

Véges–hőmérsékleti soktestprobléma

Szépfalusy Péter, Szirmai Gergely

ELTE TTK Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

(kézirat)

2005/2006. tanév

Tartalomjegyzék

1. Betöltési szám reprezentáció	1
1.1. A Fock-tér konstrukciója	1
1.2. Keltő és eltüntető operátorok	5
1.2.1. Fermionok keltő és eltüntető operátorai	5
1.2.2. Bozonok keltő és eltüntető operátorai	7
1.3. Téroperátorok	9
1.4. A Hilbert-tér operátorainak reprezentálása	13
1.4.1. Egyrészeske operátorok	14
1.4.2. Kétrészeske operátorok	16
1.5. Alkalmazások és példák	18
2. Véges-hőmérsékleti Green-függvényes technika	25
2.1. Nagykanonikus sokaság, imaginárius idő	25
2.2. Véges-hőmérsékleti Green-függvény	27
2.3. A szabad Green-függvény meghatározása	29
2.4. Egyensúlyi mennyiségek	32
2.5. Perturbációszámítás	34
2.6. Wick-tétel	38
2.7. Feynman-diagramok	42
2.7.1. Gráfszabályok koordináta reprezentációban	43
2.7.2. Gráfszabályok Matsubara-frekvenciákkal	47
2.7.3. Egy propagátort tartalmazó frekvenciaösszegek elvégzése	50
2.7.4. Gráfszabályok homogén rendszerre	52
2.8. Dyson-egyenlet	55
3. Kölcsönható elektron-gáz	59
3.1. A zselémodell	59
3.2. A zselémodell termodinamikai potenciáljai	61
3.3. Hartree–Fock-közelítés	64
3.4. A korrelációs energia számítása	70
3.4.1. Sztatikus szennyezés elektromos potenciálja	86

4. Elemi gerjesztések	91
4.1. Egyrészecke elemi gerjesztések	91
4.1.1. Szabad gáz	101
4.1.2. Kölcsönható rendszer	102
4.1.3. Kvázirészecskék az elektrongázban	105
4.2. Kollektív gerjesztések	107
4.2.1. Sűrűségfluktuációs propagátor	107
4.2.2. A zselémodell plazmagerjesztései	117
5. Folytonos fázisátalakulások vizsgálata	123
5.1. Folyadék-gáz fázisátalakulás	123
5.1.1. Kompresszibilitási összegszabály	124
5.1.2. Delta-gáz modell	125
A. A lineáris válaszelmélet elemei	129

1. fejezet

Betöltési szám reprezentáció

Ebben a fejezetben az N azonos részecskét tartalmazó kvantummechanikai rendszerhez egy térelméleti formalizmust konstruálunk. Ennek során eljutunk a Fock-tér fogalmához, majd megadjuk a sokrészecskés rendszer operátorainak hatását a Fock-tér állapotain. Ezzel az eljárással a kvantummechanikai rendszer egy új reprezentációjához jutunk el, melyet *betöltési szám reprezentációnak* neveznek.

1.1. A Fock-tér konstrukciója

Egy több azonos részecskét tartalmazó kvantummechanikai rendszer részecskéi megkülönböztethetetlenek. Ennek megfelelően a rendszer hullámfüggvénye választható a permutációs csoport megfelelő ábrázolásának sajátfüggvényeként. Mi a továbbiakban csak olyan hullámfüggvényekkel foglalkozunk, melyek vagy teljesen szimmetrikusak vagy teljesen antiszimmetrikusak két részecske valamennyi koordinátájának (hely, spin stb.) felcserélése esetén. Azokat a rendszereket, melyek hullámfüggvénye az első módon transzformálódik (szimmetrikus) Bose-rendszereknek nevezik, részecskéiket pedig bozonoknak, míg azokat a rendszereket, melyek hullámfüggvénye a második módon transzformálódik (antiszimmetrikus) Fermi-rendszereknek nevezik részecskéiket pedig fermionoknak.

Az egyrészecske hullámfüggvények terében egy tetszőleges hullámfüggvényt ki tudunk fejteni, egy teljes ortonormált rendszer segítségével. Legyen ez az ortonormált rendszer:

$$\varphi_i(\underline{r}, s), \quad i \in \{1, 2, \dots\}. \quad (1.1)$$

A teljesség feltétele:

$$\sum_i \varphi_i(\underline{r}, s) \varphi_i^*(\underline{r}', s') = \delta^{(3)}(\underline{r} - \underline{r}') \delta_{s, s'}, \quad (1.2)$$

míg az ortogonalitást

$$\sum_s \int d^3r \varphi_i^*(\underline{r}, s) \varphi_j(\underline{r}, s) = \delta_{i,j} \quad (1.3)$$

fejezi ki. Az (1.1) teljes ortonormált rendszeren egy tetszőleges egyrészecske hullámfüggvényt ki tudunk fejeteni a

$$\psi(\underline{r}, s) = \sum_i c_i \varphi_i(\underline{r}, s) \quad (1.4)$$

alakban; a c_i kifejtési együtthatókat pedig a

$$c_i = \sum_s \int d^3r \varphi_i^*(\underline{r}, s) \psi(\underline{r}, s) \quad (1.5)$$

egyenlet határozza meg.

Hasonló kifejtés az N részecskéből álló rendszer tetszőleges állapotára is igaz. Figyelembe kell venni azonban, hogy bozonok esetén az N részecskés hullámfüggvény csak teljesen szimmetrikus, fermionok esetén pedig csak teljesen antiszimmetrikus lehet. A teljes ortonormált rendszert tehát az (1.1) egyrészecske hullámfüggvényekből építjük föl az alábbi módon: kiválasztunk N darab egyrészecske hullámfüggvényt, vagyis létrehozunk egy $(\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N)$ N hosszú sorozatot, ahol a sorozat tagjai az (1.1) hullámfüggvények indexei. Ezt az N darab hullámfüggvényt összeszorozzuk, majd teljesen szimmetrizáljuk illetve antiszimmetrizáljuk és végül normáljuk. Az így kapott rendszer teljes és ortonormált lesz az N részecskés teljesen szimmetrikus illetve teljesen antiszimmetrikus állapotterén. A teljes ortonormált rendszerünk elemei tehát a

$$\Psi_{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N}^B(x_1, x_2 \dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_i n_i!}} \sum_{(\alpha)} \prod_{i=1}^N \varphi_{\alpha_i}(x_i), \quad (1.6a)$$

$$\Psi_{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N}^F(x_1, x_2 \dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{(\alpha)} (-1)^{P_\alpha} \prod_{i=1}^N \varphi_{\alpha_i}(x_i) \quad (1.6b)$$

hullámfüggvények. Az első alak a bozonok állapotterének bázisvektorait, a második fermionokét írja le. A fenti két kifejezésben az $(\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N)$ sorozat elemeit nagyság szerint sorba rendezettnak tekintjük, egyrészt azért, hogy fermionok esetén az előjel egyértelmű legyen, másrészt, hogy ne számoljuk többször ugyanazt az N részecskés állapotot. Bevezettük az $x = (\underline{r}, s)$ jelölést. Az i -edik állapotban lévő részecskék számát (betöltési számot) n_i

jelöli, vagyis n_i leolvassa, hogy az $\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N$ sorozatban az i kvantumszám hányszor szerepel. Az összegzés az $\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N$ *szimbólumok* összes (ismétléses) permutációjára utal. További jelölésként vezettük be a P_α mennyiséget, mely egyszerűen azt mondja meg, hogy az adott permutáció az eredeti leosztásból hány lépés alatt érhető el (vagyis megadja, hogy a permutáció páros vagy páratlan). Szintén érdemes megjegyezni, hogy fermionok esetén az (1.6b) kifejezést szokás Slater-determinánsnak is nevezni, hiszen az éppen az $S_{ij} = \varphi_{\alpha_i}(x_j)$ hullámfüggvényekből készített mátrix determinánsának kifejtése (alakalmasan normálva).

► Érdemes megjegyezni, hogy az $\{\alpha_i\}$ kvantumszámok ismeretében a normált hullámfüggvényt ismétlés nélküli permutációval is elő lehet állítani, azonban a normálási faktor ilyenkor $\sqrt{\prod_i n_i!} / \sqrt{N!}$ lesz bozonokra, fermionokra pedig változatlan, hiszen ott a Pauli-elv tiltja, hogy két részecske ugyanabban a kvantumállapotban legyen. Ez utóbbi jelölés azonban nehézkesebben használható, hiszen akkor a szimmetrizálás (antiszimmetrizálás) műveletét attól kéne függővé tenni, hogy milyen állapotra hat. ◀

Az (1.6) egyenletekkel definiált bázisvektorokat tehát (az egyrészecske hullámfüggvények ismeretében) fermionok esetén egy -1 szorzó erejéig, bozonok esetén pedig egyértelműen jellemzik az $\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N$ számok. Ha csak olyan $\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N$ számsorozatot engedünk meg, amelyben a sorozat (növekvő) sorba rendezett, akkor a sorozat mind fermionok mind pedig bozonok esetén egyértelműen megadja az (1.6) bázisvektorok egyikét. Elég tehát azt megmondani, hogy az adott i -edik egyrészecske hullámfüggvényből hányat használtunk föl az (1.6) bázisvektor konstrukciójához. Tehát az (1.6) bázisvektorokat egy-egyértelmű kapcsolatba lehet hozni az $|\{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N\}\rangle^{B,F}$ (ahol az $\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N$ egy rendezett sorozat), és az $|n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle^{B,F}$ szimbólumokkal:

$$\Psi_{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N}^{B,F}(x_1, x_2 \dots x_N) \longleftrightarrow |\{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N\}\rangle^{B,F} = |n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle^{B,F}, \quad (1.7)$$

ahol n_i a már korábban is szereplő betöltési szám. Ez egy N részecskét tartalmazó rendszer esetén azt a természetes mellékfeltételt jelenti még, hogy

$$\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N. \quad (1.8)$$

Összefoglalva tehát az (1.7) jelölés arra a bázisvektorra utal az (1.6) kifejezésből, melyben n_1 darab φ_1 hullámfüggvényt n_2 darab φ_2 hullámfüggvényt, stb. használtunk föl. Az (1.6) bázisvektork (1.7) szerinti tömör jelölését hívják betöltési szám reprezentációnak.

Mivel az (1.6) rendszer teljes (az N részecskés állapottéren), ezért egy

tetszőleges N részecskés hullámfüggvény előállítható ezek segítségével

$$\begin{aligned} \Phi^{B,F}(x_1, x_2 \dots x_N) &= \sum_{(\alpha)} C_{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N} \Psi_{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N}^{B,F}(x_1, x_2 \dots x_N) \longleftrightarrow \\ &\longleftrightarrow |\Phi^{B,F}\rangle = \sum_{\substack{\{n_i\} \\ (\sum_i n_i = N)}} C_{n_1, n_2 \dots n_i \dots} |n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle^{B,F}, \quad (1.9) \end{aligned}$$

ahol a $C_{n_1 \dots n_i \dots}$ kifejtési együtthatók megegyeznek a $C_{\alpha_1 \dots \alpha_N}$ kifejtési együtthatókkal, ha az $\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N$ számsorozatban pontosan n_1 darab 1-es stb. van. Az összegzés az első esetben az egyrészecske állapotok indexeiből alkotott eltérő N elemű halmazokra vonatkozik, míg második esetben a betöltési számok olyan kiosztásaira történik, melyekben a betöltési számok összege éppen a rendszer részecskéinek száma.

Az (1.7) formulával bevezetett vektortérre átörökökíthetjük az N részecskés állapottér skalárszorzatát is, ha a bázisvektoraira a:

$$\begin{aligned} {}^{B,F} \langle \dots n'_i \dots n'_1 | n_1 \dots n_i \dots \rangle^{B,F} &:= \int dx_1 \dots dx_N \Psi_{\alpha'_1, \alpha'_2 \dots \alpha'_N}^{*B,F}(x_1 \dots x_N) \times \\ &\times \Psi_{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N}^{B,F}(x_1 \dots x_N) = \delta_{n'_1, n_1} \dots \delta_{n'_i, n_i} \dots \quad (1.10) \end{aligned}$$

definícióval élünk, ahol $\int dx_i = \sum_{s_i} \int d^3 r_i$. Az utolsó egyenlőség azért áll fenn, mivel az (1.6) bázisvektorok (melyek $\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N$ indexei nem egymás permutációi) egymásra ortogonálisak. Ezzel az eljárással az N részecskés állapottér izometrikus¹ módon leképeztük azon $|n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle$ vektorkra, melyekre $\sum_i n_i = \sum_i n'_i = N$. Ezt a definíciót érdemes kiterjeszteni olyan esetekre is, amikor a bal és jobb oldali állapotok betöltési számainak összege nem egyezik meg (különböző részecskeszámú állapotok szorzatára), vagyis

$${}^{B,F} \langle \dots n'_i \dots n'_1 | n_1 \dots n_i \dots \rangle^{B,F} := \delta_{n'_1, n_1} \dots \delta_{n'_i, n_i} \dots \quad (1.11)$$

bármely két bázisvektorra. Így egy olyan állapottérhez jutunk, melyben a különböző részecskeszámú állapottérek egymásra ortogonálisan vannak beágyazva. Ebbe az állapottérbe beleértjük még azt az állapotot is, mely nulla részecskét tartalmaz

$$|0\rangle := |0, 0 \dots 0 \dots\rangle. \quad (1.12)$$

Ezt az állapotot hívják vákuum állapotnak². Az így bevezetett állapottér pedig Fock-térnek.

¹izomorf és skalárszorzat tartó

²Ez természetesen nem azonos az állapottér nulla elemével, hiszen pl. ennek normája 1, míg a nulla elemé 0

Az (1.11) skalárszorzat definiálja a $\langle \dots n_i \dots n_1 |$ vektorkoat. Dirac nyomán a $|n_1 \dots n_i \dots \rangle$ vektorokat a továbbiakban ket vektoroknak fogjuk nevezni, míg a $\langle \dots n_i \dots n_1 |$ vektorokat bra vektoroknak. Utóbbiak felfoghatók, mint a Fock-tér lineáris funkcionáljai terének generátor-rendszere, vagy mint a ket vektorok adjungáltjai.

1.2. Keltő és eltüntető operátorok

A Fock-tér használatának nagy előnye, hogy meg tudunk adni olyan operátorokat, melyek különböző részecskeszámú Hilbert-tereket kötnek össze. Ezen operátorokat érdemes külön-külön vizsgálni fermionok és bozonok esetén.

1.2.1. Fermionok keltő és eltüntető operátorai

Fermionok esetén a Fock-tér bázisvektorainak hullámfüggvényét az (1.6b) egyenlet definiálja. Ezen a Fock-téren vezessük be az alábbi keltő és eltüntető operátorokat, melyek hatása a ket vektorokra:

$$\hat{a}_k^\dagger |n_1 \dots n_{k-1}, n_k, n_{k+1} \dots \rangle = \sqrt{1 - n_k} (-1)^{\Sigma_k} |n_1 \dots n_{k-1}, 1 + n_k, n_{k+1} \dots \rangle, \quad (1.13a)$$

$$\hat{a}_k |n_1 \dots n_{k-1}, n_k, n_{k+1} \dots \rangle = \sqrt{n_k} (-1)^{\Sigma_k} |n_1 \dots n_{k-1}, 1 - n_k, n_{k+1} \dots \rangle, \quad (1.13b)$$

ahol

$$\Sigma_k = \sum_{j=1}^{k-1} n_j. \quad (1.14)$$

Az (1.13a) egyenlettel bevezetett \hat{a}_k^\dagger operátor tehát egy eggyel nagyobb részecskeszámú állapotba visz (amennyiben a k-adik állapot korábban betöltetlen volt) illetve a Fock-tér nulla elemébe (ha az állapot betöltött volt). Ezt az operátort ezért keltő (emissziós) operátornak nevezzük. Az (1.13b) egyenlet alapján bevezetett \hat{a}_k operátor pedig eggyel kisebb részecskeszámú állapotba visz (amennyiben a k-adik állapot korábban betöltött volt) illetve a Fock-tér nulla elemébe (amennyiben a k-adik állapot kezdetben betöltetlen volt). Ezt az operátort pedig ezért eltüntető (abszorpciós) operátornak nevezzük. Ezen definíciók alapján könnyű belátni az alábbi két fontos állítást:

Állítás: Az így definiált keltő és eltüntető operátorok egymás adjungáltjai.

Bizonyítás: Az adjungált operátor definíciója alapján:

$$\begin{aligned} \langle \dots n'_k \dots n'_1 | (\hat{a}_k)^\dagger | n_1 \dots n_k \dots \rangle &= \left(\langle \dots n_k \dots n_1 | \hat{a}_k | n'_1 \dots n'_k \dots \rangle \right)^* = \\ &= \sqrt{n'_k} (-1)^{\Sigma'_k} \delta_{n_1, n'_1} \dots \delta_{n_k, n'_k-1} \dots = \sqrt{1-n_k} (-1)^{\Sigma_k} \delta_{n'_1, n_1} \dots \delta_{n'_k, 1-n_k} \dots = \\ &= \langle \dots n'_k \dots n'_1 | \hat{a}_k^\dagger | n_1 \dots n_k \dots \rangle. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Kihasználtuk a keltő és eltüntető operátorok definícióját, továbbá hogy a fenti várható érték mindig valós és hogy az n_k betöltési számok csak 0 vagy 1 értéket vehetnek föl fermionok esetén. ■

Az (1.15) egyenlettel összhangban értelmezni tudjuk a keltő és eltüntető operátorok hatását a bra vektorokra is. Ezek a következők:

$$\langle \dots n_{k+1}, n_k, n_{k-1} \dots n_1 | \hat{a}_k = \sqrt{1-n_k} (-1)^{\Sigma_k} \langle \dots n_{k+1}, 1+n_k, n_{k-1} \dots n_1 |, \quad (1.16a)$$

$$\langle \dots n_{k+1}, n_k, n_{k-1} \dots n_1 | \hat{a}_k^\dagger = \sqrt{n_k} (-1)^{\Sigma_k} \langle \dots n_{k+1}, 1-n_k, n_{k-1} \dots n_1 |. \quad (1.16b)$$

A formalizmus számára igen fontos a keltő és eltüntető operátorok felcserélési relációinak ismerete, mert a soktestrendszer statisztikájára ezek gyakorolnak befolyást.

Állítás: Fermionok esetén a keltő és eltüntető operátorok az alábbi anti-kommutációs relációkat elégítik ki:

$$\{\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger\} = \delta_{k,l}, \quad (1.17a)$$

$$\{\hat{a}_k, \hat{a}_l\} = \{\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger\} = 0, \quad (1.17b)$$

ahol a kapesos zárójel az antikommutátort jelöli: $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$.

Bizonyítás: Az (1.17a) összefüggés belátásához legyen először $k < l$. Ekkor az $\hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger | n_1 \dots n_k \dots n_l \dots \rangle + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k | n_1 \dots n_k \dots n_l \dots \rangle = 0$, ha $n_k = 0$ vagy $n_l = 1$. Ha $n_k = 1$ és $n_l = 0$ akkor:

$$\begin{aligned} \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger | n_1 \dots n_k \dots n_l \dots \rangle + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k | n_1 \dots n_k \dots n_l \dots \rangle &= \\ &= (-1)^{\Sigma_k} (-1)^{\Sigma_l} | n_1 \dots 0 \dots \overset{k}{1} \dots \overset{l}{1} \dots \rangle + (-1)^{\Sigma_k} (-1)^{\Sigma_l-1} | n_1 \dots 0 \dots \overset{k}{1} \dots \overset{l}{1} \dots \rangle = 0, \end{aligned} \quad (1.18)$$

az eltérés Σ_l -ben van³. Természetesen a $k > l$ esetben is ugyanúgy 0-t kapunk mindenre teljesen hasonló módon. Az egyetlen nem vizsgált tag még a $k = l$

³Itt és a továbbiakban a betöltési szám konkrét értékének feltüntetésekor a szám fölötti jellel utalunk a sorban elfoglalt helyre.

esete. Ekkor:

$$\begin{aligned} \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger |n_1 \dots n_k \dots n_l \dots\rangle + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k |n_1 \dots n_k \dots n_l \dots\rangle &= \\ &= (1 - n_k) |n_1 \dots n_k \dots n_l \dots\rangle + n_k |n_1 \dots n_k \dots n_l \dots\rangle = \\ &= |n_1 \dots n_k \dots n_l \dots\rangle. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Ezzel beláttuk az (1.17a) relációt. A többi belátása teljesen hasonló módon történik. ■

Az előző felcserélési relációk bizonyítása során fellépett egy önadjungált operátor, mely leolvasta, hogy a k -adik állapotnak mennyi a betöltési száma. Ezt az operátort ezért betöltési szám operátornak nevezik:

$$\hat{n}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (1.20)$$

A teljes részecskeszám operátora pedig előáll

$$\hat{N} = \sum_k \hat{n}_k \quad (1.21)$$

alakban.

Ezen operátorok segítségével a Fock-tér bármely állapotát elő lehet állítani a (részecskét nem tartalmazó) vákuum állapotból, hiszen a bázisvektorok (Fock-bázis) felírhatók:

$$\Psi_{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N}^F(x_1 \dots x_N) \longleftrightarrow |n_1 \dots n_i \dots\rangle = |\{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N\}\rangle = \prod_{i=1}^N \hat{a}_{\alpha_i}^\dagger |0\rangle. \quad (1.22)$$

A vákuum állapotra természetesen fenn állnak az alábbi összefüggések:

$$\langle 0|0\rangle = 1, \quad (1.23a)$$

$$\hat{a}_k |0\rangle = 0, \quad (1.23b)$$

$$\langle 0|\hat{a}_k^\dagger = 0. \quad (1.23c)$$

1.2.2. Bozonok keltő és eltüntető operátorai

Bozonok Fock-terének bázisvektorait az (1.6a) egyenlet adja meg, így bozonok esetén vezessük be az alábbi keltő és eltüntető operátorokat:

$$\hat{a}_k^\dagger |n_1 \dots n_{k-1}, n_k, n_{k+1} \dots\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_1 \dots n_{k-1}, n_k + 1, n_{k+1} \dots\rangle, \quad (1.24a)$$

$$\hat{a}_k |n_1 \dots n_{k-1}, n_k, n_{k+1} \dots\rangle = \sqrt{n_k} |n_1 \dots n_{k-1}, n_k - 1, n_{k+1} \dots\rangle. \quad (1.24b)$$

Az (1.24a) egyenlettel definiált operátort nevezik keltő operátornak, mert (a fermionoknál tárgyalthoz hasonlóan) ez visz át eggyel nagyobb részecskeszámú állapotba, míg az (1.24b) egyenlettel definiált operátort eltüntető operátornak nevezik.

Állítás: Az (1.24) egyenletekkel definiált keltő és eltüntető operátorok egymás adjungáltjai.

A bizonyítás teljesen analóg a fermionoknál tárgyalttal. Szintén kiterjeszthetjük a keltő és eltüntető operátorok hatását a bra vektorokra is:

$$\langle \dots n_{k+1}, n_k, n_{k-1} \dots n_1 | \hat{a}_k = \sqrt{n_k + 1} \langle \dots n_{k+1}, n_k + 1, n_{k-1} \dots n_1 |, \quad (1.25a)$$

$$\langle \dots n_{k+1}, n_k, n_{k-1} \dots n_1 | \hat{a}_k^\dagger = \sqrt{n_k} \langle \dots n_{k+1}, n_k - 1, n_{k-1} \dots n_1 |. \quad (1.25b)$$

Állítás: Bozonok esetén a keltő és eltüntető operátorok az alábbi kommutátor relációkat elégítik ki:

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger] = \delta_{k,l}, \quad (1.26a)$$

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_l] = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger] = 0, \quad (1.26b)$$

ahol a szögletes zárójel a szokásos kommutátort jelöli: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Ezen állítás bizonyítása is hasonló a fermionoknál tárgyalthoz. Bozonok esetén egy önmagában is érdekes állítást lehet kimondani (melyet a későbbiekben használni is fogunk):

Állítás:

$$[\hat{a}_k, (\hat{a}_k^\dagger)^n] = n(\hat{a}_k^\dagger)^{n-1}. \quad (1.27)$$

Bizonyítás: Az állítást teljes indukcióval látjuk be.

- $n = 1$ esetén $[\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger] = 1$ nyilvánvaló az (1.26a) összefüggés alapján.
- $n = 2$ esetén $[\hat{a}_k, (\hat{a}_k^\dagger)^2] = \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k^\dagger (\hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) = 2\hat{a}_k^\dagger$

Tfh. az állítás $n - 1$ -re igaz. Ekkor:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k, (\hat{a}_k^\dagger)^n] &= \hat{a}_k (\hat{a}_k^\dagger)^n - (\hat{a}_k^\dagger)^n \hat{a}_k = \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} - (\hat{a}_k^\dagger)^n \hat{a}_k = \\ &= (1 + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} - (\hat{a}_k^\dagger)^n \hat{a}_k = (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} + \hat{a}_k^\dagger [\hat{a}_k, (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1}] = \\ &= (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} + (n-1) (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} = n (\hat{a}_k^\dagger)^{n-1} \end{aligned} \quad (1.28)$$

■

A betöltési szám operátor bozonoknál is

$$\hat{n}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \quad (1.29)$$

melyből a teljes részecskeszám operátora előáll

$$\hat{N} = \sum_k \hat{n}_k \quad (1.30)$$

alakban.

Állítás: Bozonokra a Fock-bázis:

$$\Psi_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N}^B(x_1 \dots x_N) \longleftrightarrow |n_1 \dots n_i \dots\rangle = |\{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod_i n_i!}} \prod_{i=1}^N \hat{a}_{\alpha_i}^\dagger |\mathbf{0}\rangle \quad (1.31)$$

alakú.

Bizonyítás: A normálási faktor belátása az (1.27) egyenlet felhasználásával történik. Ehhez alakítsuk át az (1.31) bázisvektorokat a keltő operátorok kommutálásának felhasználásával az

$$|n_1 \dots n_i \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod_i n_i!}} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i} \dots |\mathbf{0}\rangle \quad (1.32)$$

alakra. Ekkor az (1.31) bázisvektorok normanégyzete:

$$\begin{aligned} \langle \dots n_i \dots n_1 | n_1 \dots n_i \dots \rangle &= \\ &= \frac{1}{\prod_i n_i!} \langle \mathbf{0} | \dots (\hat{a}_i)^{n_i} \dots (\hat{a}_1)^{n_1} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i} \dots | \mathbf{0} \rangle = \\ &= \frac{n_1!}{\prod_i n_i!} \langle \mathbf{0} | \dots (\hat{a}_i)^{n_i} \dots (\hat{a}_2)^{n_2} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i} \dots | \mathbf{0} \rangle, \end{aligned} \quad (1.33)$$

hiszen az (1.27) egyenlet felhasználásával $(\hat{a}_1)^{n_1} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} = n_1 (\hat{a}_1)^{n_1-1} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1-1} + (\hat{a}_1)^{n_1-1} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \hat{a}_1$ adódik. A második tag vákuum várható értéke 0, mivel \hat{a}_1 jobbra egy olyan állapotra hat, amiben nincs ilyen részecske. A többi párra is ezt végigcsinálva éppen $\langle \dots n_i \dots n_1 | n_1 \dots n_i \dots \rangle = 1$ -et kapunk. ■

A vákuum állapotra itt is fenn állnak a fermionoknál már szereplő összefüggések:

$$\langle \mathbf{0} | \mathbf{0} \rangle = 1, \quad (1.34a)$$

$$\hat{a}_k |\mathbf{0}\rangle = 0, \quad (1.34b)$$

$$\langle \mathbf{0} | \hat{a}_k^\dagger = 0. \quad (1.34c)$$

1.3. Téroperátorok

Az előző alfejezetekben megkonstruáltuk a Fock-teret egy előre választott egyrészecske teljes ortonormált rendszer segítségével és ezen a téren olyan

lineáris operátorokat vezettünk be, melyek a Fock-tér különböző részecske-számú szektorait kötötték össze az általunk választott egyrészecske állapotokat keltve illetve eltüntetve. Ezen operátorok segítségével ki tudtuk fejezni a Fock-tér tetszőleges állapotának bármely betöltési számát és teljes részecske-számát is. Érdekes ezen operátorok lineáris kombinációját venni és bevezetni a

$$\hat{\Psi}^\dagger(x) := \sum_{j=1}^{\infty} \varphi_j^*(x) \hat{a}_j^\dagger, \quad (1.35a)$$

$$\hat{\Psi}(x) := \sum_{j=1}^{\infty} \varphi_j(x) \hat{a}_j \quad (1.35b)$$

téropерátorokat. Ezen operátorok szintén egymás adjungáltjai (a hullámfüggvény és a léptető operátorok sorrendje nyilván mindegy, hiszen utóbbiak a Fock-tér állapotait léptetik csak, hullámfüggvényre nem hatnak). Azt is könnyű megmutatni, hogy a téropерátorok az „ \underline{x} ” helyen „ s ” spinnel keltenek illetve tüntetnek el egy részecskét. Ugyanis

$$\hat{\Psi}^\dagger(x) |\mathbf{0}\rangle = \sum_j \varphi_j^*(x) \hat{a}_j^\dagger |\mathbf{0}\rangle \longleftrightarrow \sum_j \varphi_j^*(x) \varphi_j(x_1) = \delta(x - x_1), \quad (1.36)$$

mivel $\hat{a}_j^\dagger |\mathbf{0}\rangle \longleftrightarrow \varphi_j(x_1)$ az (1.7) továbbá az (1.22) és az (1.31) egyenletek alapján. A $\delta(x - x_1)$ szimbolikus jelölés alatt a $\delta^{(3)}(\underline{x} - \underline{x}_1) \delta_{s,s_1}$ jelölést értjük.

A keltő és eltüntető operátorok esetén láttuk, hogy a Fock-tér Bose illetve Fermi rendszerekre fenn álló szimmetria tulajdonsága ezen operátorok felcserélési relációjában nyilvánul meg. Közvetlen behelyettesítéssel ellenőrizhető, hogy

$$\begin{aligned} \{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(y)\} &= \delta(x - y), \\ \{\hat{\Psi}^\dagger(x), \hat{\Psi}^\dagger(y)\} &= \{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(y)\} = 0. \end{aligned} \quad (1.37a)$$

antikommutátoros felcserélési reláció áll fenn fermionokra és

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(y)] &= \delta(x - y) \\ [\hat{\Psi}^\dagger(x), \hat{\Psi}^\dagger(y)] &= [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(y)] = 0. \end{aligned} \quad (1.37b)$$

kommutátoros reláció igaz bozonokra.

A teljes részecskeszám operátor is kifejezhető a téropерátorok segítségével. Felhasználva az (1.3) ortogonalitási összefüggést

$$\int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) = \int dx \sum_{i,j=1}^{\infty} \varphi_i^*(x) \varphi_j(x) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \hat{N}. \quad (1.38)$$

Könnyű belátni azt is, hogy a téroperátorok a teljes részecskeszámot eggyel változtatják, hiszen az (1.37) felcserélési relációk segítségével megmutatható, hogy $[\hat{\Psi}(x), \hat{N}] = \hat{\Psi}(x)$ és $[\hat{\Psi}^\dagger(x), \hat{N}] = -\hat{\Psi}^\dagger(x)$ mind bozonokra mind fermionokra és így, ha

$$\hat{N} |\Phi_N\rangle = N |\Phi_N\rangle, \quad (1.39)$$

egy N részecskés állapot, úgy

$$\hat{N} \hat{\Psi}(x) |\Phi_N\rangle = (N - 1) \hat{\Psi}(x) |\Phi_N\rangle, \quad (1.40a)$$

$$\hat{N} \hat{\Psi}^\dagger(x) |\Phi_N\rangle = (N + 1) \hat{\Psi}^\dagger(x) |\Phi_N\rangle. \quad (1.40b)$$

A téroperátorok segítségével a Fock-téren adott N részecskés állapot hullámfüggvénye felírható.

Állítás:

$$\Phi(x_1 \dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \prod_{i=1}^N \hat{\Psi}(x_i) | \Phi_N \rangle \quad (1.41)$$

mind bozonokra mind pedig fermionokra (természetesen, ha az N részecskés állapotra nem N számú téroperátort hattatunk, akkor ezen állapotot (mivel részecskeszáma nem lesz 0) a vákuummal skalárszorozva nullát kapunk). Érzékeltetésként nézzünk erre három példát:

1. A Fock-tér i kvantumszámú egyrészecske állapotának hullámfüggvénye:

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\Psi}(x) | 0 \dots 0, \overset{i}{1}, 0 \dots \rangle &= \langle 0 | \hat{\Psi}(x) \hat{a}_i^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \sum_j \varphi_j(x) \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger | 0 \rangle = \\ &= \sum_j \varphi_j(x) \langle 0 | \delta_{ij} + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | 0 \rangle = \varphi_i(x). \end{aligned} \quad (1.42)$$

2. A Fock-tér i és j kvantumszámú állapotának hullámfüggvénye ($i \neq j$):

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 0 | \hat{\Psi}(x_1) \hat{\Psi}(x_2) | 0 \dots 0, \overset{i}{1}, 0 \dots 0, \overset{j}{1}, 0 \dots \rangle &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k,l} \langle 0 | \hat{a}_k \hat{a}_l \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger | 0 \rangle \varphi_k(x_1) \varphi_l(x_2) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_i(x_1) \varphi_j(x_2) \pm \varphi_i(x_2) \varphi_j(x_1)]. \end{aligned} \quad (1.43)$$

3. A Fock-tér olyan kétrészecske állapotának hullámfüggvénye, melyben mindkét részecske az i egyrészecske kvantumszámú állapotban van:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \mathbf{0} | \hat{\Psi}(x_1) \hat{\Psi}(x_2) \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_i^\dagger)^2 | \mathbf{0} \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{k,l} \langle \mathbf{0} | \hat{a}_k \hat{a}_l (\hat{a}_i^\dagger)^2 | \mathbf{0} \rangle \times \\ &\times \varphi_k(x_1) \varphi_l(x_2) = \begin{cases} \varphi_i(x_1) \varphi_i(x_2) & \text{bozonokra} \\ 0 & \text{fermionokra} \end{cases} \quad (1.44) \end{aligned}$$

Bizonyítás: Első lépésként nézzük meg az (1.41) függvény normáltságát!

$$\begin{aligned} \int dx_1 \dots dx_N \Phi^*(x_1 \dots x_N) \Phi(x_1 \dots x_N) &= \\ &= \frac{1}{N!} \int dx_1 \dots dx_N \langle \Phi_N | \prod_{i=N}^1 \hat{\Psi}^\dagger(x_i) | \mathbf{0} \rangle \langle \mathbf{0} | \prod_{j=1}^N \hat{\Psi}(x_j) | \Phi_N \rangle. \quad (1.45) \end{aligned}$$

A vákuum állapotra vetítő $|\mathbf{0}\rangle \langle \mathbf{0}|$ projektor elhagyható, hiszen tőle jobbra a vákuum állapot számszorosa van, mivel az N téroperátor nulla részecske-számú állapotba viszi az N részecskes állapotot. Az (1.45) normát tovább írva és felhasználva az (1.40a) összefüggést

$$\begin{aligned} \frac{1}{N!} \int dx_1 \dots dx_N \langle \Phi_N | \prod_{i=N}^1 \hat{\Psi}^\dagger(x_i) \prod_{j=1}^N \hat{\Psi}(x_j) | \Phi_N \rangle &= \\ &= \frac{1}{N!} \langle \Phi_N | \int dx_2 \dots dx_N \hat{\Psi}^\dagger(x_N) \dots \hat{\Psi}^\dagger(x_2) \hat{N} \hat{\Psi}(x_2) \dots \hat{\Psi}(x_N) | \Phi_N \rangle = \\ &= \frac{1}{N!} \langle \Phi_N | \int dx_3 \dots dx_N \hat{\Psi}^\dagger(x_N) \dots \hat{\Psi}^\dagger(x_3) \hat{N} \hat{\Psi}(x_3) \dots \hat{\Psi}(x_N) | \Phi_N \rangle = \\ &= \frac{1 \cdot 2}{N!} \langle \Phi_N | \int dx_4 \dots dx_N \hat{\Psi}^\dagger(x_N) \dots \hat{\Psi}^\dagger(x_4) \hat{N} \hat{\Psi}(x_4) \dots \hat{\Psi}(x_N) | \Phi_N \rangle = \\ &= \dots = \frac{N!}{N!} \langle \Phi_N | \Phi_N \rangle = 1. \quad (1.46) \end{aligned}$$

Másrészt nézzük meg, hogy milyen hatással van a téroperátorok szorzata az (1.22) és az (1.31) Fock-bázisra. Felbontva a téroperátorokat az (1.35) definíciónak megfelelően és az összegzési indexeket $\beta_1, \beta_2 \dots \beta_N$ -el jelölve:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \mathbf{0} | \prod_{j=1}^N \hat{\Psi}(x_j) | \{\alpha_1 \dots \alpha_N\} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_i n_i!}} \langle \mathbf{0} | \prod_{j=1}^N \hat{\Psi}(x_j) \prod_{k=1}^N \hat{a}_{\alpha_k}^\dagger | \mathbf{0} \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_i n_i!}} \sum_{\beta_1 \dots \beta_N=1}^{\infty} \varphi_{\beta_1}(x_1) \dots \varphi_{\beta_N}(x_N) \langle \mathbf{0} | \hat{a}_{\beta_1} \dots \hat{a}_{\beta_N} \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \dots \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger | \mathbf{0} \rangle, \quad (1.47) \end{aligned}$$

mely bozonokra és fermionokra is egyaránt igaz (fermionok esetén $\prod_i n_i! = 1$). Az összeg belsejében szereplő átlag pontosan akkor nem 0, ha $(\beta_1 \dots \beta_N)$ éppen $(\alpha_1 \dots \alpha_N)$ valamelyik permutációja. Így a $\beta_1 \dots \beta_N$ szerinti összegzés az $(\alpha_1 \dots \alpha_N)$ *ismétlés nélküli permutációira* történik⁴. Az (1.22) és az (1.31) Fock-bázis normáltságából következik, hogy

$$\langle 0 | \hat{a}_{\alpha_N} \dots \hat{a}_{\alpha_1} \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \dots \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger | 0 \rangle = \left(\prod_i n_i! \right). \quad (1.48)$$

A $\beta_1, \beta_2 \dots \beta_N$ számsorozat egyéb permutációjára, mely nem 0 eredményre vezet az eredmény bozonok esetén változatlan, fermionok esetén a permutáció párosságától függően (-1) előjelben különbözik. Így

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \prod_{j=1}^N \hat{\Psi}(x_j) | \{\alpha_1 \dots \alpha_N\} \rangle = \frac{\sqrt{\prod_i n_i!}}{N!} \sum_{[\alpha]} (\pm 1)^{P_\alpha} \varphi_{\alpha_1}(x_1) \dots \varphi_{\alpha_N}(x_N) \quad (1.49)$$

Az összegzés tehát az $\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N$ sorozat ismétlés nélküli permutációira történik (mely fermionok esetén, ahol minden kvantumszám legfeljebb egyszer szerepelhet, természetesen megegyezik az ismétléses permutációkkal). Az (1.49) alak tehát tényleg az (1.6) bázisokkal ekvivalens, hiszen ott az összegzés az ismétléses permutációkra történt, mely bozonok esetén a két normálás közti különbséget adja⁵. Az (1.41) állítás ebből már következik (az (1.6) bázis teljességének felhasználásával). ■

1.4. A Hilbert-tér operátorainak reprezentálása

Az előzőekben megmutattuk, hogy az N részecskét tartalmazó kvantummechanikai rendszer állapottere értelmezhető egy általánosabb állapottér altereként. Ebben az alfejezetben az a célunk, hogy az N részecskés Hilbert-tér operátorainak a hatását megvizsgáljuk a Fock-tér (1.22) és (1.31) bázisvektorain és így megadjuk alakjukat a betöltési szám reprezentációban. Az új operátorok már a teljes Fock-téren lesznek értelmezve, viszont nyilvánvalóan elvárjuk azt tőlük, hogy ne vigyenek át a különböző részecskeszámú alterek (szektorok) között, vagyis blokkdiagonálisak legyenek. Ez a kritérium (mint nemsokára példákon át látni fogjuk) pusztán azt jelenti, hogy a Hilbert-terünk operátorainak Fock-térbeli reprezentációjában pontosan ugyanannyi eltüntető mint keltő operátor legyen.

⁴Hiszen az α_i számok adottak

⁵Lásd. az (1.6) képletek alatti apró betűs megjegyzést is

1.4.1. Egyrészecske operátorok

Egyrészecske operátornak olyan operátort nevezünk, mely csak egy (például az i -edik) részecske változójára hat, jelölése: $\hat{O}^{(1)}(i)$. Példa erre az i -edik részecske impulzusa $\underline{P}_i = -i\hbar \nabla_i$. Az általunk vizsgált mennyiségek természetesen nem tüntetnek ki egy részecskét sem, ezért csak ú.n. teljes egyrészecske operátorokkal foglalkozunk, mely az i részecskeindexre ki van összegezve

$$\hat{O}_T^{(1)} = \sum_{i=1}^N \hat{O}^{(1)}(i). \quad (1.50)$$

Fontos megjegyezni, hogy míg az i -edik részecske változójára ható operátor kivisz a szimmetrizált (antiszimmetrizált) Hilbert-térből, addig a teljes egyrészecske operátorok megőrzik a hullámfüggvény permutációs szimmetriáját. Ilyen operátorra példa a teljes impulzus operátora: $\hat{\underline{P}}_T = -i\hbar \sum_i \nabla_i$, vagy a kinetikus energia operátora: $\hat{K}_T = -\sum_i \hbar^2 \Delta_i / 2M$, vagy spinfüggő operátorra példa a spin-pálya kölcsönhatás operátora: $\hat{E}_T^{sp} = \sum_i \xi(r_i) (\hat{\underline{L}}_i \times \hat{\underline{p}}_i) \hat{S}_i$.

Állítás: A teljes egyrészecske operátorok alakja betöltési szám reprezentációban:

$$\hat{O}_T^{(1)} = \sum_{j,k} \langle \varphi_k | \hat{O}^{(1)} | \varphi_j \rangle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j, \quad (1.51a)$$

ahol

$$\langle \varphi_k | \hat{O}^{(1)} | \varphi_j \rangle = \int dx_a \varphi_k^*(x_a) \hat{O}^{(1)}(a) \varphi_j(x_a) \quad (1.51b)$$

a szokásos átlagot jelöli.

Bizonyítás: A bizonyítás első lépése megnézni, hogy az egyrészecske operátorok hogy hatnak az egyrészecske hullámfüggvényekre. Felhasználva az (1.2) teljességi összefüggést

$$\hat{O}^{(1)}(j) \varphi_{\alpha_j}(x_j) = \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_k(x_j) \langle \varphi_k | \hat{O}^{(1)} | \varphi_{\alpha_j} \rangle \quad (1.52)$$

adódik. Ekkor hatása a szorzathullámfüggvényeken:

$$\begin{aligned} \hat{O}^{(1)}(j) \prod_{i=1}^N \varphi_{\alpha_i}(x_i) &= \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_{\alpha_1}(x_1) \dots \varphi_{\alpha_{j-1}}(x_{j-1}) \varphi_k(x_j) \varphi_{\alpha_{j+1}}(x_{j+1}) \dots \times \\ &\quad \times \varphi_{\alpha_N}(x_N) \langle \varphi_k | \hat{O}^{(1)} | \varphi_{\alpha_j} \rangle. \end{aligned} \quad (1.53)$$

A teljes egyrészecske operátor hatása pedig:

$$\begin{aligned} \hat{O}_T^{(1)} \prod_{i=1}^N \varphi_{\alpha_i}(x_i) &= \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_{\alpha_1}(x_1) \dots \varphi_{\alpha_{j-1}}(x_{j-1}) \varphi_k(x_j) \varphi_{\alpha_{j+1}}(x_{j+1}) \dots \times \\ &\times \varphi_{\alpha_N}(x_N) \langle \varphi_k | \hat{O}^{(1)} | \varphi_{\alpha_j} \rangle. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Tekintsük az alábbi hullámfüggvényt:

$$\Psi'_{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N}(x_1, x_2 \dots x_N) = \begin{cases} \Psi_{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N}^F(x_1, x_2 \dots x_N) & \text{fermionokra} \\ \sqrt{\prod_i n_i!} \Psi_{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N}^B(x_1, x_2 \dots x_N) & \text{bozonokra} \end{cases} \quad (1.55)$$

mely az egyrészecske hullámfüggvények szimmetrizált illetve antiszimmetrizált szorzata (osztva $\sqrt{N!}$ -al), és bozonok esetén nem normált. Ha a teljes egyrészecske operátort ezen a bázison hattanadjuk, akkor

$$\begin{aligned} \hat{O}_T^{(1)} \Psi'_{\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N}(x_1, x_2 \dots x_N) &= \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{\infty} \Psi'_{\alpha_1 \dots \alpha_{j-1}, k, \alpha_{j+1} \dots \alpha_N}(x_1, x_2 \dots x_N) \times \\ &\times \langle \varphi_k | \hat{O}^{(1)} | \varphi_{\alpha_j} \rangle. \end{aligned} \quad (1.56)$$

Az (1.51a) állítás igazolásához nézzük meg az $\hat{O}_T^{(1)}$ teljes egyrészecske operátor hatását a $\prod_{i=1}^N \hat{a}_{\alpha_i}^\dagger |0\rangle$ Fock-bázison, mely az (1.55) alatti Ψ' -nek felel meg! Első lépésként végezzünk el egy azonos átalakítást:

$$\begin{aligned} \hat{O}_T^{(1)} \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \dots \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle &= [\hat{O}_T^{(1)}, \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger] \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \dots \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle + \\ &+ \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger [\hat{O}_T^{(1)}, \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger] \hat{a}_{\alpha_3}^\dagger \dots \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle + \dots + \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \dots \hat{a}_{\alpha_{N-1}}^\dagger [\hat{O}_T^{(1)}, \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger] |0\rangle, \end{aligned} \quad (1.57)$$

mely abból következik, hogy a kommutátorok második tagja mindig kiejti az előző kommutátort, kivéve az utolsó tagnál, mely azonban zérus, hiszen az egyrészecske operátor a vákuum állapotot a Fock-tér nulla elemébe képezi. A kommutárok kifejtése az alábbi módon végezhető el az (1.17) és az (1.26) felcserélési relációk felhasználásával:

$$\begin{aligned} [\hat{O}_T^{(1)}, \hat{a}_l^\dagger] &= \sum_{j,k=1}^{\infty} \langle \varphi_k | \hat{O}^{(1)} | \varphi_j \rangle (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_l^\dagger - \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j) = \\ &= \sum_{j,k=1}^{\infty} \langle \varphi_k | \hat{O}^{(1)} | \varphi_j \rangle \hat{a}_k^\dagger (\hat{a}_j \hat{a}_l^\dagger \mp \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_j) = \sum_{k=1}^{\infty} \langle \varphi_k | \hat{O}^{(1)} | \varphi_l \rangle \hat{a}_k^\dagger, \end{aligned} \quad (1.58)$$

(a felső előjel bozonokra az alsó fermionokra érvényes). Így az (1.51a) teljes egyrészecske operátor hatása a Fock-bázison:

$$\hat{O}_T^{(1)} \prod_{j=1}^N \hat{a}_{\alpha_j}^\dagger |\mathbf{0}\rangle = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{\infty} \langle \varphi_k | \hat{O}^{(1)} | \varphi_{\alpha_j} \rangle \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \dots \hat{a}_{\alpha_{j-1}}^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\alpha_{j+1}}^\dagger \dots \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger |\mathbf{0}\rangle, \quad (1.59)$$

mely éppen megegyezik (1.56)-el. Így az (1.7) és az (1.11) izomertiának megfelelően egy operátor izomofrizmust hoztunk létre az (1.50) N részecskés hullámfüggvényeken ható teljes egyrészecske operátorok és az (1.51a) Fock-tér teljes egyrészecske operátorai között. ■

A teljes egyrészecske operátort meg lehet adni téroperátorok segítségével is. Kiírva az (1.51b) skalárszorzatot az (1.51a) egyenletben és felhasználva a téroperátorok (1.35) definícióját adódik az igen hasznos és szemléletes

$$\hat{O}_T^{(1)} = \int dx_a \hat{\Psi}^\dagger(x_a) \hat{O}^{(1)}(a) \hat{\Psi}(x_a) \quad (1.60)$$

összefüggés.

