q|m\rangle}\langle m|\rho_{-q}|n\rangle \cdot$$

$$\cdot\, \underline{e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}}\, e^{i\omega t}$$

$$\langle n| \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}} \underbrace{\rho_q} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}} |m\rangle$$

$$\langle n| \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\rho_q e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}_{\rho_q(t)} |m\rangle \Rightarrow \text{Heisenberg-képben időfüggő } \rho_q \text{ mátrixeleme}$$

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{p'}{p}\frac{b^2}{\hbar}V\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dt}{2\pi}\underbrace{\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\langle n|\rho_q(t)|m\rangle\langle m|\rho_{-q}(0)|n\rangle\cdot e^{i\omega t}}$$

$$e^{i\omega t}\underbrace{\sum_{n}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\langle n|\rho_q(t)\rho_{-q}(0)|n\rangle}$$

$$\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}\rho_q(t)\rho_{-q}(0)\right) \Rightarrow \text{sűrűség-sűrűség korrelációs fv.}$$

$$\Downarrow$$

$$\langle\rho_q(t)\rho_q(0)\rangle$$

Minden olyan szórásban, ahol a szórás gyenge, akkor a h.k.m a korrelációs fv-t tartalmazza

Röntgennel pl. e^--sűrűség korr. fv.

Neutronok e^- mágneses momentumainak sűrűségének korr. fv-ét érzékeli

Nem azonos szórócentrumok esetén b bent marad az összegzésben.

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{p'}{p}\frac{1}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\langle n|\sum_{\alpha} b_\alpha e^{-iqx_\alpha}|m\rangle\langle m|\sum_{\alpha'} e^{iqx_{\alpha'}} b_{\alpha'}|n\rangle \cdot$$

$$\cdot\,\delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right)$$

Miért lehet ilyen?

- izotópok
- más spinállapotban az egyes magspinek

↳ ekkor a minta állapotát ezzel kell részletezni

↳ de a magspinek jó közelítéssel függetlenek egymástól és más szabadsági fokoktól, mert gyengék a kh-k.

$$\overline{b_\alpha b_{\alpha'}} = \begin{cases} \overline{b_\alpha^2} & \alpha = \alpha' \\ \overline{b_\alpha}\,\overline{b_{\alpha'}} & \alpha \neq \alpha' \end{cases}$$

α-tól független az átlag, ha azonos szórócentrumok vannak, csak a spinállapotban van különbség.

$\overline{b_\alpha} = \bar{b}$ $\quad\overline{b_\alpha^2} = \overline{b^2}$

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

olyan, mint amit korábban már néztünk, csak b helyett $\bar{b}$

részecskék közti fáziskülönbségeket megőrzi, információ a struktúráról

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE} = \underline{\frac{p'}{p}\frac{\bar{b}^2}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\left|\langle n|\sum_\alpha e^{-iqx_\alpha}|m\rangle\right|^2 \delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right)} +$$

$$+ \underline{\frac{p'}{p}\frac{(\overline{b^2} - \bar{b}^2)}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\sum_\alpha \overbrace{|\langle n|e^{-iqx_\alpha}|m\rangle|^2}^{\text{fáziskül. elvész}}\delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right)}$$

koherens szórási hkm ⇒ rendszer szerkezetéről hordoz információt

inkoherens szórási hkm ⇒ általában sima fv.

$\omega = 0$ rugalmas szórás ⇒ Bragg-csúcsok

kondenzált anyag egyéb energiaszintek közel ⇒ csak sűrűségről inf.

Ha $\langle n | e^{-iqx_\alpha} | m \rangle = 0 \Rightarrow$ tiltott átmenet $\Rightarrow$ kiválasztási szabályok

energiamegmaradás $\Rightarrow$ Fermi-féle aranyszabályból.
impulzusmegmaradás?
Azt kéne látni, hogy ha a neutron impulzusa $\hbar\vec{q}$-val változik, akkor a rendszeré is ennyivel fog

Minta teljes $\underbrace{\text{energiája}}_{\hat{H}}$ és $\underbrace{\text{impulzusa}}_{\hat{P}}$ felcserélhetők.

$[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ olyan sfv-ek, melyek az $\hat{P}$-nek és $\hat{H}$-nak is sfv-e.

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

$$\underline{\hat{P}}|n\rangle = \underline{P}_n|n\rangle \qquad \underline{\hat{P}} = \sum_\alpha p_\alpha = \sum_\alpha \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_\alpha$$

$$\left[\underline{\hat{P}}, \sum_\alpha e^{-iqx_\alpha}\right] = \left[\sum_{\alpha'} \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\alpha'}, \sum_\alpha e^{-iqx_\alpha}\right] = \sum_\alpha \left[\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_\alpha, e^{-iqx_\alpha}\right] =$$

$$= \sum_\alpha \frac{\hbar}{i}(-iq)e^{-iqx_\alpha} = -\hbar q \sum_\alpha e^{-iqx_\alpha}$$

$$\underbrace{\underline{\hat{P}} \sum_\alpha e^{-iqx_\alpha}|m\rangle}_{\Downarrow} = \underline{P}_m \sum_\alpha e^{-iqx_\alpha}|m\rangle + \frac{\hbar}{i}\sum_\alpha(-iq)e^{-iqx_\alpha}|m\rangle =$$

$$= \underbrace{(\underline{P}_m - \hbar q)}\sum_\alpha e^{-iqx_\alpha}|m\rangle$$

sfv ilyen sé-kel.

$$\frac{d^2\sigma}{dE\,d\Omega} = \frac{p'}{p}\frac{b^2}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\left|\langle n|\underbrace{\sum_\alpha e^{-iqx_\alpha}|m\rangle}_{\underbrace{\underline{P}_m - \hbar q}}\right|^2 \delta\!\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right)$$

csak akkor nem 0, ha $|n\rangle$ is $\hbar q$-val kisebb impulzusú állapot, mint $|m\rangle$.

Statisztikus fizika 2012. 12. 13. (4.)

adott imp. értékhez több energia sajátérték is tartozhat
így ezt alkalmazva a lineárkombinációjukat
kapjuk.

Neutronszórásban megjelennek a $\overset{\text{harmonikusszerű} \Rightarrow \text{véges szélességű}}{\text{rácsrezgés}}$ energiáinak
megfelelő csúcs