1.4.2. Kétrészecske operátorok

Kétrészecske operátornak olyan operátort nevezünk, mely pontosan két (például az i -edik és a j -edik) részecske változójára hat, jelölése: $\hat{O}^{(2)}(i, j)$. Példa erre a párkölcsönhatás operátora $V(\underline{r}_i - \underline{r}_j)$. A teljes kétrészecske operátor, mely az N részecskés szimmetrizált (antiszimmetrizált) állapotok teréből nem visz ki analóg módon értelmezhető, mint ahogy azt az egyrészecskés operátorokra tettük. Vagyis a teljes kétrészecske operátor alakja:

$$\hat{O}_T^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N \hat{O}^{(2)}(i, j). \quad (1.61)$$

Állítás: A teljes kétrészecske operátor alakja betöltési szám reprezentációban:

$$\hat{O}_T^{(2)} = \frac{1}{2} \int dx_a dx_b \hat{\Psi}^\dagger(x_a) \hat{\Psi}^\dagger(x_b) \hat{O}^{(2)}(a, b) \hat{\Psi}(x_b) \hat{\Psi}(x_a), \quad (1.62a)$$

$$\hat{O}_T^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle \varphi_i \varphi_j | \hat{O}^{(2)} | \varphi_k \varphi_l \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k, \quad (1.62b)$$

ahol

$$\langle \varphi_i \varphi_j | \hat{O}^{(2)} | \varphi_k \varphi_l \rangle = \int dx_a dx_b \varphi_i^*(x_a) \varphi_j^*(x_b) \hat{O}^{(2)}(a, b) \varphi_k(x_a) \varphi_l(x_b). \quad (1.62c)$$

Bizonyítás: Először érdemes belátni, hogy a két alak ekvivalens, ez azonban a téroperátorok definíciójából következik. Magának az állításnak a bizonyítása itt is történhetne hasonló módon (csak kicsit hosszadalmasabban), mint ahogy azt az egyrészeske operátoroknál tettük, de a tömörség kedvéért itt érdemes egy másik utat követni. Ez pedig az, hogy az (1.62a) Fock-téren értelmezett operátor hatását összehasonlítjuk az (1.61) N részecskés hullámfüggvényeken értelmezett operátor hatásával az (1.7) izomorfizmusnak megfelelően. Tehát vizsgáljuk meg $\hat{O}_T^{(2)} |\Phi_N\rangle$ és $|\Phi_N\rangle$ hullámfüggvényeinek kapcsolatát. Az $\hat{O}_T^{(2)} |\Phi_N\rangle$ állapotnak megfelelő hullámfüggvény az (1.41) egyenlet alapján:

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \mathbf{0} | \prod_{i=1}^N \hat{\Psi}(x_i) \hat{O}_T^{(2)} |\Phi_N\rangle. \quad (1.63)$$

Hogy a két hullámfüggvényt összehasonlítsuk át kell emelni a téroperátorokat a teljes kétrészeske operátoron az (1.37) felcserélési relációk felhasználásával. Az első téroperátor átemelésének az eredményeképpen

$$\begin{aligned} \prod_{i=1}^N \hat{\Psi}(x_i) \hat{O}_T^{(2)} &= \frac{1}{2} \prod_{i=1}^{N-1} \hat{\Psi}(x_i) \left[\int dx_b \hat{\Psi}^\dagger(x_b) \hat{O}^{(2)}(N, b) \hat{\Psi}(x_b) \hat{\Psi}(x_N) \pm \right. \\ &\quad \left. \pm \int dx_a dx_b \hat{\Psi}^\dagger(x_a) \hat{\Psi}(x_N) \hat{\Psi}^\dagger(x_b) \hat{O}^{(2)}(a, b) \hat{\Psi}(x_b) \hat{\Psi}(x_a) \right] = \\ &= \frac{1}{2} \prod_{i=1}^{N-1} \hat{\Psi}(x_i) \left\{ \int dx_a \hat{\Psi}^\dagger(x_a) \left[\hat{O}^{(2)}(N, a) + \hat{O}^{(2)}(a, N) \right] \hat{\Psi}(x_a) \hat{\Psi}(x_N) + \right. \\ &\quad \left. + \int dx_a dx_b \hat{\Psi}^\dagger(x_a) \hat{\Psi}^\dagger(x_b) \hat{O}^{(2)}(a, b) \hat{\Psi}(x_b) \hat{\Psi}(x_a) \hat{\Psi}(x_N) \right\} \quad (1.64) \end{aligned}$$

adódik. A második téroperátort is átemelve kapjuk, hogy:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \prod_{i=1}^{N-2} \hat{\Psi}(x_i) &\left\{ \left[\hat{O}^{(2)}(N, N-1) + \hat{O}^{(2)}(N-1, N) \right] \hat{\Psi}(x_{N-1}) \hat{\Psi}(x_N) + \right. \\ &\quad + \int dx_a \hat{\Psi}^\dagger(x_a) \left[\hat{O}^{(2)}(N, a) + \hat{O}^{(2)}(a, N) + \hat{O}^{(2)}(N-1, a) + \right. \\ &\quad \left. \left. + \hat{O}^{(2)}(a, N-1) \right] \hat{\Psi}(x_a) \hat{\Psi}(x_{N-1}) \hat{\Psi}(x_N) + \right. \\ &\quad \left. + \int dx_a dx_b \hat{\Psi}^\dagger(x_a) \hat{\Psi}^\dagger(x_b) \hat{O}^{(2)}(a, b) \hat{\Psi}(x_b) \hat{\Psi}(x_a) \hat{\Psi}(x_{N-1}) \hat{\Psi}(x_N) \right\}. \quad (1.65) \end{aligned}$$

Ebből már látható, hogy az összes téroperátor átemelése után a következő alakra jutunk:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\substack{j,k=1 \\ (j \neq k)}}^N \hat{O}^{(2)}(j, k) + \int dx_a \hat{\Psi}^\dagger(x_a) \sum_{j=1}^N [\hat{O}^{(2)}(j, a) + \hat{O}^{(2)}(a, j)] \hat{\Psi}(x_a) + \right. \\ \left. + \int dx_a dx_b \hat{\Psi}^\dagger(x_a) \hat{\Psi}^\dagger(x_b) \hat{O}^{(2)}(a, b) \hat{\Psi}(x_b) \hat{\Psi}(x_a) \right\} \prod_{i=1}^N \hat{\Psi}(x_i). \quad (1.66) \end{aligned}$$

A kapcsos zárójelben lévő három tagú összeg utolsó két tagja olyan lesz, melyek bal oldalán keltő téroperátor áll. Ha ezeket a tagokat balról szorozzuk a vákuum állapottal az 0 lesz, hiszen $\langle 0 | \hat{\Psi}^\dagger(x) = 0$. Vagyis összevetve az (1.62a) egyenletet a most mondottakkal kapjuk, hogy:

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \prod_{i=1}^N \hat{\Psi}(x_i) \hat{O}_T^{(2)} | \Phi_N \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^N \hat{O}^{(2)}(j, k) \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \prod_{i=1}^N \hat{\Psi}(x_i) | \Phi_N \rangle, \quad (1.67)$$

éppen amit be szerettünk volna látni. ■

1.5. Alkalmazások és példák

1. Példa. Részecskesűrűség és párkorrelációs operátor

Az N részecskes Hilbert-téren ható részecskesűrűség és párkorrelációs függvény alakja:

$$\hat{n}(\underline{r}, s) = \sum_{i=1}^N \delta(\underline{r} - \underline{r}_i) \delta_{s, s_i}, \quad (1.68a)$$

$$\hat{P}(\underline{r}, s; \underline{r}', s') = \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N \delta(\underline{r} - \underline{r}_i) \delta_{s, s_i} \delta(\underline{r}' - \underline{r}_j) \delta_{s', s_j}. \quad (1.68b)$$

Adjuk meg ezek alakját betöltési szám reprezentációban!

1. Megoldás. Az (1.60) és az (1.62a) egyenletek alapján közvetlen behelyettesítéssel kapható, hogy:

$$\hat{n}(\underline{r}, s) = \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}, s) \hat{\Psi}(\underline{r}, s), \quad (1.69a)$$

$$\hat{P}(\underline{r}, s; \underline{r}', s') = \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}, s) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s') \hat{\Psi}(\underline{r}', s') \hat{\Psi}(\underline{r}, s). \quad (1.69b)$$

2. Példa. *A soktestrendszer Hamilton-operátora betöltési szám reprezentációban*

Az N megkülönböztethetetlen részecskét tartalmazó rendszer Hamilton-operátora az N részecskés Hilbert-téren:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i + U(\underline{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N V(i, j), \quad (1.70)$$

ahol Δ_i az i -edik részecske koordinátájára ható Laplace-operátor, $U(\underline{r})$ a részecskékre ható külső potenciál, $V(i, j)$ pedig a kétrészecske kölcsönhatást jelöli. Adjuk meg ezen Hamilton-operátort betöltési szám reprezentációban!

2. Megoldás. *Szintén közvetlenül alkalmazva az (1.60) és az (1.62a) egyenleteket adódik a továbbiakban igen sokat használt alak:*

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_s \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}, s) \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + U(\underline{r}) \right] \hat{\Psi}(\underline{r}, s) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2} \int d^3r_1 d^3r_2 \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}_1, s_1) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}_2, s_2) V(1, 2) \hat{\Psi}(\underline{r}_2, s_2) \hat{\Psi}(\underline{r}_1, s_1). \end{aligned} \quad (1.71)$$

Érdemes megjegyezni, hogy ez az alak származtatható a kétrészecske operátorok betöltési szám reprezentációbeli alakja ismerete nélkül is abban a speciális esetben, amikor a kétrészecske kölcsönhatás potenciálja spinfüggetlen. A kétrészecske kölcsönhatást ilyen speciális esetben pedig fel lehet írni az alábbi alakban:

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N V(\underline{r}_i; \underline{r}_j) = \frac{1}{2} \sum_{s, s'} \int d^3r d^3r' V(\underline{r}; \underline{r}') \hat{P}(\underline{r}, s; \underline{r}', s'). \quad (1.72)$$

A párkorrelációs függvényt viszont meg lehet adni betöltési szám reprezentációban a kétrészecske operátorok ismerete nélkül is, hiszen:

$$\begin{aligned} \hat{P}(\underline{r}, s; \underline{r}', s') &= \sum_{i,j=1}^N \delta(\underline{r} - \underline{r}_i) \delta_{s, s_i} \delta(\underline{r}' - \underline{r}_j) \delta_{s', s_j} - \\ &- \sum_{i=1}^N \delta(\underline{r} - \underline{r}_i) \delta_{s, s_i} \delta(\underline{r}' - \underline{r}_i) \delta_{s', s_i} = \hat{n}(\underline{r}, s) \hat{n}(\underline{r}', s') - \hat{n}(\underline{r}, s) \delta(\underline{r} - \underline{r}') \delta_{s, s'} = \\ &= \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}, s) \hat{\Psi}(\underline{r}, s) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s') \hat{\Psi}(\underline{r}', s') - \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}, s) \hat{\Psi}(\underline{r}, s) \delta(\underline{r} - \underline{r}') \delta_{s, s'}, \end{aligned} \quad (1.73)$$

mely a felcserélési relációk felhasználásával éppen az (1.69b) egyenletet adja, melyet beírva az (1.72) egyenletbe éppen adódik ezen speciális eset állítása.

3. Példa. Homogén rendszer Hamilton-operátora

További fontos alkalmazásként nézzük meg az N részecskés kölcsönható rendszer Hamilton-operátorát abban a speciális esetben, amikor a rendszer koordináta-eltolás invariáns, vagy rövidebben homogén. Ennek feltétele, hogy a potenciál $U(\underline{r}) \equiv 0$ legyen és a párkölcsönhatás csak a koordináták különbségétől függjön $v(\underline{r} - \underline{r}') := V(\underline{r}; \underline{r}')$ (a kölcsönhatás ettől még lehetne spinfüggő, de ettől most eltekintünk). Határozzuk meg tehát a

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N v(\underline{r}_i - \underline{r}_j), \quad (1.74)$$

Hamilton-operátor másodkvantált alakját! Használjunk periodikus határfeltételt!

3. Megoldás. A periodikus határfeltétel azt jelenti, hogy a rendszert egy L élhosszúságú kockába tesszük és a kocka végeit azonosítjuk egymással (összevarrjuk). A hullámfüggvényre (és deriváltjára) kirótt folytonossági határfeltételt kielégítő teljes ortonormált rendszer:

$$\varphi_{\underline{k}, m_s}(\underline{r}, s) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \chi_{m_s}(s), \quad (1.75)$$

ahol $\Omega = L^3$ a doboz térfogata és $\chi_{m_s}(s) = \delta_{m_s, s}$.

Az (1.51a) egyenletet használva a kinetikus energia operátorára

$$\hat{T} = \sum_{s, s'} \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} \left\langle \underline{k}', s' \left| \frac{\hat{p}^2}{2M} \right| \underline{k}, s \right\rangle \hat{a}_{\underline{k}', s'}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}, s} = \sum_{\underline{k}, s} \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \hat{a}_{\underline{k}, s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}, s}, \quad (1.76)$$

a kölcsönhatási energia operátora pedig (1.62b) felhasználásával:

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{s_1, s_2, \\ s_3, s_4}} \sum_{\substack{\underline{k}_1, \underline{k}_2, \\ \underline{k}_3, \underline{k}_4}} \langle \underline{k}_1, s_1; \underline{k}_2, s_2 | v | \underline{k}_3, s_3; \underline{k}_4, s_4 \rangle \hat{a}_{\underline{k}_1, s_1}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}_2, s_2}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}_4, s_4} \hat{a}_{\underline{k}_3, s_3}. \quad (1.77)$$

A várható érték pedig:

$$\begin{aligned} \langle \underline{k}_1, s_1; \underline{k}_2, s_2 | v | \underline{k}_3, s_3; \underline{k}_4, s_4 \rangle &= \frac{1}{\Omega^2} \sum_{m, m'} \int d^3 r_1 d^3 r_2 e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} \times \\ &\times v(\underline{r}_2 - \underline{r}_1) e^{i\mathbf{k}_3 \mathbf{r}_2} e^{i\mathbf{k}_4 \mathbf{r}_1} \chi_m(s_1) \chi_{m'}(s_2) \chi_{m'}(s_3) \chi_m(s_4) = \\ &= \frac{\delta_{s_1, s_4} \delta_{s_2, s_3}}{\Omega^2} \int d^3 R d^3 r e^{-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \mathbf{R}} e^{-\frac{i}{2}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \mathbf{r}} v(\underline{r}) e^{\frac{i}{2}(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \mathbf{r}} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\delta_{s_1, s_4} \delta_{s_2, s_3} \delta_{\underline{k}_1 + \underline{k}_2, \underline{k}_3 + \underline{k}_4}}{\Omega} \int d^3 r e^{-i(\underline{k}_2 - \underline{k}_3) \underline{r}} v(\underline{r}) = \\
&= \frac{\delta_{s_1, s_4} \delta_{s_2, s_3} \delta_{\underline{k}_1 + \underline{k}_2, \underline{k}_3 + \underline{k}_4}}{\Omega} \mathbf{v}(\underline{k}_2 - \underline{k}_3). \quad (1.78)
\end{aligned}$$

Az integrálás során áttértünk tömegközépponti ($\underline{R} = (\underline{r}_2 + \underline{r}_1)/2$) és relatív ($\underline{r} = \underline{r}_2 - \underline{r}_1$) koordinátákra. Az utolsó integrálban pedig felfedeztük a párkölcsönhatási potenciál Fourier-transzformáltját, melyet vastag betűvel jelöltünk. Ezt visszaírva az (1.77) egyenletbe, a Hamilton-operátor köcslönhatási tagjára adódó összefüggés:

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\substack{\underline{k}_1, \underline{k}_2, \underline{q} \\ s_1, s_2}} \mathbf{v}(\underline{q}) \hat{a}_{\underline{k}_1 + \underline{q}, s_1}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}_2 - \underline{q}, s_2}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}_2, s_2} \hat{a}_{\underline{k}_1, s_1}. \quad (1.79)$$

A teljes Hamilton-operátor pedig ezek összege $\hat{H} = \hat{T} + \hat{H}_1$, vagyis:

$$\hat{H} = \sum_{\underline{k}, s} \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \hat{a}_{\underline{k}, s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}, s} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\substack{\underline{k}_1, \underline{k}_2, \underline{q} \\ s_1, s_2}} \mathbf{v}(\underline{q}) \hat{a}_{\underline{k}_1 + \underline{q}, s_1}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}_2 - \underline{q}, s_2}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}_2, s_2} \hat{a}_{\underline{k}_1, s_1}. \quad (1.80)$$

A sokrészecskés rendszer Fock-téren értelmezett Hamilton-operátorához így nagyon szemléletes képet lehet társítani. Egyrészt mivel minden tagja pontosan ugyanannyi keltő, mint eltüntető operátort tartalmaz, ezért a részecske-számot megőrzi. Továbbá a kölcsönhatás felfogható, mint egy olyan folyamat, mely során egy \underline{k}_1 hullámszámú, s_1 spinű és egy \underline{k}_2 hullámszámú, s_2 spinű részecske átszóródik (lecserélődik) egy $\underline{k}_1 + \underline{q}$ hullámszámú, s_1 spinű és egy $\underline{k}_2 - \underline{q}$ hullámszámú, s_2 spinű részecskére, megőrizve így a kölcsönhatás előtti összimpulzust és összspint.

4. Példa. Kvantumátmenetek (időfüggő perturbációszámítás)

Legyen az N részecskés rendszerünk Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (1.81)$$

alakú, ahol \hat{H}_0 egy teljes egyrészecske operátor \hat{H}_1 pedig egy teljes kétrészecske operátor. Legyen mindkét operátor időfüggetlen. A Fock-teret építsük föl \hat{H}_0 sajátállapotaitól, melyek

$$\hat{H}_0 |i\rangle = \epsilon_i |i\rangle. \quad (1.82)$$

Az így konstruált Fock-téren bármely állapot kifejezhető:

$$|\Phi_N\rangle_t = \sum_m c_m(t) \left| n_1^{(m)} \dots n_i^{(m)} \dots \right\rangle, \quad \sum_i n_i^{(m)} = N. \quad (1.83)$$

A rendszer Hamilton-operátora pedig fölírható:

$$\hat{H}_0 = \sum_i \epsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i, \quad \hat{H}_1 = \sum_{i,j,k,l} \langle i, j | \hat{v} | k, l \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k \quad (1.84)$$

alakban.

Preparáljuk a rendszer állapotát úgy, hogy $t = 0$ -ban \hat{H}_0 sajátállapotában legyen:

$$|\Phi_N\rangle_{t=0} = |n_1 \dots n_i \dots\rangle. \quad (1.85)$$

Határozzuk meg ezen állapot időfejlődését vezető rendben!

4. Megoldás. Az állapot időfejlődését a Schrödinger-egyenlet írja le:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi_N\rangle_t = \hat{H} |\Phi_N\rangle_t. \quad (1.86)$$

Mivel \hat{H}_0 sajátállapotaiból építettük föl a Fock-teret, így:

$$\hat{H}_0 |n_1^{(m)} \dots n_i^{(m)} \dots\rangle = \sum_k \epsilon_k n_k^{(m)} |n_1^{(m)} \dots n_i^{(m)} \dots\rangle. \quad (1.87)$$

Ezt felhasználva és az (1.86) Schrödinger-egyenletbe behelyettesítve az (1.83) hullámfüggvényt (és balról szorozva a Fock-tér N részecskés szektorának egy másik bázisvektorával), a kifejtési együtthatókra a

$$i\hbar \dot{c}_l(t) = c_l(t) \sum_k \epsilon_k n_k^{(l)} + \sum_m c_m(t) \left\langle \dots n_j^{(l)} \dots n_1^{(l)} \left| \hat{H}_1 \right| n_1^{(m)} \dots n_j^{(m)} \dots \right\rangle \quad (1.88)$$

differentiálegyenlet adódik.

Lépjünk át kölcsönhatási képbe (válasszuk le a perturbálatlan Hamilton-operátor szerinti időfüggést az állapotokról)! Ezt úgy érzük el, hogy a kifejtési együtthatókat

$$c_m(t) \equiv b_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_k n_k^{(m)} \epsilon_k t}. \quad (1.89)$$

alakban kezeljük. Így kölcsönhatási képben az (1.83) állapot

$$|\Phi_N\rangle_t = \sum_m b_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_k n_k^{(m)} \epsilon_k t} |n_1^{(m)} \dots n_j^{(m)} \dots\rangle \quad (1.90)$$

alakúra módosul. A $b_l(t)$ együtthatók mozgásegyenlete:

$$i\hbar \dot{b}_l(t) = \sum_m b_m(t) e^{\frac{i}{\hbar} \sum_k \epsilon_k (n_k^{(l)} - n_k^{(m)}) t} \left\langle \dots n_j^{(l)} \dots n_1^{(l)} \left| \hat{H}_1 \right| n_1^{(m)} \dots n_j^{(m)} \dots \right\rangle. \quad (1.91)$$

Felhasználva a kétrészecske operátor betöltési szám reprezentációbeli (1.84) alakját kapjuk, hogy:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \dot{b}_l(t) &= \sum_{opqr} \sum_m b_m(t) e^{\frac{i}{\hbar} \sum_k \epsilon_k (n_k^{(l)} - n_k^{(m)}) t} \langle o, p | \hat{v} | q, r \rangle \times \\
 &\times \left\langle \dots n_j^{(l)} \dots n_1^{(l)} \left| \hat{a}_o^\dagger \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_r \hat{a}_q \right| n_1^{(m)} \dots n_j^{(m)} \dots \right\rangle = \sum_{opqr} \sum_m (\pm 1)^{f_m[o,p,r,q]} b_m(t) \times \\
 &\times e^{\frac{i}{\hbar} \sum_k \epsilon_k (n_k^{(l)} - n_k^{(m)}) t} \langle o, p | \hat{v} | q, r \rangle \sqrt{(1 \pm n_o^{(m)})(1 \pm n_p^{(m)}) n_q^{(m)} n_r^{(m)}} \times \\
 &\times \delta_{n_1^{(l)}, n_1^{(m)}} \dots \delta_{n_o^{(l)}+1, n_o^{(m)}} \dots \delta_{n_p^{(l)}+1, n_p^{(m)}} \dots \delta_{n_r^{(l)}-1, n_r^{(m)}} \dots \delta_{n_q^{(l)}-1, n_q^{(m)}}, \quad (1.92)
 \end{aligned}$$

ahol a $(-1)^f$ fázisfaktor fermionok esetén érvényes fázisfaktor.

Ezt az egyenletet iteratíven oldjuk meg. Nulladik rendben a megoldás nyilván az (1.85) kezdőfeltétel (hiszen ez a perturbálatlan Hamilton-operátor sajátállapota), ekkor a kölcsönhatási képbeli kifejtési együtthatók:

$$b_l(t) \equiv \delta_{l,0}, \quad (1.93)$$

ahol a nulladik betöltési szám kiosztáson éppen a kezdőfeltétel betöltési számait értjük. Az első rendű járulékokat (vezető korrekciót) úgy kapjuk, hogy a kezdőfeltételt (nulladrendű megoldást) tesszük az egyenlet jobb oldalába. Ennek eredménye:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \dot{b}_l^{(1)}(t) &= \sum_{opqr} (\pm 1)^{f[o,p,r,q]} \langle o, p | \hat{v} | q, r \rangle \sqrt{(1 \pm n_o)(1 \pm n_p) n_q n_r} \times \\
 &\times e^{\frac{i}{\hbar} (\epsilon_o + \epsilon_p - \epsilon_r - \epsilon_q) t} \delta_{n_1^{(l)}, n_1} \dots \delta_{n_o^{(l)}+1, n_o} \dots \delta_{n_p^{(l)}+1, n_p} \dots \delta_{n_r^{(l)}-1, n_r} \dots \delta_{n_q^{(l)}-1, n_q}. \quad (1.94)
 \end{aligned}$$

Ez a kifejezés már egyszerűen integrálható, és ebből meghatározhatjuk a kifejtési együtthatókat. Az időegységre vonatkoztatott átmeneti valószínűség (a $|q, r\rangle$ kétrészecske állapotból az $|o, p\rangle$ kétrészecske állapotba):

$$P_{op,qr} = \frac{1}{\hbar} |\langle o, p | \hat{v} | q, r \rangle|^2 \delta(\epsilon_o + \epsilon_p - \epsilon_q - \epsilon_r) (1 \pm n_o)(1 \pm n_p) n_q n_r. \quad (1.95)$$

Az eredmény több szempontból is érdekes. Egyrészt a klasszikus határeset megkapható belőle az $n_j \ll 1$ feltevéssel, vagyis amikor a kifejezés nem függ a végállapotok betöltöttségétől. A kvantummechanikai azonos részecskék megkülönböztethetetlensége (bozon vagy fermion volta) azonban súlyos hatással van az átmeneti valószínűségekre. Fermionoknál, amennyiben a végállapot betöltött, úgy oda nem tud a kölcsönhatás következtében részecske beszóródni.

Bozonoknál azonban minnél többen vannak egy adott egyrészecske állapotban annál nagyobb valószínűséggel szóródik be ugyanabba az állapotba egy másik részecske. Alacsony hőmérsékleten ez a „vonzás” egy különös fázisátalakuláshoz vezet, melyet Bose-Einstein-kondenzációnak neveznek.

Szintén érdekes, hogy a részletes egyensúly: $P_{ij,kl} = P_{kl,ij}$ teljesülésének egy elégséges feltétele, hogy a betöltési számok kielégítsék az

$$(1 \pm n_i)(1 \pm n_j)n_k n_l = (1 \pm n_k)(1 \pm n_l)n_i n_j \quad (1.96)$$

függvényegyenletet. Behelyettesítéssel ellenőrizhetjük, hogy a

$$\bar{n}_m = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_m}{\Theta} - \alpha} \mp 1} \quad (1.97)$$

eloszlások (1.96) egyenletet kielégítik, melyekben Θ, α paraméterek. Az (1.97) kifejezések éppen a betöltési számok egyensúlyi statisztikus fizikai átlagai, ha a Θ paramétert $k_B T$ -vel azonosítjuk és α -t a $\sum_i \bar{n}_i = N$ feltétel határozza meg.

2. fejezet

Véges-hőmérsékleti Green-függvényes technika

A véges hőmérsékleti soktesprobléma kulcsfontosságú fogalma a hőmérsékleti Green-függvény. A hőmérsékleti Green-függvény kitüntetett szerepét annak köszönheti, hogy segítségével mind egyensúlyi, mind pedig dinamikai mennyiségeket ki tudunk fejezni. Ezen fejezet során csak egyensúlyi mennyiségeket vizsgálunk. Definiáljuk a Green-függvényt és megmutatjuk, hogy ennek felhasználásával hogyan tudjuk megadni a rendszert jellemző termodinamikai mennyiségeket. A fejezet jelentős részét a Green-függvény meghatározásának perturbációs számításon alapuló módszere tölti ki.

2.1. Nagykanonikus sokaság, imaginárius idő

A vizsgálni kívánt rendszerről feltételezzük, hogy egymással párpotenciállal kölcsönható, megkülönböztethetetlen részecskékből áll. Az ilyen rendszer Hamilton-operát az 1. fejezet 2. példájában meghatároztuk. A Hamilton-operátor kézenfekvő módon két részre bontható:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (2.1a)$$

ahol

$$\hat{H}_0 = \sum_s \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}, s) \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + U(\underline{r}) \right] \hat{\Psi}(\underline{r}, s), \quad (2.1b)$$

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2} \int d^3r_1 d^3r_2 \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}_1, s_1) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}_2, s_2) V(1, 2) \hat{\Psi}(\underline{r}_2, s_2) \hat{\Psi}(\underline{r}_1, s_1). \quad (2.1c)$$

A \hat{H}_0 tag az $U(\underline{r})$ külső potenciálban lévő, kölcsönhatásmentes rendszer Hamilton-operátora, míg \hat{H}_1 jelöli a teljes Hamilton-operátor kölcsönhatási részét.

A véges hőmérsékletű kvantummechanikai rendszert legkézenfekvőbben nagykanonikus sokasággal írhatjuk le, melyhez vezessük be a következő operátort:

$$\hat{K} := \hat{H} - \mu \hat{N}, \quad (2.2a)$$

ahol $\hat{N} = \sum_s \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}, s) \hat{\Psi}(\underline{r}, s)$ a teljes részecskeszám operátora, μ pedig a kémiai potenciál. Mivel \hat{H} és \hat{N} önadjungált és alulról korlátos operátorok, ezért \hat{K} is önadjungált és μ megfelelő értékeire alulról korlátos is. Ez utóbbi feltétel azért fontos, mert a nagykanonikus sokaság sűrűségmátrixát (statistikai súlyát) értelmezzük vele. Hasonló tulajdonságai és kulcsfontosságú szerepe miatt \hat{K} -t gyakran hívják nagykanonikus Hamilton-operátornak. A \hat{K} operátort is érdemes két részre bontani az alábbiak szerint:

$$\hat{K}_0 = \hat{H}_0 - \mu \hat{N}, \quad (2.2b)$$

$$\hat{K}_1 = \hat{H}_1, \quad (2.2c)$$

hiszen \hat{K}_0 az ideális rendszer \hat{K} operátora, a kölcsönhatást pedig \hat{K}_1 tartalmazza. A rendszer nagykanonikus állapotösszegét és sűrűségmátrixát az alábbi módon fejezhetjük ki:

$$Z_G = e^{-\beta \Omega(T, V, \mu)} = \text{Sp} e^{-\beta \hat{K}} = \sum_{\{n_i\}} \langle \dots n_i \dots n_1 | e^{-\beta \hat{K}} | n_1 \dots n_i \dots \rangle, \quad (2.3)$$

$$\hat{\rho}_G = \frac{e^{-\beta \hat{K}}}{Z_G}, \quad (2.4)$$

ahol $\beta = 1/(k_B T)$ az inverz hőmérséklet és $\Omega(T, V, \mu)$ a nagykanonikus termodinamikai potenciál. Az Sp jel a teljes Fock-térre vett nyomképzés műveletét jelöli, tehát az $|n_1 \dots n_i \dots\rangle$ állapotok a teljes Fock-tér (nem csak az N részecskés szektor) bázisát alkotják¹. Az \hat{O} Fock-téren értelmezett operátor nagykanonikus sokaságátlagát a sűrűségmátrix segítségével az alábbi módon adhatjuk meg:

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Sp} \left\{ \hat{\rho}_G \hat{O} \right\}. \quad (2.5)$$

¹A nyomképzés műveletét természetesen nem csak az $|n_1 \dots n_i \dots\rangle$ Fock-tér bázison lehet elvégezni. Néha kényelmesebb a részecskeszám, energia és egyéb kvantumszámokkal megadott állapotok teljes rendszerét használni.

A nagykanonikus Hamilton-operátor segítségével értelmezhetjük egy \hat{O}_S Schrödinger-képbeli operátor alábbi transzformáltját:

$$\hat{O}_K(\tau) := e^{\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}} \hat{O}_S e^{-\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}. \quad (2.6)$$

A (2.6) transzformáció emlékeztet az \hat{O}_S operátor $t = -i\tau$ imaginárius idejű Heisenberg-képre történő transzformálására (eltekintve a \hat{K} operátorban megjelenő kémiai potenciáltól és részecskeszámától)². Mivel az $\exp(\hat{K}\tau/\hbar)$ transzformáció nem unitér, ezért ha \hat{O}_S önadjungált operátor is, $\hat{O}_K(\tau)$ nem az $\tau \neq 0$ esetén. Fontosságuk miatt a téroperátorok τ függését külön kihangsúlyozzuk:

$$\hat{\Psi}(x, \tau) = e^{\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}} \hat{\Psi}(x) e^{-\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}, \quad (2.7a)$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(x, \tau) = e^{\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}} \hat{\Psi}^\dagger(x) e^{-\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}. \quad (2.7b)$$

Fontos megjegyezni, hogy a K-kép következtében $\hat{\Psi}(x, \tau)$ és $\hat{\Psi}^\dagger(x, \tau)$ nem egymás adjungáltjai. Egyszerű deriválással származtatható a K-képbeli operátor mozgásegyenlete, melyre a Heisenberg-képbeli operátor mozgásegyenletéhez hasonló módon

$$\frac{d\hat{O}_K(\tau)}{d\tau} = \frac{1}{\hbar} [\hat{K}, \hat{O}_K(\tau)] \quad (2.8)$$

adódik.

A K-képbeli téroperátorok az alábbi csererelációknak tesznek eleget:

$$\left[\hat{\Psi}(\underline{r}, s, \tau), \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', \tau) \right]_{\mp} = \delta_{s,s'} \delta^{(3)}(\underline{r} - \underline{r}'), \quad (2.9)$$

$$\left[\hat{\Psi}(\underline{r}, s, \tau), \hat{\Psi}(\underline{r}', s', \tau) \right]_{\mp} = \left[\hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}, s, \tau), \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', \tau) \right]_{\mp} = 0, \quad (2.10)$$

ahol $[\hat{A}, \hat{B}]_{\mp}$ az \hat{A} és \hat{B} operátorok kommutátora bozonok, míg antikommutátora fermionok esetén. Fontos hangsúlyozni, hogy ezen felcserélési relációk egyidejűek. Ha ismernénk két tetszőleges, különböző időpontban értelmezett téroperátor felcserélési relációját, akkor a probléma egzakt megoldását is ismernénk.

2.2. Véges-hőmérsékleti Green-függvény

A rendszer véges-hőmérsékleti, egyrészecske Green-függvényét (röviden Green-függvényét, vagy propagátorát) az alábbi egyenlet definiálja:

$$\mathcal{G}(\underline{r}, s, \tau; \underline{r}', s', \tau') = - \left\langle T_{\tau} [\hat{\Psi}(\underline{r}, s, \tau) \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', \tau')] \right\rangle, \quad (2.11)$$

²A továbbiakban a τ függést imaginárius idő függésnek, vagy ahol ez nem vezet félreértéshez, röviden csak időfüggésnek nevezzük; a különböző mennyiségek τ deriváltjait tartalmazó differenciálegyenleteit pedig mozgásegyenleteknek. A bevezetett imaginárius idejű, módosított Heisenberg-képet pedig röviden csak K-képnek nevezzük.

ahol T_τ a τ rendező operátor, amely téroperátorok (illetve keltő- és eltüntető operátorok) szorzatát rendezi, úgy hogy a nagyobb τ argumentumú operátort rendez bal oldalra. Egyező τ esetén a keltő operátor kerül bal oldalra. A rendezés során, fermionok esetén minden egyes párcsere alkalmával a kifejezés szorozódik -1 -el. Ezen definíció alapján a (2.11) Green-függvényben szereplő időrendezett szorzat explicit alakja a következő:

$$T_\tau[\hat{\Psi}(\underline{r}, s, \tau)\hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', \tau')] = \begin{cases} \hat{\Psi}(\underline{r}, s, \tau)\hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', \tau') & \text{ha } \tau > \tau' \\ \pm \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', \tau')\hat{\Psi}(\underline{r}, s, \tau) & \text{ha } \tau' \geq \tau \end{cases} \quad (2.12)$$

A véges-hőmérsékleti Green-függvény (imaginárius-) időeltolás invariáns, azaz $\mathcal{G}(x, \tau; x', \tau') = \mathcal{G}(x, \tau - \tau_0; x', \tau' - \tau_0) = \mathcal{G}(x, \tau - \tau'; x', 0)$. Az állítás belátásához nézzük a $\tau > \tau'$ esetet. Ilyenkor a rendező operátor egyszerűen elhagyható, és

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(x, \tau; x', \tau') &= -\text{Sp} \{ \hat{\rho}_G \hat{\Psi}(x, \tau) \hat{\Psi}^\dagger(x', \tau') \} = \\ &= -\text{Sp} \{ \hat{\rho}_G e^{\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}} \hat{\Psi}(x) e^{-\frac{\hat{K}(\tau-\tau')}{\hbar}} \hat{\Psi}^\dagger(x') e^{-\frac{\hat{K}\tau'}{\hbar}} \} = \\ &= -\text{Sp} \{ \hat{\rho}_G e^{\frac{\hat{K}(\tau-\tau')}{\hbar}} \hat{\Psi}(x) e^{-\frac{\hat{K}(\tau-\tau')}{\hbar}} \hat{\Psi}^\dagger(x') \} = \mathcal{G}(x, \tau - \tau'; x', 0). \end{aligned} \quad (2.13)$$

A számolás során kihasználtuk a nyomképzés invarianciáját az operátorok ciklikus permutációjára $\text{Sp} \{ABC\} = \text{Sp} \{BCA\} = \text{Sp} \{CAB\}$, és hogy $e^{\beta\hat{K}}$ és $e^{\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}$ felcserélhetők. A $\tau \leq \tau'$ eset belátása teljesen hasonló, így az olvasóra bízunk. Az időeltolási invariancia következtében a (2.11) Green-függvényeket a továbbiakban általában $\mathcal{G}(x, x'; \tau - \tau')$ -vel jelöljük.

Látni fogjuk, hogy az alkalmazások szempontjából a $\mathcal{G}(x, x'; \tau)$ Green-függvény $-\beta\hbar < \tau \leq \beta\hbar$ helyen felvett értékeire van csak szükségünk. Ezen a leszűkített értelmezési tartományon a Green-függvény az alábbi periodicitási/antiperiodicitási tulajdonsággal rendelkezik.

Állítás: $\mathcal{G}(x, x'; \tau)$ a $-\beta\hbar < \tau \leq \beta\hbar$ intervallumon bozonok esetén periodikus, fermionok esetén antiperiodikus τ -ban $\beta\hbar$ szerint.

Bizonyítás: Legyen $-\beta\hbar < \tau \leq 0$: Ekkor

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(x, x'; \tau) &= -\text{Sp} \{ \hat{\rho}_G T_\tau[\hat{\Psi}(x, \tau) \hat{\Psi}^\dagger(x', 0)] \} = \mp e^{\beta\Omega} \text{Sp} \{ e^{-\beta\hat{K}} \hat{\Psi}^\dagger(x', 0) \times \\ &\quad \times \hat{\Psi}(x, \tau) \} = \mp e^{\beta\Omega} \text{Sp} \{ e^{-\beta\hat{K}} e^{\beta\hat{K}} \hat{\Psi}(x, \tau) e^{-\beta\hat{K}} \hat{\Psi}^\dagger(x', 0) \} = \\ &= \mp e^{\beta\Omega} \text{Sp} \{ e^{-\beta\hat{K}} \hat{\Psi}(x, \tau + \beta\hbar) \hat{\Psi}^\dagger(x', 0) \} = \pm \mathcal{G}(x, x'; \tau + \beta\hbar). \end{aligned} \quad (2.14)$$

■

Mivel a Green-függvény $2\beta\hbar$ szerint fermionok és bozonok esetén is periodikus, ezért a következő módon mindkét esetre értelmezhető a Green-

függvény Fourier-sora:

$$\mathcal{G}(x, x'; \tau) = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathcal{G}(x, x'; i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}, \quad (2.15a)$$

$$\mathcal{G}(x, x'; i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta\hbar}^{\beta\hbar} \mathcal{G}(x, x'; \tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau, \quad (2.15b)$$

ahol $\omega_n = \frac{n\pi}{\beta\hbar}$. Érdemes azonban a (2.15b) kifejezését tovább alakítani a $\beta\hbar$ szerinti periodikusság (antiperiodikusság) felhasználásával.

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(x, x'; i\omega_n) &= \frac{1}{2} \int_{-\beta\hbar}^{\beta\hbar} \mathcal{G}(x, x'; \tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau = \frac{1}{2} \left[\int_{-\beta\hbar}^0 \mathcal{G}(x, x'; \tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}(x, x'; \tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau \right] = \frac{1}{2} \left[\pm \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}(x, x'; \tau') e^{-i\omega_n \beta\hbar} e^{i\omega_n \tau'} d\tau' + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}(x, x'; \tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau \right] = \frac{1}{2} [1 \pm (-1)^n] \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}(x, x'; \tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau, \end{aligned} \quad (2.16)$$

azaz bozonok esetén a Fourier-sor páros együtthatói, fermionok esetén páratlan együtthatói különböznek zérustól. A (2.15b) összefüggést végül is az alábbi alakba írhatjuk:

$$\mathcal{G}(x, x'; i\omega_n) = \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}(x, x'; \tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau, \quad (2.17a)$$

$$\omega_n = \begin{cases} \frac{2n\pi}{\beta\hbar} & \text{bozonokra,} \\ \frac{(2n+1)\pi}{\beta\hbar} & \text{fermionokra.} \end{cases} \quad (2.17b)$$

A (2.17b) kifejezésekben megjelenő mennyiségeket Matsubara-frekvenciáknak nevezzük; a Green-függvény (2.17a) Fourier-transzformáltját pedig a Green-függvény Matsubara-reprezentációjának.

2.3. A szabad Green-függvény meghatározása

Alkalmazásként nézzük meg a kölcsönhatásmentes rendszer (más néven szabad rendszer) Green-függvényét, melyet a későbbiekben gyakran használunk majd. Használjuk azokat az egyrészecske hullámfüggvényeket, melyek \hat{H}_0 sajátfüggvényei, vagyis:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + U(\underline{r}) \right] \varphi_k(\underline{r}, s) = e_k \varphi_k(\underline{r}, s). \quad (2.18)$$

A téroperátor

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_k \varphi_k(x) \hat{a}_k,$$

és így \hat{K}_0 alakja betöltési szám reprezentációban:

$$\begin{aligned} \hat{K}_0 = \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + U(\underline{r}) - \mu \right] \hat{\Psi}(x) &= \sum_{k,l} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \int dx \varphi_k^*(x) \times \\ &\times \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + U(\underline{r}) - \mu \right] \varphi_l(x) = \sum_k (e_k - \mu) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Ebben az egyszerű esetben expliciten megkonstruálhatjuk a keltő és eltüntető operátorok τ függését. Az eltüntető operátor mozgásegyenlete

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \hat{a}_k(\tau) &= \frac{1}{\hbar} [\hat{K}_0, \hat{a}_k(\tau)] = \frac{1}{\hbar} \sum_l (e_l - \mu) [\hat{a}_l^\dagger(\tau) \hat{a}_l(\tau), \hat{a}_k(\tau)] = \\ &= -\frac{1}{\hbar} (e_k - \mu) \hat{a}_k(\tau), \end{aligned} \quad (2.20)$$

ahol fölhasználtuk, hogy $\hat{K} \equiv \hat{K}(\tau)$, hiszen \hat{K} fölcserélhető a sűrűségmátrixszal. A mozgásegyenletet közvetlenül integrálva

$$\hat{a}_k(\tau) = \hat{a}_k e^{-\frac{e_k - \mu}{\hbar} \tau}. \quad (2.21a)$$

Teljesen hasonló számolás eredményeként

$$\hat{a}_k^\dagger(\tau) = \hat{a}_k^\dagger e^{\frac{e_k - \mu}{\hbar} \tau}. \quad (2.21b)$$

A (2.21a) és (2.21b) összefüggések segítségével a téroperátorok τ függésére

$$\hat{\Psi}(x, \tau) = \sum_k \varphi_k(x) \hat{a}_k e^{-\frac{e_k - \mu}{\hbar} \tau} \quad (2.22a)$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(x, \tau) = \sum_k \varphi_k^*(x) \hat{a}_k^\dagger e^{\frac{e_k - \mu}{\hbar} \tau} \quad (2.22b)$$

adódik. A (2.11) definíció közvetlen alkalmazásával $\tau > \tau'$ esetén

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{(0)}(x, \tau; x', \tau') &= -\text{Sp} \left\{ \hat{\rho}_G \sum_{k,l} \varphi_k(x) \varphi_l^*(x') \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger e^{-\frac{e_k - \mu}{\hbar} \tau} e^{\frac{e_l - \mu}{\hbar} \tau'} \right\} = \\ &= -\sum_k \varphi_k(x) \varphi_k^*(x') e^{-\frac{e_k - \mu}{\hbar} (\tau - \tau')} \langle 1 \pm \hat{n}_k \rangle_0, \end{aligned}$$

míg $\tau \leq \tau'$ -re

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{(0)}(x, \tau; x', \tau') &= \mp \text{Sp} \left\{ \hat{\rho}_G \sum_{k,l} \varphi_k(x) \varphi_l^*(x') \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k e^{-\frac{e_k - \mu}{\hbar} \tau} e^{\frac{e_l - \mu}{\hbar} \tau'} \right\} = \\ &= \mp \sum_k \varphi_k(x) \varphi_k^*(x') e^{-\frac{e_k - \mu}{\hbar} (\tau - \tau')} \langle \hat{n}_k \rangle_0 \end{aligned}$$

adódik. A két eredmény összevetéséből

$$\mathcal{G}_{(0)}(x, \tau; x', \tau') = - \sum_k \varphi_k(x) \varphi_k^*(x') e^{-\frac{e_k - \mu}{\hbar} (\tau - \tau')} \cdot \begin{cases} 1 \pm n_k^{(0)}, & \text{ha } \tau > \tau' \\ \pm n_k^{(0)}, & \text{ha } \tau \leq \tau', \end{cases} \quad (2.23)$$

ahol $n_k^{(0)}$ a szabad gáz átlagos betöltési száma, melyet szintén könnyen meghatározhatunk az alábbi módon:

$$\begin{aligned} n_k^{(0)} &:= \frac{1}{Z_G} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta \hat{K}_0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \right\} = \frac{1}{Z_G} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta \hat{K}_0} \hat{a}_k (\beta \hbar) \hat{a}_k^\dagger \right\} = \\ &= \frac{1}{Z_G} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta \hat{K}_0} \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \right\} e^{-\beta(e_k - \mu)} = e^{-\beta(e_k - \mu)} (1 \pm n_k^{(0)}). \quad (2.24) \end{aligned}$$

Az első egyenlőségnél felhasználtuk a nyomképzés ciklikus tulajdonságát és beillesztettük bal oldalra az $\hat{1} = e^{-\beta \hat{K}_0} e^{\beta \hat{K}_0}$ operátort, az utolsó kifejezéshez pedig az operátorok felcserélési relációjának felhasználásával jutottunk. A (2.24) egyenletből a betöltési számokra a jól ismert

$$n_k^{(0)} = \frac{1}{e^{\beta(e_k - \mu)} \mp 1} \quad (2.25)$$

összefüggés adódik.

A (2.23) Green-függvényben nehézséget okoz, hogy az időrendezés miatt két tagot tartalmaz. A periodikusság felhasználásával származtatható Fourier-sor azonban fermionok és bozonok esetén is egyszerű alakú. *Bozonok* esetén

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{(0)}(x, x'; i\omega_n) &= - \sum_k \varphi_k(x) \varphi_k^*(x') \left(1 + n_k^{(0)} \right) \int_0^{\beta \hbar} e^{i\omega_n \tau} e^{-\frac{e_k - \mu}{\hbar} \tau} d\tau = \\ &= \sum_k \frac{\varphi_k(x) \varphi_k^*(x')}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)}, \quad (2.26) \end{aligned}$$

ahol felhasználtuk a Matsubara-reprezentáció (2.17) kifejezésit, a Green-függvény (2.23) és a betöltési szám (2.25) alakjait, továbbá, hogy bozonok esetén $e^{i\omega_n \beta \hbar} = 1$. *Fermionok* esetén a számolás menete és a végeredmény (2.26) alakja ugyanez, de ott a betöltési számok átlaga és a lehetséges Matsubara-frekvenciák eltérnek.

2.4. Egyensúlyi mennyiségek

A véges hőmérsékleti Green-függvény ismeretében egyensúlyi termodinamikai mennyiségek átlagai könnyen kifejezhetők. Az egyrészecske operátorok átlagait az egyidős egyrészecske Green-függvény segítségével adhatjuk meg, hiszen:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\underline{r}, s, \tau; \underline{r}', s', \tau) &= \mp \text{Sp} \left\{ \hat{\rho}_G \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', \tau) \hat{\Psi}(\underline{r}, s, \tau) \right\} = \\ &= \mp \left\langle \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s') \hat{\Psi}(\underline{r}, s) \right\rangle,\end{aligned}$$

így az $\hat{O}^{(1)}(\underline{r}_a, s_a)$ egyrészecske operátor nagykanonikus átlaga:

$$\left\langle \hat{O}^{(1)} \right\rangle = \mp \sum_{s_a, s_b} \delta_{s_a, s_b} \int d^3 r_a \lim_{\underline{r}_b \rightarrow \underline{r}_a} \left[\hat{O}^{(1)}(\underline{r}_a, s_a) \mathcal{G}(\underline{r}_a, s_a, \tau; \underline{r}_b, s_b, \tau) \right]. \quad (2.27)$$

A (2.27) összefüggést alkalmazva a részecskeszám átlagára

$$N(T, V, \mu) = \mp \sum_s \int d^3 r \mathcal{G}(\underline{r}, s, \tau; \underline{r}, s, \tau), \quad (2.28)$$

míg a kinetikus energia átlagára

$$E_{\text{kin}}(T, V, \mu) = \mp \sum_s \int d^3 r \lim_{\underline{r}' \rightarrow \underline{r}} \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \mathcal{G}(\underline{r}, s, \tau; \underline{r}', s, \tau) \right] \quad (2.29)$$

adódik.

Kétrészecske operátorok átlagát általában nem tudjuk az egyrészecske Green-függvény segítségével kifejezni, meghatározásukhoz a kétrészecske propagátor ismerete szükséges. A kölcsönhatási energia átlagát azonban meghatározhatjuk a Green-függvény mozgásegyenlete segítségével:

$$\begin{aligned}\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}(\underline{r}, s, \tau; \underline{r}', s', \tau') \Big|_{\tau < \tau'} &= \mp \text{Sp} \left[\hat{\rho}_G \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', \tau') \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{\Psi}(\underline{r}, s, \tau) \right] = \\ &= \mp \text{Sp} \left\{ \hat{\rho}_G \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', \tau') \left[\frac{\hbar^2}{2M} \Delta - U(\underline{r}) + \mu - \sum_{s''} \int d^3 r'' \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}'', s'', \tau) \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times V(\underline{r} - \underline{r}'') \hat{\Psi}(\underline{r}'', s'', \tau) \right] \hat{\Psi}(\underline{r}, s, \tau) \right\}, \quad (2.30)\end{aligned}$$

ahol a (2.8) mozgásegyenletet közvetlenül alkalmaztuk a téroperátorra. A kommutátor számolását az olvasóra bizzuk, eredményük bozonokra és fermionokra is ugyanaz, a (2.30) egyenletben felhasznált alak. A (2.30) mozgásegyenlet utolsó tagjában észrevehetjük a (2.1c) kölcsönhatási energia keresett

átlagát. Az egyenlet átalakításával a kölcsönhatási energiára

$$\begin{aligned} E_1(T, V, \mu) &= \langle \hat{H}_1 \rangle = \\ &= \pm \frac{1}{2} \sum_s \int d^3r \lim_{\tau' \rightarrow \tau+0} \lim_{\underline{r}' \rightarrow \underline{r}} \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + U(\underline{r}) - \mu \right] \mathcal{G}(\underline{r}, s, \tau; \underline{r}', s, \tau') \end{aligned} \quad (2.31)$$

adódik. A fenti mennyiségek ismeretében a rendszer Hamilton-operátorának nagykanonikus átlagát is felírhatjuk, mely a rendszer termodinamikai belső energiája

$$\begin{aligned} E(T, V, \mu) &= E_{\text{kin}}(T, V, \mu) + \langle U(\underline{r}) \rangle + E_1(T, V, \mu) = \\ &= \mp \frac{1}{2} \sum_s \int d^3r \lim_{\tau' \rightarrow \tau+0} \lim_{\underline{r}' \rightarrow \underline{r}} \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + U(\underline{r}) + \mu \right] \mathcal{G}(\underline{r}, s, \tau; \underline{r}', s, \tau'). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Utoljára a nagykanonikus termodinamikai potenciált fejezzük ki a Green-függvény segítségével. Ennek érdekében vezessünk be egy $\lambda \in [0, 1]$ paramétert és a

$$\hat{K}(\lambda) := \hat{K}_0 + \lambda \hat{K}_1 \quad (2.33)$$

nagykanonikus Hamilton-operátort, ahol \hat{K}_0 és \hat{K}_1 operátorok a (2.2b) és (2.2c) egyenletekkel adóttak. Azaz $\hat{K}(\lambda = 0)$ a szabad rendszert, míg $\hat{K}(\lambda = 1)$ a vizsgált kölcsönható rendszert írja le. Az állapotösszeg

$$Z_G(\lambda) = \text{Sp} e^{-\beta \hat{K}(\lambda)}. \quad (2.34)$$

A $\hat{K}(\lambda)$ operátor exponenciális függvényét kifejtve, $Z_G(\lambda)$ -ra

$$Z_G(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Sp} \left(\hat{K}_0 + \lambda \hat{K}_1 \right)^n \quad (2.35)$$

adódik. Az állapotösszeg λ szerinti deriváltja

$$\frac{\partial Z_G}{\partial \lambda} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} n \text{Sp} \left[\left(\hat{K}_0 + \lambda \hat{K}_1 \right)^{n-1} \hat{K}_1 \right] = -\frac{\beta}{\lambda} Z_G(\lambda) \langle \lambda \hat{K}_1 \rangle_{\lambda}. \quad (2.36)$$

A (2.36) derivált meghatározásánál figyelni kell rá, hogy \hat{K}_1 és \hat{K}_0 operátorok nem cserélhetők föl, azonban a nyomképzés linearitását és ciklikus tulajdonságát felhasználva összevonhatjuk az n különböző sorrendű operátorszorzatot.

Végül a linearitást ismét kihasználva az összegzést visszavisszük a nyomképzés művelete mögé, majd a sort visszaalakítjuk exponenciális függvénnyé. A λ paraméterű rendszer nagykanonikus termodinamikai potenciálja

$$\Omega_\lambda(T, V, \mu) = -k_B T \ln Z_G(\lambda). \quad (2.37)$$

Ennek λ szerinti deriváltja

$$\frac{\partial \Omega_\lambda}{\partial \lambda} = -\frac{k_B T}{Z_G(\lambda)} \frac{\partial Z_G}{\partial \lambda} = \frac{1}{\lambda} \left\langle \lambda \hat{K}_1 \right\rangle_\lambda. \quad (2.38)$$

Ezt visszaintegrálva 0-tól 1-ig az eredeti rendszer nagykanonikus termodinamikai potenciáljára

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0(T, V, \mu) + \int_0^1 \frac{1}{\lambda} \left\langle \lambda \hat{K}_1 \right\rangle_\lambda d\lambda$$

adódik. Felhasználva a (2.31) kifejezést Ω -ra végül is a

$$\begin{aligned} \Omega(T, V, \mu) = \Omega_0(T, V, \mu) \mp \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \sum_s \int d^3r \times \\ \times \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \lim_{\underline{r}' \rightarrow \underline{r}} \frac{1}{2} \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - U(\underline{r}) + \mu \right] \mathcal{G}_{(\lambda)}(\underline{r}, s, \tau; \underline{r}', s, \tau') \end{aligned} \quad (2.39)$$

kifejezés adódik, ahol \mathcal{G}_λ a λ paraméterű kölcsönható rendszer Green-függvénye. A (2.39) összefüggés értelmében a nagykanonikus termodinamikai potenciált is ki tudjuk fejezni a propagátor analitikus alakjának ismeretében. Bár az eljárás kicsit bonyolultabb, mint a belső energia számolása esetében, hiszen eggyel több integrált kell elvégezni, viszont a Green-függvényt amúgy is általában a csatolási állandó perturbációs sora alakjában állítjuk elő, így a λ szerinti integrál elvégzése többnyire nem okoz problémát.

2.5. Perturbációszámítás

A kölcsönható rendszer Green-függvényének meghatározásához a perturbációszámítás módszereit használjuk. A 2.3. paragrafusban láttuk, hogy a szabad rendszer keltő és eltüntető operátorainak imaginárius időfüggése egyszerű, ha az egyrészecske probléma megoldását ismerjük. A perturbációszámítást kölcsönhatási képben végezzük, ahol az operátorok a szabad rendszer nagykanonikus Hamilton-operátora szerint fejlődnek időben. Az \hat{O}_S Schrödinger-képbeli operátor kölcsönhatási képbeli alakja tehát:

$$\hat{O}_I(\tau) := e^{\frac{\hat{K}_0 \tau}{\hbar}} \hat{O}_S e^{-\frac{\hat{K}_0 \tau}{\hbar}}. \quad (2.40)$$

Így mozgásegyenlete az alábbi alakot ölti:

$$\frac{d\hat{O}_I(\tau)}{d\tau} = \frac{1}{\hbar}[\hat{K}_0, \hat{O}_I(\tau)]. \quad (2.41)$$

A K-képbeli operátort a kölcsönhatási képbelivel az

$$\hat{O}_K(\tau) = e^{\frac{\hat{K}_0\tau}{\hbar}} e^{-\frac{\hat{K}_0\tau}{\hbar}} \hat{O}_I(\tau) e^{\frac{\hat{K}_0\tau}{\hbar}} e^{-\frac{\hat{K}_0\tau}{\hbar}} = \hat{U}(0, \tau) \hat{O}_I(\tau) \hat{U}(\tau, 0) \quad (2.42)$$

hasonlósági transzformáció köti össze, ahol

$$\hat{U}(\tau_1, \tau_2) := e^{\frac{\hat{K}_0\tau_1}{\hbar}} e^{-\frac{\hat{K}_0}{\hbar}(\tau_1 - \tau_2)} e^{-\frac{\hat{K}_0\tau_2}{\hbar}}. \quad (2.43)$$

A (2.43) definícióból könnyen látható az \hat{U} operátor alábbi 3 fontos tulajdonsága:

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad & \left[\hat{U}(\tau_1, \tau_2) \right]^{-1} = \hat{U}(\tau_2, \tau_1), \\ \text{(II)} \quad & \hat{U}(\tau_1, \tau_2) \hat{U}(\tau_2, \tau_3) = \hat{U}(\tau_1, \tau_3), \\ \text{(III)} \quad & \hat{U}(\tau, \tau) = \hat{1}. \end{aligned}$$

Az \hat{U} operátor mozgásegyenletét τ szerinti deriválással származtathatjuk a (2.43) egyenletből

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{U}(\tau, \tau') = e^{\frac{\hat{K}_0\tau}{\hbar}} \left(\hat{K}_0 - \hat{K} \right) e^{-\frac{\hat{K}_0}{\hbar}(\tau - \tau')} e^{-\frac{\hat{K}_0\tau'}{\hbar}} = -\hat{K}_{1,I}(\tau) \hat{U}(\tau, \tau'). \quad (2.44a)$$

A mozgásegyenlethez tartozó kezdőfeltétel:

$$\hat{U}(\tau', \tau') = \hat{1}. \quad (2.44b)$$

Érdemes a (2.44) egyenletet integrálegyenletté alakítani

$$\hat{U}(\tau, \tau') = \hat{1} - \frac{1}{\hbar} \int_{\tau'}^{\tau} \hat{K}_{1,I}(\tau'') \hat{U}(\tau'', \tau') d\tau'', \quad (2.45)$$

melyet iteratíván meg tudunk oldani. Az iteratív megoldás:

$$\hat{U}_{(0)}(\tau, \tau') = \hat{1},$$

$$\hat{U}_{(1)}(\tau, \tau') = \hat{1} - \frac{1}{\hbar} \int_{\tau'}^{\tau} \hat{K}_{1,I}(\tau_1) d\tau_1,$$

$$\hat{U}_{(2)}(\tau, \tau') = \hat{1} - \frac{1}{\hbar} \int_{\tau'}^{\tau} \hat{K}_{1,I}(\tau_1) d\tau_1 + \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^2 \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau'}^{\tau_1} d\tau_2 \hat{K}_{1,I}(\tau_1) \hat{K}_{1,I}(\tau_2),$$

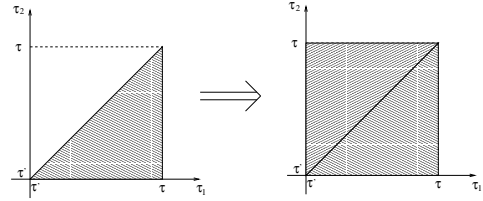
...

$$\hat{U}(\tau, \tau') = \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^n \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \dots \int_{\tau'}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{K}_{1,I}(\tau_1) \dots \hat{K}_{1,I}(\tau_n). \quad (2.46)$$

A (2.46) egyenletnél kellemetlenség, hogy az n egymás utáni τ szerinti integrál nem az n dimenziós hiperkockára történik. Tekintsük a kifejtés 3. tagját ($n = 2$).

$$\begin{aligned} \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau'}^{\tau_1} d\tau_2 \hat{K}_{1,I}(\tau_1) \hat{K}_{1,I}(\tau_2) &= \frac{1}{2} \left[\int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau'}^{\tau_1} d\tau_2 \hat{K}_{1,I}(\tau_1) \hat{K}_{1,I}(\tau_2) + \right. \\ &\left. + \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_2 \int_{\tau'}^{\tau_2} d\tau_1 \hat{K}_{1,I}(\tau_2) \hat{K}_{1,I}(\tau_1) \right] = \frac{1}{2} \int_{\tau'}^{\tau} \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 d\tau_2 T_{\tau} [\hat{K}_{1,I}(\tau_1) \hat{K}_{1,I}(\tau_2)]. \end{aligned} \quad (2.47)$$

A (2.47) levezetésnél első lépésében hozzáadtuk a kifejezéshez önmagát (eltérő integrálási változó kiosztással) és osztottuk az egészet kettővel. Így a 2.1. ábrának megfelelően az eredeti alsó háromszögre vett integrál helyett bevezettünk egy alsó és egy felső háromszögre vett integrált. A második lépésben az időrendező operátor bevezetésével összevontuk a két integrált a teljes négyzetre vett integrállá. Teljesen hasonló módon alakítható át a (2.46) kifejtés többi tagja is, és az U operátorra végül is az alábbi kifejezést kapjuk:



2.1. ábra. Integrálási tartomány $n = 2$ esetén

$$\hat{U}(\tau, \tau') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^n \int_{\tau'}^{\tau} \dots \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \dots d\tau_n T_{\tau} [\hat{K}_{1,I}(\tau_1) \dots \hat{K}_{1,I}(\tau_n)]. \quad (2.48)$$

A (2.48) kifejezés helyességét közvetlenül is ellenőrizhetjük. A kifejezést τ szerint deriválva, n -edik rendben éppen n egymás utáni integrált kell deriválni a felső határ szerint. Eredményül egy ugyanilyen, de $n - 1$ dimenziós integrál és egy extra $\hat{K}_{1,I}(\tau)$ operátor szorzatát kapjuk n -szer. A sor tagjaiból $\hat{K}_{1,I}(\tau)$ -t kiemelve épp a (2.44) mozgásegyenlethez jutunk.

Az \hat{U} operátor perturbációs sorának segítségével az állapotösszeget (és a nagykanonikus termodinamikai potenciált) is felírhatjuk perturbációs sor alakjában. Ehhez először a (2.43) egyenlet felhasználásával fejezzük ki a nagykanonikus állapotösszeget

$$Z_G = \text{Sp} \left(e^{-\beta \hat{K}} \right) = \text{Sp} \left[e^{-\beta \hat{K}_0} \hat{U}(\beta \hbar, 0) \right], \quad (2.49)$$

melyből a (2.48) egyenlet felhasználásával

$$Z_G = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^n \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \dots d\tau_n \operatorname{Sp} \left\{ e^{-\beta\hat{K}_0} T_\tau \left[\hat{K}_{1,I}(\tau_1) \dots \hat{K}_{1,I}(\tau_n) \right] \right\} \quad (2.50)$$

adódik.

A Green-függvény perturbációs sorát is meghatározhatjuk \hat{U} (2.48) sora segítségével. $\tau > \tau'$ esetén:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(x, \tau; x', \tau') &= -Z_G^{-1} \operatorname{Sp} \left[e^{-\beta\hat{K}} \hat{\Psi}_K(x, \tau) \hat{\Psi}_K^\dagger(x', \tau') \right] = -Z_G^{-1} \operatorname{Sp} \left[e^{-\beta\hat{K}_0} \times \right. \\ &\quad \times \hat{U}(\beta\hbar, 0) \hat{U}(0, \tau) \hat{\Psi}_I(x, \tau) \hat{U}(\tau, 0) \hat{U}(0, \tau') \hat{\Psi}_I^\dagger(x', \tau') \hat{U}(\tau', 0) \left. \right] = \\ &= \frac{-\operatorname{Sp} \left[e^{-\beta\hat{K}_0} \hat{U}(\beta\hbar, \tau) \hat{\Psi}_I(x, \tau) \hat{U}(\tau, \tau') \hat{\Psi}_I^\dagger(x', \tau') \hat{U}(\tau', 0) \right]}{\operatorname{Sp} \left[e^{-\beta\hat{K}_0} \hat{U}(\beta\hbar, 0) \right]}, \quad (2.51) \end{aligned}$$

ahol a 2. egyenlőségjel után felhasználtuk a (2.43) és (2.42) egyenleteteket, míg legvégül felhasználtuk Z_G (2.49) alakját és az \hat{U} operátorok (II) tulajdonságát. Teljesen hasonlóan $\tau \leq \tau'$ esetén

$$\mathcal{G}(x, \tau; x', \tau') = \frac{\mp \operatorname{Sp} \left[e^{-\beta\hat{K}_0} \hat{U}(\beta\hbar, \tau') \hat{\Psi}_I^\dagger(x', \tau') \hat{U}(\tau', \tau) \hat{\Psi}_I(x, \tau) \hat{U}(\tau, 0) \right]}{\operatorname{Sp} \left[e^{-\beta\hat{K}_0} \hat{U}(\beta\hbar, 0) \right]}. \quad (2.52)$$

A (2.51) és (2.52) egyenletek közös alakra hozhatók, ha ismét visszaírjuk a τ rendező operátort. Ennek oka, hogy a két kiírt téroperátor sorrendjét és a \pm előjelet nyilvánvalóan helyesen adja vissza a rendezés. A probléma egyedül a kifejezésekben mindenfelé szereplő \hat{U} operátorokkal lehetne, de ott sincs, ha azokat a (2.48) alakból helyettesítjük be; hiszen ilyenkor a perturbációszámítás minden rendjében megjelenik a két téroperátoron kívül $4n$ másik téroperátor, melyeket, ha közös időrendezés mögé rakunk, akkor T_τ épp a (2.51) illetve a (2.52) egyenletek által megadott, helyes sorrendbe rakja. A Green-függvény perturbációs sora tehát:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(x, \tau; x', \tau') &= \\ &= \frac{-\operatorname{Sp} \left\{ e^{-\beta\hat{K}_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\hbar^{-1})^n}{n!} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \dots d\tau_n T_\tau \left[\hat{K}_1(\tau_1) \dots \hat{K}_1(\tau_n) \hat{\Psi}(x, \tau) \hat{\Psi}^\dagger(x', \tau') \right] \right\}}{\operatorname{Sp} \left\{ e^{-\beta\hat{K}_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\hbar^{-1})^n \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \dots d\tau_n T_\tau \left[\hat{K}_1(\tau_1) \dots \hat{K}_1(\tau_n) \right] \right\}}. \quad (2.53) \end{aligned}$$

A kifejezésben minden τ függő operátor kölcsönhatási képben értendő. Mivel ettől a ponttól kezdve a τ függő operátorok szinte kizárólag kölcsönhatási képben vannak, ezért az I alsó indexet nem jelöljük.

Megjegyzések:

- A (2.51) és (2.52) kifejezéseket úgy lehet csak összevonni a (2.53) alakra, ha a Green-függvény mindkét időargumentuma 0 és $\beta\hbar$ között van.
- A (2.49) összefüggésből látszik, hogy az imaginárius idő bevezetése a sűrűségmátrix (és az átlagok) perturbatív számolásához szükséges.

2.6. Wick-tétel

Az előző paragrafusban felírtuk a Green-függvény perturbációs sorát. A Wick-tétel a fellépő operátorszorzatok átlagának kiszámításához nyújt segítséget. Először vezessük be két operátor párosításának fogalmát. Jelölje $\hat{\alpha}_j$ a j állapotot keltő vagy eltüntető operátorok egyikét, vagyis

$$\hat{\alpha}_j = \begin{cases} \hat{a}_j, & \text{vagy} \\ \hat{a}_j^\dagger. \end{cases}$$

Ekkor a (2.21) egyenletek felhasználásával

$$e^{\beta\hat{K}_0}\hat{\alpha}_je^{-\beta\hat{K}_0} = \hat{\alpha}_je^{\lambda_j(e_j-\mu)\beta}, \quad (2.54)$$

ahol

$$\lambda_j = \begin{cases} 1, & \text{ha } \hat{\alpha}_j = \hat{a}_j^\dagger, \\ -1, & \text{ha } \hat{\alpha}_j = \hat{a}_j. \end{cases}$$

Két *időfüggetlen* $\hat{\alpha}$ operátor párosítottján az

$$\overline{\hat{\alpha}_a\hat{\alpha}_b} := \frac{[\hat{\alpha}_a, \hat{\alpha}_b]_\mp}{1 \mp e^{\lambda_a\beta(e_a-\mu)}} \quad (2.55)$$

mennyiséget értjük. Két ilyen operátor párosítottja mindenképpen zérus, ha mindkét operátor keltő vagy mindkét operátor eltüntető. A párosítás akkor is zérus, ha ugyan az egyik operátor keltő, a másik eltüntető, de különböző egyrészecske állapotot keltenek illetve tüntetnek el. A két nullától különböző párosítás tehát:

$$\overline{\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j} = \frac{[\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_j]_\mp}{1 \mp e^{\beta(e_j-\mu)}} = n_j^{(0)}, \quad (2.56a)$$

$$\overline{\hat{a}_j\hat{a}_j^\dagger} = \frac{[\hat{a}_j, \hat{a}_j^\dagger]_\mp}{1 \mp e^{-\beta(e_j-\mu)}} = 1 \pm n_j^{(0)}. \quad (2.56b)$$

Az *időfüggetlen* operátorokra bevezetett párosítás tehát nem más, mint a két operátor szorzatának várható értéke a szabad rendszer által meghatározott sokaságra, azaz

$$\overline{\hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b} = \langle \hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \rangle_0 = \frac{1}{Z_{G,0}} \text{Sp} \left(e^{-\beta \hat{K}_0} \hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \right). \quad (2.57)$$

Tekintsük most *páros számú* operátor szorzatának a szabad rendszer által meghatározott nagykanonikus sokaságra vett átlagát!

$$\begin{aligned} \text{Sp} (\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \dots \hat{\alpha}_z) &= \text{Sp} \left(\hat{\rho}_0 [\hat{\alpha}_a, \hat{\alpha}_b]_{\mp} \hat{\alpha}_c \dots \hat{\alpha}_z \right) \pm \\ &\pm \text{Sp} \left(\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_b [\hat{\alpha}_a, \hat{\alpha}_c]_{\mp} \hat{\alpha}_d \dots \hat{\alpha}_z \right) + \text{Sp} \left(\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c [\hat{\alpha}_a, \hat{\alpha}_d]_{\mp} \hat{\alpha}_e \dots \hat{\alpha}_z \right) \pm \\ &\pm \text{Sp} \left(\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \hat{\alpha}_d [\hat{\alpha}_a, \hat{\alpha}_e]_{\mp} \hat{\alpha}_f \dots \hat{\alpha}_z \right) + \dots \pm \text{Sp} \left(\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \hat{\alpha}_d \dots \hat{\alpha}_z \hat{\alpha}_a \right). \end{aligned} \quad (2.58)$$

A (2.58) egyenlet egy azonos átalakítás csupán. A jobb oldalon az egymást követő tagok kommutátorainak (antikommutátorainak) első tagja kiejti a kifejezés megelőző tagjában szereplő kommutátor második tagját. Tekintsük most részletesebben a kifejezés utolsó tagját! Fontos észrevétel, hogy páros számú operátor esetén ezen utolsó tag előjele mindig \pm , sohasem $+$. Felhasználva a nyomképzés ciklikus tulajdonságát az utolsó helyen álló $\hat{\alpha}_a$ operátort az első helyre vihetjük. Ezután beírva $\hat{\alpha}_a$ elé az $\hat{1} = e^{-\beta \hat{K}_0} e^{\beta \hat{K}_0}$ egységoperátort és kihasználva a (2.54) összefüggést az utolsó tagra

$$\pm e^{\lambda_a \beta (e_a - \mu)} \text{Sp} (\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \dots \hat{\alpha}_z)$$

adódik. Átvíve ezt a tagot a bal oldalra és osztva az $1 \mp e^{\lambda_a \beta (e_a - \mu)}$ együtthatóval, valamint felhasználva a (2.55) definíciót és a tényt, hogy a párosítások már az egységoperátor számszorosai,

$$\begin{aligned} \text{Sp} (\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \dots \hat{\alpha}_y \hat{\alpha}_z) &= \overline{\hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b} \text{Sp} (\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_c \dots \hat{\alpha}_z) \pm \overline{\hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_c} \text{Sp} (\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_d \dots \hat{\alpha}_z) + \\ &+ \dots + \overline{\hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_z} \text{Sp} (\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_b \dots \hat{\alpha}_y). \end{aligned} \quad (2.59)$$

Az előjelet kényelmesen beleolvaszthatjuk a párosítás definíciójába az alábbi módon. Értelmezzük egy operátorszorzatban nem egymás mellett álló két operátor párosítottját oly módon, mintha egymás mellett állók lennének szorozva $(-1)^P$ -vel, ahol P azon fermion operátor párcserék száma, amelyeket el kell végezni, hogy a szorzatban a párosítandó operátorok egymás mellett álljanak. Tehát

$$\begin{aligned} \text{Sp} (\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \dots \hat{\alpha}_y \hat{\alpha}_z) &= \text{Sp} (\hat{\rho}_0 \overline{\hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b} \hat{\alpha}_c \dots \hat{\alpha}_y \hat{\alpha}_z) + \\ &+ \text{Sp} (\hat{\rho}_0 \overline{\hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_c} \hat{\alpha}_b \dots \hat{\alpha}_y \hat{\alpha}_z) + \dots + \text{Sp} (\hat{\rho}_0 \overline{\hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \dots \hat{\alpha}_y} \hat{\alpha}_z). \end{aligned} \quad (2.60)$$

A (2.59) egyenletből már jól látszik, hogy az eljárás tovább folytatható. Minden lépésben kettővel csökken a nyomképzés művelete mögött álló operátorok száma, míg végül minden operátort kipárosítunk az összes lehetséges módon. A végeredmény tehát

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \dots \hat{\alpha}_y \hat{\alpha}_z) &= \overbrace{\hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \hat{\alpha}_d} \dots \overbrace{\hat{\alpha}_y \hat{\alpha}_z} + \overbrace{\hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \hat{\alpha}_d} \dots \overbrace{\hat{\alpha}_y \hat{\alpha}_z} + \\ &+ \text{összes többi lehetséges teljes párosítás.} \end{aligned} \quad (2.61)$$

Páratlan számú $\hat{\alpha}$ operátor szorzatának várható értékével nem kell bajlódunk, mivel az normál rendszer esetén mindig zérus. Ennek oka, hogy páratlan számú operátor szorzatában nem lehet ugyananyi keltő, mint eltüntető operátor, tehát ez a szorzat nem őrzí meg a részecskeszámot. Egy ilyen szorzat várható értéke egy részecskeszám-őrző sokaságra mindig zérus.

Vizsgáljuk most τ függő operátorok várható értékét a szabad rendszer által meghatározott nagykanonikus sokaságra. Az $\hat{\alpha}$ operátorok időfüggését (kölsönhatási képben) a (2.21) egyenletek mutatják. Ezen egyenletek értelmében az időfüggés egyszerű skalár függvény, melyet kiemelhetünk a nyomképzés művelete alól, így az időfüggő operátorok várható értékét visszavezethetjük időfüggetlen párosításokra az alábbi módon

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\hat{\rho}_0 \hat{\alpha}_a(\tau_a) \hat{\alpha}_b(\tau_b) \dots \hat{\alpha}_z(\tau_z)) &= \left[\overbrace{\hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \hat{\alpha}_d} \dots \overbrace{\hat{\alpha}_y \hat{\alpha}_z} + \overbrace{\hat{\alpha}_a \hat{\alpha}_b \hat{\alpha}_c \hat{\alpha}_d} \dots \overbrace{\hat{\alpha}_y \hat{\alpha}_z} + \right. \\ &+ \left. \text{összes többi lehetséges teljes párosítás} \right] e^{\lambda_a(e_a - \mu) \frac{\tau_a}{\hbar}} \dots e^{\lambda_z(e_z - \mu) \frac{\tau_z}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Végül térjünk rá az időfüggő operátorok időrendezett szorzatának várható értékére. Defináljuk két *időfüggő* operátor párosítottját az alábbi módon:

$$\overbrace{\hat{\alpha}_a(\tau_a) \hat{\alpha}_b(\tau_b)} := \left\langle T_\tau \left[\hat{\alpha}_a(\tau_a) \hat{\alpha}_b(\tau_b) \right] \right\rangle_0. \quad (2.63)$$

Tekintsük ezután páros számú időfüggő operátor időrendezett szorzatának várható értékét, és tegyük fel először, hogy $\tau_a > \tau_b > \dots > \tau_z$. Ekkor

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\hat{\rho}_0 T_\tau [\hat{\alpha}_a(\tau_a) \hat{\alpha}_b(\tau_b) \dots \hat{\alpha}_z(\tau_z)]) &= \overbrace{\hat{\alpha}_a(\tau_a) \hat{\alpha}_b(\tau_b)} \dots \overbrace{\hat{\alpha}_y(\tau_y) \hat{\alpha}_z(\tau_z)} + \\ &+ \overbrace{\hat{\alpha}_a(\tau_a) \hat{\alpha}_b(\tau_b)} \dots \overbrace{\hat{\alpha}_y(\tau_y) \hat{\alpha}_z(\tau_z)} + \text{összes többi lehetséges teljes párosítás.} \end{aligned} \quad (2.64)$$

Ha az operátorok időargumentumának sorrendje a fenti, akkor az állítás nyilvánvaló, hiszen T_τ akár el is hagyható és az időfüggő párosítás (2.63)

definíciója, továbbá a (2.62) egyenlet alapján a (2.64) nyilvánvalóan következik. Ha azonban az operátorok időargumentumai nincsenek nagyság szerint rendezve, akkor a (2.64) egyenlet mindkét oldalán nagyság szerint rendezhetjük őket. Ennek oka egyrészt, hogy az időrendező operátor mögött álló operátorok sorrendje egy $(-1)^P$ faktortól eltekintve mindegy, hiszen az időrendező operátor úgyszintén az időargumentumoknak megfelelő sorrendbe rakja és megszorozza $(-1)^P$ -vel, ahol P a fermion operátorok párcseréinek száma. Másrészt a nem egymás mellett álló operátorok párosítását úgy értelmeztük, hogy először párcserékkal egymás mellé visszük a párosítandó operátorokat, majd a kifejezést megszorozzuk $(-1)^P$ szorzóval, ahol P a felhasznált párcserék száma. A (2.64) egyenlet időargumentumok szerinti növekvő sorrendbe rendezése tehát mindkét oldal ugyanazon $(-1)^P$ -vel való megszorozásával ekvivalens, azaz az egyenlet azonos átalakítása.

Végül tekintsük téroperátorok időrendezett szorzatának várható értékét! Legyen $\hat{A}(\tau_A)$ és $\hat{B}(\tau_B)$ két téroperátor, azaz vagy $\hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}, s, \tau)$ vagy $\hat{\Psi}(\underline{r}', s', \tau')$. Értelmezzük két időfüggő téroperátor párosítottját az alábbi módon:

$$\overline{\hat{A}(\tau_A)\hat{B}(\tau_B)} := \left\langle T_\tau \left[\hat{A}(\tau_A)\hat{B}(\tau_B) \right] \right\rangle_0. \quad (2.65)$$

Mely a disztributivitáson keresztül összhangban van a téroperátorok (1.35) definíciójával és az időfüggő \hat{a} operátorokra bevezetett (2.63) párosítással. A (2.65) és a (2.11) definíciók alapján

$$\overline{\hat{\Psi}(\underline{r}, s, \tau)\hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', \tau')} = \pm \overline{\hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', \tau')\hat{\Psi}(\underline{r}, s, \tau)} = -\mathcal{G}_{(0)}(\underline{r}, s, \tau; \underline{r}', s', \tau'). \quad (2.66)$$

Két keltő illetve két eltüntető téroperátor párosítása zérus. A téroperátorok (1.35) definíciója és az \hat{a} operátorok időrendezett szorzatára vonatkozó (2.64) Wick-tétel segítségével téroperátorok időrendezett szorzatára is kimondhatjuk a Wick-tételt, amely az $\hat{A}(\tau_A), \hat{B}(\tau_B), \dots, \hat{Y}(\tau_Y), \hat{Z}(\tau_Z)$ páros számú téroperátor esetén a következő alakot ölti

$$\begin{aligned} \left\langle T_\tau \left[\hat{A}(\tau_A)\hat{B}(\tau_B) \dots \hat{Y}(\tau_Y)\hat{Z}(\tau_Z) \right] \right\rangle_0 &= \overline{\hat{A}(\tau_A)\hat{B}(\tau_B) \dots \hat{Y}(\tau_Y)\hat{Z}(\tau_Z)} + \\ &\quad \overline{\hat{A}(\tau_A)\hat{B}(\tau_B) \dots \hat{Y}(\tau_Y)\hat{Z}(\tau_Z)} + \overline{\hat{A}(\tau_A)\hat{B}(\tau_B) \dots \hat{Y}(\tau_Y)\hat{Z}(\tau_Z)} + \\ &\quad + \text{összes többi lehetséges teljes párosítás.} \end{aligned} \quad (2.67)$$

A (2.64) és (2.67) Wick-tétel segítségével az operátor párosításokra visszavezetve kiszámíthatjuk tetszőleges operátorszorzat szabad rendszer nagykanonikus sokaságára vett várható értékét, mint amilyen a (2.53) kifejezés nevezője és számlálója is. Példaként tekintsük az alábbi időrendezett szorzat

várhatóértékét [ahol $X_i = (x_i, \tau_i)$]:

$$\begin{aligned} \left\langle T_\tau \left[\hat{\Psi}(X_1) \hat{\Psi}(X_2) \hat{\Psi}^\dagger(X_3) \hat{\Psi}^\dagger(X_4) \right] \right\rangle_0 &= \\ &= \overbrace{\hat{\Psi}(X_1) \hat{\Psi}(X_2) \hat{\Psi}^\dagger(X_3) \hat{\Psi}^\dagger(X_4)} + \overbrace{\hat{\Psi}(X_1) \hat{\Psi}(X_2) \hat{\Psi}^\dagger(X_3) \hat{\Psi}^\dagger(X_4)} = \\ &= \mathcal{G}_{(0)}(X_2, X_3) \mathcal{G}_{(0)}(X_1, X_4) \pm \mathcal{G}_{(0)}(X_1, X_3) \mathcal{G}_{(0)}(X_2, X_4). \end{aligned} \quad (2.68)$$

2.7. Feynman-diagramok

A (2.53) perturbációs sort érdemesebb az idő és térváltozókban szimmetrikusabb alakra hozni. Ennek érdekében vezessük be az alábbi időfüggő kölcsönhatási potenciált:

$$v(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2) := V(x_1, x_2) \delta(\tau_1 - \tau_2), \quad (2.69)$$

és a kölcsönhatási operátor sűrűségét

$$\hat{k}_1(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2) := \frac{1}{2} \hat{\Psi}^\dagger(x_1, \tau_1) \hat{\Psi}^\dagger(x_2, \tau_2) v(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2) \hat{\Psi}(x_2, \tau_2) \hat{\Psi}(x_1, \tau_1), \quad (2.70)$$

melyből

$$\hat{K}_1 = \int dX_1 \int dX_2 \hat{k}_1(X_1, X_2). \quad (2.71)$$

Itt is használtuk az $X_i = (\underline{x}_i, s_i, \tau_i)$, és bevezettük az

$$\int dX_i \equiv \sum_{s_i} \int d^3 r_i \int_0^{\beta \hbar} d\tau_i \quad (2.72)$$

jelölést. Ekkor a (2.53) kifejezést az alábbi alakba írhatjuk:

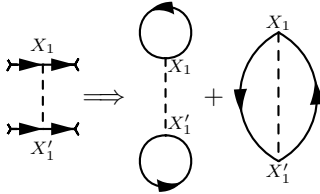
$$\begin{aligned} \mathcal{G}(X; X') &= \\ &= - \frac{\left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\hbar^{-1})^n}{n!} \left[\prod_{i=1}^n \int dX_i dX'_i \right] T_\tau \left\{ \left[\prod_{j=1}^n \hat{k}_1(X_j, X'_j) \right] \hat{\Psi}(X) \hat{\Psi}^\dagger(X') \right\} \right\rangle_0}{\left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\hbar^{-1})^n}{n!} \left[\prod_{i=1}^n \int dX_i dX'_i \right] T_\tau \left[\prod_{j=1}^n \hat{k}_1(X_j, X'_j) \right] \right\rangle_0}. \end{aligned} \quad (2.73)$$

A Green-függvény előállításának eljárása a következő. A (2.73) kifejezés számlálóját és nevezőjét is kifejtjük n szerint és minden rendben (minden n -re) elvégezzük a Wick-tétel segítségével az átlagok kiszámítását. A párosításokat a követhetőség érdekében érdemes grafikusán szemléltetni.

2.7.1. Gráfszabályok koordináta reprezentációban

A grafikus szemléltetés az alábbi módon történik. Tartozzon minden koordinátához (tér és idő együtt) egy pont. Minden pontban van egy téroperátor, amely vagy keltő vagy eltüntető. Ezek a téroperátorok kipárosítva alkotnak egy Green-függvényt. A Green-függvényt egy irányított vonallal szemléltjük, amely a kipárosított keltő operátortól az eltüntető operátorig húzódik. Azaz minden keltő operátorhoz $[\hat{\Psi}^\dagger(X)]$ rendeljünk egy olyan „fél vonalat” amely az X koordinátájú pontból indul, és minden eltüntető operátorhoz $[\hat{\Psi}(X')]$ szintén rendeljünk egy „fél vonalat”, amely az X' koordinátájú pontba érkezik. Kipárosításuk, amely a szabad Green-függvényt szolgáltatja, így annyiból áll, hogy a két fél vonalat összekötjük.

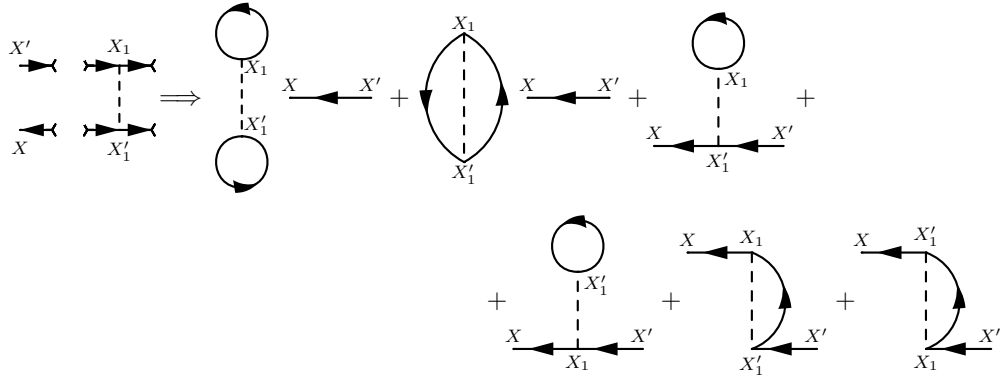
A (2.70) kölcsönhatási tagban két keltő és két eltüntető operátor van, de összesen csak két koordináta. Mindkét koordinátához tartozó pont olyan, amelybe egy fél vonal befut egy fél vonal pedig kifut belőle. Ez a két pont azonban nem független. Egyrészt időargumentumuk azonos, másrészt még a $v(X_1, X_2)$ kölcsönhatás összekapcsolja őket. Ezért a (2.70) kölcsönhatási taghoz rendeljünk egy olyan ábrát, ami tartalmaz két kimenő és két bejövő fél vonalat, két pontot, és a két pontot egy szagatott vonal összeköti, ami azt jelöli, hogy ezen két pont között értelmezzük a kölcsönhatást. Ezeket a pontokat nevezzük belső pontoknak. A (2.71) kifejezésnek megfelelően látjuk, hogy a belső pontokra integrálni kell.



2.2. ábra. A Green-függvény nevezőjének első rendű korrekciója Feynman-diagramokkal szemléltetve.

A (2.73) Green-függvény nevezője perturbációs sorának n -ed rendű járulékát úgy kapjuk tehát, hogy az n kölcsönhatási vonalhoz csatlakozó $4n$ irányított vonalat az összes lehetséges módon kipárosítjuk (összekötjük), figyelve arra, hogy a kipárosított fél vonalak irányítása egyező legyen (azaz keltő operátort csak eltüntetővel párosítunk). A kipárosított vonalakhoz egy $-\mathcal{G}_{(0)}$ szabad propagátor tartozik, míg a kölcsönhatást jelölő minden szagatott vonalhoz egy $v/2$ járulék. A nevezőben fellépő diagramok minden

pontja belső pont, ezek mindegyikére integrálunk. Hogy tényleg a (2.73) egyenlet nevezőjét kapjuk szükséges még az így kapott intergrálokat megszorozni $(-\hbar^{-1})^n/n!$ -sal. Fermionok esetén szintén figyelni kell arra, hogy a párosításoknál az operátorok egymás mellé viteléhez valahány párcserét kell végezni, és így a kifejezést meg kell szorozni $(-1)^F$ -el, ahol F a fermion operátorok párcseréinek száma. Ezt az F számot szintén leolvashatjuk közvetlenül a felrajzolt gráfról is. Belátható, hogy F éppen a diagramban



2.3. ábra. A kölcsönható Green-függvény számlálójának első rendű korrekciója Feynman-diagramokkal szemléltetve.

található zárt fermion hurkok száma. Ezen összefüggés belátását kicsit későbbre halasztjuk. Az eljárást a 2.2. ábrán szemléltetjük a nevező elsőrendű ($n = 1$) diagramjaival.

Az eljárás alapján ezen két diagram járuléka, vagyis az állapotösszeg első rendű korrekciója:

$$\begin{aligned} \frac{Z_G^{(1)}}{Z_G^{(0)}} = & -\frac{1}{2\hbar} \left\{ \int dX_1 dX'_1 [-\mathcal{G}_{(0)}(X_1; X_1)] [-\mathcal{G}_{(0)}(X'_1; X'_1)] v(X_1; X'_1) + \right. \\ & \left. + (\pm 1) \int dX_1 dX'_1 [-\mathcal{G}_{(0)}(X_1; X'_1)] [-\mathcal{G}_{(0)}(X'_1; X_1)] v(X_1; X'_1) \right\}. \quad (2.74) \end{aligned}$$

Az egyenlet második sorában megjelenő (± 1) szorzó azért lép fel, mivel a 2.2. ábra második diagramja egyetlen propagátorokból alkotott hurkot tartalmaz, ami fermionok esetén egy -1 szorzót eredményez (bozonok esetén pedig nincs ilyen faktor). A (2.74) első sorában nem jelent meg ez a tényező, mert a 2.2. első diagramja két propagátor hurkot tartalmaz ami bozonok és fermionok esetén is összesen $+1$ szorzótényezővel jár. Ellenőrzésképpen érdemes a (2.73) nevezője elsőrendű járulékanak közvetlenül a Wick-tételen alapuló diagramok nélküli számítását elvégezni, mely eredménye természetesen megegyezik a (2.74) kifejezéssel.

A (2.73) Green-függvény számlálójának perturbációs sorát hasonlóan készíthetjük. Azt kell először észrevenni, hogy a nevezőhöz képest a számláló tartalmaz még egy-egy extra keltő és eltüntető téroperátort, amelyeket szintén párosítani kell. Ezért n -ed rendben $4n + 2$ téroperátort (fél vonalat) kell kipársítani a nevezőnél ismertetett módon. A számlálóban fellépő két extra téroperátor koordinátájára azonban nem integrálunk. Az ezekhez tartozó két pontot külső pontoknak nevezzük. A fermion propagátorhurkok által be-

hozott $(-1)^F$ tényezőre itt is ügyelni kell! Illusztrációként tekintsük most a számláló első rendű ($n = 1$) járulékait. Az eljárással nyerhető diagramokat a 2.3. ábra szemlélteti. A diagramok járuléka, a (2.73) Green-függvény számlálójának első rendű korrekciója, ez alapján

$$\begin{aligned} \frac{Z_G}{Z_G^{(0)}} \mathcal{G}^{(1)}(X; X') &= \frac{1}{2\hbar} \int dX_1 dX'_1 \left[\mathcal{G}_{(0)}(X_1; X_1) \mathcal{G}_{(0)}(X'_1; X'_1) \mathcal{G}_{(0)}(X; X') \pm \right. \\ &\pm \mathcal{G}_{(0)}(X_1; X'_1) \mathcal{G}_{(0)}(X'_1; X_1) \mathcal{G}_{(0)}(X; X') \pm \mathcal{G}_{(0)}(X_1; X_1) \mathcal{G}_{(0)}(X; X'_1) \mathcal{G}_{(0)}(X'_1; X') \pm \\ &\pm \mathcal{G}_{(0)}(X'_1; X'_1) \mathcal{G}_{(0)}(X; X_1) \mathcal{G}_{(0)}(X_1; X') + \mathcal{G}_{(0)}(X; X_1) \mathcal{G}_{(0)}(X_1; X'_1) \mathcal{G}_{(0)}(X'_1; X') + \\ &\left. \mathcal{G}_{(0)}(X; X'_1) \mathcal{G}_{(0)}(X'_1; X_1) \mathcal{G}_{(0)}(X_1; X') \right] v(X_1; X'_1). \quad (2.75) \end{aligned}$$

Látjuk tehát, hogy a (2.73) perturbációs sor minden tagjához hozzá tudunk rendelni egy-egy Feynman-diagramot. Az ismertett eljárás segítségével a Feynman-diagramokból egyértelműen megkaphatjuk a perturbációs sort.

Érdemes észrevenni a 2.3. ábrán, hogy az első két diagram, a többtől eltérően két független komponensből áll. A perturbációs sor ezen diagramok által jelölt tagjai egyszerűen összeszorzódnak (nincs közös integrálási változójuk). Az ilyen tulajdonságú gráfokat széteső diagramoknak nevezik. Ezek alapján úgy értelmezzük két Feynman-diagram szorzatát, hogy egyszerűen egymás mellé rajzoljuk őket, hiszen ilyenkor nem lesz közös integrálási változójuk és a perturbációs sor általuk leírt tagjai éppen szorzatként jelenik meg a közös diagram által reprezentált kifejezésben. A 2.3. ábra többi Feynman-diagramját csatolt gráfnak nevezik. Azt is érdemes észrevenni, hogy a számláló széteső diagramjai mind olyanok, hogy az egyik komponens önmagában egy összefüggő számlálódiagram, a megmaradó többi komponens (első rendben ez csak egy, de magasabb rendben lehet több is) pedig éppen valamelyik nevező diagram. Mivel adott rendben az összes lehetséges párosítást le kell rajzolni, ezért ha kiszemelünk egy n -ed rendű (n kölcsönhatási vonalat tartalmazó) összefüggő számláló diagramot, akkor minden $m > n$ rendben fellépnek olyan széteső diagramok, amelyek tartalmazzák a kiszemelt n -ed rendű számlálódiagramot és szorzóként egy $m - n$ -ed rendű neveződiagramot. Ezekből a diagramokból a kiszemelt n -ed rendű összefüggő diagram kiemelhető és a megmaradó rész pedig éppen a teljes nevező lesz. Ha ezt a kiemelést a számláló összes csatolt diagramjával elvégezzük, akkor végül a nevezővel egyszerűsíthetünk. A Green-függvény perturbációs sorát tehát az alábbi alakra hozhatjuk:

$$\mathcal{G}(X; X') = \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\hbar^{-1})^n}{n!} \left[\prod_{i=1}^n \int dX_i dX'_i \right] \times \right.$$

$$\times T_\tau \left\{ \left[\prod_{j=1}^n \hat{k}_1(X_j, X'_j) \right] \hat{\Psi}(X) \hat{\Psi}^\dagger(X') \right\} \Bigg\rangle_{0,C}. \quad (2.76)$$

Ahol az átlag végére írt C betű azt jelenti, hogy csak csatolt gráfokat veszünk figyelembe. *Vagyis a (2.73) perurbációs sorban a számlálóból kiemelhető a teljes nevező, amellyel egyszerűsítve a kifejezésben csak csatolt diagramok maradnak. A további tárgyalás során tehát csak csatolt diagramokkal kell foglalkoznunk.*

Az összefüggő diagramok két fontos tulajdonságát kell még megbeszélni. A 2.3. ábra 4 összefüggő diagramjából csak kettő különbözik topológiailag. A másik kettőt ezekből a kölcsönhatás változóinak cseréjével kaphatjuk. Mivel a kölcsönhatásról feltételezzük, hogy szimmetrikus a változóiban és ezek a változók integrálási változók, ezért ezen topológiailag egyező gráfok járuléka megegyezik. Ha ezeket a gráfokat nem különböztetjük meg és mindig csak az egyiket rajzoljuk le, akkor a (2.70) kölcsönhatási tagban szereplő $1/2$ szorzót éppen kiejti, hogy ezeket a gráfokat járulékát kétszer kellene számolni. Az összefüggő gráfok másik tulajdonsága, amelyhez magasabb rendű diagramokat kell tekinteni, hogy n -ed rendben (azaz n kölcsönhatási vonal esetén) még $n!$ darab egyező járuléku diagramunk van, hiszen adott topológiájú diagramot az n kölcsönhatási vonallal éppen $n!$ féleképpen párosíthatunk ki (amennyiben a végpontok cseréjét már adottnak tételezzük fel). Ha ezeket a topológiailag egyező gráfokat is csak egyszer vesszük figyelembe, akkor az $n!$ szorzó éppen kiejti a (2.76) kifejezésben szereplő $1/n!$ tényezőt.

Végezetül lássuk be a diagram járulékának előjeléről mondottakat! Először lássuk be azt, hogy a hurkot nem tartalmazó gráfok járulékát sosem kell megszorozni (-1) -el! Hurkot egyáltalán nem tartalmazó gráf csak a (2.73) kifejezés számlálójának valamelyik tagját reprezentálhatja. És ez a tag is csak csatolt lehet. A számláló n -ed rendű tagjában az operátorok teljes előjelcsere nélkül átrendezhetők az alábbi alakra (hiszen ehhez minden n -re páros számú párcserét kell végezni):

$$\begin{aligned} & \left\langle T_\tau [k_1(X_1, X'_1) \dots k_1(X_n, X'_n) \hat{\Psi}(X) \hat{\Psi}^\dagger(X')] \right\rangle_0 \sim \\ & \sim \left\langle T_\tau [\hat{\Psi}^\dagger(X_1) \hat{\Psi}(X_1) \hat{\Psi}^\dagger(X'_1) \hat{\Psi}(X'_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(X_n) \hat{\Psi}(X_n) \hat{\Psi}^\dagger(X'_n) \hat{\Psi}(X'_n) \hat{\Psi}(X) \hat{\Psi}^\dagger(X')] \right\rangle_0 = \\ & = \left\langle T_\tau [\hat{\Psi}(X) \hat{\Psi}^\dagger(X_1) \hat{\Psi}(X_1) \hat{\Psi}^\dagger(X'_1) \hat{\Psi}(X'_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(X_n) \hat{\Psi}(X_n) \hat{\Psi}^\dagger(X'_n) \hat{\Psi}(X'_n) \hat{\Psi}^\dagger(X')] \right\rangle_0. \end{aligned} \quad (2.77)$$

A (2.77) kifejezésben csak a téroperátorokra koncentráltunk. Egyenlőséghez a második és a harmadik sorokban álló kifejezést meg kell még szorozni $v(X_1, X'_1) \dots v(X_n, X'_n)$ -vel. Az n -ed rendű csatolt, hurok nélküli diagramból származó természetes párosítás pedig mindig az alábbi alakú (leszámítva az

integrálási változók tetszőleges cseréjét, ami azonban nem okoz előjelváltást):

$$\overbrace{\hat{\Psi}(X)\hat{\Psi}^\dagger(X_1)}\overbrace{\hat{\Psi}(X_1)\hat{\Psi}^\dagger(X'_1)}\overbrace{\hat{\Psi}(X'_1)\hat{\Psi}^\dagger(X_1)}\overbrace{\hat{\Psi}(X_1)\hat{\Psi}^\dagger(X'_1)}\dots\overbrace{\hat{\Psi}^\dagger(X_n)\hat{\Psi}(X_n)}\overbrace{\hat{\Psi}(X_n)\hat{\Psi}^\dagger(X'_n)}\overbrace{\hat{\Psi}(X'_n)\hat{\Psi}^\dagger(X_n)}\overbrace{\hat{\Psi}(X'_n)\hat{\Psi}^\dagger(X')}, \quad (2.78)$$

melyben az operátorok sorrendje megegyezik a (2.77) utolsó sorában lévővel, tehát a diagram járuléka nem kap -1 szorzót. Tekintsük a fermion hurkot tartalmazó diagramok esetét. Minden hurkot kezelhetünk külön a párosítások előjele szempontjából. Könnyen meggondolható, hogy a hurok minden pontja belső pont, vagyis kölcsönhatásból származik. Ezért a (2.73) kifejezésben fellépő hozzá tartozó párosítás mindig páros számú párcserével az alábbi alakra hozható

$$\overbrace{\hat{\Psi}^\dagger(X_1)\hat{\Psi}(X_1)\hat{\Psi}^\dagger(X_2)\hat{\Psi}(X_2)\hat{\Psi}^\dagger(X_3)\dots\hat{\Psi}^\dagger(X_r)\hat{\Psi}(X_r)} \quad (2.79)$$

Ahhoz hogy a párosítások mindegyike $-\mathcal{G}_{(0)}$ legyen még az utolsó operátort át kell vinni a legelső helyre, ami $2r-1$ párcserét jelent. Tehát minden hurok járulékát meg kell szorozni -1 -el.

Összefoglalásként álljon itt egy gyűjtemény a Green-függvény perturbációs sorának Feynman-diagramokon alapuló számítási módjáról.

A Green-függvény meghatározására vonatkozó gráfszabályok koordináta reprezentációban (n -ed rendben):

1. Rajzoljunk le minden n kölcsönhatási vonalat tartalmazó, topológiailag különböző, két külső ponttal rendelkező, csatolt gráfot!
2. Osszuk ki a $2n$ belső pont (integrálási változók) koordinátáját!
3. Az X_i pontból induló és X_j pontba érkező vonal járuléka $-\mathcal{G}_{(0)}(X_j, X_i)$.
4. Az X_i és X'_i belső pontokat összekötő kölcsönhatási vonal járuléka $-(\hbar)^{-1}v(X_i; X'_i)$.
5. Integráljunk minden X_i belső pontra!
6. A gráf járulékát szorozzuk meg $(-1)^F$ -el, ahol F a gráfban található fermion hurkok száma!

2.7.2. Gráfszabályok Matsubara-frekvenciákkal

Szinte mindig érdemes áttérni az időváltozóval történő számolás helyett Matsubara-reprezentációra. Felhasználva a δ -függvény alábbi előállítását:

$$\delta(\tau_1 - \tau_2) = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n e^{-i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)}, \text{ ahol } \omega_n = \frac{2n\pi}{\beta\hbar}, \quad (2.80)$$

a (2.69) kölcsönhatásra

$$v(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2) = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n V(x_1, x_2) e^{-i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)} \quad (2.81)$$

adódik. A Green-függvény Matsubara-reprezentációja a (2.15a) egyenlet alapján:

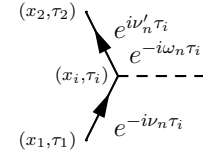
$$\mathcal{G}(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2) = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n \mathcal{G}(x_1, x_2; i\omega_n) e^{-i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)}, \quad (2.82)$$

mely a $\mathcal{G}_{(0)}$ perturbálatlan Green-függvényre is fenn áll. A kölcsönhatás és a szabad Green-függvény ezen reprezentációja felhasználásával belátható a következő fontos állítás.

Állítás: A diszkrét frekvencia minden belső pontban (más nevén kölcsönhatási vertexben) megmarad.

Bizonyítás: Legyen (x_i, τ_i) a vizsgált belső pont. Tekintsük a 2.4. ábrát. A (2.15a) kifejezésből látható, hogy az X_1 és X_i pont között futó propagátor τ_i függése adott ν_n Matsubara-frekvencia esetén $\exp(-i\nu_n\tau_i)$. Hasonlóan az X_i és X_2 pontok között futó propagátor τ_i függése ν'_n Matsubara-frekvencia mellett $\exp(i\nu'_n\tau_i)$. A (2.81) kétrészecske kölcsönhatás τ_i függése $i\omega_n$ Matsubara-frekvencia mellett $\exp(-i\omega_n\tau_i)$ (ha a kölcsönhatás első végpontját választjuk X_i -nek). Mivel más helyen nem lép fel a τ_i változó, így a rá vonatkozó integrált elvégezhetjük:

$$\int_0^{\beta\hbar} d\tau_i e^{-i(\omega_n + \nu_n - \nu'_n)\tau_i} = \beta\hbar \delta_{\omega_n + \nu_n, \nu'_n}. \quad (2.83)$$



2.4. ábra. A diszkrét frekvencia megmaradása a kölcsönhatási vertexben.

Vagyis a vertexbe befutó frekvenciák összege zérus. Két fontos megjegyzés kívánczik ide. Függetlenül attól, hogy fermionokat vagy bozonokat írunk le, a kölcsönhatásnál fellépő Matsubara-frekvencia mindig a bozonokra jellemző $2n\pi/\beta\hbar$. Ez természetesen összhangban van azzal is, hogy fermionok esetén a két ν_n és ν'_n „páratlan” n -ű frekvenciák különbsége páros. A másik fontos észrevétel, hogy a kölcsönhatási vonal τ függésének felvételekor önkényesen választottuk ki, hogy a (2.81) kifejezés τ_1 vagy τ_2 változója legyen τ_i . Ezt megtehetjük, de figyelni kell rá, hogy a kölcsönhatási vonal másik vertexében ilyenkor a másik τ -t válasszuk. Ezt a legegyszerűbben úgy érhetjük el, hogy a kölcsönhatási vonalat, ami eredetileg nem irányított, a frekvenciák kiosztásakor irányítjuk, amely kijelöli, hogy melyik vertexből melyik vertexbe fut be a frekvencia (és így azt is, hogy melyik vertexbe melyik τ -t vettük föl).

Ilyen módon minden belső pontban elvégezhetjük az idő szerinti integrálást. Ennek az ára, hogy minden részecske és kölcsönhatási vonalnál megjelenik egy-egy új frekvencia, amire mind összegezni kell. Egy n -ed rendű diagramban van n kölcsönhatási vonal és a $4n + 2$ párosítandó operátor miatt $2n + 1$ részecske vonal. Tehát megjelenik $3n + 1$ diszkrét frekvencia. A teljes diagramba befutó és onnan kifutó vonal frekvenciája természetesen meg kell egyezzen, hiszen a (2.82) egyenlet értelmében a teljes Green-függvényhez is egyetlen Matsubara-frekvencia tartozik. Erre a frekvenciára nem hajtunk végre összegezést. Tehát összesen $3n - 1$ frekvenciaösszegzést kell elvégezni. A diszkrét frekvenciák megmaradása miatt azonban van $2n$ számú δ -függvényünk, amelyből egyet már „fölhasználtunk” arra, hogy a bejövő és kimenő frekvenciák megegyezzenek. Így összesen $2n - 1$ számú δ -függvény marad. Ezek felhasználásával a frekvenciaösszegek száma összesen n -re csökken. Összefoglalásképpen megadjuk a gráfszabályokat Matsubara-reprezentáció esetére.

A Green-függvény meghatározására vonatkozó gráfszabályok koordináta reprezentációban Matsubara-frekvenciákkal (n -ed rendben):

1. Rajzoljunk le minden n kölcsönhatási vonalat tartalmazó, topológiailag különböző, két külső ponttal rendelkező, csatolt gráfot!
2. Irányítsuk az összes kölcsönhatási vonalat és osszuk ki a diszkrét frekvenciamegmaradás figyelembe vételével az n különböző frekvencia változót!
3. Az x_i pontból induló és x_j pontba érkező $i\nu_n$ frekvenciájú vonal járuléka (2.26) alapján: $-\mathcal{G}_{(0)}(x_j, x_i; i\nu_n) = -\sum_k \frac{\varphi_k(x_j)\varphi_k^*(x_i)}{i\nu_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)}$.
4. Az x_i és x'_i belső pontokat összekötő $i\omega_n$ frekvenciájú kölcsönhatási vonal járuléka $-(\hbar)^{-1}V(x_i; x'_i)$.
5. Azon $\mathcal{G}_{(0)}(x_i, x_j; i\nu_n)$ szabad Green-függvények járulékát, amelyek önmagukba záródnak, vagy amelyek két végét egy kölcsönhatási vonal köti össze szorozzuk meg egy $e^{i\nu_n\eta}$ konvergencia faktorról! (Ennek belátása a következő paragrafusban található.)
6. Integráljunk minden x_i belső pontra $(\int dx_i \equiv \sum_{s_i} \int d^3r_i)$ és összegezzünk az n független frekvenciára $(\frac{1}{\beta\hbar} \sum_{i\nu_n})!$
7. A gráf járulékát szorozzuk meg $(-1)^F$ -el, ahol F a gráfban található fermion hurkok száma!

2.7.3. Egy propagátort tartalmazó frekvenciaösszegek elvégzése

Feynman-diagramok járulékainak számításakor igen gyakran van dolgunk egy propagátort tartalmazó frekvenciaösszegek elvégzésével. Nemcsak azért, mert ez gyakran fordul elő, hanem azért is, mert a több propagátort tartalmazó frekvenciaösszegek számolása gyakran visszavezethető erre az esetre.

Az egy propagátort tartalmazó frekvenciaösszeg

$$\sum_n \mathcal{G}_{(0)}(x_i, x_j; i\nu_n) \quad (2.84)$$

kiszámításához (2.26) alapján először meg kell határoznunk a

$$\sum_n \frac{1}{i\nu_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)} \quad (2.85)$$

összeget. Ez az összeg azonban sem bozonok sem fermionok esetén nem konvergens, azonban a

$$\sum_n \frac{e^{i\nu_n \eta}}{i\nu_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)}, \quad (\eta \rightarrow 0^+) \quad (2.86)$$

összeg már igen. Az összeget kontúrintegrálás segítségével végezzük el, külön-külön bozonokra és fermionokra.

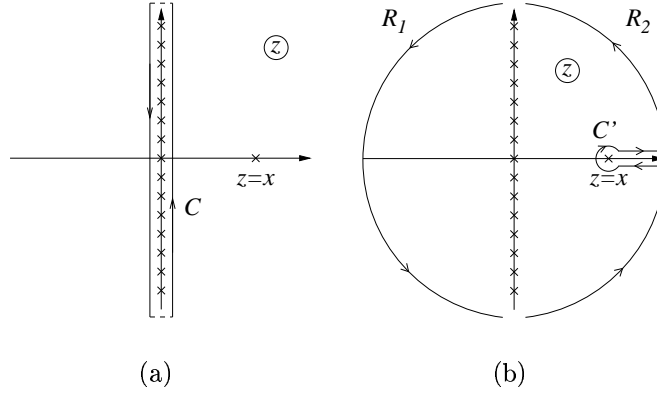
Bozonok esetén az összegben fellépő frekvenciák a $\nu_n = 2n\pi/\beta\hbar$ Bose–Matsubara-frekvenciák. A

$$\frac{\beta\hbar}{e^{\beta\hbar z} - 1} \quad (2.87)$$

meromorf függvény pólusai az $i2n\pi/\beta\hbar$ (n tetszőleges egész) helyeken vannak. Ezek mind elsőrendű pólusok és a függvény reziduuma minden pólusra 1. A (2.86) frekvenciaösszeget bozonok esetén ezért az alábbi integrállal állíthatjuk elő

$$\sum_n \frac{e^{i\nu_n \eta}}{i\nu_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{e^{z\eta}}{z - x} \frac{\beta\hbar}{e^{\beta\hbar z} - 1} dz, \quad (2.88)$$

ahol $x = \hbar^{-1}(e_k - \mu)$. A kontúrintegrál a 2.5(a). ábrán szemléltetett, az imaginárius tengelyt körülfogó C kontúrra történik. A kontúrt a végtelenben szétvághatjuk és átdeformálhatjuk az R_1 , R_2 és C' kontúrokra. Az integrandus járuléka az $e^{\eta z}$ konvergencia faktornak köszönhetően eltűnik az R_1 , az



2.5. ábra. A frekvenciaösszeg elvégzéséhez.

$1/[e^{\beta\hbar z} - 1]$ faktor miatt pedig az R_2 végtelen sugarú körökön. A (2.88) frekvenciaösszeget bozonok esetén végül is az alábbi integrálra egyszerűsíthetjük:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{C'} \frac{e^{z\eta}}{z-x} \frac{\beta\hbar}{e^{\beta\hbar z} - 1} dz, \quad (2.89)$$

amit már könnyen elvégezhetünk. Az integrandusnak egyetlen pólusa van a C' kontúr belsejében, így az integrál teljes járuléka, ami egyben a (2.86) frekvenciaösszeg eredménye bozonok esetére

$$\sum_n \frac{e^{i\nu_n \eta}}{i\nu_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)} = -\frac{\beta\hbar}{e^{\beta(e_k - \mu)} - 1} e^{(e_k - \mu)\hbar^{-1}\eta} \longrightarrow -\frac{\beta\hbar}{e^{\beta(e_k - \mu)} - 1}. \quad (2.90)$$

A $-$ előjel a C' görbe ellentétes irányítása miatt került be.

Fermionok esetén a (2.86) frekvenciaösszegben $\nu_n = (2n + 1)\pi/\beta\hbar$ (n egész) értékeket vesz fel. A megfelelő 1 reziduumú meromorf függvény

$$\frac{-\beta\hbar}{e^{\beta\hbar z} + 1}. \quad (2.91)$$

A (2.86) frekvenciaösszeget így az alábbi kontúrintegrál állítja elő:

$$\sum_n \frac{e^{i\nu_n \eta}}{i\nu_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{e^{z\eta}}{z-x} \frac{-\beta\hbar}{e^{\beta\hbar z} + 1} dz. \quad (2.92)$$

Az eljárás innen kezdve hasonló. A képzetes tengelyen lévő pólusok helyzete eltolódik, de a C kontúr marad változatlan. A bozonok esetéhez hasonlóan a C kontúrt a végtelenben kettévágjuk és átdeformáljuk a 2.5(b). ábrának

megfelelően. Az integrál járuléka a végtelen félörökön most is zérus, és csak a negatív irányítású C' körre kell elvégezni az integrált. A frekvenciaösszeg eredményéül fermionokra

$$\sum_n \frac{e^{i\nu_n \eta}}{i\nu_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)} = \frac{\beta \hbar}{e^{\beta(e_k - \mu)} + 1} e^{(e_k - \mu)\hbar^{-1}\eta} \longrightarrow \frac{\beta \hbar}{e^{\beta(e_k - \mu)} + 1} \quad (2.93)$$

adódik.

Összefoglalva: a (2.86) frekvenciaösszegre bozonok illetve fermionok esetén a

$$\sum_n \frac{e^{i\nu_n \eta}}{i\nu_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)} = \mp \frac{\beta \hbar}{e^{\beta(e_k - \mu)} \mp 1}. \quad (2.94)$$

összefüggés adódik.

2.7.4. Gráfszabályok homogén rendszerre

Az 1.5. paragrafus 3. példájának megoldása során meghatároztuk a spinfüggetlen párpotenciállal kölcsönható homogén rendszer Hamilton-operátorát. A továbbiakban kizárólag ilyen rendszerekkel foglalkozunk. Ezen rendszerek tárgyalását érdemes impulzus és frekvenciareprezentációban végezni. Periodikus határfeltételt alkalmazunk, és az egyrészecke állapotok teljes rendszerének a

$$\varphi_{\underline{k}, m_s}(\underline{r}, s) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi_{m_s}(s) \quad (2.95)$$

hullámfüggvényeket választjuk, ahol $\chi_{m_s}(s) = \delta_{m_s, s}$, és V a rendszer teljes térfogata. A (2.26) szabad Green-függvény ezek felhasználásával

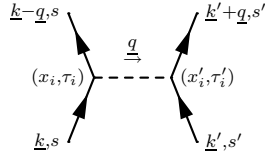
$$\mathcal{G}_{(0)}(\underline{r}_1, s_1, \underline{r}_2, s_2; i\omega_n) = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \frac{\delta_{s_1, s_2}}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu)} e^{i\mathbf{k}(\underline{r}_1 - \underline{r}_2)}. \quad (2.96)$$

A (2.15a) összefüggés felhasználásával érdemes a τ függő szabad Green-függvényt az alábbi alakra hozni:

$$\mathcal{G}_{(0)}(\underline{r}_1, s_1, \tau_1; \underline{r}_2, s_2, \tau_2) = \delta_{s_1, s_2} \frac{1}{\beta \hbar} \sum_n \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) e^{i\mathbf{k}(\underline{r}_1 - \underline{r}_2) - i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)}, \quad (2.97)$$

ahol bevezettük a szabad Green-függvény

$$\mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) := \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu)} \quad (2.98)$$



2.6. ábra. Az impulzus megmaradásához.

impulzus reprezentációját. Az (1.80) kifejezésből könnyen megkonstruálható a rendszerünk nagykanonikus Hamilton-operátora impulzus reprezentációban, amely a következő alakot ölti:

$$\hat{K} = \hat{K}_0 + \hat{K}_1, \quad (2.99a)$$

$$\hat{K}_0 = \sum_{\underline{k}, s} (e_{\underline{k}} - \mu) \hat{a}_{\underline{k}, s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}, s} \quad (2.99b)$$

$$\hat{K}_1 = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\underline{k}, \underline{k}', q \\ s, s'}} v(\underline{q}) \hat{a}_{\underline{k}-\underline{q}, s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}'+\underline{q}, s'}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}', s'} \hat{a}_{\underline{k}, s}, \quad (2.99c)$$

ahol

$$v(\underline{q}) = \int d^3r v(\underline{r}) e^{-i\underline{q}\underline{r}} \quad (2.99d)$$

a kétrészecske kölcsönhatási potenciál Fourier-transzformáltja. A (2.99c) kifejezésből és a 2.6. ábrából látszik, hogy a kölcsönhatási vertexekben a hullámszám (impulzus) is megmarad. Érdeemes észrevenni, hogy a (2.97) szabad Green-függvény diagonális a spinváltozóban (az egységmátrix számszorosa). Mivel a kölcsönhatás is spinfüggetlen, ezért a kölcsönható Green-függvény spin szerkezete is ilyen marad. A kölcsönható Green-függvényt alakja tehát:

$$\mathcal{G}(\underline{r}_1, s_1, \tau_1; \underline{r}_2, s_2, \tau_2) = \delta_{s_1, s_2} \frac{1}{\beta \hbar} \sum_n \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \mathcal{G}(\underline{k}, i\omega_n) e^{i\underline{k}(\underline{r}_1 - \underline{r}_2) - i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)}, \quad (2.100)$$

ahol $\mathcal{G}(\underline{k}, i\omega_n)$ a kölcsönható Green-függvény alakja impulzus-reprezentációban. A spinváltozók jelölését ezért a továbbiakban elhagyjuk. Annyit kell azonban észrevenni, hogy a minden propagátorhurokban marad egy spinösszegzés, aminek eredményeként az L propagátorhurkot tartalmazó Feynman-diagramok járulékát meg kell szorozni $[\pm(2s+1)]^L$ -el. Ebbe a kifejezésbe már a fermionhurok -1 szorzófaktorát is beolvasztottuk. Összefoglalásképpen megadjuk a gráfszabályokat impulzus reprezentációban is.

A Green-függvény meghatározására vonatkozó gráfszabályok impulzus reprezentációban (n -ed rendben):

1. Rajzoljunk le minden n kölcsönhatási vonalat tartalmazó, topológiailag különböző, két külső ponttal rendelkező, csatolt gráfot!
2. Irányítsuk az összes kölcsönhatási vonalat és osszuk ki a diszkrét frekvenciamegmaradás figyelembe vételével az n különböző frekvencia változót és az impulzusmegmaradás figyelembe vételével az n különböző impulzus változót!
3. A \underline{k} impulzusú és, $i\nu_n$ diszkrét Matsubara-frekvenciájú vonal járuléka $-\mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\nu_n) = -\frac{1}{i\nu_n - \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu)}$.
4. A \underline{q} impulzusú és $i\omega_n$ Matsubara-frekvenciájú kölcsönhatási vonal járuléka $-(\hbar)^{-1}v(\underline{q})$.
5. Azon $\mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}; i\nu_n)$ szabad Green-függvények járulékát, amelyek önmagukba záródnak, vagy amelyek két végét egy kölcsönhatási vonal köti össze szorozzuk meg egy $e^{i\nu_n\eta}$ konvergencia faktorrall!
6. Összegezzünk az n független frekvenciára $(\frac{1}{\beta\hbar} \sum_{i\nu_n})$ és az n független impulzusra $(\frac{1}{V} \sum_{\underline{q}})!$
7. A gráf járulékát szorozzuk meg $[\pm(2s+1)]^L$ -el, ahol L a gráfban található propagátor hurkok száma!

Általában termodinamikai határesetet vizsgálunk. Ilyenkor az impulzuskvantumszámok besűrűsödnek; az impulzusra vett összegzés integrállá megy át.

$$\frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \rightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \quad (2.101)$$

Illusztrációként nézzük meg a homogén rendszer kölcsönható Green-függvényének első rendű korrekcióját a megismert szabályok segítségével. Ezt a közelítést szokták Hartree–Fock-közelítésnek is nevezni. A kölcsönható Green-függvény első rendig terjedő előállítása a 2.7. ábrán látható. Az ábrán és a továbbiakban a *vastag irányított vonal* a kölcsönható Green-függvény -1 szeresét jelöli. A gráfszabályok segítségével a kölcsönható rendszer Green-függvényére első rendben az alábbi kifejezés adódik:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{(\text{HF})}(\underline{k}, i\omega_n) &= \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) - \left[\mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) \right]^2 \times \\ &\times \frac{1}{\beta\hbar^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[v(\underline{q} - \underline{k}) \pm (2s+1)v(0) \right] \sum_m \mathcal{G}_{(0)}(\underline{q}, i\nu_m) e^{i\nu_m\eta}. \end{aligned} \quad (2.102)$$

A (2.94) frekvenciaösszeg felhasználásával végül is a

$$\mathcal{G}_{(\text{HF})}(\underline{k}, i\omega_n) = \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) + \left[\mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) \right]^2 \times \\ \times \frac{1}{\hbar} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{(2s+1)v(0) \pm v(\underline{q} - \underline{k})}{e^{\beta(e_{\underline{q}} - \mu)} \mp 1}. \quad (2.103)$$

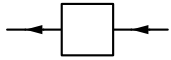
kifejezéshez jutunk.

2.8. Dyson-egyenlet

A bevezetett Feynman-diagramos technika egy nagy előnyét illusztrálja, a kulcsfontosságú Dyson-egyenlet gráfszabályokon alapuló származtatása.

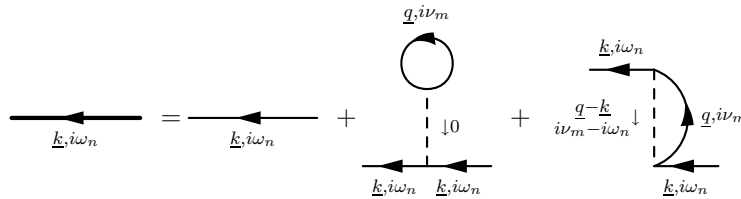
Azokat a Feynman-diagramokat, amelyek nem esnek két részre egy részecskevonal elvágásával, egyrészecske irreducibilis (vagy röviden irreducibilis) diagramoknak nevezzük. A 2.7. ábra mindkét elsőrendű diagramja ilyen tulajdonságú. A 2.8. ábra (a) diagramja szintén irreducibilis, azonban a (b) diagram már nem az, a középső propagátor kivételével a gráf két, nem összefüggő komponensre bomlik. Az ilyen diagramokat reducibilis diagramoknak nevezik.

Jelöljük az *összes* egy bemenő és egy kimenő vonallal rendelkező irreducibilis Feynman-diagram összegét a 2.9. ábrának megfelelő dobozzal. A doboz járulékát pedig $-\Sigma \mathcal{G}_{(0)}^2$ -el. Pontosabban megfogalmazva jelölje $-\Sigma(\underline{k}, i\omega_n) [\mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n)]^2$ az összes olyan irreducibilis diagram járulékát, amibe egy $\mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n)$ szabad propagátor fut be, és amiből szintén egy $\mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n)$ szabad propagátor fut ki. Azaz $\Sigma(\underline{k}, i\omega_n)$ -be (az egyszerűbb kezelhetőség érdekében) nem értjük bele a befutó és kifutó vonalak járulékát, hiszen ezek úgyis mindig csak szorzóként jelennek meg [v.ö. a (2.103) kifejezés második tagjával].

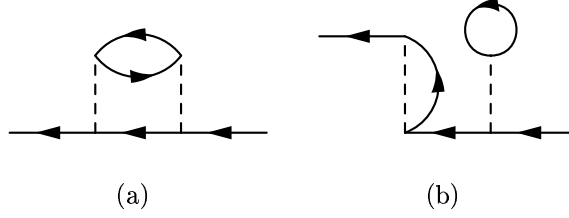


2.9. ábra.

Az újonnan bevezetett blokk segítségével a kölcsönható rendszer teljes Green-függvényét a 2.10 ábrának megfelelően állíthatjuk elő. A felső ábrán



2.7. ábra. A kölcsönható Green-függvény Hartree–Fock-közelítésben.



2.8. ábra. Irreducibilis (a), és reducibilis (b) diagram.

vázolt egyenletet az alábbi módon kell olvasni. A Green-függvény egyrészt tartalmazza a szabad propagátort, másrészt minden olyan diagram járulékát, amiből nem tudunk egy szabad propagátort elvenni, úgy, hogy a gráf két részre essék. A teljes Green-függvény tartalmazza még az összes olyan gráf járulékát is, amelyből csak egy helyről tudunk kivenni egy szabad propagátort úgy, hogy a gráf két részre essék, illetve az összes olyanét is, amiből pontosan két helyről lehet elvenni egy szabad propagátort, úgy, hogy bármelyik elvételével a gráf két részre essen szét. És így tovább. Ez az egyenlet a Green-függvény perturbációs sorának egy lehetséges átrendezése. Az alsó ábra azt szemlélteti, hogy a felső ábra minden dobozt tartalmazó diagramjából egy vonalat és egy doboz szorzatát kiemelve a megmaradó rész ismét (a felső ábrának megfelelően) a teljes propagátor. A felső ábrának megfelelő egyenlet:

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_{(0)} + \mathcal{G}_{(0)}\Sigma\mathcal{G}_{(0)} + \mathcal{G}_{(0)}\Sigma\mathcal{G}_{(0)}\Sigma\mathcal{G}_{(0)} + \mathcal{G}_{(0)}\Sigma\mathcal{G}_{(0)}\Sigma\mathcal{G}_{(0)}\Sigma\mathcal{G}_{(0)} + \dots, \quad (2.104)$$

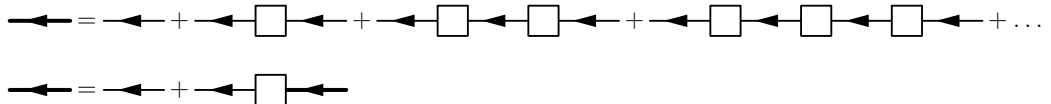
melyből a Dyson-egyenlet

$$\mathcal{G}(\underline{k}, i\omega_n) = \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) + \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n)\Sigma(\underline{k}, i\omega_n)\mathcal{G}(\underline{k}, i\omega_n). \quad (2.105)$$

Felhasználva a szabad Green-függvény (2.98) alakját, a teljes propagátorra

$$\mathcal{G}(\underline{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu) - \Sigma(\underline{k}, i\omega_n)} \quad (2.106)$$

adódik. A (2.106) egyenlet értelmében Σ -t *sajátenergiának* nevezik. Annyit most is látunk, hogy $\hbar\Sigma(\underline{k}, i\omega_n)$ a szabad részecske $e_{\underline{k}}$ kinetikus energiájához



2.10. ábra. A Dyson-egyenlet grafikus szemléltetése

adódik, később azonban a kvázirészecskék tárgyalásakor az elnevezés mélyebb értelmét is látni fogjuk.

Végezetül nézzük meg, hogy a Green-függvény a (2.100) impulzus reprezentációja segítségével hogyan tudjuk kifejezni a (2.28), a (2.32) és a (2.39) termodinamikai mennyiségeket! Egyszerű behelyettesítés és a szükséges deriválások, integrálás és spinösszegzés elvégzése után az alábbi kifejezéseket kapjuk:

$$N = \mp(2s+1) \frac{V}{\beta\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_n \mathcal{G}(\underline{k}, i\omega_n) e^{i\omega_n\eta}, \quad (2.107a)$$

$$E = \mp(2s+1) \frac{V}{\beta\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_n \frac{1}{2} (i\hbar\omega_n + e_{\underline{k}} + \mu) \mathcal{G}(\underline{k}, i\omega_n) e^{i\omega_n\eta}, \quad (2.107b)$$

$$\Omega = \Omega_0 \mp (2s+1) \frac{V}{\beta\hbar} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_n \frac{1}{2} (i\hbar\omega_n - e_{\underline{k}} + \mu) \mathcal{G}^{(\lambda)}(\underline{k}, i\omega_n) e^{i\omega_n\eta}. \quad (2.107c)$$

Felhasználva még a kölcsönható Green-függvény (2.106) alakját, továbbá hogy $\sum_n e^{i\omega_n\eta} = 0$ — melyet a 2.7.3 paragrafusban elvégzett számításhoz hasonlóan ellenőrizhetünk —, a rendszer teljes energiájának és nagykanonikus termodinamikai potenciáljának várható értékére az alábbi összefüggések származtathatók. Az energia várható értéke

$$E(T, V, \mu) = \mp(2s+1) \frac{V}{\beta\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_n \left[e_{\underline{k}} + \frac{\hbar}{2} \Sigma(\underline{k}, i\omega_n) \right] \mathcal{G}(\underline{k}, i\omega_n) e^{i\omega_n\eta}, \quad (2.108)$$

a nagykanonikus termodinamikai potenciál pedig

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0(T, V, \mu) \mp (2s+1) \frac{V}{\beta\hbar} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_n \frac{\hbar}{2} \Sigma^{(\lambda)}(\underline{k}, i\omega_n) \mathcal{G}^{(\lambda)}(\underline{k}, i\omega_n) e^{i\omega_n\eta}. \quad (2.109)$$

3. fejezet

Kölcsönható elektrongáz

Ebben a fejezetben a kölcsönható elektrongáz példáján tekintjük át az eddig megbeszélteket. Fémek termikus és transzporttulajdonságainak leírása céljából Drude 1900-ban javasolta, az azóta róla elnevezett modellt. A modell ideális és klasszikus elektrongázt tételez föl. Ez a nagymértékben egyszerűsített leírás a fémek számos tulajdonságát kvantitatíven is sikeresen magyarázza. Mérföldkövet jelentett a fejlődésben Sommerfeld 1928-ban bevezetett modellje, melyben az elektronokat már a Fermi–Dirac-statisztika szerint tárgyalta (de még mindig ideális gázként). Joggal merült föl a kérdés, hogy hogyan adhat a tapasztalattal ennyire jó egyezést két olyan modell, melyek az elektronok — viszonylag erős, hosszú hatótávolságú — kölcsönhatását elhanyagolják. A kérdést a soktestprobléma válaszolta meg azzal, hogy az elektronok korrelációja leárnyékolja a hosszú hatótávolságú kölcsönhatást. Ezt igyekszünk áttekinteni a következőkben.

3.1. A zselémodell

A vizsgált modellben a Coulomb-taszítással kölcsönható elektronok a fémek homogén (elkent) pozitív háttérben mozognak. A pozitív háttérre a töltésemlegesség miatt van szükségünk. Ennek hiányában az elektronok a fém felületén halmozódnaak föl. A vizsgált modellben tehát figyelembe vesszük az elektronok mozgási energiáját, az elektronrendszer kölcsönhatását, az elektronok kölcsönhatását a pozitív háttérrel és a pozitív háttér önkölcsönhatását. Az elektronok koordinátáját \underline{r}_i -vel, impulzusát $\hat{\underline{p}}_i$ -vel jelölve, a modell Hamilton-operátora az alábbi alakban írható föl:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\underline{p}}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N v(\underline{r}_i - \underline{r}_j) - n \sum_{i=1}^N \int d^3r v(\underline{r} - \underline{r}_i) + \frac{n^2}{2} \int d^3r d^3r' v(\underline{r} - \underline{r}'), \quad (3.1)$$

ahol m az elektron tömege, $n = N/V$ a homogén pozitív háttér sűrűsége (ami megegyezik az elektronok sűrűségével), $v(\underline{r})$ pedig a két elemi töltés között fellépő Coulomb-kölcsönhatás potenciálja:

$$v(\underline{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \equiv \frac{e_0^2}{r}. \quad (3.2)$$

Első lépésként határozzuk meg a (3.1) Hamilton-operátor alakját betöltési szám reprezentációban! Mivel a rendszer homogén, ezért érdemes síkhullám állapotokat használni (periodikus határfeltétellel) egyrészecke hullámfüggvényként. Az 1. fejezet 3. példája alapján tudjuk, hogy ilyenkor a kölcsönhatás Fourier-transzformáltjára van szükségünk. A Coulomb-kölcsönhatás hosszú hatótávolsága miatt annak Fourier-transzformáltja nem létezik a $\underline{q} = 0$ helyen. Azonban a pozitív háttér bevezetése ezt a problémát áthidalja. Ennek belátásához vezessünk be egy regularizált potenciált:

$$v_\alpha(\underline{r}) = e_0^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r}, \quad (3.3)$$

mely $\alpha = 0$ esetén visszaadja a (3.2) potenciált, de $\alpha \neq 0$ esetén rövid hatótávolságú és Fourier-transzformáltja jól definiált minden hullámszámmra¹. Számítsuk ki a (3.3) potenciál Fourier-transzformáltját!

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_\alpha(\underline{q}) &= \int d^3r v_\alpha(\underline{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \int_0^\infty dr r^2 \frac{e_0^2}{r} e^{-\alpha r} e^{-iqr \cos\vartheta} = \\ &= 2\pi e_0^2 \int_0^\infty dr r^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r} \int_{-1}^1 dx e^{iqrx} = \frac{2\pi e_0^2}{iq} \int_0^\infty dr [e^{(-\alpha+iq)r} - e^{-(\alpha+iq)r}] = \\ &= \frac{2\pi e_0^2}{iq} \left(\frac{1}{\alpha - iq} - \frac{1}{\alpha + iq} \right) = \frac{4\pi e_0^2}{q^2 + \alpha^2}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

melyből a Coulomb-kölcsönhatás Fourier-transzformáltja $q \neq 0$ esetén:

$$\mathbf{v}(\underline{q}) = \frac{4\pi e_0^2}{q^2}. \quad (3.5)$$

A (3.1) Hamilton-operátorban a (3.2) potenciált a regularizált (3.3) potenciálra cserélve, majd alkalmazva az 1. fejezet 3. példájánál követett eljárást, a modell módosított Hamilton-operátorára betöltési szám reprezentációban a következő adódik:

$$\begin{aligned} \hat{H}_\alpha &= \sum_{\underline{k},s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}_{\underline{k},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k},s} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\underline{k},\underline{k}',\underline{q} \\ s,s'}} \mathbf{v}_\alpha(\underline{q}) \hat{a}_{\underline{k}+\underline{q},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}'-\underline{q},s'}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}',s'} \hat{a}_{\underline{k},s} - \\ &\quad - n \mathbf{v}_\alpha(0) \sum_{\underline{k},s} \hat{a}_{\underline{k},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k},s} + \frac{n^2 V}{2} \mathbf{v}_\alpha(0). \end{aligned} \quad (3.6)$$

¹Ezt a potenciált Yukawa-potenciálnak nevezik.

A (3.6) Hamilton-operátor utolsó előtti tagjában a $\sum_{\underline{k},s} \hat{a}_{\underline{k},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k},s}$ mennyiség éppen a teljes részecskeszám operátora. A Fock-tér N részecskés szektorában ez az operátor helyettesíthető N -el. Így a (3.6) Hamilton-operátor utolsó két tagját összevonhatjuk, az összevonás után kapott Hamilton-operátor:

$$\hat{H}_\alpha = \sum_{\underline{k},s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}_{\underline{k},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k},s} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\underline{q}, \underline{k}, \underline{k}' \\ s, s'}} \mathbf{v}_\alpha(\underline{q}) \hat{a}_{\underline{k}+\underline{q},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}'-\underline{q},s'}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}',s'} \hat{a}_{\underline{k},s} - \frac{n^2 V}{2} \mathbf{v}_\alpha(0). \quad (3.7)$$

A (3.7) Hamilton-operátor második tagjában a \underline{q} szerinti összegzésből $\underline{q} = 0$ tagot válasszuk le és kezeljük külön! A keltő és eltüntető operátorok (1.17) antikommutációs tulajdonságainak kihasználásával az összeg $\underline{q} = 0$ -hoz tartozó tagja:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\underline{k}, \underline{k}' \\ s, s'}} \mathbf{v}_\alpha(0) \hat{a}_{\underline{k},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}',s'}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}',s'} \hat{a}_{\underline{k},s} &= \frac{\mathbf{v}_\alpha(0)}{2V} \sum_{\substack{\underline{k}, \underline{k}' \\ s, s'}} \left(\hat{a}_{\underline{k},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k},s} \hat{a}_{\underline{k}',s'}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}',s'} - \right. \\ &\quad \left. - \hat{a}_{\underline{k},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}',s'} \delta_{\underline{k},\underline{k}'} \delta_{s,s'} \right) = \frac{n^2 V}{2} \mathbf{v}_\alpha(0) - \frac{n}{2} \mathbf{v}_\alpha(0). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Ezzel az átalakítással a (3.7) Hamilton-operátor:

$$\hat{H}_\alpha = \sum_{\underline{k},s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}_{\underline{k},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k},s} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\underline{q}, \underline{k}, \underline{k}' \\ s, s' \\ \underline{q} \neq 0}} \mathbf{v}_\alpha(\underline{q}) \hat{a}_{\underline{k}+\underline{q},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}'-\underline{q},s'}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}',s'} \hat{a}_{\underline{k},s} - \frac{n}{2} \mathbf{v}_\alpha(0). \quad (3.9)$$

A (3.9) kifejezés utolsó tagja nem extenzív, így termodinamikai határesetben elhanyagolható a többi taghoz képest. A termodinamikai határeset elvégzése után a potenciál már csak olyan összegzésben szerepel, amelyben $\underline{q} \neq 0$. Ilyenkor már biztonságosan el lehet végezni az $\alpha \rightarrow 0$ határátmenetet is. A zselémodell Hamilton-operátorára végül is

$$\hat{H} = \sum_{\underline{k},s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}_{\underline{k},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k},s} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\underline{q}, \underline{k}, \underline{k}' \\ s, s' \\ \underline{q} \neq 0}} \mathbf{v}(\underline{q}) \hat{a}_{\underline{k}+\underline{q},s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}'-\underline{q},s'}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}',s'} \hat{a}_{\underline{k},s} \quad (3.10)$$

adódik, ahol $\mathbf{v}(\underline{q})$ a (3.5) Coulomb-kölcsönhatás.

3.2. A zselémodell termodinamikai potenciáljai

A fejezet nagy részében a zselémodell termodinamikai potenciáljait fogjuk számolni. Mivel rendszerünk részecskeszámát (sűrűségét) szeretnénk paraméternek használni, ezért a számunkra érdekes termodinamikai potenciál a

szabad energia és a rendszer összenergiája. A véges hőmérsékleti soktestprobléma nagykanonikus sokaságban dolgozik, így közvetlenül a nagykanonikus termodinamikai potenciált tudjuk származtatni. Ennek segítségével azonban a többi termodinamikai potenciál a Legendre-transzformáció segítségével kifejezhető. A számolást kissé bonyolítja, hogy a nagykanonikus termodinamikai potenciál természetes változója a kémiai potenciál, az eredmények kiértékelését azonban rögzített részecskeszám esetére szeretnénk végezni. A szabad energia meghatározására a szokásos eljárás a következő. Fejezzük ki a nagykanonikus termodinamikai potenciált az adott közelítésben a természetes változói szerint:

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0(T, V, \mu) + \frac{V}{\beta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n} \Sigma^\lambda(\underline{k}, i\omega_n) \mathcal{G}^\lambda(\underline{k}, i\omega_n). \quad (3.11)$$

A nagykanonikus termodinamikai potenciál ismeretében fejezzük ki a részecskeszám várható értékét:

$$N(T, V, \mu) = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V}. \quad (3.12)$$

A (3.12) összefüggésből fejezzük ki a kémiai potenciált: $\mu(T, V, N)$, majd a Legendre-transzformáció segítségével a szabad energiát:

$$F(T, V, N) = [\Omega(T, V, \mu) + \mu N]_{\mu=\mu(T, V, N)}. \quad (3.13)$$

A szabad energia ismeretében a rendszer belső energiája is számítható:

$$E(T, V, N) = F(T, V, N) + TS(T, V, N). \quad (3.14)$$

A rendszer alapállapotú energiája egybeesik a nulla hőmérsékleti szabadenergiával, mely (3.14) alapján:

$$E(0, V, N) = F(0, V, N). \quad (3.15)$$

A termodinamikai potenciálokat perturbációs sor alakjában írjuk föl, amelyek a (3.5) és a (3.10) egyenletekből láthatóan e_0^2 hatványai szerint halad. A (3.11) egyenletben a kölcsönhatás mind a sajátenergiában, mind pedig a Green-függvényben megjelenik. A csatolási állandó hatványai szerint haladó perturbációs sor meghatározásának érdekében a Green-függvényt írjuk vissza a

$$\mathcal{G}^\lambda = \mathcal{G}_{(0)} + \mathcal{G}_{(0)} \Sigma^\lambda \mathcal{G}_{(0)} + \mathcal{G}_{(0)} \Sigma^\lambda \mathcal{G}_{(0)} \Sigma^\lambda \mathcal{G}_{(0)} + \dots \quad (3.16)$$

alakba. A nagykanonikus termodinamikai potenciált meghatározó egyenlet alakja tehát:

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0(T, V, \mu) + \frac{V}{\beta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n} [\Sigma^\lambda(\underline{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) + \Sigma^\lambda(\underline{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) \Sigma^\lambda(\underline{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) + \dots] \quad (3.17)$$

A csatolási állandóban vezető rendet, $\mathcal{O}(e_0^2)$, a sor első tagjából a sajátenergia elsőrendű járuléka szolgáltatja, vagyis amikor a sajátenergiát a Hartree–Fock-közelítésnek megfelelően választjuk:

$$\Omega_{\text{HF}}(T, V, \mu) = \frac{V}{\beta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n \eta} \Sigma_{\text{HF}}^\lambda(\underline{k}) \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n). \quad (3.18)$$

A teljes nagykanonikus potenciát tradicionálisan az alábbi alakba írhatjuk:

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0(T, V, \mu) + \Omega_{\text{HF}}(T, V, \mu) + \Omega_{\text{corr}}(T, V, \mu), \quad (3.19)$$

amely az $\Omega_{\text{corr}}(T, V, \mu)$ mennyiség definíciójául szolgál, vagyis ez a nagykanonikus termodinamikai potenciál azon járuléka, amely túl megy a Hartree–Fock-közelítésen. Mivel $\Omega_0 = \mathcal{O}(e_0^0)$ és $\Omega_{\text{HF}} = \mathcal{O}(e_0^2)$, ezért $\Omega_{\text{corr}} = \mathcal{O}(e_0^2)$.

► Megjegyezzük, hogy a nagykanonikus termodinamikai potenciálhoz magasabb rendű tagok több helyről is jönnek. Például másodrendű tag egyrészt a (3.17) kifejtés első tagjából a sajátenergia másodrendű járulékaiból, másrészt a (3.17) kifejtés második tagjából, a két sajátenergia elsőrendű járulékaiból. A későbbiekben látni fogjuk, hogy a korrelációs energia számolásánál fellépő gráfok járuléka szingulárisan viselkednek. A szinguláris viselkedés következtében ezen gráfok járulékának korrekciója nagyobb lesz, mint $\mathcal{O}(e_0^4)$. ◀

Mivel a szabadenergiát és a rendszer összenergiáját perturbációs sor alakjában akarjuk előállítani, ezért célszerű a kémiai potenciált is sor alakjában fölírti:

$$\mu = \mu_0 + \mu_1 + \mu_2, \quad (3.20)$$

ahol: $\mu_0 = \mathcal{O}(e_0^0)$, $\mu_1 = \mathcal{O}(e_0^2)$, $\mu_2 = \mathcal{O}(e_0^2)$. A (3.12) és (3.19) egyenletek felhasználásával:

$$N(T, V, \mu) = -\frac{\partial \Omega_0(T, V, \mu)}{\partial \mu} - \frac{\partial \Omega_{\text{HF}}(T, V, \mu)}{\partial \mu} - \frac{\partial \Omega_{\text{corr}}(T, V, \mu)}{\partial \mu}. \quad (3.21)$$

Mivel $\Omega_0 = \mathcal{O}(e_0^0)$ és $\Omega_{\text{HF}} = \mathcal{O}(e_0^2)$, továbbá $\Omega_{\text{corr}} = \mathcal{O}(e_0^2)$, ezért a részecske-szám sorfejtésének első két rendje:

$$N = -\left(\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu}\right)_{\mu=\mu_0} - \mu_1 \left(\frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2}\right)_{\mu=\mu_0} - \left(\frac{\partial \Omega_{\text{HF}}}{\partial \mu}\right)_{\mu=\mu_0} + \mathcal{O}(e_0^2). \quad (3.22)$$

Mivel a szabad gáz kémiai potenciálját éppen az

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu} \right)_{\mu=\mu_0} \quad (3.23)$$

definiálja, ezért a (3.22) egyenletből μ_1 egyszerűen kifejezhető. Értékére

$$\mu_1 = - \frac{\left(\frac{\partial \Omega_{\text{HF}}}{\partial \mu} \right)}{\left(\frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2} \right)} \bigg|_{\mu=\mu_0} \quad (3.24)$$

adódik. A rendszer szabadenergiáját a (3.13), (3.19) és (3.20) egyenletek felhasználásával, továbbá Ω_0 , Ω_{HF} és Ω_{corr} μ_0 körüli Taylor-sorfejtésével az alábbi alakban írhatjuk föl:

$$\begin{aligned} F = \Omega_0(\mu_0) + \mu_0 N + \mu_1 \left(\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu} \right)_{\mu=\mu_0} + \Omega_{\text{HF}}(\mu_0) + \mu_1 N + \Omega_{\text{corr}}(\mu_0) + \\ + \mu_2 N + \mu_2 \left(\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu} \right)_{\mu=\mu_0} + \mathcal{O}(e_0^4), \end{aligned} \quad (3.25)$$

ahol a tagokat átcsoportosítottuk, hogy az összeg a csatolási állandó hatványainak megfelelően haladjon. A (3.23) egyenlet felhasználásával látható, hogy a (3.25) egyenlet első sorának harmadik és ötödik tagja együtt nullát ad, hasonlóan a második sor első és második tagja. A szabadenergia sorfejtése ezek alapján

$$F = \Omega_0(\mu_0) + \mu_0 N + \Omega_{\text{HF}}(\mu_0) + \Omega_{\text{corr}}(\mu_0) + \mathcal{O}(e_0^4) \quad (3.26)$$

A (3.26) kifejezés első két tagja adja a szabadenergia nulladrendű járulékát, harmadik tagja az elsőrendű járulékot, a többi tag magasabb rendű járulékot ad a szabadenergiához. Tudjuk, hogy $\Omega_{\text{corr}}(\mu_0) = \mathcal{O}(e_0^2)$, tételezzük fel, hogy

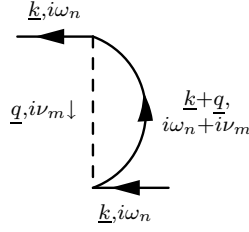
$$\Omega_{\text{corr}}(\mu_0) = \Omega_{\text{corr}}^{(1)}(\mu_0) + \mathcal{O}(e_0^4), \quad (3.27)$$

akkor a szabadenergia sorfejtésének végső alakja

$$F = \Omega_0(\mu_0) + \mu_0 N + \Omega_{\text{HF}}(\mu_0) + \Omega_{\text{corr}}^{(1)}(\mu_0) + \mathcal{O}(e_0^4). \quad (3.28)$$

3.3. Hartree–Fock-közelítés

Nézzük meg először a szabadenergia elsőrendű járulékát, mely a Hartree–Fock-közelítésnek felel meg. Mivel a (3.10) Hamilton-operátorban a kihagytuk a kölcsönhatás $\underline{q} = 0$ járulékát, ezért az összes olyan diagram járuléka



3.1. ábra. Az elektrongáz sajátenergiájának elsőrendű járuléka. (A két külső ponthoz csatlakozó szabad propagátort nem számítjuk a sajátenergiába.)

nulla, melyben van olyan gráfrészlet, ami a diagram többi részéhez pusztán egy kölcsönhatási vonallal csatlakozik. A Hartree járulék Feynman-diagramja is ilyen. Ezért a sajátenergia elsőrendű járuléka csupán a Fock-tagot tartalmazza. Ennek Feynman-diagramja látható a 3.1. ábrán, a diagram járuléka:

$$\begin{aligned}\Sigma_F^\lambda(\underline{k}) &= -\frac{1}{\hbar} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\nu_m} \lambda \mathbf{v}(\underline{q}) \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k} + \underline{q}, i\omega_n + i\nu_m) e^{i\nu_m\eta} = \\ &= -\frac{\lambda}{\hbar} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \mathbf{v}(\underline{q}) n_{\underline{k}+\underline{q}}^0 = -\frac{\lambda}{\hbar} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \mathbf{v}(\underline{k}' - \underline{k}) n_{\underline{k}'}^0, \quad (3.29)\end{aligned}$$

ahol $n_{\underline{k}}^{(0)}$ a Fermi-Dirac eloszlás:

$$n_{\underline{k}}^{(0)} = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\omega_n} \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) e^{i\omega_n\eta} = \frac{1}{e^{\beta\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \beta\mu} + 1}. \quad (3.30)$$

A (3.29) egyenlet utolsó lépésében elvégeztünk egy változócserét a \underline{q} változó szerinti hármasintegrálról a $\underline{k}' = \underline{k} + \underline{q}$ változó szerinti hármasintegrálra.

A nagykanonikus termodinamikai potenciál elsőrendű járuléka a (3.18) összefüggés alapján:

$$\begin{aligned}\Omega_{\text{HF}}(T, V, \mu) &= -\frac{V}{\beta\hbar} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n\eta} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \lambda \mathbf{v}(\underline{k}' - \underline{k}) n_{\underline{k}'}^{(0)} \times \\ &\times \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) = -\frac{V}{\beta\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \mathbf{v}(\underline{k}' - \underline{k}) n_{\underline{k}'}^{(0)} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n\eta} \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) = \\ &= -V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \mathbf{v}(\underline{k}' - \underline{k}) n_{\underline{k}'}^{(0)} n_{\underline{k}}^{(0)} = V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar \Sigma_F(\underline{k}) n^{(0)}(\underline{k}). \quad (3.31)\end{aligned}$$

A levezetésnél az első egyenlőségjel után elvégeztük a λ változóra vonatkozó integrált, majd az utolsó sorban a frekvenciaösszegzést. Az utolsó egyenlőségjel után megadott összefüggést már csak praktikussági okokból írtuk föl ismét, mert később még használni fogjuk.

A (3.29) és (3.31) összefüggések analitikusan csak nulla hőmérsékleten és a klasszikus határesetben értékelhetők ki. Nézzük meg ezeket a határeseteket!

Nulla hőmérsékleti határeset

A további számolást érdemes dimenziótlan formában végezni. A dimenziótlanításhoz vezessük be az alábbi karakterisztikus mennyiségeket:

$$\begin{aligned} \text{Bohr-sugár:} & \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me_0^2}, \\ \text{elektronok átlagos távolsága:} & \quad r_0 = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3}, \\ \text{atomi energia egység:} & \quad 1 \text{ ryd} = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = \frac{e_0^2}{2a_0} = 13,6 \text{ eV}, \\ \text{Fermi-hullámszám:} & \quad k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}. \end{aligned}$$

(Az r_0 távolság azon gömb sugara, melyben átlagosan egy elektron található.) Ezen mennyiségek segítségével vezessük be az alábbi kulcsfontosságú dimenziótlan paramétert:

$$r_s \equiv \frac{r_0}{a_0} = \left(\frac{3}{4\pi n a_0^3}\right)^{1/3} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{k_F a_0} = \frac{1,9192}{k_F a_0}, \quad (3.32)$$

mely az elektronok dimenziótlanított átlagos távolsága. Nemsokára látni fogjuk, hogy a perturbációszámítás kis paramétere éppen az r_s mennyiség. Az már most is látható, hogy r_s arányos e_0^2 -el, mely a perturbációszámítás formális paramétere.

Nulla hőmérsékleten a szabad gáz kémiai potenciálja:

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = (k_F a_0)^2 \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} \text{ ryd} = \frac{3,6832}{r_s^2} \text{ ryd}. \quad (3.33)$$

A rendszer szabadenergiáját ebben a közelítésben a (3.28) egyenlet első három tagja alapján számolhatjuk. Mivel $F = E - TS$, ezért nulla hőmérsékleten a szabadenergia egyenlő az alapállapot energiával. Az alapállapot energiája meghatározásához számítsuk ki tehát $\Omega_0(\mu_0)$ és $\Omega_{\text{HF}}(\mu_0)$ értékét!

$$\begin{aligned} \Omega_0(0, V, \mu_0) &= -\frac{2}{15\pi^2} V \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \mu_0^{5/2} = -\frac{2}{5} N (k_F a_0)^2 \text{ ryd} = \\ &= -\frac{2}{5} N \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} \text{ ryd}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Vagyis a szabad gáz egy részecskére jutó, alapállapotú (kinetikus) energiája:

$$\frac{E_K}{N} = \frac{\Omega_0(0, V, \mu_0) + \mu_0 N}{N} = \frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} \text{ ryd} = \frac{2,2099}{r_s^2} \text{ ryd}. \quad (3.35)$$

A Hartree–Fock-közelítés nagykanonikus termodinamikai potenciáljának nulla hőmérsékleti járulékát a (3.31) egyenlet utolsó kifejezése alapján érdemes számolni, mely a (3.28) egyenlet és $F = E - TS$ alapján egybeesik az alapállapotú energia Hartree–Fock-közelítésbeli korrekciójával. Ehhez azonban először számítsuk ki $\hbar\Sigma_F$ értékét (3.29) alapján!

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma_F(\underline{k}) &= - \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \mathbf{v}(\underline{k}' - \underline{k}) n_{\underline{k}'}^{(0)} = - \frac{4\pi e_0^2}{(2\pi)^3} \int d^3 k' \frac{n_{\underline{k}'}^{(0)}}{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \vartheta} = \\ &= - \frac{4\pi e_0^2}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dk' k'^2 n_{\underline{k}'}^{(0)} \int_0^\pi d\vartheta \frac{\sin \vartheta}{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \vartheta} = \\ &= - \frac{e_0^2}{\pi} \int_0^\infty dk' k'^2 n_{\underline{k}'}^{(0)} \int_{-1}^1 \frac{du}{k^2 + k'^2 - 2kk'u} = \\ &= - \frac{e_0^2}{2\pi} \int_0^\infty dk' \frac{k'}{k} n_{\underline{k}'}^{(0)} \ln \left(\frac{k+k'}{k-k'} \right)^2. \quad (3.36) \end{aligned}$$

Nulla hőmérsékleten $n_k^{(0)} = \Theta(k_F - k)$, ahol $\Theta(x)$ a Heaviside-függvény. A Fock-sajátenergia zérus hőmérsékleti kifejezése így a következő alakú:

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma_F(\underline{k}) &= - \frac{e_0^2}{2\pi} \int_0^{k_F} dk' \frac{k'}{k} \ln \left(\frac{k+k'}{k-k'} \right)^2 = - \frac{e_0^2 k}{2\pi} \int_0^{\frac{k_F}{k}} dy y \ln \left(\frac{1+y}{1-y} \right)^2 = \\ &= - \frac{e_0^2 k}{2\pi} \left\{ \left[\frac{y^2}{2} \ln \left(\frac{1+y}{1-y} \right)^2 \right]_0^{\frac{k_F}{k}} - \int_0^{\frac{k_F}{k}} \frac{2y^2 dy}{(1+y)(1-y)} \right\} = \\ &= - \frac{e_0^2 k}{2\pi} \left\{ \left[\frac{y^2}{2} \ln \left(\frac{1+y}{1-y} \right)^2 \right]_0^{\frac{k_F}{k}} + \int_0^{\frac{k_F}{k}} \left[2 - \frac{1}{1-y} - \frac{1}{1+y} \right] dy \right\} = \\ &= - \frac{e_0^2}{2\pi} \left[\frac{k_F^2 - k^2}{2k} \ln \left(\frac{k_F + k}{k_F - k} \right)^2 + 2k_F \right]. \quad (3.37) \end{aligned}$$

A (3.31) egyenlet alapján már elő tudjuk állítani a nagykanonikus termodinamikai potenciál elsőrendű korrekcióját nulla hőmérsékleten.

$$\Omega_{\text{HF}}(0, V, \mu_0) = V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar\Sigma_F(\underline{k}) n_{\underline{k}}^{(0)} =$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{2V e_0^2}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} \left[\frac{k_F^2 - k^2}{2k} \ln \left(\frac{k_F + k}{k_F - k} \right)^2 + 2k_F \right] k^2 dk = \\
&= -\frac{2V e_0^2 k_F^4}{(2\pi)^3} \int_0^1 \left[\frac{1 - y^2}{2y} 2 \ln \frac{1 + y}{1 - y} + 2 \right] y^2 dy = \\
&= -\frac{2V e_0^2 k_F^4}{(2\pi)^3} \int_0^1 \left[(1 - y^2) y \ln \frac{1 + y}{1 - y} + 2y^2 \right] dy. \quad (3.38)
\end{aligned}$$

Mivel az integrandus parciális integrálás után racionális törtfüggvénnyé alakítható, ezért az integrandusnak létezik primitív függvénye. Parciális integrálás után a parciális törtre bontás mindenképpen eredményre vezet, ha azonban a parciális integrálásnál ügyesebben választjuk meg a segédfüggvényeket, akkor jelentősen kevesebb számolással eredményre jutunk. A (3.37) összefüggés származtatásakor már kiszámoltuk a $2y \ln[(1+y)/(1-y)]$ kifejezés határozatlan integrálját, ezért a (3.38) utolsó sorának integráljában legyen a parciális integrálás két segédfüggvénye: $v = (1 - y^2)$ és $u' = y \ln[(1+y)/(1-y)]$. Ekkor:

$$\begin{aligned}
I^{(1)} &= \int_0^1 (1 - y^2) y \ln \frac{1 + y}{1 - y} dy = \left[(1 - y^2) \left(\frac{y^2 - 1}{2} \ln \frac{1 + y}{1 - y} + y \right) \right]_0^1 + \\
&+ \int_0^1 \left[y(y^2 - 1) \ln \frac{1 + y}{1 - y} + 2y^2 \right] dy = -I^{(1)} + 2 \int_0^1 y^2 dy = -I^{(1)} + \frac{2}{3}. \quad (3.39)
\end{aligned}$$

A parciális integrálás során a kiintegrált rész zérus, hiszen a szögletes zárójelben lévő kifejezés eltűnik mindkét határon. A (3.39) kifejezés elejét és végét tekintve, $I^{(1)}$ -re egy egyenlet adódik, mely megoldása: $I^{(1)} = \frac{1}{3}$. A (3.38) kifejezésben elvégezve még y^2 integrálját, a nagykanonikus termodinamikai potenciál és alapállapotú energia elsőrendű korrekciójára

$$\Omega_{\text{HF}}(0, V, \mu_0) = E_{\text{HF}} = -\frac{2V e_0^2 k_F^4}{(2\pi)^3} = -\frac{3}{4} \frac{e_0^2 k_F}{\pi} N \quad (3.40)$$

adódik. Vagyis:

$$\frac{E_{\text{HF}}}{N} = -\frac{3}{2\pi} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \frac{e_0^2}{2a_0} = -\frac{0,9163}{r_s} \text{ ryd}. \quad (3.41)$$

A (3.35) és (3.41) kifejezések felhasználásával az elektrongáz alapállapotú energiája Hartree–Fock-közelítésben:

$$\frac{E}{N} = \frac{2,2099}{r_s^2} \text{ ryd} - \frac{0,9163}{r_s} \text{ ryd}. \quad (3.42)$$

A végeredményből megfigyelhető, hogy a perturbációs sor kis paramétere r_s . Bár a (3.42) kifejezés a sornak csak az első két tagját tartalmazza, az állítás mégis hihető, hiszen r_s arányos e_0^2 -el, mely a perturbációs sorfejtés formális paramétere. A Hamilton-operátort dimenziótlanítással olyan alakra hozhatjuk, melyben a kölcsönhatási-energia előtt megjelenő szorzófaktor r_s -nek éppen eggyel nagyobb hatványát tartalmazza, mint a kinetikus energia előtt álló szorzófaktor. Fontos még megjegyezni, hogy a fenti számolás r_s kis értékeire, vagyis nagy elektronsűrűségekre konzisztens. Fémek esetén $1,8 < r_s < 6$, vagyis a sor többi tagja további megfontolások nélkül nem hanyagolható el az elsőrendű járulék mellett.

Klasszikus határeset

Az általános kifejezések a klasszikus határesetben ($-\beta\mu_0 \gg 1$) is kiértékelhetők. Ebben a határesetben a Fermi-Dirac-eloszlás átmegy a klasszikus Maxwell-Boltzmann-eloszlásba. A szabad gáz nagykanonikus termodinamikai potenciálja a klasszikus határesetben:

$$\begin{aligned}\Omega_0(T, V, \mu_0) &= -k_B T V (2s+1) e^{\beta\mu_0} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2mk_B T}} = \\ &= -k_B T \frac{(2s+1)V}{\lambda_B^3} e^{\beta\mu_0}, \text{ ahol: } \lambda_B = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{1/2}. \quad (3.43)\end{aligned}$$

A teljes részecskeszám kifejezése pedig:

$$N = (2s+1)V e^{\beta\mu_0} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2mk_B T}} = \frac{(2s+1)V}{\lambda_B^3} e^{\beta\mu_0}. \quad (3.44)$$

Melyből a szabad gáz magas hőmérsékleti kémiai potenciáljára:

$$\frac{\mu_0}{k_B T} = \ln \left(\frac{N}{2s+1} \frac{\lambda_B^3}{V} \right) \quad (3.45)$$

adódik. A (3.45) kémiai potenciált a (3.43) összefüggésbe helyettesítve, arra

$$\Omega_0 = -k_B T N \quad (3.46)$$

adódik. Ezen nem is lepődünk meg, hiszen a klasszikus ideális gáz állapotegyenlete $PV = Nk_B T$ és tudjuk, hogy $\Omega = -PV$.

A nagykanonikus termodinamikai potenciál elsőrendű járulékát a (3.31) egyenlet alapján számíthatjuk, figyelembe véve, hogy a klasszikus határeset-

ben $n_{\underline{k}}^{(0)} = \exp[\beta(\mu_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m})]$:

$$\begin{aligned}\Omega_{\text{HF}}(T, V, \mu_0) &= -\frac{(2s+1)V}{2} e^{2\beta\mu_0} 4\pi e_0^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{e^{-\frac{\hbar^2(k^2+k'^2)}{2mk_B T}}}{(\underline{k} - \underline{k}')^2} = \\ &= -\frac{(2s+1)V}{2(\pi\lambda_B)^3} \frac{e_0^2}{\lambda_B} e^{2\beta\mu_0} \int d^3x d^3y \frac{e^{-x^2-y^2}}{(\underline{x} - \underline{y})^2}. \quad (3.47)\end{aligned}$$

Ahhoz, hogy a Hartree–Fock-közelítés klasszikus határesetbeli eredményét összehasonlíthassuk a (3.46) szabad gáz járulékával, fejezzük ki a (3.44) egyenletből a V/λ_B^3 mennyiséget és helyettesítsük be a (3.47) egyenletbe! Ennek eredménye:

$$\Omega_{\text{HF}}(T, V, \mu_0) = -\frac{N}{2\pi^3} \frac{e_0^2}{\lambda_B} e^{\beta\mu_0} \int d^3x d^3y \frac{e^{-x^2-y^2}}{(\underline{x} - \underline{y})^2}, \quad (3.48)$$

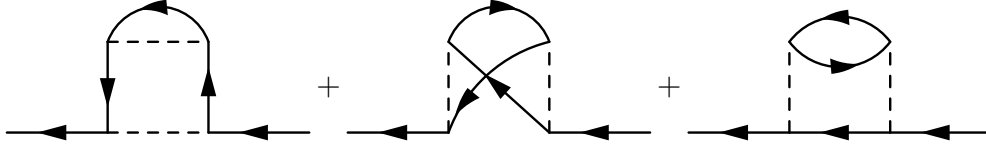
mely (3.46) kifejezéshez képest, nem csak a csatolási állandóban ad kisebb járulékot, hanem a klasszikus határesetben $-\beta\mu_0 \gg 1$ paraméter szerint is exponenciálisan kicsi. A Hartree–Fock-közelítés járulékat a klasszikus határesetben jogosan elhanyagolhatjuk. Bevilágító lehet a Planck-állandó szerepét megbeszélni. A (3.46) összefüggésből is látszik, hogy a szabad gáz termodinamikai potenciálja, Ω_0 , ebben a határesetben \hbar -t nem tartalmaz. A (3.48) egyenletben ismét felhasználva a (3.45) kifejezést

$$\Omega_{\text{HF}}(T, V, \mu_0) = -\frac{N^2}{2V\pi^3} \frac{e_0^2 \lambda_B^2}{2s+1} \int d^3x d^3y \frac{e^{-x^2-y^2}}{(\underline{x} - \underline{y})^2} \quad (3.49)$$

adódik. A (3.43) egyenletből leolvasható, hogy a termikus hullámhossz a Planck-állandó első hatványát hordozza, így a nagykanonikus termodinamikai potenciál Hartree–Fock járulékanak számlálójában \hbar második hatványáva szerepel. Ez utóbbi észrevétel is azt erősíti meg, hogy a Hartree–Fock járulék a klasszikus határesetben elhagyható.

3.4. A korrelációs energia számítása

A korrelációs energia definíciójául szolgáló (3.19) egyenletnek megfelelően a korrelációs energia a nagykanonikus termodinamikai potenciál mindazon járuléka, amely túl megy a Hartree–Fock-közelítésen. A (3.11), a (3.18) és



3.2. ábra. Az elektrongáz sajátenergiájának másodrendű járuléka.

a (3.19) egyenletek felhasználásával a korrelációs energiára

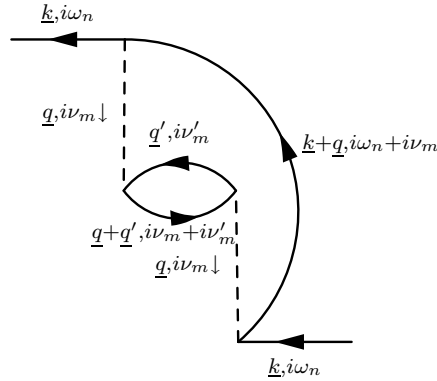
$$\begin{aligned}\Omega_{\text{corr}}(T, V, \mu) &= \Omega(T, V, \mu) - \Omega_0(T, V, \mu) - \Omega_{\text{HF}}(T, V, \mu) = \\ &= \frac{V}{\beta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n \eta} [\Sigma^\lambda(\underline{k}, i\omega_n) \mathcal{G}^\lambda(\underline{k}, i\omega_n) - \Sigma_{\text{HF}}^\lambda(\underline{k}) \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n)]\end{aligned}\quad (3.50)$$

adódik.

A korrelációs energiára így a vezető járulékot a csatolási állandóban másodrendű tagokból várjuk. A (3.16) egyenlet segítségével megállapíthatjuk, hogy a 2. rendű járulék két helyről származik. Egyrészt a sajátenergia 2. rendű járuléka és a szabad Green-függvény szorzatából, másrészt a sajátenergia 1. rendű (Hartree–Fock) járuléka és az első rendű Green-függvény szorzatából, vagyis:

$$[\Sigma^\lambda \mathcal{G}^\lambda]_{2.\text{rend}} = \Sigma_{2.\text{rend}}^\lambda \mathcal{G}_{(0)} + \Sigma_{\text{HF}}^\lambda \mathcal{G}_{(0)} \Sigma_{\text{HF}}^\lambda \mathcal{G}_{(0)}. \quad (3.51)$$

Kiszámítható, hogy a (3.51) kifejtés második tagjának járuléka a (3.50) kifejezésben véges $\mathcal{O}(e_0^4)$ rendű eredményt ad. Ezért a korrelációs energia vezető tagjának meghatározásához tekintsük a sajátenergia 2. rendű járulékait, melyeket a 3.2. ábrán tüntettünk fel (kihagyva az olyan diagramokat, amelyekben vannak a gráf többi részéhez egyetlen kölcsönhatási vonalon keresztül csatlakozó gráfrészek, mivel ez utóbbiak járuléka — a Hartree taghoz hasonlóan — zérus). Szintén ellenőrizhető, hogy a 3.2. ábrán szereplő másodrendű diagramok közül az első kettőt használva fel a (3.51) egyenletnek megfelelően a (3.50) korrelációs energiára kapható járulék véges és szintén $\mathcal{O}(e_0^4)$ rendű. Tekintsük most a 3.2. ábra harmadik diagramját! Rajzoljuk át egy később hasznosabbnak bizonyuló alakra és osszuk ki a frekvenciákat és hullámszámokat (3.3. ábra)! Koncentráljunk a q szerinti integrálra. A két kölcsönhatás egyenként hordoz egy-egy q^{-2} szorzót, melyek a q szerinti hármasintegrál elvégzésekor a gömbi polárkoordinátákra való áttérés után ($\int dq q^2 q^{-4} \sim \int dq q^{-2} \sim q^{-1}$) divergens eredményre vezetnek. Ez a naív hatványszámlálás túlbecsüli a divergenciát. Az integrál egzaktul is elvégezhető

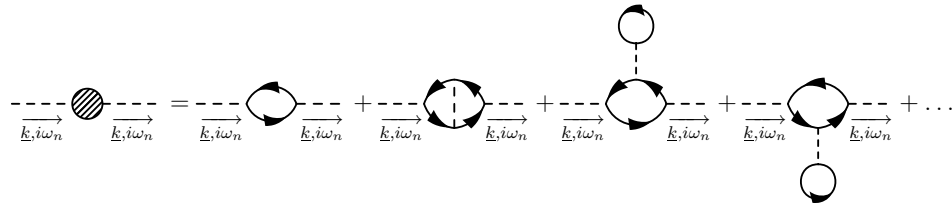


3.3. ábra. Az elektromág sajátenergiájának divergens másodrendű gráfja.

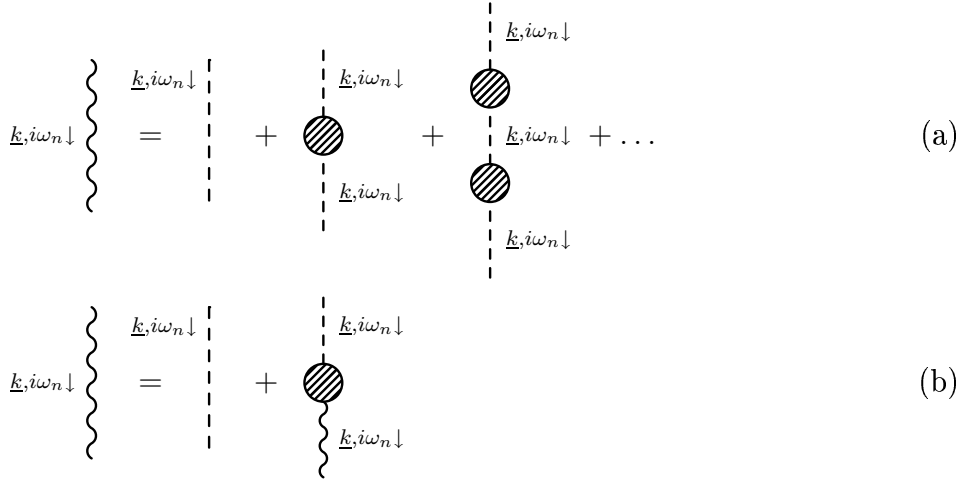
és ilyenkor a járulékra enyhébb, logaritmikus divergencia kapható. Ugyanez a logaritmikus divergencia fordulna elő akkor is, ha a buborék helyére tet-szőleges proper diagramot helyettesítenénk, amelyeket alább definiálunk.

Proper diagramnak, vagy más néven *polarizációs betétnek* olyan gráfot nevezünk, amely két külső kölcsönhatási vonalhoz csatlakozik és egy kölcsön-hatási vonal elvágásával nem esik szét két részre úgy, hogy a külső kölcsön-hatási vonalak különböző komponensbe kerülnek. A polarizációs diagramok összegét a 3.4. ábrának megfelelően satírozott karikával szemléltetjük; járulé-kukat polarizációs függvénynek nevezzük, melyet $-\hbar\Pi(\underline{k}, i\omega_n)$ -nel jelölünk.

Ha a 3.3. sajátenergiában a „buborék” (vagy polarizációs függvény) helyére két polarizációs függvény által közrefogott kölcsönhatást helyettesíte-nénk, a divergencia még erősebb lenne, hiszen a megjelenő új kölcsönhatás szintén q^{-2} -t hordoz. Még több kölcsönhatást helyezve be (polarizációs függ-vények közbeiktatásával) a divergencia még erősebb. Felmerül azonban az a



3.4. ábra. A polarizációs függvény jelölése és legalacsonyabb rendű Feynman-diagramjai. (A két külső kölcsönhatási vonalat nem számítjuk a proper di-agramba. Csak az áttekinthetőség kedvéért rajzoljuk le.)



3.5. ábra. Az elektrongáz effektív kölcsönhatása.

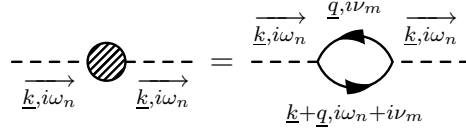
természetes kérdés, hogy nem kapunk-e véges eredményt, ha ezeket az egyre divergensebb gráfokat felösszegezzük. A felösszegezés érdekében vezessünk be egy effektív kölcsönhatást a 3.5. (a) ábra alapján! A 3.5. (a) ábra a Dyson-egyenlethez hasonló mértani sor, amely átrajzolható a 3.5. (b) ábrának megfelelően. Az ábrákon a hullámos vonal — a gráfszabályokkal összhangban — $-\hbar^{-1}\mathbf{v}_{\text{eff}}(\underline{k}, i\omega_n)$ -et, az effektív kölcsönhatást jelöli. A 3.5. (b) ábra alapján az effektív kölcsönhatásra felírható egyenlet a következő:

$$\mathbf{v}_{\text{eff}}(\underline{k}, i\omega_n) = \mathbf{v}(\underline{k}) + \mathbf{v}(\underline{k})\Pi(\underline{k}, i\omega_n)\mathbf{v}_{\text{eff}}(\underline{k}, i\omega_n), \quad (3.52)$$

melyből az effektív kölcsönhatás

$$\mathbf{v}_{\text{eff}}(\underline{k}, i\omega_n) = \frac{\mathbf{v}(\underline{k})}{1 - \mathbf{v}(\underline{k})\Pi(\underline{k}, i\omega_n)}. \quad (3.53)$$

A további számolást *véletlenfázisú közelítésben* végezzük, melyben a polarizációs függvényt a legalacsonyabb rendű járulékaival, a buborékkal vesszük figyelembe. Az elnevezés történeti eredetű (az itt nem tárgyalt mozgásegyenlet módszerre nyúlik vissza) és az angol Random Phase Approximation-ből származik. Az angol névre utalva a továbbiakban ezt a közelítést egyszerűen RPA-nak fogjuk hívni. Határozzuk meg először a buborékdiagram járulékát! A 3.6. ábra jobb oldalán, a buborékdiagramban, egyetlen hurok található, vagyis egyetlen szabad impulzust és frekvenciát osztottunk ki (\underline{q} -t és $i\nu_m$ -et), amelyekre a járulék számításakor összegeznünk kell. A gráfszabályok alapján a polarizációs függvény járuléka a következő alakot ölti (figyelembe véve,



3.6. ábra. A polarizációs függvény RPA-ban.

hogy a 3.6. gráf járuléka $-\hbar\Pi_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n)$:

$$\begin{aligned}
 \Pi_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) &= \frac{2s+1}{\beta\hbar^2} \sum_m \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \mathcal{G}_{(0)}(\underline{q}, i\nu_m) \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k} + \underline{q}, i\omega_n + i\nu_m) = \\
 &= \frac{2s+1}{\beta\hbar^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \sum_m \frac{1}{i\nu_m - \hbar^{-1}(T_{\underline{q}} - \mu)} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_m - \hbar^{-1}(T_{\underline{k}+\underline{q}} - \mu)} = \\
 &= \frac{2s+1}{\hbar} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(T_{\underline{k}+\underline{q}} - T_{\underline{q}})} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_m e^{i\nu_m\eta} \left[\frac{1}{i\nu_m - \hbar^{-1}(T_{\underline{q}} - \mu)} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{i\omega_n + i\nu_m - \hbar^{-1}(T_{\underline{k}+\underline{q}} - \mu)} \right] = -(2s+1) \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{n_{\underline{k}+\underline{q}}^{(0)} - n_{\underline{q}}^{(0)}}{i\hbar\omega_n - (T_{\underline{k}+\underline{q}} - T_{\underline{q}})}. \tag{3.54}
 \end{aligned}$$

A második egyenlőségjel után beírtuk a szabad Green-függvény (2.97) alakját, majd a következő egyenlőségjel után a frekvenciaösszeg kiszámítása érdekében egy azonos átalakítást (parciális törtekre bontást) végeztünk. A frekvenciaösszeg tagonkénti elvégzéséhez beírtuk az $e^{i\nu_m\eta}$ konvergenciafaktort, majd a második tagnál a $\nu_{m'} = \nu_m + \omega_n$ változócsere-t hajtottuk végre.

A vizsgált másodrendű tagok viselkedésének és a (3.50) egyenlet figyelembe vételével a korrelációs energia vezető rendű járulékára

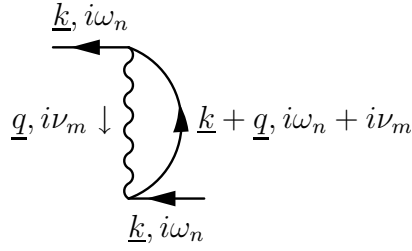
$$\Omega_{\text{corr}}^{(1)}(T, V, \mu) = \frac{V}{\beta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n\eta} \Sigma_{\text{corr}}^\lambda(\underline{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) \tag{3.55a}$$

kapható, ahol

$$\Sigma_{\text{corr}}^\lambda(\underline{k}, i\omega_n) = [\Sigma_{\text{r}}^\lambda(\underline{k}, i\omega_n) - \Sigma_{\text{HF}}^\lambda(\underline{k})]. \tag{3.55b}$$

A (3.55b) egyenletben $\Sigma_{\text{r}}^\lambda(\underline{k}, i\omega_n)$, a 3.7. ábrán szereplő Feynman-diagram járuléka. Így

$$\Sigma_{\text{corr}}^\lambda(\underline{k}, i\omega_n) = -\frac{1}{\hbar} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_m [\mathbf{v}_{\text{eff}}(\underline{q}, i\nu_m) - \lambda\mathbf{v}(\underline{q})] \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k} + \underline{q}, i\omega_n + i\nu_m), \tag{3.56a}$$

3.7. ábra. A buboréksor felösszegzését tartalmazó Σ_r^λ sajátenergia.

ahol természetesen

$$\mathbf{v}_{\text{eff}}^\lambda(\underline{k}, i\omega_n) = \frac{\lambda \mathbf{v}(\underline{k})}{1 - \lambda \mathbf{v}(\underline{k}) \Pi_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n)}. \quad (3.56b)$$

A (3.55) és (3.56a) egyenletek felhasználásával a korrelációs energia vezető rendű járuléka a következő:

$$\begin{aligned} \Omega_{\text{corr}}^{(1)}(T, V, \mu) &= -V \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_m [\mathbf{v}_{\text{eff}}^\lambda(\underline{q}, i\nu_m) - \lambda \mathbf{v}(\underline{q})] \times \\ &\quad \times \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k} + \underline{q}, i\omega_n + i\nu_m) \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) = \\ &= -\frac{V\hbar}{2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_m \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} [\mathbf{v}_{\text{eff}}^\lambda(\underline{q}, i\nu_m) - \lambda \mathbf{v}(\underline{q})] \Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu_m) = \\ &= \frac{V\hbar}{2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_m \left\{ \ln [1 - \mathbf{v}(\underline{q}) \Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu_m)] + \mathbf{v}(\underline{q}) \Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu_m) \right\}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

A számolásnál a (3.54) egyenlet segítségével a két szabad Green-függvény szorzatát kifejeztük a buborék járulékával, majd elvégeztük a λ szerinti integrált². A korrelációs energia (3.57) végső kifejezését a nulla hőmérsékleti, illetve a klasszikus határesetben értékeljük ki analitikusan.

²A λ szerinti integrálok számításánál felhasználtuk az alábbi egyszerű részletszámításokat:

$$\begin{aligned} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \lambda \mathbf{v}(\underline{q}) \Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu_m) &= \mathbf{v}(\underline{q}) \Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu_m), \\ \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \frac{\lambda \mathbf{v}(\underline{q}) \Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu_m)}{1 - \lambda \mathbf{v}(\underline{q}) \Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu_m)} &= -\ln [1 - \mathbf{v}(\underline{q}) \Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu_m)]. \end{aligned}$$

Nulla hőmérsékleti határeset

Nulla hőmérsékleten a Matsubara-frekvenciák „besűrűsödnek”, mivel két egymást követő (n és $n + 1$) Matsubara-frekvencia különbsége: $\Delta\nu = \frac{2\pi}{\beta\hbar} \rightarrow 0$, így

$$\frac{1}{\beta\hbar} \sum_m (\dots) = \frac{1}{\beta\hbar\Delta\nu} \sum_m (\dots)\Delta\nu = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu}{2\pi} (\dots). \quad (3.58)$$

A korrelációs energia vezető rendű járuléka (3.57) az alábbi alakot ölti:

$$\Omega_{\text{corr}}^{(1)}(0, V, \mu) = \frac{V\hbar}{2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int \frac{d\nu}{2\pi} \left\{ \ln [1 - \mathbf{v}(\underline{q})\Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu)] + \mathbf{v}(\underline{q})\Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu) \right\}. \quad (3.59)$$

A buborékdiagram járuléka a zérus hőmérsékleti határesetben:

$$\begin{aligned} \Pi_{(0)}(\underline{k}, i\omega) &= -2 \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{n_{\underline{k}+\underline{q}}^{(0)} - n_{\underline{q}}^{(0)}}{i\hbar\omega - (T_{\underline{k}+\underline{q}} - T_{\underline{q}})} = \\ &= -2 \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} n_{\underline{q}}^{(0)} \left[\frac{1}{i\hbar\omega - (T_{\underline{q}} - T_{\underline{q}-\underline{k}})} - \frac{1}{i\hbar\omega - (T_{\underline{k}+\underline{q}} - T_{\underline{q}})} \right]. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Első lépésként az integrandust két részre bontottuk a számláló alapján, majd az első tagban végrehajtottunk egy $\underline{q}' = \underline{k} + \underline{q}$ változócsere, majd a két integrált újra összevontuk. Így a betöltési szám az integrandus mindkét tagjára csak a \underline{q} hullámszámtól függ. Zérus hőmérsékleten a betöltési szám, a korábban is használt lépcsőfüggvény [lásd a (3.37) egyenlet fölött], amely segítségével a (3.60) kifejezés tovább alakítható. Polárkoordinátákra való áttérés (a z -tengely \underline{k} irányú) és a φ szög szerinti integrálás után a buborékdiagramra az alábbi kifejezés kapható:

$$\begin{aligned} \Pi_{(0)}(\underline{k}, i\omega) &= -\frac{1}{2\pi^2} \int_0^{k_F} dq q^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \times \\ &\quad \times \left[\frac{1}{T_{\underline{k}} - \frac{\hbar^2}{m} qk \cos \vartheta + i\hbar\omega} + \frac{1}{T_{\underline{k}} + \frac{\hbar^2}{m} qk \cos \vartheta - i\hbar\omega} \right] = \\ &= -\frac{m}{2\pi^2 \hbar^2 k} \int_0^{k_F} dq q \left[\ln \frac{T_{\underline{k}} + \frac{\hbar^2}{m} qk + i\hbar\omega}{T_{\underline{k}} - \frac{\hbar^2}{m} qk + i\hbar\omega} + \ln \frac{T_{\underline{k}} + \frac{\hbar^2}{m} qk - i\hbar\omega}{T_{\underline{k}} - \frac{\hbar^2}{m} qk - i\hbar\omega} \right]. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Az utolsó integrál pedig parciális integrálással elvégezhető, a buborék járú-

lékára zérus hőmérsékleten a következő eredmény adódik:

$$\begin{aligned} \Pi_{(0)}(\underline{k}, i\omega) = & -\frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2} \left\{ 1 + \frac{m^2}{2\hbar^4 k^3 k_F} \left[4T_{\underline{k}}T_{k_F} - (T_{\underline{k}} + i\hbar\omega)^2 \right] \ln \frac{T_{\underline{k}} + i\hbar\omega + \hbar v_F k}{T_{\underline{k}} + i\hbar\omega - \hbar v_F k} + \right. \\ & \left. + \frac{m^2}{2\hbar^4 k^3 k_F} \left[4T_{\underline{k}}T_{k_F} - (T_{\underline{k}} - i\hbar\omega)^2 \right] \ln \frac{T_{\underline{k}} - i\hbar\omega + \hbar v_F k}{T_{\underline{k}} - i\hbar\omega - \hbar v_F k} \right\}, \quad (3.62) \end{aligned}$$

ahol bevezettük a $v_F = \hbar k_F/m$ Fermi-sebességet és a $T_{k_F} = \hbar^2 k_F^2/2m$ Fermi-energiát. Érdekes most meghatároznunk, a későbbi számolások érdekében, a (3.62) polarizációs függvény két határesetét. Az egyik a sztatikus határeset, melyet $\omega = 0$ definiál. Egyszerű behelyettesítéssel a polarizációs függvény sztatikus határesetére

$$\Pi_{(0)}(\underline{k}, 0) = -\frac{mk_F}{\hbar^2\pi^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{k_F}{2k} \left(1 - \frac{k^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{k + 2k_F}{k - 2k_F} \right| \right] \quad (3.63)$$

kapható. A másik fontos határeset a hosszúhullámú határeset, amelyet a $k \ll k_F$ definiál. Vezessük be az alábbi két dimenziótlan mennyiséget:

$$y := \frac{k}{k_F}, \quad (3.64a)$$

$$\zeta := \frac{\omega}{v_F k} = \frac{\omega m}{\hbar k_F k}. \quad (3.64b)$$

Hosszúhullámú határesetben $y \ll 1$. Az áttekinthetőség kedvéért fejtsük hatványsorba a (3.62) kifejezésben előforduló dimenziótlan mennyiségeket:

$$\frac{m^2}{2\hbar^4 k^3 k_F} 4T_{\underline{k}}T_{k_F} = \frac{1}{2y}, \quad (3.65a)$$

$$\frac{m^2}{2\hbar^4 k^3 k_F} (T_{\underline{k}} + i\hbar\omega)^2 = \frac{1}{8}y + \frac{1}{2}(i\zeta)^2 \frac{1}{y} + i\frac{\zeta}{2}, \quad (3.65b)$$

$$\frac{m^2}{2\hbar^4 k^3 k_F} (T_{\underline{k}} - i\hbar\omega)^2 = \frac{1}{8}y + \frac{1}{2}(i\zeta)^2 \frac{1}{y} - i\frac{\zeta}{2}, \quad (3.65c)$$

$$\ln \frac{T_{\underline{k}} + i\hbar\omega + \hbar v_F k}{T_{\underline{k}} + i\hbar\omega - \hbar v_F k} = \ln \frac{i\zeta + 1}{i\zeta - 1} - y \frac{1}{(i\zeta)^2 - 1} + \mathcal{O}(y^2), \quad (3.65d)$$

$$\ln \frac{T_{\underline{k}} - i\hbar\omega + \hbar v_F k}{T_{\underline{k}} - i\hbar\omega - \hbar v_F k} = -\ln \frac{i\zeta + 1}{i\zeta - 1} - y \frac{1}{(i\zeta)^2 - 1} + \mathcal{O}(y^2). \quad (3.65e)$$

Ezek felhasználásával a (3.62) polarizációs függvény hosszú hullámú határesetre a következő alakot ölti:

$$\Pi_{(0)}(\underline{k}, i\omega) = -\frac{mk_F}{\pi^2\hbar^2} R(\zeta) + \mathcal{O}(y), \quad (3.66a)$$

ahol³:

$$R(\zeta) = 1 + i\frac{\zeta}{2} \ln \frac{1 + i\frac{1}{\zeta}}{1 - i\frac{1}{\zeta}} = 1 - \zeta \operatorname{arctg} \frac{1}{\zeta}. \quad (3.66b)$$

A (3.59) korrelációs energia számításához is térjünk át a következő dimenziótlan változókra: $y := q/k_F$ és $\zeta := \nu/v_F q$. Ilyenkor

$$\mathbf{v}(\underline{q})\Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu) = -\frac{1}{y^2} \frac{k_{\text{TF}}^2}{k_F^2} K(y, \zeta), \quad (3.67a)$$

ahol bevezettük az ún. Thomas–Fermi hullámszámot:

$$k_{\text{TF}}^2 = \frac{4e_0^2 m k_F}{\hbar^2 \pi}, \quad (3.67b)$$

és $K(y, \zeta)$ egy dimenziótlan függvény, amiről a (3.66) egyenlet alapján tudjuk, hogy $q \ll k_F$ -re ($y \ll 1$ -re), $K(y, \zeta) \rightarrow R(\zeta)$. A korrelációs energia zérus hőmérsékleti kifejezésére így

$$\Omega_{\text{corr}}^{(1)}(0, V, \mu) = \frac{V \hbar^2 k_F^5}{(2\pi)^3 m} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} dy y^3 \left\{ \ln \left[1 + \frac{1}{y^2} \frac{k_{\text{TF}}^2}{k_F^2} K(y, \zeta) \right] - \frac{1}{y^2} \frac{k_{\text{TF}}^2}{k_F^2} K(y, \zeta) \right\} \quad (3.68)$$

adódik. Az y szerinti integrálban $y \ll 1$ esetén $K(y, \zeta)$ helyére $R(\zeta)$ írható. Vezessük be az

$$y_c^2 := \frac{k_{\text{TF}}^2}{k_F^2} R(\zeta) \quad (3.69)$$

mennyiséget. Mivel $0 < R(\zeta) \leq 1$, ezért

$$y_c^2 < \frac{k_{\text{TF}}^2}{k_F^2} = \frac{4e_0^2 m}{\hbar^2 \pi k_F} = \frac{4}{\pi} \frac{1}{a_0 k_F} = 9 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{4/3} r_s, \quad (3.70)$$

vagyis $r_s \ll 1$ esetén $y_c \ll 1$ is teljesül. A (3.68) kifejezésben az y szerinti integrál $y \rightarrow 0$ része problémás. Az $r_s \ll 1$ esetben azonban az y szerinti integrált három részre bonthatjuk:

$$\int_0^{\infty} dy \dots = \int_0^{y_c} dy \dots + \int_{y_c}^1 dy \dots + \int_1^{\infty} dy \dots \quad (3.71)$$

³Felhasználtuk, hogy:

$$\frac{1}{2i} \ln \frac{1 + ix}{1 - ix} = \operatorname{arctg} x,$$

Mindhárom integrál elvileg elvégezhető, és véges eredményt ad. Az első integrálban a logaritmus nem fejthető sorba, a második és a harmadik integrálban azonban már igen. Továbbá az első két integrálban használhatjuk a buborék (3.66) hosszúhullámú határesetét. Megmutatható, hogy a teljes y szerinti integrálhoz a döntő járulékot a (3.71) felbontás második tagja adja. Ebben a tagban a logaritmus sorbafejthető és a buborék hosszúhullámú határesetet használható, vagyis a korrelációs energia vezető rendű járulékára

$$\begin{aligned}\Omega_{\text{corr}}^{(1)}(0, V, \mu) &= -\frac{V\hbar^2 k_{\text{TF}}^4 k_{\text{F}}}{2(2\pi)^3 m} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta R^2(\zeta) \int_{y_c}^1 dy \frac{1}{y} = \\ &= \frac{V\hbar^2 k_{\text{TF}}^4 k_{\text{F}}}{2(2\pi)^3 m} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta R^2(\zeta) \ln y_c = \frac{V\hbar^2 k_{\text{TF}}^4 k_{\text{F}}}{2(2\pi)^3 m} \ln \frac{k_{\text{TF}}}{k_{\text{F}}} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta R^2(\zeta) \quad (3.72)\end{aligned}$$

kapható. A számolás utolsó lépésében kihasználtuk, hogy

$$\ln y_c = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{k_{\text{TF}}^2}{k_{\text{F}}^2} R(\zeta) \right) = \ln \left(\frac{k_{\text{TF}}}{k_{\text{F}}} \right) + \frac{1}{2} \ln R(\zeta), \quad (3.73)$$

és a vezető rendű korrekció számításához a jobb oldal 2. tagját elhagyhatjuk. Utolsó lépésként számítsuk még ki a ζ szerinti integrált⁴!

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} d\zeta R^2(\zeta) &= \int_0^1 dy \int_0^1 dz \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{y^2 z^2}{(y^2 + \zeta^2)(z^2 + \zeta^2)} = \\ &= \int_0^1 dy \int_0^1 dz \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \left(\frac{1}{y^2 + \zeta^2} - \frac{1}{z^2 + \zeta^2} \right) \frac{y^2 z^2}{z^2 - y^2} = \\ &= \pi \int_0^1 dy \int_0^1 dz \frac{yz}{y+z} = \pi \left(\frac{1}{2} - \int_0^1 dz z^2 \ln \frac{1+z}{z} \right) = \pi \frac{2}{3} (1 - \ln 2). \quad (3.74)\end{aligned}$$

Az elektrongáz korrelációs energiájának zérus hőmérsékleti kifejezésére, az elsőrendű közelítésnél bevezetett egységrendszerben, végül is

$$\frac{\Omega_{\text{corr}}^{(1)}(0, V, \mu)}{N} = \frac{2}{\pi^2} (1 - \ln 2) \ln r_s \approx 0,0622 \ln r_s \quad [\text{ryd}] \quad (3.75)$$

adódik. Az alapállapot energiája tehát — felhasználva a nulladrendű és elsőrendű járulékok (3.42) kifejezését is —

$$\frac{E}{N} = \frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} + 0,0622 \ln r_s + \dots \quad [\text{ryd}]. \quad (3.76)$$

⁴Használjuk fel, hogy

$$1 - \zeta \operatorname{arctg} \frac{1}{\zeta} = \int_0^1 dx \frac{x^2}{x^2 + \zeta^2}.$$

Megjegyzések:

1. Az alapállapot energiája (3.76) sorfejtése tovább folytatható. Ehhez egyrészt meg kell határozni az eddig elhanyagolt (másod- és magasabb rendű) Feynman-diagramok járulékát, másrészt pontosabban kell kiszámolni $\Omega_{\text{corr}}^{(1)}$ kifejezését is. A három következő tag:

$$-0,096 + 0,018 r_s \ln r_s + b r_s \quad [\text{ryd}] \quad (3.77)$$

2. A számolás során láttuk, hogy a hosszú hatótávolságú kölcsönhatás következtében a perturbációs számítás második rendjében [ahol minden diagram $\mathcal{O}(e_0^4)$ rendű] az egyik gráf járuléka divergens volt. Ez egy felösszegzést tett szükségessé az egyre magasabb rendű és egyre erősebben divergens gráfok körében. A felösszegzés eredményéül olyan véges értékű kifejezés adódott, amelyet e_0^2 hatványai szerint formálisan sorbafejtve visszakaptuk az egyre divergensebb rendeket [ld. a (3.57) összefüggést].
3. A buborék diagram (3.62) kifejezésében a logaritmusok határozott integrálok összevonásából adódtak. A kifejezésben a logaritmus fő részét kell venni. A buborék járuléka így valós függvényekkel kifejezhető az alábbi alakban:

$$\begin{aligned} \Pi_{(0)}(\underline{k}, i\omega) = & \\ = -\frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2} \left\{ 1 + \frac{m^2}{2\hbar^4 k^3 k_F} \left[4T_{\underline{k}} T_{k_F} - T_{\underline{k}}^2 + \hbar^2 \omega^2 \right] \ln \frac{(T_{\underline{k}} + \hbar v_F k)^2 + \hbar^2 \omega^2}{(T_{\underline{k}} - \hbar v_F k)^2 + \hbar^2 \omega^2} + \right. & \\ & \left. + P(\underline{k}, \omega) \right\}, \quad (3.78a) \end{aligned}$$

ahol

$$P(\underline{k}, \omega) = \begin{cases} \frac{\omega}{kv_F} \left[\arctg \left(\frac{\hbar\omega}{T_{\underline{k}} + \hbar kv_F} \right) - \arctg \left(\frac{\hbar\omega}{T_{\underline{k}} - \hbar kv_F} \right) \right], & k > 2k_F \\ -\frac{\omega}{kv_F} \left[\arctg \left(\frac{T_{\underline{k}} + \hbar kv_F}{\hbar\omega} \right) + \arctg \left(\frac{\hbar kv_F - T_{\underline{k}}}{\hbar\omega} \right) \right], & k < 2k_F. \end{cases} \quad (3.78b)$$

4. A sor r_s kis értékére konvergál. Ott, ahol r_s kicsi (nagy sűrűségű az elektrongáz) a korrelációs energia negatív, tehát erősíti a kötést. Fémekben azonban $r_s : 1,8—6$ között van. Érdekes tehát megnézni egy másik leírást az r_s nagy (kis sűrűségű elektrongáz) határesetre.

Korrelációs energia a kis sűrűségű elektrongázra (Wigner-rács)

A zérus hőmérsékletű, kis sűrűségű elektrongázban ($r_s \gg 1$) a potenciális energia fontosabb, mint a kinetikus energia. Ilyenkor az elektronok a Coulomb-taszítás következtében rácsba rendeződnek, melyet Wigner-rácsnak nevezünk. (A rácsba rendeződéshez természetesen szükséges a pozitív háttér is; ennek hiányában az elektronok kiszaladnának a felületre.) Becsüljük meg a Wigner-rács potenciális energiáját!

Tételezzük fel, hogy a szabályos Wigner-rácsban az elektronok távolsága r_0 . (Ez természetesen csak közelítőleg igaz, hiszen $r_0 = (3/4\pi n)^{1/3}$ az elektronok átlagos távolsága. A két mennyiség akkor lenne csak azonos, ha a teret le lehetne fedni gömbökkel átfedések és hézagok nélkül.) A homogén háttér következtében egy gömbön belül az össztöltés zérus, így a különböző gömbök nem hatnak kölcsön egymással. Egy gömb potenciális energiája (Coulomb-energiája) két részből áll:

$$\frac{E}{N} = \frac{E_{\text{ep}} + E_{\text{pp}}}{N}, \quad (3.79)$$

ahol E_{ep}/N a gömb közepén ülő elektron kölcsönhatási energiája a pozitív háttérrel, E_{pp}/N pedig a gömbön belüli pozitív háttér önkölcsönhatási energiája.

Az elektron potenciális energiáját könnyen kiszámíthatjuk. Nagysága:

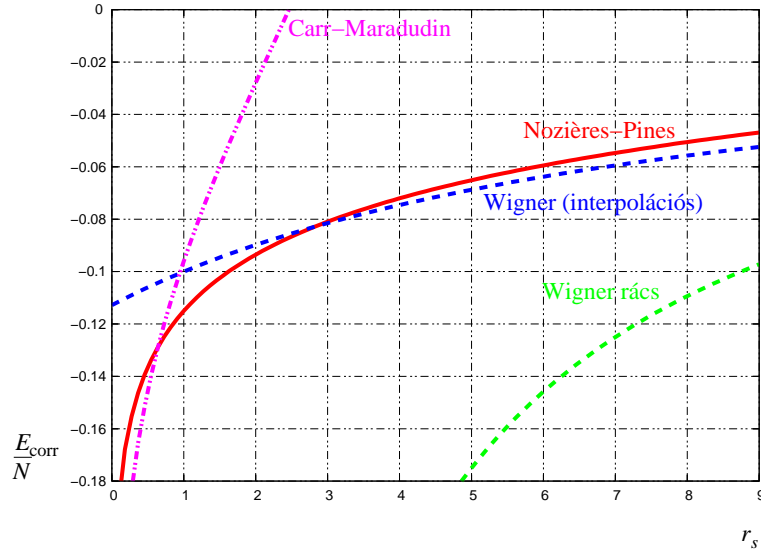
$$\frac{E_{\text{ep}}}{N} = -n \int_{r < r_0} \frac{e_0^2}{r} d^3r = -\frac{3e_0^2}{r_s^3 a_0^3} \int_0^{r_s a_0} r dr = -\frac{3e_0^2}{2r_s a_0} = -\frac{3}{r_s} \quad [\text{ryd}]. \quad (3.80)$$

A pozitív háttér önkölcsönhatását legegyszerűbben az alábbi módon számíthatjuk ki.

$$\begin{aligned} \frac{E_{\text{pp}}}{N} &= \frac{1}{2} \int_{r < r_0} d^3r \int_{r' < r_0} d^3r' \frac{e_0^2 n^2}{|\underline{r} - \underline{r}'|} = \pi e_0^2 n^2 \int_{r < r_0} d^3r \int_0^{r_0} dr' r'^2 \times \\ &\times \int_{-1}^1 \frac{du}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr'u}} = 4\pi^2 e_0^2 n^2 \int_0^{r_0} dr \int_0^{r_0} dr' r r' (|r + r'| - |r - r'|) = \\ &= \frac{3}{5} \frac{e_0^2}{r_s a_0} = \frac{6}{5} \frac{1}{r_s} [\text{ryd}] \quad (3.81) \end{aligned}$$

A (3.79) teljes energia pedig a (3.80) és a (3.81) egyenletek felhasználásával:

$$\frac{E}{N} = -\frac{1,8}{r_s} \quad [\text{ryd}]. \quad (3.82)$$



3.8. ábra. A különböző korrelációs energiák összehasonlítása.

A korrelációs energia, az az energia, ami túl megy a Hartree–Fock-közelítésen, így a kis sűrűségű elektrongáz korrelációs energiájára a (3.41) kifejezés felhasználásával:

$$\frac{E_{\text{corr}}}{N} = \frac{E_{\text{ep}} + E_{\text{pp}} - E_{\text{HF}}}{N} = -\frac{0,875}{r_s} \quad [\text{ryd}] \quad (3.83)$$

kapható. Ez a Wigner-rácsra kapott eredmény $r_s \gg 1$ esetén használható, míg a perturbációszámítással kapott a (3.75) egyenletet és az alatta található 1. megjegyzés korrekcióit is tartalmazó, ún. Carr–Maraudin-kifejezés $r_s \ll 1$ esetén jogos. A két határeset közé számos interpolációs formulát készítettek. Wigner nevéhez is fűződik egy variációs módszerrel nyert formula, mely $r_s \gg 1$ -re a (3.83) kifejezésbe megy át:

$$\frac{E_{\text{corr}}^{\text{W}}}{N} = -\frac{0,88}{r_s + 7,8} \quad [\text{ryd}]. \quad (3.84)$$

Hasznos és egyszerű interpolációs formulát adott még Nozières és Pines is:

$$\frac{E_{\text{corr}}^{\text{NP}}}{N} = -0,115 + 0,031 \ln r_s \quad [\text{ryd}]. \quad (3.85)$$

A különböző korrelációs energiákat az összevethetőség kedvéért együtt mutatjuk meg a 3.8 ábrán.

Klasszikus határeset

Térjünk vissza a (3.57) korrelációs energia kiértékelésére, és most tekintsük a klasszikus határesetet ($-\beta\mu_0 \gg 1$), amikor a betöltési szám $n_k^{(0)} = e^{\beta(\mu_0 - e_k)}$. Könnyen megmutatható, hogy a buborékgráf járuléka (3.54) a frekvencia páros függvénye⁵, vagyis az integrál elvégzése után $i\omega_n$ -nek csak páros hatványait tartalmazhatja. Klasszikus határesetben azonban $T \rightarrow \infty$, vagyis $\omega_n = 2n\pi/\beta\hbar \rightarrow \infty$. A buborék nemzérus Matsubara-frekvenciájú komponensei $1/T^2$ szerint eltűnnek. A korrelációs energia számításánál ezért csak $\omega_n = 0$ -ra kell korlátozódni. Így a korrelációs energia vezető rendű járuléka a következő:

$$\Omega_{\text{corr}}^{(1)}(T, V, \mu) = \frac{Vk_B T}{2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \left\{ \ln [1 - \mathbf{v}(\underline{q})\Pi_{(0)}(\underline{q}, 0)] + \mathbf{v}(\underline{q})\Pi_{(0)}(\underline{q}, 0) \right\}. \quad (3.86)$$

A további számolás érdekében határozzuk meg a buborék sztatikus kifejezését a klasszikus határesetben! A (3.54) kifejezésből indulva, majd az integrandust a nulla hőmérséketű számoláshoz hasonlóan szétbontva, változcseré után elérhető, hogy a betöltési számok ugyanazon argumentummal rendelkezzenek:

$$\begin{aligned} \Pi_{(0)}(\underline{k}, 0) &= (2s+1) \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{n_{\underline{k}+\underline{q}}^{(0)} - n_{\underline{q}}^{(0)}}{T_{\underline{k}+\underline{q}} - T_{\underline{q}}} = (2s+1) \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} n_{\underline{q}}^{(0)} \times \\ &\times \left[\frac{1}{T_{\underline{q}} - T_{\underline{q}-\underline{k}}} - \frac{1}{T_{\underline{k}+\underline{q}} - T_{\underline{q}}} \right] = \frac{2(2s+1)m}{(2\pi)^2 \hbar^2 k} \int d^3 q n_{\underline{q}}^{(0)} \ln \left| \frac{k-2q}{k+2q} \right|. \end{aligned} \quad (3.87)$$

Dimenziótlanítsuk az integrált az $x = q\lambda_B$ változó bevezetésével, ahol $\lambda_B = (2\pi\hbar^2/mk_B T)^{1/2}$, a már korábban is bevezetett deBroglie-hullámhossz!

$$\Pi_{(0)}(\underline{k}, 0) = -\frac{(2s+1)\beta e^{\beta\mu}}{\lambda_B^3} \varphi(k\lambda_B), \quad (3.88a)$$

ahol a bevezetett dimenziótlan függvény definíciója a következő:

$$\varphi(x) = \frac{1}{\pi x} \int_0^\infty dy e^{-\frac{y^2}{4\pi}} \ln \left| \frac{2y+x}{2y-x} \right|. \quad (3.88b)$$

A $\varphi(x)$ függvény hatványsorba fejthető $x=0$ körül, és $\varphi(0) = 1$. A (3.86) integrál dimenziótlanításához tekintsük a Coulomb-kölcsönhatás és a buborék

⁵A belátáshoz tekintsük $\Pi(\underline{k}, -i\omega_n)$ -t a (3.54) képlet alapján. Hajtsunk végre először egy $\underline{q}' = \underline{q} + \underline{k}$, majd egy $\underline{q} = -\underline{q}'$ változcserét, és így végül is visszakapjuk $\Pi(\underline{k}, i\omega_n)$ kifejezését, azaz a függvény páros ω_n -ben.

dimenziótlan szorzatát:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(\underline{q})\Pi_{(0)}(\underline{q}, 0) &= -\frac{4\pi e_0^2 (2s+1)\beta e^{\beta\mu}}{q^2 \lambda_B^3} \varphi(q\lambda_B) = \\ &= -\frac{1}{z^2} \varphi \left[2e_0 z \left(\frac{(2s+1)\pi\beta e^{\beta\mu}}{\lambda_B} \right)^{1/2} \right], \end{aligned} \quad (3.89)$$

ahol bevezettük a

$$z = \frac{q\lambda_B}{2e_0} \left(\frac{\lambda_B}{(2s+1)\pi\beta e^{\beta\mu}} \right)^{1/2} \quad (3.90)$$

dimenziótlan mennyiséget. Ennek segítségével a (3.86) korrelációs energia kifejezése a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} \Omega_{\text{corr}}^{(1)}(T, V, \mu) &= 2Ve_0^3 \left(\frac{\beta}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{(2s+1)e^{\beta\mu}}{\lambda_B^3} \right)^{3/2} \times \\ &\times \int_0^\infty dz z^2 \left(\ln \left\{ 1 + z^{-2} \varphi \left[2e_0 z \left(\frac{(2s+1)\pi\beta e^{\beta\mu}}{\lambda_B} \right)^{1/2} \right] \right\} - \right. \\ &\quad \left. - z^{-2} \varphi \left[2e_0 z \left(\frac{(2s+1)\pi\beta e^{\beta\mu}}{\lambda_B} \right)^{1/2} \right] \right). \end{aligned} \quad (3.91)$$

A korrelációs energia kifejezésében több helyen is szerepel az e_0 faktor. Szerepel az egész előtt egy e_0^3 szorzófaktorként és szerepel még az integrandusban a φ függvények belsejében. Mivel $\varphi(x)$ analitikus $x = 0$ közelében, ezért a korrelációs energia vezető rendű járulékához a φ függvények argumentumát zérusnak vehetjük. Mivel $\varphi(0) = 1$, így

$$\Omega_{\text{corr}}^{(1)}(T, V, \mu) = 2Ve_0^3 \left(\frac{\beta}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{(2s+1)e^{\beta\mu}}{\lambda_B^3} \right)^{3/2} \int_0^\infty dz z^2 [\ln(1 + z^{-2}) - z^{-2}]. \quad (3.92)$$

Az utolsó integrál pedig parciális integrálással elvégezhető; az integrál eredménye: $-\pi/3$. Felhasználva még a teljes részecskeszám (3.44) kifejezését és μ helyére μ_0 -t írva a nagykanonikus termodinamikai potenciál Hartree–Fock-közelítésen túlmenő vezető rendű korrekciójára

$$\Omega_{\text{corr}}^{(1)}(T, V, \mu_0) = -\frac{2}{3} e_0^3 \sqrt{\frac{\pi\beta}{V}} N^{3/2} \quad (3.93)$$

adódik. A (3.93) korrelációs energia e_0^3 -t tartalmaz ami szintén $\mathcal{O}(e_0^2)$ a $\mathcal{O}(e_0^4)$ helyett. A felösszegzés itt is, akárcsak a nullahőmérsékleti határesetben megváltoztatta, nemperturbatívává tette a korrelációs energiát. Szintén fontos

észrevenni, hogy a Hartree–Fock-közelítéssel ellentétben a termodinamikai potenciál RPA korrekciója független \hbar -tól, így klasszikus határesetben korrekciója erősebb a Hartree–Fock közelítés korrekciójánál.

A fermiongáz állapotegyenletének meghatározásához tekintsük a szabadenergia (3.28) kifejezését! Ez alapján

$$F(T, V, N) = F_0(T, V, N) + \Omega_{\text{corr}}^{(1)}(T, V, \mu_0), \quad (3.94a)$$

mivel a Hartree–Fock-korrekció a klasszikus határesetben elhagyható. És ahol

$$F_0(T, V, N) = \Omega_0(T, V, \mu_0) + \mu_0 N, \quad (3.94b)$$

$$N = \frac{(2s+1)e^{\beta\mu_0}}{\lambda_B^3} V. \quad (3.94c)$$

A rendszer nyomását a

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} \quad (3.95)$$

termodinamikai összefüggés szolgáltatja. Egyrészt

$$-\left(\frac{\partial F_0}{\partial V}\right)_{T,N} = \frac{Nk_B T}{V}, \quad (3.96)$$

másrészt a (3.93) kifejezés felhasználásával

$$-\left(\frac{\partial \Omega_{\text{corr}}^{(1)}(T, V, \mu_0)}{\partial V}\right)_{T,N} = -\frac{1}{3}\sqrt{\pi}\beta e_0^3 n^{3/2}. \quad (3.97)$$

A (3.96) és a (3.97) kifejezések összege előállítja a teljes nyomást. A térfogattal történő átszorzás után a gáz állapotegyenletére a következő kifejezés kapható:

$$pV = Nk_B T \left[1 - \frac{\sqrt{\pi}}{3} \left(\frac{e_0^2 n^{1/3}}{k_B T} \right)^{3/2} + \mathcal{O}(e_0^4) \right], \quad (3.98)$$

melyet a klasszikus, töltött fermiongáz (klasszikus plazma) Debye–Hückel-egyenletének neveznek. A kölcsönhatás következtében megjelenő korrekció előjele negatív; a kölcsönhatás csökkenti a nyomást. A végeredményből megsejthető, hogy a sorfejtés kis paramétere az

$$\frac{e_0^2 n^{1/3}}{k_B T} \ll 1 \quad (3.99)$$

mennyiség. A zérus hőmérsékleti határesettel ellentétben, az RPA eredménye a klasszikus határesetben híg gáz esetén lehet pontos.

3.4.1. Sztatikus szennyezés elektromos potenciálja

Az eredmények interpretálása érdekében tekintsük a $Z \cdot e$ töltésű sztatikus szennyezés hatását! Az elektronrendszer (3.10) Hamilton-operátorához, a szennyezés által létrehozott elektromos potenciál miatt, új tagot kell hozzáadnunk, amit perturbációnak tekintünk:

$$\hat{H}_{sz} = \sum_{\underline{k}, \underline{q}, s} Z \mathbf{v}(\underline{q}) \hat{a}_{\underline{k}+\underline{q}, s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}, s}. \quad (3.100)$$

A (3.100) perturbáció által leírt külső potenciál következtében a rendszer már nem homogén (sérül a térbeli eltolási szimmetria). A koordináta reprezentációban felírt gráfszabályok csak annyiban módosulnak, hogy (3.100) következtében új, két lábú kölcsönhatási vertex jelenik meg. Ez a vertex, a kétrészecske kölcsönhatáshoz hasonlóan, a perturbációs számítás minden rendjében járulékot ad a Green-függvényhez (sajátenergiához).

A számolásokat továbbra is impulzus reprezentációban végezzük, azonban a külső perturbáció által megsértett eltolási invariancia miatt a kölcsönható Green-függvény már nem diagonális a hullámszámban (a rendszerben a teljes impulzus nem marad meg). A kölcsönható Green-függvény definíciója ilyenkor a következő:

$$\mathcal{G}_{s, s'}(\underline{k}, \tau, \underline{k}', \tau') = - \left\langle T_\tau \left[\hat{a}_{\underline{k}, s}(\tau) \hat{a}_{\underline{k}', s'}^\dagger(\tau') \right] \right\rangle. \quad (3.101)$$

Mivel azonban a szabad rendszer továbbra is eltolásinvariáns, ezért a szabad Green-függvény diagonális marad a hullámszámban:

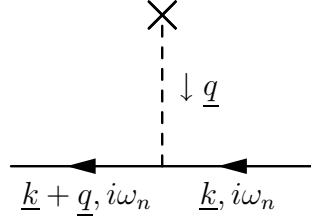
$$\mathcal{G}_{(0)s, s'}(\underline{k}, \underline{k}', i\omega_n) = \frac{\delta_{s, s'} \delta_{\underline{k}, \underline{k}'}}{i\omega_n - \hbar^{-1}(T_{\underline{k}} - \mu)}. \quad (3.102)$$

A szabad Green-függvényt rögtön Matsubara-képben adtuk meg, és kihasználtuk, hogy a rendszer összspinje továbbra is megmarad, így a szabad Green-függvény diagonális a spin indexben is. Ez utóbbi tulajdonság természetesen a (3.101) kölcsönható Green-függvényre is fenn áll.

A (3.100) perturbációhoz rendelhető Feynman-diagramot impulzus reprezentációban a 3.9. ábrán láthatjuk. A gráf járuléka (a külső részecskevonalak nélkül):

$$-\frac{Z \mathbf{v}(\underline{q})}{\hbar}. \quad (3.103)$$

A gráfban megjelenő \underline{q} impulzusra összegezni kell. (Így az elvégzendő hullámszám integrálok száma már nem a gráfban található független hurkok számával lesz egyenlő, hanem ehhez még a külső potenciált tartalmazó vertexek számát is hozzá kell adni).



3.9. ábra. A külső sztatikus szennyezés figyelembe vételekor megjelenő új vertex.

A kétrészecske kölcsönhatáshoz hasonlóan, a sztatikus szennyezés által létrehozott elektromos potenciálhoz is lehet egy effektív potenciált rendelni, amely már tartalmazza a közeg polarizációjának hatását is. A sztatikus szennyezés effektív potenciáljának definíciója a 3.10. ábrán látható. Az ábra alapján, a sztatikus szennyezés effektív potenciálját $\mathbf{U}(\underline{q})$ -val jelölve, a rá vonatkozó egyenlet a következő:

$$\mathbf{U}(\underline{q}) = Z\mathbf{v}(\underline{q}) \left[1 + \mathbf{v}(\underline{q})\Pi(\underline{q}, 0) + (\mathbf{v}(\underline{q})\Pi(\underline{q}, 0))^2 + \dots \right]. \quad (3.104)$$

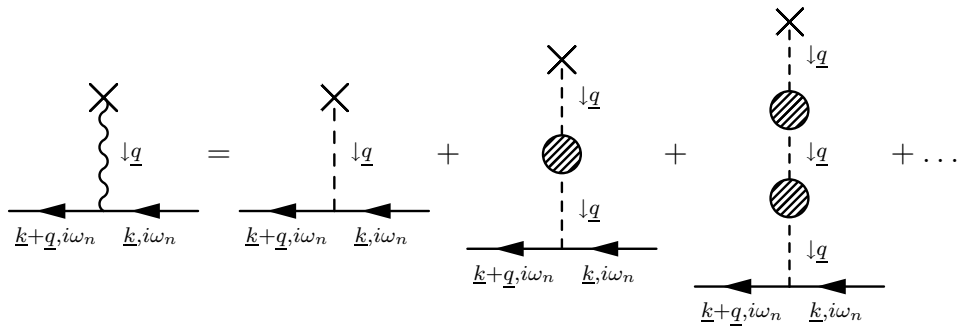
A szögletes zárójelben lévő mértani sort felösszegezve, az effektív potenciálra

$$\mathbf{U}(\underline{q}) = \frac{Z\mathbf{v}(\underline{q})}{\mathcal{E}(\underline{q}, 0)}, \quad (3.105a)$$

ahol

$$\mathcal{E}(\underline{q}, 0) := 1 - \mathbf{v}(\underline{q})\Pi(\underline{q}, 0) \quad (3.105b)$$

a sztatikus dielektromos függvény.



3.10. ábra. A külső sztatikus szennyezés effektív potenciálja. A hullámos vonallal ábrázolt vertex $-\hbar^{-1}\mathbf{U}(\underline{q})$ -t, az effektív kölcsönhatást jelöli.

Határozzuk meg a (3.105a) effektív potenciál koordinátafüggését RPA-ban. Ehhez egy inverz Fourier-transzformációra van szükség:

$$U(\underline{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \mathbf{U}(\underline{k}) e^{i\underline{k}\underline{r}}. \quad (3.106)$$

A véletlen fázisú közelítésben a polarizációs függvényt a legalacsonyabb rendű járulékaival, a buborék diagrammal vesszük figyelembe. Ilyenkor

$$\mathcal{E}_{(0)}(\underline{q}, 0) = 1 - \mathbf{v}(\underline{q}) \Pi_{(0)}(\underline{q}, 0). \quad (3.107)$$

Mivel a buborékdiagramok sztatikus járuléka eltérő a nulla hőmérsékleti és a klasszikus határesetekben, ezért a számolást itt is külön-külön kell elvégezni.

Nulla hőmérsékleti határeset

Zérus hőmérsékleten buborék diagram sztatikus határesetét a (3.63) kifejezés adja. Ha csak kis hullámszámokra korlátozódva ezt a kifejezést tovább közelítjük, akkor

$$\mathbf{v}(\underline{k}) \Pi_{(0)}(\underline{k}, 0) = -\frac{k_{\text{TF}}^2}{k^2}, \quad (k \ll k_{\text{F}}), \quad (3.108)$$

és az effektív kölcsönhatás Fourier-transzformáltjára a következő kifejezés kapható $k \ll k_{\text{F}}$ esetén:

$$\mathbf{U}(\underline{k}) = \frac{4\pi Z e_0^2}{k^2 + k_{\text{TF}}^2}. \quad (3.109)$$

Ha ezt az alakot használhatjuk minden hullámszámmra, akkor (3.106) alapján

$$U(\underline{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \frac{4\pi Z e_0^2}{k^2 + k_{\text{TF}}^2} e^{i\underline{k}\underline{r}} = \frac{Z e_0^2}{r} e^{-k_{\text{TF}} r} \quad (3.110)$$

adódik, amely egy Yukawa-szerű, leárnýékolt potenciál. Az árnyékolási hossz:

$$r_{\text{TF}} = \frac{1}{k_{\text{TF}}} = \left(\frac{\hbar^2 \pi}{4e_0^2 k_{\text{F}} m} \right)^{1/2} = \left(\frac{\pi a_0}{4k_{\text{F}}} \right)^{1/2}. \quad (3.111)$$

A helyzet azonban nem ilyen egyszerű. Az inverz Fourier-transzformációnál a nagy hullámszámú komponensekre is szükség van. Ha a buborék sztatikus járulékána teljes (3.63) kifejezést megtartjuk, akkor könnyen ellenőrizhető, hogy

$$\left. \frac{\partial \mathcal{E}_{(0)}(\underline{k}, 0)}{\partial k} \right|_{k=2k_{\text{F}}} = \infty. \quad (3.112)$$

A szinguláris viselkedés az inverz Fourier-transzformációt jelentősen bonyolítja, a végeredményt kvalitatíve is megváltoztatja. A számolás elvégezhető, de terjedelmi okokból itt ezt nem közöljük. Végeredményül a szennyezés által létrehozott sztatikus, effektív potenciálra

$$U(\underline{r}) \sim \frac{\cos(2k_{\text{F}}r + \alpha)}{r^3}, \quad \left(r \gg \frac{1}{k_{\text{TF}}} \right) \quad (3.113)$$

adódik, mely szintén rövid hatótávolságú (leárnýékolt) potenciál, amely előjele a Fermi-impulzussal összemérhető távolságon belül periodikusan előjelet vált. Ezt az oszcillációt Friedel-oszcillációnak nevezik és számos szilárdtest-fizikai jelenség hátterében megtalálható.

Klasszikus határeset

Klasszikus határesetben a (3.88a) kifejezés felhasználásával

$$\mathbf{v}(\underline{k})\Pi_{(0)}(\underline{k}, 0) = -\frac{4\pi e_0^2 (2s+1)\beta e^{\beta\mu}}{k^2 \lambda_{\text{B}}^3} \varphi(k\lambda_{\text{B}}) = -\frac{\kappa^2}{k^2} \varphi(k\lambda_{\text{B}}), \quad (3.114a)$$

ahol

$$\kappa^2 = 4\pi e_0^2 \frac{(2s+1)\beta e^{\beta\mu}}{\lambda_{\text{B}}^3} = 4\pi e_0^2 \beta n \quad (3.114b)$$

az ún. Debye-hullámszám. Klasszikus határesetben $k\lambda_{\text{B}} \ll 1$ vehető, és ilyenkor a (3.88b) alapján $\varphi(k\lambda_{\text{B}}) \approx 1$, melyből

$$U(\underline{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \frac{4\pi Z e_0^2}{k^2 + \kappa^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{Z e_0^2}{r} e^{-\kappa r}, \quad (r \gg r_{\text{D}}) \quad (3.115)$$

Yukawa-potenciál adódik. Itt az árnyékolási hossz az ún. Debye-hossz:

$$r_{\text{D}} = \frac{1}{\kappa} = \left(\frac{k_{\text{B}}T}{4\pi e_0^2 n} \right)^{1/2}. \quad (3.116)$$

Végezetül becsüljük meg mind zérus hőmérsékleten mind pedig a klasszikus határesetben az árnyékolási hosszban belüli részecskék számát! Zérus hőmérsékleten a (3.111) árnyékolási hossz felhasználásával ezek száma

$$n \frac{4r_{\text{TF}}^3 \pi}{3} = \left(\frac{\pi a_0}{4k_{\text{F}} r_0^2} \right)^{3/2} = \frac{\pi}{12} \left(\frac{1}{r_s} \right)^{3/2} \gg 1, \quad (3.117)$$

ha r_s kicsi, vagyis ott, ahol a közelítés jó. Klasszikus határesetben a (3.116) Debye-hossz felhasználásával, az árnyékolási gömbön belüli részecskék száma:

$$n \frac{4r_{\text{D}}^3 \pi}{3} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{k_{\text{B}}T}{4\pi e_0^2 n^{1/3}} \right)^{3/2} \gg 1, \quad (3.118)$$

ott ahol (3.99) kifejezés értelmében a közelítés jó. Érdekes észrevétel, hogy bár zérus hőmérsékleten sűrű gáz esetén, klasszikus határesetben híg gáz esetén jó az RPA, mégis mindkét határesetben a közelítés használhatóságának a feltétele megfogalmazható úgy is, hogy az árnyékolási hosszban sok részecskének kell lennie.

4. fejezet

Elemi gerjesztések

Az N kölcsönható részecskékből álló kvantummechanikai rendszer dinamikájának vizsgálata általában igen bonyolult feladat. Alacsony hőmérsékleten azonban a kölcsönható rendszer dinamikája leírható egy közelítőleg ideális gáz, az elemi gerjesztések gáza segítségével. Ebben a fejezetben ezt a dinamikai leírást tárgyaljuk a soktestprobléma Green-függvényes módszere segítségével. Vizsgálni fogjuk az elemi gerjesztések és a propagátorok kapcsolatát, az elemi gerjesztések használhatóságának feltételeit és meghatározásuk módját. Alkalmazásként az előző fejezetben vizsgált elektrongáz példáján mutatjuk be az itt megismert fogalmakat.

Az elemi gerjesztéseknek két nagy fajtája van, az egyrészecske elemi gerjesztések, vagy más néven kvázi-részecskék, és a kollektív gerjesztések. A kvázi-részecske gerjesztések egy részecske hozzáadásával, vagy elvételével kapcsolatos energiaváltozások, szemben a kollektív gerjesztésekkel, amelyek az egész rendszerre kifejtett gyenge külső perturbációra adott választ írják le. Egyrészecske gerjesztés kapcsán érdemes pl. egy a szilárdtesthez hozzáadott elektronra, vagy elektron-lyuk párra gondolni, míg kollektív gerjesztés alatt pl. egy fononra (sűrűség hullám kvantumra), ami az egész szilárdtest válasza a külső mechanikai perturbációra.

4.1. Egyrészecske elemi gerjesztések

Az egyrészecske elemi gerjesztések (kvázi-részecskék) az egyrészecske propagátorral (Green-függvénnyel) hozhatók kapcsolatba. A kapcsolat pontos feltárásához vezessük be először a rendszer spektrálfüggvényét az alábbi definíció alapján!

$$\rho(\underline{r}, s, t; \underline{r}', s', t') := \left\langle [\hat{\Psi}(\underline{r}, s, t), \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', t')]_{\mp} \right\rangle =$$

$$= \text{Sp} \left\{ \hat{\rho}_G [\hat{\Psi}(\underline{r}, s, t), \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', t')]_{\mp} \right\} = \delta_{s,s'} \rho(\underline{r}, s, t; \underline{r}', s', t'), \quad (4.1)$$

ahol $[\hat{A}, \hat{B}]_{\mp}$ az \hat{A} és \hat{B} operátorok kommutátora bozonok, míg antikommütátora fermionok esetén, t a „valós idő” és az operátorok időfüggését az alábbi kifejezés definiálja

$$\hat{\Psi}(\underline{r}, s, t) = e^{i\frac{\hat{K}t}{\hbar}} \hat{\Psi}(\underline{r}, s) e^{-i\frac{\hat{K}t}{\hbar}}. \quad (4.2)$$

Ez a kép átmenet a (2.6) K-kép és a Heisenberg-kép között, mivel ez a transzformáció, ellentétben a K-képnél értelmezett párjával, a megjelenő i miatt már unitér, de a transzformáció generátorául továbbra sem a Hamilton-operátort, hanem \hat{K} -t használjuk. A (4.1) kifejezés végén kihasználtuk, hogy a kölcsönhatás spinfüggetlen, és így a spektrálfüggvény, akár csak a hőmérsékleti Green-függvény diagonális a spinváltozóban és a főátlóban álló elemek megegyeznek. A továbbiakban a spinváltozót (ahol ez nem félrevezető) nem írjuk ki, és mindig a főátló egy elemére gondolunk.

A nyomképzés műveletét a Fock-tér egy speciálisan választott teljes ortonormált rendszerének segítségével végezzük el:

$$\text{Sp}(\dots) = \sum_n \langle n | \dots | n \rangle, \quad (4.3)$$

ahol az összegzésnél n befutja a teljes indexhalmazt, amire $\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}$. Mivel az általunk vizsgált rendszereknél \hat{H} és \hat{N} felcserélhetők (és emiatt mindkettő felcserélhető $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$ -el is), ezért ezen operátoroknak van közös sajátvektorrendszerük. Válasszuk az $|n\rangle$ teljes ortonormált rendszert ezen közös sajátvektor rendszerből, vagyis

$$\hat{N} |n\rangle = N_n |n\rangle, \quad (4.4a)$$

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (4.4b)$$

$$\hat{K} |n\rangle = K_n |n\rangle, \quad \text{ahol: } K_n = E_n - \mu N_n, \quad (4.4c)$$

$$\hat{\rho}_G |n\rangle = w_n |n\rangle, \quad \text{és } w_n = \frac{1}{Z_G} e^{-\beta K_n}. \quad (4.4d)$$

Az utolsó egyenlőség azért áll fenn, mert a sűrűségmátrix \hat{K} mátrixfüggvénye, így ennek is sajátvektora az, ami \hat{K} -nak.

Fejtsük ki a (4.1) spektrálfüggvényben a nyomképzés műveletét!

$$\begin{aligned} \rho(\underline{r}, t; \underline{r}', t') &= \sum_{m,n} w_n \left[\langle n | \hat{\Psi}(\underline{r}, t) | m \rangle \langle m | \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', t') | n \rangle \mp \right. \\ &\quad \left. \mp \langle n | \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', t') | m \rangle \langle m | \hat{\Psi}(\underline{r}, t) | n \rangle \right] = \sum_{m,n} w_n \left[\langle n | \hat{\Psi}(\underline{r}) | m \rangle \langle m | \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}') | n \rangle \times \right. \\ &\quad \left. \times e^{i\frac{K_n - K_m}{\hbar}(t-t')} \mp \langle n | \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}') | m \rangle \langle m | \hat{\Psi}(\underline{r}) | n \rangle e^{-i\frac{K_n - K_m}{\hbar}(t-t')} \right]. \quad (4.5) \end{aligned}$$

Az első kifejezésben a két téroperátor szorzata közé beillesztettük az egységoperátort:

$$\hat{1} = \sum_m |m\rangle \langle m|. \quad (4.6)$$

Az egyenlőségjel után pedig kihasználtuk, hogy a választott teljes rendszer sajátvektora $e^{i\frac{\hat{K}}{\hbar}t}$ -nek is. A kifejezés második tagjában cseréljük fel az m és n összegző indexeket és használjuk ki, hogy

$$w_m = \frac{1}{Z_G} e^{-\beta K_m} = w_n e^{\beta(K_n - K_m)}. \quad (4.7)$$

A spektrálfüggvényre így végül is

$$\rho(\underline{r}, t; \underline{r}', t') = \sum_{m,n} w_n A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}') \left[1 \mp e^{\beta(K_n - K_m)} \right] e^{i\frac{K_n - K_m}{\hbar}(t - t')} \quad (4.8a)$$

adódik, ahol bevezettük az

$$A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}') = \langle n | \hat{\Psi}(\underline{r}) | m \rangle \langle m | \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}') | n \rangle \quad (4.8b)$$

menntiséget. $A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}')$ csak abban az esetben különbözik zérustól, ha az $|m\rangle$ állapothoz tartozó részecskeszám sajátérték eggyel több, mint az $|n\rangle$ állapothoz tartozó, mivel $\hat{\Psi}(\underline{r})$ téroperátor eggyel csökkenti (illetve $\hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}')$ eggyel növeli) a részecskeszámot, és az eltérő sajátértékhez tartozó állapotok egymásra ortogonálisak. Ezt az alakot, amihez a nyomképzés műveletének a (4.4) bázison vett elvégzésével, továbbá a (4.6) teljes rendszer beszúrásával jutottunk, nevezik a spektrálfüggvény Lehmann-reprezentációjának.

A (4.8a) kifejezésből látszik, hogy a spektrálfüggvény csak a $t - t'$ időkülönbségtől függ, így Fourier-transzformáltja az alábbi definíció alapján értelmezhető:

$$\rho(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \rho(\underline{r}, t; \underline{r}', 0) e^{i\omega t}. \quad (4.9a)$$

Az inverz transzformáció képlete:

$$\rho(\underline{r}, t; \underline{r}', t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \rho(\underline{r}, \underline{r}', \omega) e^{-i\omega(t-t')}. \quad (4.9b)$$

A (4.9) kifejezések segítségével a (4.8a) spektrálfüggvény Fourier-transzformáltja:

$$\rho(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = 2\pi \sum_{m,n} w_n A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}') \left[1 \mp e^{\beta(K_n - K_m)} \right] \delta\left(\omega - \frac{K_m - K_n}{\hbar}\right). \quad (4.10)$$

A spektrálfüggvény (4.10) alakjából már érthető az elnevezése. A spektrálfüggvénynek azoknál a frekvenciáknál vannak éles csúcsai, amikre teljesül, hogy $\omega = \hbar^{-1}(K_m - K_n)$, vagyis két eggyel eltérő részecskeszámú állapotok energiakülönbségével egyenlő.

Könnyen ellenőrizhető a spektrálfüggvényre vonatkozó alábbi két fontos összesszabály:

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \rho(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = \delta^{(3)}(\underline{r} - \underline{r}'), \quad (4.11a)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\rho(\underline{r}, \underline{r}', \omega)}{e^{\beta\hbar\omega} \mp 1} &= \sum_{n,m} w_m \langle n | \hat{\Psi}(\underline{r}) | m \rangle \langle m | \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}') | n \rangle = \\ &= \sum_m \langle m | \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}') \hat{\Psi}(\underline{r}) | m \rangle = \langle \hat{n}(\underline{r}, \underline{r}') \rangle. \end{aligned} \quad (4.11b)$$

Emlékeztetünk rá, hogy $\langle n \rangle$ most az egyik spinirányhoz tartozó átlagsűrűség, a teljes sűrűség ennek $(2s + 1)$ szerese. A (4.11a) összesszabály belátásához tekintsük a kifejezés bal oldalát, mely éppen a (4.9b) inverz Fourier-transzformáció képlete $t = t'$ esetén, tehát az egyidős spektrálfüggvényt határozza meg, ami a (4.1) definíció alapján nem más, mint az egyidős kommutátor (antikommutátor) várható értéke. Mivel pedig az egyidős kommutátor (antikommutátor) az egységoperátor számszorosa, az egységoperátor átlaga pedig 1, így az első összesszabály teljesül. A (4.11b) összesszabály belátásához tekintsük először a (4.10) kifejezést. Először írjuk át w_n -t w_m -re a (4.7) összefüggés felhasználásával. A Dirac-delta segítségével végezzük el a frekvencia szerinti integrált, majd egyszerűsítsünk a nevezőben és a számlálóban is egyaránt szereplő $e^{\beta(K_m - K_n)} \mp 1$ -el.

Homogén rendszer esetén a teljes impulzus operátora

$$\hat{\underline{P}} = \hbar \sum_{\underline{k}, s} \underline{k} \hat{a}_{\underline{k}, s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}, s} \quad (4.12)$$

szintén felcserélhető a (4.4) kifejezésekben szereplő operátorokkal. Ilyenkor az $\{|n\rangle\}$ teljes ortonormált rendszer megválasztható úgy hogy az impulzus operátornak is sajátvektor-rendszere legyen az alábbi sajátértékegyenlet szerint:

$$\hat{\underline{P}} |n\rangle = \underline{P}_n |n\rangle \quad (4.13)$$

A téroperátorokat az (1.35) definíciójuk és a (2.95) egyrészecske hullámfüggvények felhasználásával az alábbi alakban írhatjuk:

$$\hat{\Psi}(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} e^{i\underline{k}\underline{r}}, \quad (4.14a)$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger e^{-i\underline{k}\underline{r}}. \quad (4.14b)$$

A (4.10) spektrálfüggvényben koordinátafüggés csak $A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}')$ -n keresztül lép fel. Vizsgáljuk meg most ezt a mennyiséget a téroperátorok (4.14) alakjának felhasználásával!

$$A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} \langle n | \hat{a}_{\underline{k}} | m \rangle \langle m | \hat{a}_{\underline{k}'}^\dagger | n \rangle e^{i(\underline{k}\underline{r} - \underline{k}'\underline{r}')}. \quad (4.15)$$

Mivel a választott teljes rendszer impulzus sajátállapot is, ezért a különböző impulzus sajátértékhez tartozó állapotok egymásra ortogonálisak. A (4.15) kifejezés jobb oldalán az összegzésen belül a szorzat első tényezője akkor lesz zérustól különböző, ha $\underline{P}_n = \underline{P}_m - \hbar \underline{k}$, a második tényező pedig akkor, ha $\underline{P}_m = \underline{P}_n + \hbar \underline{k}'$. Tehát az összegzés azon tagjai különbözhetnek zérustól, amikre $\underline{k} = \underline{k}'$. Végezzük el a \underline{k}' szerinti összegzést! Így azt kapjuk, hogy:

$$A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \langle n | \hat{a}_{\underline{k}} | m \rangle \langle m | \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger | n \rangle e^{i\underline{k}(\underline{r} - \underline{r}')} = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} A_{m,n}(\underline{k}) e^{i\underline{k}(\underline{r} - \underline{r}')}, \quad (4.16)$$

ahol bevezettük az

$$A_{m,n}(\underline{k}) := \langle n | \hat{a}_{\underline{k}} | m \rangle \langle m | \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger | n \rangle \quad (4.17)$$

jelölést. Mivel a (4.16) kifejezés szerint a (4.10) spektrálfüggvény csak a koordináták különbségétől függ, így Fourier-transzformáltja a következő alakot ölti:

$$\rho(\underline{k}, \omega) = \int d^3r \rho(\underline{r}, 0, \omega) e^{-i\underline{k}\underline{r}}, \quad (4.18a)$$

$$\rho(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \rho(\underline{k}, \omega) e^{i\underline{k}(\underline{r} - \underline{r}')}. \quad (4.18b)$$

Behelyettesítve a (4.16) alakot a (4.10) összefüggésbe és felhasználva a (4.18b) kifejezést, a spektrálfüggvényre impulzusreprezentációban a következő kapható:

$$\rho(\underline{k}, \omega) = 2\pi \sum_{m,n} w_m A_{m,n}(\underline{k}) \left[e^{\beta \hbar \omega} \mp 1 \right] \delta \left(\omega - \frac{K_m - K_n}{\hbar} \right), \quad (4.19)$$

ahol felhasználtuk még a (4.7) összefüggést, hogy w_n helyére w_m -et írjunk és, hogy a δ -függvénynek köszönhetően az exponenciális függvény argumentumában $\hbar^{-1}(K_m - K_n)$ helyére ω írható. A spektrálfüggvényre vonatkozó két

összegszabály alakja impulzusreprezentációban a következő:

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \rho(\underline{k}, \omega) = 1, \quad (4.20a)$$

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\rho(\underline{k}, \omega)}{e^{\beta\hbar\omega} \mp 1} = \sum_{m,n} w_m A_{m,n}(\underline{k}) = \sum_m w_m \langle m | \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}} | m \rangle = n_{\underline{k}} \equiv n_{\underline{k},s}. \quad (4.20b)$$

Két másik fontos tulajdonság:

1. $\rho(\underline{k}, \omega)$ valós, mivel $A_{m,n}(\underline{k}) = |\langle n | \hat{a}_{\underline{k}} | m \rangle|^2$ valós és így (4.19) minden tagja valós.
2. $\frac{\rho(\underline{k}, \omega)}{e^{\beta\hbar\omega} \mp 1} > 0$, ami szintén közvetlenül ellenőrizhető a (4.19) kifejezésből. Így tehát fermionok esetén $\rho(\underline{k}, \omega) > 0$, bozonok esetén pedig $\text{sign}(\omega)\rho(\underline{k}, \omega) > 0$.

Az elemi gerjesztések vizsgálatának másik fontos mennyisége a retardált Green-függvény, melyet az alábbi módon értelmezzünk:

$$\begin{aligned} iG^R(\underline{r}, s, t; \underline{r}', s', t') &:= \Theta(t - t') \left\langle [\hat{\Psi}(\underline{r}, s, t), \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', s', t')]_{\mp} \right\rangle = \\ &= \Theta(t - t') \rho(\underline{r}, s, t; \underline{r}', s', t') = i\delta_{s,s'} G^R(\underline{r}, s, t; \underline{r}', s, t'), \end{aligned} \quad (4.21)$$

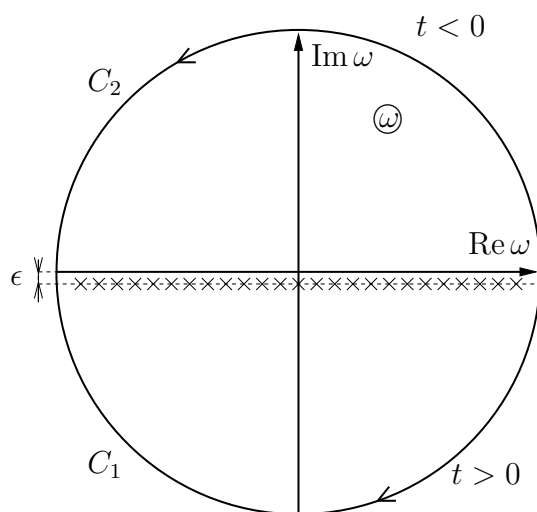
ahol $\Theta(t - t')$ a Heavyside-függvény, mely értéke 1, ha argumentuma pozitív és értéke zérus egyébként. A retardált Green-függvény is diagonális a spin változóban és a főátlóban álló elemei megegyeznek. A spinváltozót expliciten a retardált Green-függvényben sem fogjuk feltüntetni. A spektrálfüggvény (4.8a) alakjának felhasználásával a retardált Green-függvény kifejezésére

$$iG^R(\underline{r}, t; \underline{r}', t') = \Theta(t - t') \sum_{m,n} w_n A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}') \left[1 \mp e^{\beta(K_n - K_m)} \right] e^{i \frac{K_n - K_m}{\hbar} (t - t')} \quad (4.22)$$

adódik, mely szintén csak $t - t'$ -től függ, a két időargumentumtól külön-külön nem. A retardált Green-függvény idő szerinti Fourier-transzformáltja:

$$\begin{aligned} G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega) &= \int_0^\infty dt G^R(\underline{r}, t; \underline{r}', 0) e^{i(\omega + i\epsilon)t} = \\ &= \sum_{m,n} w_n \frac{A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}')}{\omega - \hbar^{-1}(K_m - K_n) + i\epsilon} \left[1 \mp e^{\beta(K_n - K_m)} \right]. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Mivel az integrandus, a Heaviside-függvény miatt, csak $t > 0$ -ra különbözik zérustól, így az integrál alsó határát 0-nak választhattuk. Az integrálban



4.1. ábra. A retardált Green-függvény inverz Fourier-transzformálásához.

megjelenő $\epsilon > 0$ regularizációs paraméter azért szükséges, mert a retardált Green-függvény nem tart zérushoz $t \rightarrow \infty$ esetén (az improprius integrál nem konvergens e nélkül). Bár első ránézésre úgy tűnik, hogy a végeredményben már ϵ nullának vehető, azonban mindjárt látni fogjuk, hogy ez nem így van; ϵ -t meg kell tartani infinitezimálisan kis pozitív számnak. Az időfüggő retardált Green-függvényt (4.23) inverz Fourier-transzformálásával kaphatjuk vissza:

$$G^R(\underline{r}, t; \underline{r}', t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega) e^{-i\omega(t-t')}. \quad (4.24)$$

A $-\infty$ -tól ∞ -ig terjedő frekvenciaintegrált a reziduum-tétel segítségével tudjuk elvégezni. Ehhez tekintsük a 4.1. ábrát. $t > t'$ esetén az integrálási utat kiegészíthetjük az alsó félsíkon haladó, végtelen nagy sugarú C_1 félkörrel, hiszen $e^{-i\omega(t-t')} = e^{-i\text{Re}\omega(t-t')} e^{\text{Im}\omega(t-t')}$, mely második tényezője $t > t'$ és $\text{Im}\omega < 0$ esetén exponenciálisan zérushoz tart, vagyis erre a félkörre vett integrál zérus. Az integrál értékét így az alsó félsíkon lévő pólusok reziduumának összegéből számíthatjuk, mely zérustól különböző. $t < t'$ esetén azonban az integrálási utat a felső félsíkon haladó, végtelen nagy sugarú C_2 félkörrel lehet kiegészíteni, mivel az integrál járuléka ezen a félkörön tűnik el. A felső félsíkon azonban nincs pólus (hiszen ϵ -al az alsó félsíkra toltuk a pólusokat), így a retardált Green-függvény $t < t'$ esetén zérus értékű (összhangban a definícióval). Ha ϵ értékét zérusnak vettük volna a (4.23) Fourier-transzformáltban, akkor a pólusok a valós tengelyre estek volna, és az inverz transzformáció során a frekvenciaintegrál aluldefiniált lett volna.

Az $\epsilon \rightarrow 0$ határesetet az előbb tárgyalt analitikus tulajdonságok szem előtt tartása mellett el tudjuk végezni az alábbi igen hasznos összefüggés segítségével:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\epsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x), \quad \text{ahol } x \text{ valós.} \quad (4.25)$$

A (4.25) kifejezés szigorúan csak integrál jel mögött érvényes, melyet mutat a képzetes részben megjelenő Dirac-delta is. A \mathcal{P} szimbólum a Cauchy-féle főértékintegrálra utal. A kifejezés származtatása a bal oldal valós és képzetes részre bontásával történik:

$$\frac{1}{x + i\epsilon} = \frac{x}{x^2 + \epsilon^2} - i \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2}.$$

Valós x mellett a jobb oldal első tagja a kifejezés valós része, melynek az x szerinti integrálja elvégezhető és az $\epsilon \rightarrow 0$ határátmenet egyértelmű, a Cauchy-féle főértékintegrált szolgáltatja. A kifejezés második tagja tisztán képzetes (ha x valós) és egy haranggörbét ad, amely félértékszélessége ϵ -al arányos, magassága pedig $1/\epsilon$ -al. Ennek x szerinti ($-\infty$ -tól ∞ -ig terjedő) integrálja független ϵ -tól, értéke $-i\pi$, ezért az $\epsilon \rightarrow 0$ határesetben Dirac-deltába megy át. A (4.25) kifejezés segítségével a retardált Green-függvény valós ω mellett:

$$G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = \text{Re } G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega) + i \text{Im } G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega), \quad (4.26a)$$

ahol:

$$\text{Re } G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = \sum_{m,n} w_n \mathcal{P} \frac{A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}')}{\omega - \hbar^{-1}(K_m - K_n)} \left[1 \mp e^{\beta(K_n - K_m)} \right], \quad (4.26b)$$

$$\text{Im } G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = -\pi \sum_{m,n} w_n A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}') \left[1 \mp e^{\beta(K_n - K_m)} \right] \delta\left(\omega - \frac{K_m - K_n}{\hbar}\right). \quad (4.26c)$$

A retardált Green-függvény és a spektrálfüggvény (4.10) alakjának összevetésével látható, hogy valós ω esetén

$$\text{Im } G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = -\frac{1}{2} \rho(\underline{r}, \underline{r}', \omega). \quad (4.27)$$

A retardált Green-függvényben, illetve a spektrálfüggvényben fellépő Dirac-delták felhasználásával látható, hogy:

$$G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = -\frac{1}{\pi} \int d\omega' \frac{\text{Im } G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\underline{r}, \underline{r}', \omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon}. \quad (4.28a)$$

Szintén a delta függvények tulajdonságának és a (4.26) összefüggések kihasználásával látható, hogy a retardált Green-függvény valós és képzetes részét Hilbert-transzformáció köti össze:

$$\operatorname{Re} G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int d\omega' \frac{\operatorname{Im} G^R(\underline{r}, \underline{r}', \omega')}{\omega - \omega'}. \quad (4.28b)$$

A retardált Green-függvényhez hasonlóan definiálható az ún. avanszált Green-függvény:

$$-iG^A(\underline{r}, t; \underline{r}', t') := \Theta(t' - t) \left\langle [\hat{\Psi}(\underline{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}', t')]_{\mp} \right\rangle = \Theta(t' - t) \rho(\underline{r}, t; \underline{r}', t'), \quad (4.29)$$

mely csak $t' > t$ időkre különbözik zérustól. Az avanszált Green-függvény is csak az időkülönbségektől függ, és ezen mennyiség Fourier-transzformáltja a következő:

$$\begin{aligned} G^A(\underline{r}, \underline{r}', \omega) &= \int_{-\infty}^0 dt G^A(\underline{r}, t; \underline{r}, 0) e^{i(\omega - i\epsilon)t} = \\ &= \sum_{m,n} w_n \frac{A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}')}{\omega - \hbar^{-1}(K_m - K_n) - i\epsilon} \left[1 \mp e^{\beta(K_n - K_m)} \right]. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Az improprius integrál regularizálásánál $-i\epsilon$ írandó, ellentétben a retardált Green-függvénynél használt $+i\epsilon$ helyett. A regularizáció következtében az avanszált Green-függvényben a pólusok a valós tengelyről a felső félsíkra tolódnak. Ez összhangban van azzal, hogy az inverz transzformációnál $t > t'$ esetén az alsó félsíkon lévő pólusok reziduumát kell összeadni, és mivel ott nincs pólus az avanszált Green-függvény értéke zérus ebben az esetben. Az $\epsilon \rightarrow 0$ határátmenetet az avanszált Green-függvényben is a (4.25) összefüggés segítségével végezhetjük el, és az avanszált Green-függvény spektrálelőállítására

$$G^A(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\underline{r}, \underline{r}', \omega')}{\omega - \omega' - i\epsilon} \quad (4.31)$$

összefüggés származtatható.

Homogén rendszer esetén a retardált és avanszált Green-függvények spektrálelőállítása:

$$G^R_A(\underline{k}, \omega) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\underline{k}, \omega')}{\omega - \omega' \pm i\epsilon}, \quad (4.32)$$

ahol a (4.28a) és a (4.31) összefüggésekkel összhangban a retardált függvényhez a $+$, az avanszáltéhoz a $-$ előjel használandó.

Tulajdonságok:

1. A retardált Green-függvény a felső félsíkon, az avanszált Green-függvény az alsó félsíkon analitikus függvények.
2. valós ω mellett:

$$\begin{aligned}\operatorname{Re} G^{\mathrm{R}}(\underline{k}, \omega) &= \operatorname{Re} G^{\mathrm{A}}(\underline{k}, \omega), \\ \operatorname{Im} G^{\mathrm{R}}(\underline{k}, \omega) &= -\operatorname{Im} G^{\mathrm{A}}(\underline{k}, \omega).\end{aligned}$$

3. komplex ω esetén:

$$G^{\mathrm{A}}(\underline{k}, \omega^*) = G^{\mathrm{R}*}(\underline{k}, \omega),$$

ahol \star a komplex konjugálást jelöli.

Most tekintsük a (2.11) hőmérsékleti Green-függvény Lehmann-reprezentációját!

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\underline{r}, \tau; \underline{r}', \tau') &= -\left\langle T_{\tau} [\hat{\Psi}(\underline{r}, \tau) \hat{\Psi}^{\dagger}(\underline{r}', \tau')] \right\rangle = -\sum_n w_n \times \\ &\times \left[\Theta(\tau - \tau') \langle n | \hat{\Psi}(\underline{r}, \tau) \hat{\Psi}^{\dagger}(\underline{r}', \tau') | n \rangle \pm \Theta(\tau' - \tau) \langle n | \hat{\Psi}^{\dagger}(\underline{r}', \tau') \hat{\Psi}(\underline{r}, \tau) | n \rangle \right].\end{aligned}\quad (4.33)$$

A téroperátorok itt a (2.7) egyenletek által definiált K -képben vannak, a T_{τ} rendező operátort Heaviside-függvények segítségével írtuk fel. A téroperátorok közé beszúrva az egységoperátor $\sum_m |m\rangle \langle m|$ alakját:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\underline{r}, \tau; \underline{r}', \tau') &= \\ &= -\sum_{n,m} w_n A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}') \left[\Theta(\tau - \tau') \pm \Theta(\tau' - \tau) e^{\beta(K_n - K_m)} \right] e^{-\frac{K_m - K_n}{\hbar}(\tau - \tau')}.\end{aligned}\quad (4.34)$$

Matsubara frekvenciákra áttérve:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\underline{r}, \underline{r}', i\omega_n) &= \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\underline{r}, \tau, \underline{r}', 0) = \\ &= -\sum_{n,m} w_n A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}') \frac{e^{[i\omega_n - \hbar^{-1}(K_m - K_n)]\beta\hbar} - 1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(K_m - K_n)}.\end{aligned}\quad (4.35)$$

Kihasználva, hogy $e^{i\omega_n \beta\hbar}$ bozonok esetén 1, fermionok esetén pedig -1 , a hőmérsékleti Green-függvényre az alábbi összefüggés kapható:

$$\mathcal{G}(\underline{r}, \underline{r}', i\omega_n) = \sum_{m,n} w_n A_{m,n}(\underline{r}, \underline{r}') \frac{1 \mp e^{\beta(K_n - K_m)}}{i\omega_n - \hbar^{-1}(K_m - K_n)}.\quad (4.36)$$

A (4.10) spektrálfüggvény felhasználásával a hőmérsékleti Green-függvény is kifejezhető:

$$\mathcal{G}(\underline{r}, \underline{r}', i\omega_n) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\underline{r}, \underline{r}', \omega')}{i\omega_n - \omega'}, \quad (4.37)$$

vagy homogén rendszer esetén:

$$\mathcal{G}(\underline{k}, i\omega_n) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\underline{k}, \omega')}{i\omega_n - \omega'}. \quad (4.38)$$

A (4.32) és a (4.38) spektrálelőállítások alapján definiálható egy általános Green-függvény:

$$G^G(\underline{k}, z) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\underline{k}, \omega')}{z - \omega'}, \quad (4.39)$$

amely $z = i\omega_n$ esetén a hőmérsékleti Green-függvényt, $z = \omega + i\epsilon$ esetén a retardált Green-függvényt és $z = \omega - i\epsilon$ esetén pedig az avanszált Green-függvényt állítja elő. $G^G(\underline{k}, z)$ -nek következésképp vágása van a valós tengelyen. Szisztematikus perturbációszámítással (a kidolgozott formalizmus segítségével) a hőmérsékleti Green-függvényt tudjuk előállítani. Ennek analitikus folytatásával kaphatjuk meg a retardált és avanszált Green-függvényeket és a spektrálfüggvényt.

4.1.1. Szabad gáz

Példaként tekintsük először a homogén, szabad gáz esetét. A homogén, szabad gáz hőmérsékleti Green-függvénye:

$$\mathcal{G}_{(0)}(\underline{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu)}. \quad (4.40)$$

Ebben az egyszerű esetben az analitikus folytatást az $i\omega_n \rightarrow \omega + i\epsilon$ helyettesítéssel érjük el, és így a homogén, szabad gáz retardált Green-függvényére

$$G_{(0)}^R(\underline{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu) + i\epsilon} \quad (4.41)$$

adódik. A (4.25) és (4.27) összefüggések felhasználásával a homogén, szabad gáz spektrálfüggvénye a következő:

$$\hat{\rho}_{(0)}(\underline{k}, \omega) = 2\pi \delta[\omega - \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu)]. \quad (4.42)$$

Szabad gáz esetén a spektrálfüggvény egyetlen éles csúcsot tartalmaz, így a gerjesztési energia:

$$\hbar\omega = e_{\underline{k}} - \mu. \quad (4.43)$$

A szabad gáz egyrészecske elemi gerjesztése nem más, mint egyetlen részecske hozzáadása a rendszerhez.

4.1.2. Kölcsönható rendszer

Homogén, kölcsönható rendszer esetén a Green-függvény nevezője módosul a sajátenergiával:

$$\mathcal{G}(\underline{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu) - \Sigma(\underline{k}, i\omega_n)}. \quad (4.44)$$

Az analitikus folytatás egyszerű esetben szintén elérhető az $i\omega_n \rightarrow \omega + i\epsilon$ helyettesítéssel, és így

$$G^R(\underline{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + i\epsilon - \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu) - \Sigma^R(\underline{k}, \omega)}, \quad (4.45a)$$

ahol

$$\Sigma^R(\underline{k}, \omega) = \Sigma(\underline{k}, \omega + i\epsilon). \quad (4.45b)$$

Ha a retardált sajátenergiának van negatív képzetes része, akkor a (4.45a) kifejezés nevezőjében az infintezimális $i\epsilon$ elhagyható. A retardált Green-függvény képzetes része a (4.27) egyenlet értelmében meghatározza a spektrálfüggvényt, vagyis:

$$\begin{aligned} \rho(\underline{k}, \omega) &= -2 \operatorname{Im} G^R(\underline{k}, \omega) = \\ &= \frac{-2 \operatorname{Im} \Sigma^R(\underline{k}, \omega)}{\left[\omega - \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu) - \operatorname{Re} \Sigma^R(\underline{k}, \omega) \right]^2 + \left[\operatorname{Im} \Sigma^R(\underline{k}, \omega) \right]^2}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Amennyiben $|\operatorname{Im} \Sigma^R(\underline{k}, \omega)| \ll \operatorname{Re} \Sigma^R(\underline{k}, \omega)$ a (4.25) összefüggés felhasználásával (ϵ helyére $\operatorname{Im} \Sigma^R$ kerül) a (4.46) spektrálfüggvény közelítőleg a

$$\rho(\underline{k}, \omega) = 2\pi \delta[\omega - \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu) - \operatorname{Re} \Sigma^R(\underline{k}, \omega)], \quad (4.47)$$

amely a szabad gázéra emlékeztető csúcs (vagy csúcsok, ha a delta függvény argumentumának több zérushelye is van). Tételezzük fel, hogy csak egy zérushely van. Ekkor a Dirac-delta ismert azonosságával¹ a spektrálfüggvényt az alábbi alakra hozhatjuk:

$$\rho(\underline{k}, \omega) = 2\pi Z(\underline{k}) \delta[\omega - \hbar^{-1}(E_{\underline{k}} - \mu)], \quad (4.48a)$$

¹A Dirac-delta átalakítása egyetlen zérushellyel rendelkező f kompozíció függvény esetén

$$\delta(f(x)) = \frac{\delta(x - x_0)}{|f'(x_0)|},$$

ahol x_0 az $f(x_0) = 0$ egyenlet megoldása és f' az f függvény első deriváltja.

ahol $E_{\underline{k}}$ az

$$E_{\underline{k}} = e_{\underline{k}} + \hbar \operatorname{Re} \Sigma^R(\underline{k}, \hbar^{-1}(E_{\underline{k}} - \mu)), \quad (4.48b)$$

egyenlet megoldása, és

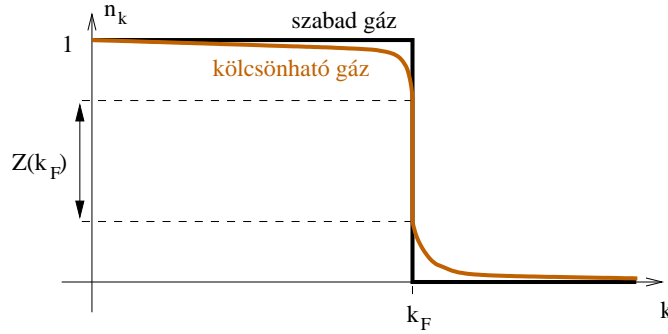
$$\frac{1}{Z(\underline{k})} = 1 - \left. \frac{\partial \operatorname{Re} \Sigma^R(\underline{k}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega = \hbar^{-1}(E_{\underline{k}} - \mu)}. \quad (4.48c)$$

A (4.48a) kifejezést összehasonlítva a szabad gáz (4.42) spektrálfüggvényével látható, hogy ha a sajátenergia képzetes része elhanyagolható, akkor az energiaspektrum kölcsönható rendszer esetén $E_{\underline{k}}$ energiájú közel ideális kvázirészecskékből álló gáz spektrumának tekinthető. Ezt az ideális gázt nevezik a kvázirészecskék gázának. Így Σ elnevezése is világossá válik, hiszen $\hbar \Sigma$ a kvázirészecske energiájának módosulása. A levezetésből az is világossá válik, hogy a kvázirészecskék ideális gázáról akkor beszélhetünk csak, ha a sajátenergia képzetes része kicsi; az állapotsűrűséget ebben az esetben tudjuk a (4.47), illetve a (4.48a) alakokra hozni. Alapvető kérdés, hogy ez a kvázirészecske-kép mikor alkalmazható. Általánosságban azt lehet mondani, hogy ennek egyik feltétele, hogy a hőmérséklet elég alacsony legyen.

Fermi-rendszerek esetén, zérus hőmérsékleten, $\operatorname{Im} \Sigma \sim (k - k_F)^2$, így a Fermi-hullámszám közelében a kvázirészecske-kép jogos. Egy érdekes és igen fontos tulajdonság megfogalmazásához tekintsük most a (4.20b) összegszabályt! A betöltési szám (fermionok esetén):

$$n_{\underline{k}} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\rho(\underline{k}, \omega)}{e^{\beta \hbar \omega} + 1} = Z(\underline{k}) \frac{1}{e^{\beta(E_{\underline{k}} - \mu)} + 1} + F_{\underline{k}}. \quad (4.49)$$

A betöltési szám meghatározásához a (4.48a) spektrálfüggvényt használtuk föl, azzal a módosítással, hogy mivel $\operatorname{Im} \Sigma$ nem infinitezimálisan kicsi (csak elég kicsi), ezért a spektrálfüggvénynek van még egy $f(\underline{k}, \omega)$ sima része. Az integrálásnál a (4.48a) kifejezésben expliciten feltüntetett delta függvényes tagból lesz a (4.49) kifejezés első tagja, a sima $f(\underline{k}, \omega)$ függvény integráljából pedig $F_{\underline{k}}$. Zérus hőmérsékleten a szabad fermionok betöltési száma $n_{\underline{k}}^{(0)}$ ugrik a Fermi-impulzusnál. Ez az ugrás a (4.49) betöltési számban is megtalálható. Megmutatható, hogy a kölcsönható rendszer Fermi-impulzusa (ahol a betöltési szám ugrik) nem tolódik el. Az ugrás nagysága a szabad gáznál megfigyelhető 1-ről $Z(\underline{k})$ -ra változik. Illusztrációként tekintsük a 4.2. ábrát. Ezt az észrevételt Luttinger mutatta meg először. Azokat a Fermi-rendszereket, amelyekben a betöltési számnak zérus hőmérsékleten ilyen ugrása van normál Fermi-rendszernek nevezzük. Ez minden olyan fermionokból álló sokrészecske rendszerre igaz, amelyekben az itt vázolt perturbációs számítás használható.



4.2. ábra. Normál fermi rendszer betöltési száma zérus hőmérsékleten.

A kvázirészecske sajátenergiája valós részének szemléletes jelentése tehát a kvázirészecske („felöltözött” részecske) energiájának módosulása. A sajátenergia képzetes részéhez is lehet szemléletes jelentést társítani. Tekintsük fermionok esetén a rendszer Green-függvényét zérus hőmérsékleten:

$$G(\underline{k}, t) = \langle \Psi_0 | T_t \hat{a}_{\underline{k}}(t) \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger(0) | \Psi_0 \rangle, \quad (4.50)$$

mivel zérus hőmérsékleten a rendszer sűrűségmátrixa az alapállapatra vetítő 1 rangú projektor (feltételezve, hogy a rendszer alapállapota nem elfajult): $\hat{\rho} = |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|$. Legyen $t > 0$, ilyenkor az időrendező operátor elhagyható. A Green-függvény nem más, mint a $\hat{a}_{\underline{k}}^\dagger(0) | \Psi_0 \rangle$ és a $\hat{a}_{\underline{k}}^\dagger(t) | \Psi_0 \rangle$ állapotok skalár szorzata (átfedése). Fizikailag ez nem más, mint az alapállapothoz adott $\hbar \underline{k}$ impulzusú kvázirészecske állapot átfedése a t idővel későbbi megfelelő állapottal. Ha a Green-függvény amplitúdója idővel csökken, az azt jelenti, hogy a kvázirészecske állapot elbomlik más állapotokba. Tekintsük most a retardált Green-függvényt ($t > 0$ esetén)! A (4.21) definíció alapján (de homogén rendszer esetén és elhagyva most is a spinfüggést):

$$\begin{aligned} G^R(\underline{k}, t) &= \langle \Psi_0 | \{ \hat{a}_{\underline{k}}(t), \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger(0) \} | \Psi_0 \rangle = \\ &= \langle \Psi_0 | \hat{a}_{\underline{k}}(t) \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger(0) | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger(0) \hat{a}_{\underline{k}}(t) | \Psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Zérus hőmérsékleten a (4.51) kifejezésben $k > k_F$ esetén a jobb oldal első tagja, míg $k < k_F$ esetén a második tagja adja a jelentős járulékot. Ha a (4.45a) retardált Green-függvényt, mely a felső félsíkon analitikus, analitikusan folytatjuk az alsó félsíkra (második Riemann-levélre) és annak létezik ott pólusa közel a valós tengelyhez, akkor G^R az alábbi alakban írható a pólushoz közeli, valós ω esetén:

$$G^R(\underline{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \hbar^{-1}(E_{\underline{k}} - \mu) + i\Gamma_{\underline{k}}}, \quad (4.52a)$$

ahol a pólus helyét a

$$z_{\underline{k}} = \hbar^{-1}(e_{\underline{k}} - \mu) + \Sigma(\underline{k}, z_{\underline{k}}) \quad (4.52b)$$

egyenlet határozza meg, és

$$E_{\underline{k}} = \hbar \operatorname{Re} z_{\underline{k}} + \mu, \quad (4.52c)$$

$$\Gamma_{\underline{k}} = -\operatorname{Im} z_{\underline{k}}. \quad (4.52d)$$

Mivel a pólus feltevésünk szerint közel van a valós tengelyhez, így $\Gamma_{\underline{k}}$ kicsi és a spektrálfüggvényre (a pólushoz közeli, valós ω mellett)

$$\rho(\underline{k}, \omega) = \frac{2\Gamma_{\underline{k}}}{[\omega - \hbar^{-1}(E_{\underline{k}} - \mu)]^2 + \Gamma_{\underline{k}}^2} \quad (4.53)$$

adódik, amely egy Lorentz-görbe. Az időfüggő retardált Green-függvényt inverz Fourier-transzformáció segítségével számíthatjuk:

$$G^R(\underline{k}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \hbar^{-1}(E_{\underline{k}} - \mu) + i\Gamma_{\underline{k}}} \sim e^{-i\frac{E_{\underline{k}} - \mu}{\hbar}t} e^{-\Gamma_{\underline{k}}t} \quad t > 0 \text{ esetén.} \quad (4.54)$$

A retardált Green-függvény tehát időben exponenciális csökkenő amplitúdóval rendelkezik. A (4.51) kifejezést összehasonlítva a propagátor (4.50) kifejezésével látható, hogy $k > k_F$ esetén a rendszerhez adott kvázirészecske-állapot amplitúdója exponenciálisan csökken $\Gamma_{\underline{k}}$ rátával. Hasonlóan csökken $k < k_F$ esetén a rendszerből elvett kvázirészecske-állapot rátája is. Ezek az időben csökkenő amplitúdójú egyrészecske gerjesztések az elektron- és a lyuk-típusú gerjesztések.

4.1.3. Kvázirészecskék az elektrongázban

Alkalmazásként tekintsük az elektrongáz példáját zérus hőmérsékleten! A sajátenergia Feynman-diagramja RPA-ban a 3.7. ábrán látható. A sajátenergia kifejezése a következő:

$$\Sigma(\underline{k}, i\omega) = -\frac{1}{\hbar} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{G}_{(0)}(\underline{k} - \underline{q}, i\omega - i\nu) \frac{\mathbf{v}(\underline{q})}{\mathcal{E}(\underline{q}, i\nu)}, \quad (4.55a)$$

ahol

$$\mathcal{E}(\underline{q}, i\nu) = 1 - \mathbf{v}(\underline{q})\Pi_{(0)}(\underline{q}, i\nu) \quad (4.55b)$$

a dielektromos függvény RPA-ban, zérus hőmérsékleten. Itt nem részletezett számolással az egyrészecske elemi gerjesztések energiaspektrumrára és

csillapodására RPA-ban a következő kifejezések kaphatók:

$$E_k = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \left(\frac{k^2}{k_F^2} - 0,166 r_s \left[\frac{k}{k_F} (\ln r_s + 0,203) - \ln r_s + 1,80 \right] \right), \quad (4.56a)$$

$$\Gamma_k = 0,252 r_s^{1/2} \left(\frac{k}{k_F} - 1 \right)^2 \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}. \quad (4.56b)$$

Érdemes észrevenni, hogy a kvázirészecske csillapodásának rátája arányos hullámszámának a Fermi-hullámszámtól vett eltérésének négyzetével, mely igazolja korábbi feltevésünket. Véges hőmérsékleten az elemi gerjesztések csillapodása erősen megnőhet. A kvázirészecske-kép ezért zérus hőmérséklet közelére korlátozódik.

A kölcsönható elektrongáz hőkapacitását a kvázirészecske-kép segítségével könnyen számíthatjuk, mivel

$$\frac{C}{C_S} = \frac{m^*}{m}, \quad (4.57)$$

ahol $C_S = \pi^2 N k_B^2 T (3\pi^2 n)^{-2/3} m$ a Sommerfeld féle szabad elektron érték, m^* pedig a kvázirészecske effektív tömege a Fermi-hullámszámnál. Az effektív tömeg definíciója:

$$\left. \frac{\partial E_k}{\partial k} \right|_{k=k_F} = \frac{\hbar^2 k_F}{m^*}, \quad (4.58)$$

melyből az effektív tömeg reciprokéra

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} \left[1 - 0,083 r_s (\ln r_s + 0,203) \right] \quad (4.59)$$

adódik véletlenfázisú közelítésben.

► Érdemes itt megjegyezni, hogy a Hartree–Fock-közelítés a hőkapacitásra kvalitatíve rossz hőmérsékletfüggést ad. Ennek oka, hogy

$$\left. \frac{\partial E_k^F}{\partial k} \right|_{k=k_F} \text{ logaritmikusan divergál,} \quad (4.60)$$

ahol

$$E_k^F = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar \Sigma_F(\underline{k}), \quad (4.61)$$

és $\Sigma_F(\underline{k})$ -t a (3.37) egyenlet szolgáltatja. Ilyenkor a Sommerfeld-sorfejtés érvényét veszti. A fajhő $T \rightarrow 0$ esetén $T/\ln T$ -vel arányos. A fajhő alacsony hőmérsékleti anomális viselkedése mutatja, hogy a hosszútávolságú kölcsönhatás már a perturbációszámítás első rendjében is váratlan problémákhoz vezethet. A kölcsönhatás polarizáción keresztül történő leárnýékolódása – amit a véletlen fázisú közelítés vesz figyelembe – azonban már helyes eredményre vezet a (4.59) effektív tömegben és így a fajhőben is. ◀

4.2. Kollektív gerjesztések

Kollektív elemi gerjesztésen valamilyen külső perturbációra adott válasz energiakvantumát értjük. A jegyzet során külső perturbáción mechanikai perturbációt értünk, vagyis olyat, amelyben a perturbáció valamilyen külső tér és egy fizikai mennyiség operátorának a szorzata. Legyen $\hat{\mathcal{H}}$ a kölcsönható rendszer Hamilton-operátora, ilyenkor a külső perturbáció hatására a Hamilton-operátor a következő módon változik meg:

$$\hat{\mathcal{H}}'(t) = \hat{\mathcal{H}}(t) + \Delta\hat{\mathcal{H}}(t), \quad (4.62a)$$

ahol

$$\Delta\hat{\mathcal{H}}(t) = \sum_s \int d^3r \hat{A}(\underline{r}, s, t) f(\underline{r}, s, t). \quad (4.62b)$$

Itt $f(\underline{r}, s, t)$ a külső perturbáló tér, $\hat{A}(\underline{r}, s)$ pedig azon fizikai mennyiség operátora, amelyen keresztül a külső tér a rendszerhez csatlakozik². A kollektív gerjesztések vizsgálata ezen \hat{A} operátor autokorrelációs függvényének segítségével történik. A jegyzet során csak a részecskesűrűséghez kapcsolódó perturbációkkal foglalkozunk (a módszert más fizikai mennyiséghez tartozó kollektív gerjesztések vizsgálatára értelemszerűen általánosíthatjuk).

4.2.1. Sűrűségfluktuációs propagátor

A sűrűséghez tartozó kollektív gerjesztéseket a sűrűség–sűrűség korrelációs függvény (vagy más néven sűrűségfluktuációs propagátor) segítségével vizsgálhatjuk. Ennek érdekében vezessük be a sűrűség eltérését egyensúlyi értékétől:

$$\hat{\hat{n}}(\underline{r}) := \hat{n}(\underline{r}) - \langle \hat{n}(\underline{r}) \rangle = \sum_s \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}, s) \hat{\Psi}(\underline{r}, s) - \sum_s \langle \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}, s) \hat{\Psi}(\underline{r}, s) \rangle. \quad (4.63)$$

Ennek segítségével a sűrűségfluktuációs propagátor definíciója a következő:

$$D(\underline{r}_1, \tau_1; \underline{r}_2, \tau_2) := - \left\langle T_\tau \left[\hat{\hat{n}}(\underline{r}_1, \tau_1) \hat{\hat{n}}(\underline{r}_2, \tau_2) \right] \right\rangle. \quad (4.64)$$

Itt τ_1 és τ_2 imaginárius időt jelölnek, továbbá T_τ a 2.2. fejezetben bevezetett időrendező operátor. Hogy elkerüljük az esetleges kétértelműséget, a $\tau =$

²Ez a külső perturbáció természetesen más, mint a jegyzet során tárgyalt, a részecskék kölcsönhatását figyelembe vevő perturbáció. Ez a nemegyensúlyi statisztikus fizika keretében tartozik, és így ezzel a perturbációs számítással a jegyzet során nem is foglalkozunk részletesen.

$\tau_1 - \tau_2 = 0$ -t úgy kezeljük, mint véges τ értékek határértékét. Az operátorok K-képbeli időfüggését a (2.6) kifejezés szerint értelmezzük.

A (4.64) sűrűségfluktuációs propagátor meghatározása kölcsönható rendszer esetén hasonlóan bonyolult feladat, mint a hőmérsékleti Green-függvényé. A továbbiakban a perturbációs számítás Feynman-diagramokon alapuló módszerét használjuk itt is. Perturbálatlan rendszernek a (2.2b) szabad rendszert tekintjük, míg perturbációnak a (2.2c) kétrészecske kölcsönhatást. A sűrűségfluktuációs propagátor helyett először tekintsük a $\langle T_\tau \hat{n}(\underline{r}_1, \tau_1) \hat{n}(\underline{r}_2, \tau_2) \rangle$ propagátor könnyebben értelmezhető perturbációs sorát. Ennek meghatározása hasonlóan történik, mint a 2.5. fejezetben a Green-függvény esetén. A nem részletezett számolás végeredménye a következő:

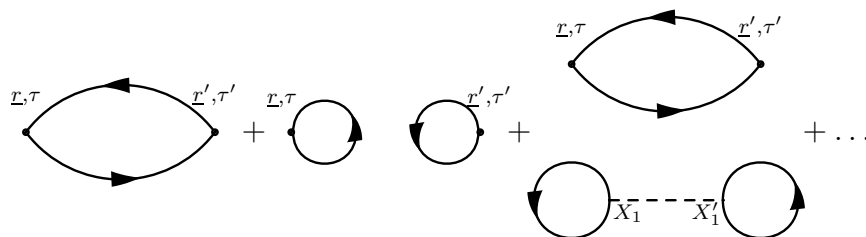
$$\langle T_\tau \hat{n}(\underline{r}, \tau) \hat{n}(\underline{r}', \tau') \rangle = \frac{D_{Sz}}{D_N}, \quad (4.65a)$$

ahol

$$D_{Sz} = \text{Sp} \left\{ e^{-\beta \hat{K}_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\hbar^{-1})^n}{n!} \int_0^{\beta \hbar} d\tau_1 \dots d\tau_n T_\tau \left[\hat{K}_1(\tau_1) \dots \hat{K}_1(\tau_n) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \sum_{s,s'} \hat{\Psi}^\dagger(x, \tau) \hat{\Psi}(x, \tau) \hat{\Psi}^\dagger(x', \tau') \hat{\Psi}(x', \tau') \right] \right\}, \quad (4.65b)$$

$$D_N = \text{Sp} \left\{ e^{-\beta \hat{K}_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\hbar^{-1})^n \int_0^{\beta \hbar} d\tau_1 \dots d\tau_n T_\tau \left[\hat{K}_1(\tau_1) \dots \hat{K}_1(\tau_n) \right] \right\}. \quad (4.65c)$$

A (4.65c) nevező megegyezik a Green-függvénynél is előforduló nevezővel és így a 2.2. ábrán látható Feynman-diagramok állítják elő. A (4.65b) számlálót előállító Feynman-diagramoknak 2 külső pontjuk van: (\underline{r}, τ) és (\underline{r}', τ') . A két külső ponthoz nem tartozik spinváltozó, hiszen a teljes sűrűség sem tartalmazza azt (és ennek következtében a (4.65b) kifejezésben ki is összegzünk rá). Mindkét külső pontból kifut egy-egy és be is fut egy-egy részecskevonal. A (4.65a) propagátort előállító első három Feynman-diagramot a 4.3. ábrán láthatjuk. Az ábrán a két nulladrendű és egy elsőrendű diagramot tüntetünk fel. Összefüggőségi szempontból mindhárom különböző típusú: az első diagram egyetlen összefüggő komponensből áll. A második diagram két független komponensből áll, de mindkét komponens csatlakozik külső ponthoz (az egyik az \underline{r}, τ a másik az \underline{r}', τ' ponthoz). A harmadik diagram szintén két független komponensből áll és az alsó komponens nem csatlakozik külső ponthoz; csak belső pontot tartalmaz. Ezen utolsó típus járuléka (a Green-függvény széteső diagramjaihoz hasonlóan) egy nevező diagram és egy külső



4.3. ábra. Néhány a számlálót előállító Feynman-diagramok közül.

ponthoz csatlakozó diagram járulékanak szorzata. A számláló perturbációs sorából (a Green-függvényeknél megismert gondolatmenet alapján) kiemelhető a nevező sora, mely utóbbival egyszerűsíthetünk is. Így a számláló diagramjaiból csak az első két típus marad: azok a gráfok, melyek minden komponense csatlakozik a két külső pont valamelyikéhez.

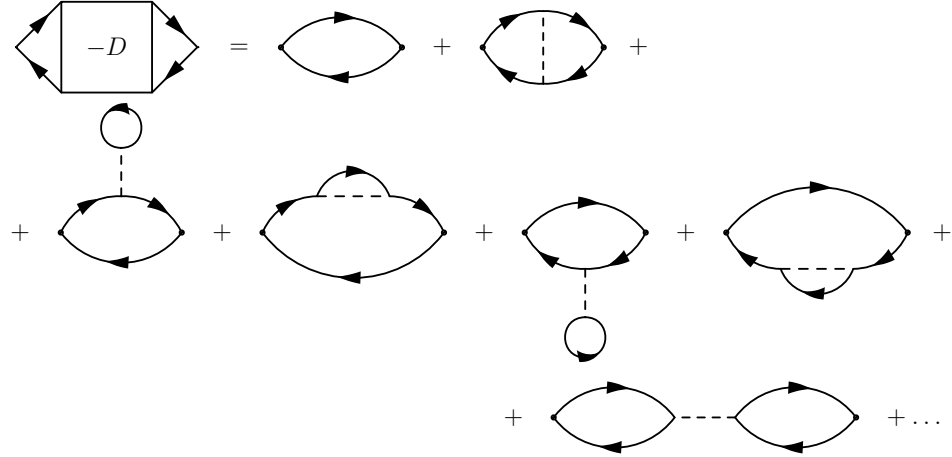
Eddig a $\langle T_\tau \hat{n}(\underline{r}, \tau) \hat{n}(\underline{r}', \tau') \rangle$ propagátor perturbációs sorát néztük. Most térjünk vissza a (4.64) sűrűségfluktuációs propagátorra. Felhasználva a (4.63) definíciót, továbbá, hogy a rendszer invariáns az imaginárius idő eltolásával szemben, ezért $\langle \hat{n}(\underline{r}, \tau) \rangle = \langle \hat{n}(\underline{r}) \rangle$, és így

$$D(\underline{r}_1, \tau_1; \underline{r}_2, \tau_2) = -\langle T_\tau \hat{n}(\underline{r}_1, \tau_1) \hat{n}(\underline{r}_2, \tau_2) \rangle + \langle \hat{n}(\underline{r}_1) \rangle \langle \hat{n}(\underline{r}_2) \rangle. \quad (4.66)$$

A (4.66) egyenlet jobb oldala második tagjának perturbációs sora $\langle \hat{n}(\underline{r}) \rangle$ és $\langle \hat{n}(\underline{r}') \rangle$ perturbációs sorainak szorzata. A szorzat olyan diagramokat tartalmaz, amelyeknek két külső pontjuk van: \underline{r} és \underline{r}' , továbbá minden diagram pontosan két független komponensből áll, amelyek egyike az egyik, másika a másik külső ponthoz csatlakozik. Vagyis a 4.3. ábrán feltüntetett második típusú diagram épp a (4.66) egyenlet jobb oldalának második tagját állítja elő. Figyelembe véve az első tag negatív előjelét adódik, hogy a (4.64) sűrűségfluktuációs propagátor perturbációs sora a 4.3. ábra első típusú diagramjait tartalmazza. Mivel a 4.3. ábrán a sűrűségfluktuációs propagátorhoz teljesen járulékot adó gráfok közül csak a nulladrendű diagramot láthatjuk, ezért a 4.4. ábrán feltűntettük a sűrűségfluktuációs propagátor perturbációs sorának nullad- és első-rendű diagramjait is. A (4.65b) perturbációs sor n -ed rendjében megjelenő $1/n!$ és az n darab kölcsönhatás által behozott 2^{-n} faktoroktól szintén megszabadulhatunk, ha a topológialag megegyező Feynman-diagramokat egyszer vesszük csak figyelembe (a 4.4. ábrán már csak a topológialag különböző gráfokat rajzoltuk föl).

A sűrűségfluktuációs propagátor meghatározására vonatkozó gráf-szabályok koordináta-reprezentációban (n -ed rendben):

1. Rajzoljunk le minden n kölcsönhatási vonalat tartalmazó, topológiai-



4.4. ábra. A sűrűségfluktuációs propagátor perturbációs sorának kezdete. Az ábrán bevezetett doboz a sűrűségfluktuációs propagátor -1 -szeresét jelöli.

lag különböző, két külső ponthoz csatlakozó csatolt gráfot, melyeknél mindkét külső pontba egy-egy részecskevonat befut és ki is fut onnan!

2. Osszuk ki a $2n$ belső pont (integrálási változók) koordinátáját!
3. Az $X_i \equiv (\underline{r}_i, s_i, \tau_i)$ pontból induló és $X_j \equiv (\underline{r}_j, s_j, \tau_j)$ pontba érkező vonal járuléka $-\mathcal{G}_{(0)}(X_j, X_i)$.
4. Az X_i és X'_i belső pontokat összekötő kölcsönhatási vonal járuléka $-(\hbar)^{-1}v(X_i; X'_i)$.
5. Integráljunk minden X_i belső pontra! (A spinváltozókra vonatkozó összegzést spinfüggetlen kölcsönhatás és izotrop rendszer esetén helyettesíthetjük a szokásos $(2s+1)^L$ szorzóval, ahol L a gráfban található részecskevonalból képzett független hurkok száma.)
6. A gráf járulékát szorozzuk meg $(\pm 1)^L$ -el (ahol $+1$ bozonokra -1 fermionokra vonatkozó előjel)!

Állítás: $D(\underline{r}_1, \tau_1, \underline{r}_2, \tau_2)$ invariáns az imagináris idő eltolásával szemben, azaz csak a $\tau_1 - \tau_2$ különbségtől függ.

Bizonyítás: Tekintsük a $\tau_1 > \tau_2$ esetet. Ilyenkor a τ rendező operátor elhagyható:

$$\begin{aligned} D(\underline{r}_1, \tau_1, \underline{r}_2, \tau_2) &= -\text{Sp} \left[\hat{\rho}_G e^{\frac{\hat{K}}{\hbar} \tau_1} \hat{n}(\underline{r}_1) e^{-\frac{\hat{K}}{\hbar} \tau_1} e^{\frac{\hat{K}}{\hbar} \tau_2} \hat{n}(\underline{r}_2) e^{-\frac{\hat{K}}{\hbar} \tau_2} \right] = \\ &= -\text{Sp} \left[\hat{\rho}_G e^{\frac{\hat{K}}{\hbar} (\tau_1 - \tau_2)} \hat{n}(\underline{r}_1) e^{\frac{\hat{K}}{\hbar} (\tau_2 - \tau_1)} \hat{n}(\underline{r}_2) \right] = D(\underline{r}_1, \tau_1 - \tau_2, \underline{r}_2, 0). \end{aligned} \quad (4.67)$$

Kihasználtuk még a nyomképzés ciklikus tulajdonságát, továbbá, hogy $\hat{\rho}_G$ felcserélhető $e^{\frac{\hat{K}}{\hbar}\tau_2}$ -vel. ■

Állítás: $D(\underline{r}_1, \tau, \underline{r}_2, 0)$ a $-\beta\hbar < \tau \leq \beta\hbar$ intervallumon bozonok és fermionok esetén is periodikus τ -ban $\beta\hbar$ szerint.

Bizonyítás: Érdemes a sűrűségfluktuációs propátort a (4.66) egyenlet alapján felbontani és mivel az egyoperátoros átlagok τ függetlenek, ezért csak az első tagra koncentrálni. Legyen $-\beta\hbar < \tau \leq 0$. Ilyenkor a τ rendező operátor felcseréli a két sűrűségoperátort, de mivel mindkét sűrűség két-két téroperátort tartalmaz, ezért felcseréléskor fermionok esetén sem változik a kifejezés előjele.

$$\begin{aligned} D(\underline{r}_1, \tau, \underline{r}_2, 0) &= -\text{Sp} \left\{ \hat{\rho}_G T_\tau \left[\hat{n}(\underline{r}_1, \tau) \hat{n}(\underline{r}_2, 0) \right] \right\} = -e^{\beta\Omega} \text{Sp} \left[e^{-\beta\hat{K}} \times \right. \\ &\quad \times \hat{n}(\underline{r}_2, 0) \hat{n}(\underline{r}_1, \tau) \left. \right] = -e^{\beta\Omega} \text{Sp} \left[e^{-\beta\hat{K}} e^{\beta\hat{K}} \hat{n}(\underline{r}_1, \tau) e^{-\beta\hat{K}} \hat{n}(\underline{r}_2, 0) \right] = \\ &= -e^{\beta\Omega} \text{Sp} \left[e^{-\beta\hat{K}} \hat{n}(\underline{r}_1, \tau + \beta\hbar) \hat{n}(\underline{r}_2, 0) \right] = D(\underline{r}_1, \tau + \beta\hbar, \underline{r}_2, 0). \end{aligned} \quad (4.68)$$

Itt szintén kihasználtuk a nyomképzés ciklikus tulajdonságát, és a második sorban beszúrtuk az egységoperátor $\hat{1} = e^{-\beta\hat{K}} e^{\beta\hat{K}}$ alakját. Mivel $\tau + \beta\hbar > 0$, ezért akár vissza is írhattuk volna az időrendező operátort az utolsó sorban a sűrűségfluktuációs operátorok elé. ■

► Fontos megjegyezni, hogy a $\beta\hbar$ szerinti periodikusság a Green-függvény esetében csak bozonokra vonatkozott. Fermionokra a Green-függvény a (2.17b) egyenletnek megfelelően $\beta\hbar$ szerint antiperiodikus. A sűrűségfluktuációs propagátor azonban mindig periodikus. Ezt úgy is elképzelhetjük, hogy a sűrűségoperátor két téroperátor szorzata, és ezért felcserélhető az eltérő koordinátájú sűrűségoperátorral (így periodicitási tulajdonsága a bozonokéval megegyező). Ennek fontos következménye, hogy amíg az egyrészecske elemi gerjesztések (kvázirészecskék) statisztikája megegyezik a rendszert alkotó részecskékével, addig a kollektív gerjesztések mindig Bose-statisztikát követnek. ◀

Az előbbi két állításnak megfelelően a sűrűségfluktuációs propagátornak létezik Matsubara-reprezentációja, amelyben a bozonokra jellemző Matsubara-frekvenciák jelennek meg.

$$D(\underline{r}_1, \underline{r}_2; i\omega_n) = \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau} D(\underline{r}_1, \tau; \underline{r}_2, 0), \quad (4.69a)$$

ahol

$$\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta\hbar}. \quad (4.69b)$$

Az időfüggő propagátort pedig az alábbi módon fejezhetjük ki:

$$D(\underline{r}_1, \tau_1; \underline{r}_2, \tau_2) = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n D(\underline{r}_1, \underline{r}_2; i\omega_n) e^{-i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)}. \quad (4.69c)$$

Homogén rendszer esetén érdemes a (2.95)

$$\varphi_{\underline{k}, m_s}(\underline{r}, s) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi_{m_s}(s) \quad (4.70)$$

egyrészecske hullámfüggvényeket használni, melyek a V térfogatú, periodikus határfeltétellel ellátott kocka alakú dobozba zárt részecske hullámfüggvényei. Az (1.35) definíció alapján a téroperátor ilyenkor az alábbi alakba írható:

$$\hat{\Psi}(\underline{r}, s) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\underline{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\underline{k}, s}. \quad (4.71)$$

A sűrűségoperátor pedig ennek segítségével

$$\begin{aligned} \hat{n}(\underline{r}) &= \hat{\Psi}^\dagger(\underline{r}) \hat{\Psi}(\underline{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}, \underline{k}', s} e^{i(\underline{k}-\underline{k}')\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\underline{k}', s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}, s} = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}, \underline{q}, s} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\underline{k}+\underline{q}, s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}, s} = \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\underline{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \hat{n}(\underline{q}), \end{aligned} \quad (4.72)$$

ahol bevezettük az

$$\hat{n}(\underline{q}) = \sum_{\underline{k}, s} \hat{a}_{\underline{k}+\underline{q}, s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}, s} \quad (4.73)$$

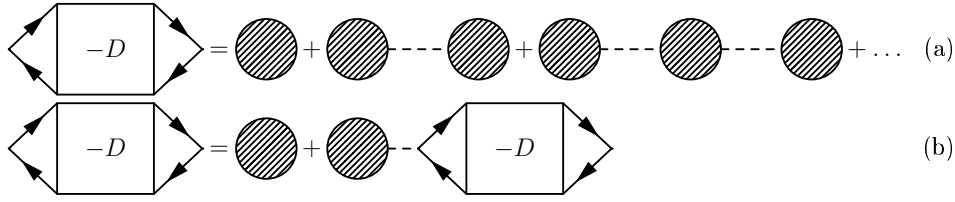
mennyiséget. Könnyű ellenőrizni, hogy $\underline{k} \neq 0$ esetén

$$D(\underline{k}, \tau) = -\frac{1}{V} \langle T_\tau [\hat{n}(\underline{k}, \tau) \hat{n}(-\underline{k}, 0)] \rangle. \quad (4.74)$$

A (4.66) egyenlet értelmében a $\underline{k} = 0$ -s részhez természetesen hozzá kell adni a teljes sűrűség átlagának négyzetét. $D(\underline{k}, \tau)$ Matsubara-reprezentációja a (4.69) egyenlethez hasonlóan értelmezhető. Ennek segítségével a termodinamikai határesetben

$$D(\underline{r}_1, \tau_1; \underline{r}_2, \tau_2) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n e^{i\mathbf{k}(\underline{r}_1-\underline{r}_2)-i\omega_n(\tau_1-\tau_2)} D(\underline{k}, i\omega_n). \quad (4.75)$$

A sűrűségpropagátor perturbációs előállításában hasonló felösszegzést végezhetünk, mint amilyen a Dyson-egyenlet a Green-függvény esetében. Ehhez Tekintsük a 4.5.a ábrát. Az egyenlet jobb oldalának első tagja azokat a diagramokat tartalmazza, amelyek nem esnek szét két részre egy kölcsönhatási vonal elvágásával. A második tag olyan diagramokat tartalmaz, amelyekben pontosan egy olyan kölcsönhatási vonal van, amelyet ha elvágunk a diagram két független komponensre esik szét. Hasonlóan a harmadik tag már két ilyen



4.5. ábra. A sűrűségfluktuációs propagátor perturbációs sorának szerkezete

kölcsönhatást is tartalmaz... A diagramokban megjelenő satírozott karikák épp a 3.4. fejezetben definiált proper diagramok, hiszen két kölcsönhatáshoz csatlakozhatnak és nem esnek szét egyetlen kölcsönhatási vonal elvágásával. A 4.5.a ábra egy mértani sort állít elő, melyet felösszegezhethetünk a 4.5.b ábrának megfelelően. A sűrűségfluktuációs propagátorra így a következő egyenlet adódik:

$$-D(\underline{k}, i\omega_n) = -\hbar\Pi(\underline{k}, i\omega_n) + [-\hbar\Pi(\underline{k}, i\omega_n)][-\hbar^{-1}\mathbf{v}(\underline{k})][-D(\underline{k}, i\omega_n)], \quad (4.76)$$

melyből

$$D(\underline{k}, i\omega_n) = \frac{\hbar\Pi(\underline{k}, i\omega_n)}{\mathcal{E}(\underline{k}, i\omega_n)}, \quad (4.77a)$$

ahol

$$\mathcal{E}(\underline{k}, i\omega_n) := 1 - \mathbf{v}(\underline{k})\Pi(\underline{k}, i\omega_n). \quad (4.77b)$$

az úgynevezett dielektromos függvény. Ennek sztatikus esetét a (3.105b) kifejezésben már definiáltuk.

A sűrűségfluktuációs spektrálfüggvény

A sűrűségfluktuációs propagátorból kiindulva definiáljuk az alábbi spektrálfüggvényt:

$$\rho^D(\underline{r}_1, t_1; \underline{r}_2, t_2) := \left\langle \left[\hat{n}(\underline{r}_1, t_1), \hat{n}(\underline{r}_2, t_2) \right] \right\rangle, \quad (4.78)$$

ahol az operátorok t (valós idő) függését az alábbi egyenlet írja le:

$$\hat{n}(\underline{r}, t) = e^{i\frac{\hat{K}}{\hbar}t} \hat{n}(\underline{r}) e^{-i\frac{\hat{K}}{\hbar}t}. \quad (4.79)$$

Lehmann-reprezentációban, vagyis amikor az operátorok közé beírjuk az egységoperátor (4.6) alakját, amelyet a (4.4) teljes rendszer segítségével állítunk elő, a (4.78) spektrálfüggvényre a következő kifejezés kapható:

$$\rho^D(\underline{r}_1, t_1; \underline{r}_2, t_2) = \sum_{m,n} w_n A_{m,n}^D(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \left[1 - e^{-\beta(K_m - K_n)} \right] e^{-i\frac{K_m - K_n}{\hbar}(t_1 - t_2)}, \quad (4.80a)$$

ahol

$$A_{m,n}^D(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \langle n | \hat{n}(\underline{r}_1) | m \rangle \langle m | \hat{n}(\underline{r}_2) | n \rangle. \quad (4.80b)$$

Mivel $\hat{n}(\underline{r})$ nem változtatja a részecskeszámot, ezért $A_{m,n}^D(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$ csak abban az esetben különbözik zérustól, ha az $|m\rangle$ és $|n\rangle$ állapotok részecskeszáma azonos.

Az időeltolási szimmetria miatt természetesen a spektrálfüggvény is csak a két időargumentum különbségétől függ, Fourier-transzformáltja így a következő alakot veszi fel:

$$\begin{aligned} \rho^D(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \rho^D(\underline{r}_1, t; \underline{r}_2, 0) e^{i\omega t} = \\ &= 2\pi \sum_{m,n} w_n A_{m,n}^D(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \left[1 - e^{-\beta(K_m - K_n)} \right] \delta\left(\omega - \frac{K_m - K_n}{\hbar}\right). \end{aligned} \quad (4.81)$$

A Fourier-transzformált itt is csúcsokat tartalmaz minden lehetséges $K_m - K_n$ értéknél, vagyis a lehetséges gerjesztési energiáknál, de itt az $|m\rangle$ és $|n\rangle$ állapotoknak azonos részecskeszámhoz kell tartozniuk (ellentétben az egyrészecske gerjesztések esetében bevezetett (4.10) spektrálfüggvénynél, ahol a két állapot eggyel eltérő részecskeszámhoz tartozott).

Homogén rendszer esetén:

$$\rho^D(\underline{k}, \omega) = 2\pi \sum_{m,n} w_n A_{m,n}^D(\underline{k}) \left[1 - e^{-\beta(K_m - K_n)} \right] \delta\left(\omega - \frac{K_m - K_n}{\hbar}\right), \quad (4.82a)$$

és

$$A_{m,n}^D(\underline{k}) = \left| \langle n | \hat{n}(\underline{k}) | m \rangle \right|^2. \quad (4.82b)$$

Mivel $\underline{k} \neq 0$ esetén $\hat{n}(\underline{k}) = \hat{n}(\underline{k})$, ezért a (4.82b) kifejezésben $\underline{k} \neq 0$ esetén $\hat{n}(\underline{k})$ helyére $\hat{n}(\underline{k})$ -t is írhatunk.

Retardált sűrűségkorrelációs függvény

A retardált sűrűségkorrelációs függvényt az alábbi módon értelmezzük:

$$\begin{aligned} iD^R(\underline{r}_1, t_1; \underline{r}_2, t_2) &:= \Theta(t_1 - t_2) \left\langle \left[\hat{n}(\underline{r}_1, t_1), \hat{n}(\underline{r}_2, t_2) \right] \right\rangle = \\ &= \Theta(t_1 - t_2) \rho^D(\underline{r}_1, t_1; \underline{r}_2, t_2), \end{aligned} \quad (4.83)$$

ahol $\Theta(t)$ a Heaviside-függvény. Felhasználva a spektrálfüggvény (4.80) kifejezését, a retardált sűrűségkorrelációs függvényre a következő kifejezés adódik:

$$D^R(\underline{r}_1, t_1; \underline{r}_2, t_2) = -i\Theta(t_1 - t_2) \sum_{m,n} w_n A_{m,n}^D(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \times \\ \times \left[1 - e^{-\beta(K_m - K_n)} \right] e^{-i\frac{K_m - K_n}{\hbar}(t_1 - t_2)}. \quad (4.84)$$

A (4.84) kifejezés Fourier-transzformáltja:

$$D^R(\underline{r}_1, \underline{r}_2; \omega) = \int_0^\infty dt D^R(\underline{r}_1, t; \underline{r}_2, 0) e^{i(\omega + i\epsilon)t} = \\ = \sum_{m,n} w_n \frac{A_{m,n}^D(\underline{r}, \underline{r}')}{\omega - \hbar^{-1}(K_m - K_n) + i\epsilon} \left[1 - e^{-\beta(K_m - K_n)} \right]. \quad (4.85)$$

A frekvenciát itt is infinitezimálisan kis képzetes résszel kellett kiegészíteni, hogy a transzformált létezzék. Így a transzformált pólusai a valós (frekvencia) tengelyről az alsó félsíkra tolódnak (akár a retardált Green-függvény esetében). Ezért a retardált sűrűségkorrelációs függvény Fourier-transzformáltja a valós tengelyen és a felső félsíkon analitikus. Az inverz transzformáció a reziduum tétel segítségével végezhető el.

Homogén rendszer esetén:

$$D^R(\underline{k}, \omega) = \sum_{m,n} w_n \frac{A_{m,n}^D(\underline{k})}{\omega - \hbar^{-1}(K_m - K_n) + i\epsilon} \left[1 - e^{-\beta(K_m - K_n)} \right]. \quad (4.86)$$

A (4.86) kifejezésben valós frekvenciákra korlátozódva, továbbá kihasználva a (4.25) azonosságot könnyen megmutatható, hogy a retardált sűrűségkorrelációs függvény képzetes része megegyezik a (4.82a) spektrálfüggvény $-1/2$ -szeresével, továbbá

$$D^R(\underline{k}, \omega) = \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho^D(\underline{k}, \omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon}. \quad (4.87)$$

A (4.82b) kifejezésben cseréljük föl az m és n indexeket! Mivel $\hat{n}(\underline{r})$ önadjungált operátor, ezért $\hat{n}^\dagger(\underline{k}) = \hat{n}(-\underline{k})$, és így

$$A_{n,m}^D(\underline{k}) = A_{m,n}^D(-\underline{k}) = A_{m,n}^D(\underline{k}). \quad (4.88)$$

Az utolsó egyenlőség izotróp rendszer esetén mindenképp igaz; ilyenkor minden mennyiség a hullámszám abszolút értékétől függ csak, irányától nem. A (4.88) és a (4.7) egyenlőségek felhasználásával a retardált sűrűségkorrelációs függvény (4.86) kifejezését az alábbi alakra hozhatjuk:

$$D^R(\underline{k}, \omega) = \sum_{m,n} w_n A_{m,n}^D(\underline{k}) \left[\frac{1}{\omega - \hbar^{-1}(K_m - K_n) + i\epsilon} - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{\omega + \hbar^{-1}(K_m - K_n) + i\epsilon} \right]. \quad (4.89)$$

Ez az kifejezés megegyezik az A függelék (A.1) egyenletének jobb oldalával. Vagyis a retardált sűrűségkorrelációs függvény azonos a sűrűség-sűrűség válaszfüggvénnyel. A kollektív gerjesztések fizikai jelentését ez az utolsó megállapítás segít felismerni. A gyenge perturbációra adott válasz rezonanciahelye (a gerjesztő frekvencia függvényében) a lineáris válaszfüggvény csúcsa, amely a válaszfüggvény pólusának valós részénél található. A csúcs annál magasabb és keskenyebb (a rezonancia annál élesebb), minél kisebb a pólus képzetes része. És minél kisebb a pólus képzetes része, az így létrehozott gerjesztés annál lassabban csillapodik a perturbáló potenciál hirtelen kikapcsolása után.

A (4.87) retardált sűrűségkorrelációs függvény a felső félsíkon analitikus kell legyen, hiszen inverz Fourier-transzformáltja csak $t > 0$ esetén különbözik zérustól. Az alsó félsíkra (a második Riemann-levélre) a (4.87) egyenlet segítségével folytathatjuk. A kollektív gerjesztéseket meghatározó pólust (hasznolva az egyrészecske elemi gerjesztésekhez) itt találjuk.

Perturbációszámítás segítségével, a (4.77a) kifejezés alapján a sűrűség-fluktuációs propagátort tudjuk meghatározni, amelyet a frekvencia változóban analitikusan folytatnunk kell úgy, hogy a felső félsíkon analitikus legyen. Ez történhet a (4.87) kifejezés segítségével, vagy közvetlenül (4.77a) egyenletből az alábbi módon:

$$D^R(\underline{k}, \omega) = \frac{\hbar \Pi^R(\underline{k}, \omega)}{\mathcal{E}^R(\underline{k}, \omega)}, \quad (4.90a)$$

ahol $\hbar \Pi^R(\underline{k}, \omega)$ a retardált polarizációs függvény ($\Pi(\underline{k}, i\omega_n)$ felső félsíkon analitikus folytatásából nyert válaszfüggvény, melyet az $i\omega_n \rightarrow \omega + i\epsilon$ helyettesítéssel kapunk a felső félsíkon és a (4.25) kifejezés segítségével folytatunk át a valós tengelyen a második Riemann-levélre), továbbá

$$\mathcal{E}^R(\underline{k}, \omega) = 1 - \mathbf{v}(\underline{k}) \Pi^R(\underline{k}, \omega). \quad (4.90b)$$

A kollektív gerjesztések diszperzióját a (4.90a) kifejezés pólusai szolgáltatják. Mivel a számláló pólusait kiejtik a nevező ugyanitt fellépő, ugyanolyan erősségű pólusai, ezért a diszperziót a következő egyenlet gyökei szolgáltatják:

$$\mathcal{E}^R(\underline{k}, \omega) = 0. \quad (4.91)$$

A pólusnak az alsó félsíkon kell elhelyezkednie, és ha a pólus képzetes része kicsi, akkor a spektrálfüggvényben (ρ^D -ben) megjelenő csúcs közel Dirac-delta alakú, vagyis a gyengén csillapodó kollektív gerjesztések spektruma is közel ideális gáz spektrumának tekinthető. A gerjesztések statisztikája azonban mindig Bose–Einstein-eloszlást követ, diszperziója pedig a pólus valós részével azonosítható.

4.2.2. A zselémodell plazmagerjesztései

Alkalmazásként tekintsük a zselémodell kollektív gerjesztéseit, a plazmagerjesztéseket (más néven plazmonokat) véletlenfázisú közelítésben. A kiértékelést itt is $T = 0$ -n és a klasszikus határesetben végezhetjük el könnyen, mint a korrelációs energia kiértékelésénél.

Plazmagerjesztések $T = 0$ -n

A kollektív gerjesztések diszperzióját a (4.91) egyenlet szolgáltatja. Véletlenfázisú közelítésben a polarizációs függvényt a legalacsonyabb rendű járulékaival, a buborékkal vesszük figyelembe. Csak hosszúhullámú ($k \rightarrow 0$) gerjesztésekkel foglalkozunk, ezért elég a buborék járulékának (3.66) hosszúhullámú határesetére szorítkoznunk. Az analitikus folytatásnál $i\omega_n \rightarrow \omega + i\epsilon$ helyettesítéssel élünk. Az ϵ paramétert nagyon kicsi pozitívnak választjuk, de a továbbiakban nem hurcoljuk magunkkal. A (3.64b) egyenletben bevezetett dimenziótlan frekvencia így tisztán képzetes:

$$\zeta = \frac{-i\omega m}{\hbar k k_F}. \quad (4.92)$$

Tételezzük föl először, hogy a plazmonok diszperziója véges és nemzérus értékhez tart $k \rightarrow 0$ esetén. Ezt a feltételezést a számolás végén, az eredmény ismeretében ellenőrizzük majd. Ilyenkor a (4.92) dimenziótlan frekvencia divergál. Jogos tehát a (3.66b) $R(\zeta)$ függvény $1/\zeta$ szerinti sorfejtését használni a hosszúhullámú határesetben, azaz:

$$R(\zeta) = 1 - \zeta \arctg \frac{1}{\zeta} = \frac{1}{3\zeta^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\zeta^4}\right), \quad (4.93)$$

amelyből a buborék járulékára a következő kifejezés adódik:

$$\Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \omega) = \frac{k^2 k_F^3}{3\omega^2 \pi^2 m}. \quad (4.94)$$

Felhasználva még a (4.90b) és a (4.91) egyenleteket, továbbá, hogy $k_F^3 = 3\pi^2 n$, a plazmagerjesztések diszperziójára a következő kifejezés adódik:

$$\omega = \omega_{\text{pl}} \equiv \sqrt{\frac{4\pi e_0^2 n}{m}}. \quad (4.95)$$

Továbbmenve $R(\zeta)$ sorfejtésében a plazmagerjesztések diszperziója hullámszámfüggővé válik:

$$\omega(k) = \omega_{\text{pl}} \left[1 + \frac{9}{10} \left(\frac{k}{k_{\text{TF}}} \right)^2 + \dots \right]. \quad (4.96)$$

Megjegyzések:

1. A plazmagerjesztések diszperziója a (4.96) kifejezésnek megfelelően valóban véges, nemzérus értékhez tart $k \rightarrow 0$ esetén, ahogy azt a (4.93) sorfejtéshez feltételeztük.
2. A $k \rightarrow 0$ esetén véges, nemzérus értékről induló plazmonspektrum a hosszú hatótávolságú Coulomb-kölcsönhatás következménye. Rövid hatótávolságú kölcsönhatás esetén a sűrűségfluktuációs gerjesztések diszperziója a hullámszámmal lineárisan eltűnő görbe adódik.
3. A diszperzióra tisztán valós kifejezés adódott, ami azt mutatja, hogy a plazmonok gyakorlatilag nem csillapodnak nagyon kis hullámszámok esetén. Nagyobb hullámszámokra azonban, amikor a plazmon diszperzió már átnyúlik az elektron-lyuk pár gerjesztések³ diszperziójába, akkor megjelenik képzetes rész is. A plazmon véges (és igen rövid) idő alatt elbomlik elektron-lyuk párba. (Ezt terjedelmi okok miatt itt nem vizsgáljuk.) A kollektív gerjesztések ilyenfajta bomlását egyrészecske gerjesztésekre Landau-csillapodásnak nevezik.

Plazmagerjesztések a klasszikus határesetben

A kollektív gerjesztések diszperziójának számításához a (4.90b) kifejezésben szereplő polarizációs függvényt kell megadnunk a klasszikus határesetben. Továbbra is véletlen fázisú közelítésben számolva a polarizációs függvényt a buborék diagram járulékával közelítjük. Ennek retardált része valós ω esetén (az $i\omega_n \rightarrow \omega + i\epsilon$ helyettesítéssel):

$$\begin{aligned}
 \Pi^{(0)R}(\underline{k}, \omega) &= -2 \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{n^{(0)}(\underline{k} + \underline{q}) - n^{(0)}(\underline{q})}{\hbar\omega + i\hbar\epsilon - (T_{\underline{k}+\underline{q}} - T_{\underline{q}})} = \\
 &= -\frac{2}{\hbar} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} n^{(0)}\left(\underline{q} + \frac{\underline{k}}{2}\right) \left[\frac{1}{\omega + i\epsilon - \frac{\hbar}{m}\underline{q}\underline{k}} - \frac{1}{\omega + i\epsilon + \frac{\hbar}{m}\underline{q}\underline{k}} \right] = \\
 &= -\frac{2}{\hbar} e^{\beta\mu} \left(\int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2q_{\perp}}{(2\pi)^2} e^{-\frac{\beta\hbar^2 q_{\perp}^2}{2m}} \right) \int \frac{dq_z}{2\pi} \exp\left(-\frac{\beta\hbar^2 (q_z + k/2)^2}{2m}\right) \times
 \end{aligned}$$

³Az elektron-lyuk pár gerjesztés egyidejűleg egy Fermi-szint alatti elektron eltávolításából és egy Fermi-szint fölötti elektron hozzáadásából álló, összetett gerjesztés. Ez egyrészecske jellegű gerjesztés, de a rendszer részecskeszámát nem változtatja. Ezeknek a gerjesztéseknek a diszperziója nem egy görbe az $\omega - k$ síkon, hanem egy tartomány, hiszen a gerjesztés energiája az elektron és a lyuk hullámszámától egyaránt függ, vagyis nem egyszerűen az átadott impulzus függvénye.

$$\times \left[\frac{1}{\omega + i\epsilon - \frac{\hbar}{m}kq_z} - \frac{1}{\omega + i\epsilon + \frac{\hbar}{m}kq_z} \right] = \text{Re } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \omega) + i\text{Im } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \omega). \quad (4.97)$$

Az első sor után az integrandusban szereplő törtet két részre bontottuk és mindkettőben végrehajtottunk egy-egy (különböző) változócsert, úgy hogy a betöltési számok argumentumában $n^{(0)}(q + \underline{k}/2)$ szerepeljen. A második sor után áttértünk hengerkoordinátákra, ahol is a koordináta-rendszer z -tengelye k irányába mutat. A z -tengelyre merőleges síkban az integrál elvégezhető, hiszen:

$$\lambda_{\text{B}}^{-2} = \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2 q_{\perp}}{(2\pi)^2} e^{-\frac{\beta \hbar^2 q_{\perp}^2}{2m}}. \quad (4.98)$$

Ennek és a (4.25) összefüggés segítségével a retardált polarizációs függvény valós és képzetes részére rendre a

$$\text{Re } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \omega) = \frac{-2e^{\beta\mu}}{\hbar\lambda_{\text{B}}^2} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} e^{-\frac{\beta \hbar^2 (q + \frac{k}{2})^2}{2m}} \left[\frac{1}{\omega - \frac{\hbar}{m}kq} - \frac{1}{\omega + \frac{\hbar}{m}kq} \right], \quad (4.99a)$$

$$\text{Im } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \omega) = \frac{e^{\beta\mu}}{\hbar\lambda_{\text{B}}^2} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-\frac{\beta \hbar^2 (q + \frac{k}{2})^2}{2m}} \left[\delta\left(\omega - \frac{\hbar}{m}kq\right) - \delta\left(\omega + \frac{\hbar}{m}kq\right) \right] \quad (4.99b)$$

kifejezések adódnak. A képzetes részben az integrál a delta-függvénynek köszönhetően expliciten elvégezhető. Eredménye:

$$\text{Im } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \omega) = -\sqrt{\frac{n^2 \pi^2 \omega^2 \beta^3 m}{2k^2}} \exp \left[-\frac{\beta m \omega^2}{2k^2} - \frac{\beta \hbar^2 k^2}{8m} \right] \frac{\text{sh} \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega \right)}{\frac{1}{2} \beta \hbar \omega} \quad (4.100)$$

A valós részt nem lehet elemi függvények segítségével kifejezni. Bevezetve azonban a

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2} dy}{x - y} \quad (4.101)$$

függvényt, a polarizáció valós részére az alábbi eredmény származtatható:

$$\begin{aligned} \text{Re } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \omega) = & -\sqrt{\frac{n^2 \beta m}{2\hbar^2 k^2}} \left\{ \Phi \left[\sqrt{\frac{\beta m}{2}} \left(\frac{\omega}{k} + \frac{\hbar k}{2m} \right) \right] - \right. \\ & \left. - \Phi \left[\sqrt{\frac{\beta m}{2}} \left(\frac{\omega}{k} - \frac{\hbar k}{2m} \right) \right] \right\}. \quad (4.102) \end{aligned}$$

A klasszikus határesetben is véges, nemzérus értékről induló plazmon diszperziót várunk, vagyis $\omega/k \rightarrow \infty$, ha $k \rightarrow 0$. Ilyenkor a (4.102) kifejezésben Φ argumentuma is tart a végtelenhez. A hosszúhullámú viselkedéshez tehát $\Phi(x)$ aszimptotikus sorára van szükségünk, melyet a (4.101) definícióból az alábbi módon állíthatunk elő:

$$\begin{aligned}\Phi(x) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x+y}{x^2-y^2} e^{-y^2} dy = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{x^2-y^2} e^{-y^2} dy = \\ &= \frac{2x}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{e^{-y^2} dy}{x^2-y^2} \sim \frac{2x}{\sqrt{\pi}} \int_0^{|x|} \frac{e^{-y^2} dy}{x^2-y^2} = \frac{2}{x\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{|x|} \left(\frac{y}{x}\right)^{2n} e^{-y^2} dy = \\ &= \frac{1}{x\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \Gamma\left(\frac{2n+1}{2}\right) x^{-2n}, \quad (4.103)\end{aligned}$$

ahol $\Gamma(s)$ a gamma függvény. Az aszimptotikus sor származtatásához először bővítettük az integrandusban szereplő törtet $x+y$ -al. Ezután elhagytuk az integrandusból a páratlan tagot, mivel az integrálási tartomány szimmetrikus. A második sorban a második lépés az integrálási intervallum leszűkítése volt $[0, \infty)$ -ről $[0, |x|]$ -re. Ezt a lépést indokolja, az integrandusban szereplő Gauss-görbe gyors levágása, hiszen emiatt elegendően nagy $|x|$ esetén a az integrál járulékának döntő része a $[0, |x|]$ intervallumról származik. Ezután a nevezőből x^2 -et kiemelve (és az integráljel alól kihozva) az integrandusban egy mértani sor összegképletét ismerhetjük föl $q = y/x$ kvócienssel. Az így kapott formális sor minden tagja integrálható és az integrálok értéke a gamma függvények segítségével kifejezhető. A kapott függvényt sor csak aszimptotikus sor, semmilyen x -re sem konvergens. A gerjesztések diszperziójának meghatározásához a hosszúhullámú határesetben azonban elég az aszimptotikus sor első két tagját megtartanunk:

$$\Phi(x) \sim \frac{1}{x} \left(1 + \frac{1}{2x^2} + \dots \right). \quad (4.104)$$

A gerjesztési spektrumról eddig feltételeztük hogy $k \rightarrow 0$ esetén véges, nemzérus értékről indul. Tegyük föl továbbá, hogy van képzetes része is, de az sokkal kisebb, mint a valós rész, és így a (4.91) egyenletben ez perturbációnak tekinthető. Keressük tehát a frekvenciát a következő alakban:

$$\omega(q) = \Omega_q - i\gamma_q. \quad (4.105)$$

Ekkor a (4.91) egyenlet a (4.90b) kifejezés felhasználásával az

$$1 - \mathbf{v}(q) \text{Re} \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \Omega_q - i\gamma_q) - i\mathbf{v}(q) \text{Im} \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \Omega_q - i\gamma_q) = 0 \quad (4.106)$$

alakot ölti. Feltételezve továbbá, hogy $\text{Im } \Pi^{(0)\text{R}}$ is jóval kisebb, mint $\text{Re } \Pi^{(0)\text{R}}$ a (4.106) egyenlet bal oldalának utolsó tagja és $\text{Re } \Pi^{(0)\text{R}}$ argumentumában szereplő γ_q elhanyagolható. A frekvencia valós részére így a következő egyenletet kapjuk:

$$1 - \mathbf{v}(q)\text{Re } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \Omega_q) = 0. \quad (4.107)$$

$\Phi(x)$ (4.104) aszimptotikus sorfejtését és a buborék (4.102) alakját felhasználva

$$\text{Re } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \Omega_q) = \frac{nq^2}{m\Omega_q^2} \left(1 + \frac{3q^2}{\beta m \Omega_q^2} + \dots \right). \quad (4.108)$$

Behelyettesítve még a kölcsönhatás (3.5) alakját is a (4.107) egyenletbe a diszperzió valós részére

$$\Omega_q = \pm \omega_{\text{pl}} \left[1 + \frac{3}{2} \left(\frac{q}{\kappa} \right)^2 + \dots \right] \quad (4.109)$$

adódik, ahol κ a (3.114b) kifejezésben bevezetett Debye-hullámszám, ω_{pl} pedig a zérushőmérsékleten is megjelenő (4.95) plazmafrekvencia. A végeredményből leolvasható, hogy a klasszikus plazmonokra vonatkozó diszperziós reláció sorfejtése akkor jó, ha $q \ll \kappa$, vagyis, ha a gerjesztés hullámhossza sokkal nagyobb, mint az árnyékolási hossz. (A 3.4.1. fejezetben, az árnyékolás mechanizmusakor tárgyalt feltételből tudjuk még azt is, hogy az árnyékolási hossz sokkal nagyobb, mint a részecskék átlagos távolsága.)

A csillapodás meghatározásához tekintsük a (4.106) egyenlet elsőrendű korrekcióját is! A korrekcióban azonos rendűnek tekintjük γ_q -t és $\text{Im } \Pi^{(0)\text{R}}$ -t. Így a bal oldal első két tagját fejtjük sorba a frekvencia változóban Ω_q körül! A harmadik tagban pedig egyszerűen hagyjuk el γ_q -t. (Természetesen ezt is sorba lehetne fejteni, de a megjelenő tag $\text{Im } \Pi^{(0)\text{R}}$ és γ_q szorzatát tartalmazza már, ami másodrendűen kicsi.

$$1 - \mathbf{v}(q)\text{Re } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \Omega_q) - \mathbf{v}(q) \frac{\partial \text{Re } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\Omega_q} (-i\gamma_q) - i\mathbf{v}(q)\text{Im } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \Omega_q) = 0. \quad (4.110)$$

A (4.107) egyenlet értelmében a bal oldal első két tagjának összege zérus, így a csillapodásra

$$\gamma_q = \frac{\text{Im } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \Omega_q)}{\frac{\partial \text{Re } \Pi^{(0)\text{R}}(\underline{k}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\Omega_q}} \quad (4.111)$$

adódik. A hosszúhullámú határesetben $\beta\hbar\Omega \approx \beta\hbar\omega_{\text{pl}} = \mathcal{O}(\kappa\lambda_{\text{B}}) \ll 1$, így a (4.100) képzetes részben

$$\frac{\text{sh}\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\Omega\right)}{\frac{1}{2}\beta\hbar\Omega} \approx 1. \quad (4.112)$$

A (4.108) valós rész deriválásával, továbbá a (4.100), a (4.112) és a (4.111) egyenletek felhasználásával a csillapodásra

$$\gamma_q = \omega_{\text{pl}} \sqrt{\frac{\pi}{8}} \left(\frac{\kappa}{q}\right)^3 e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\kappa}{q}\right)^2} \quad (4.113)$$

adódik. A csillapodás $q \rightarrow 0$ -ra (a hosszúhullámú határesetben) exponenciálisan eltűnik. A plazmonok klasszikus határestbeli bomlása is Landau-csillapodás.

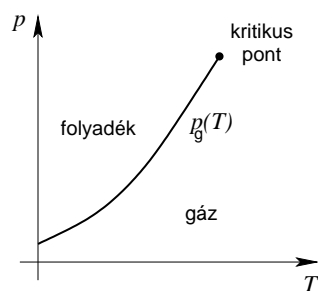
5. fejezet

Folytonos fázisátalakulások vizsgálata

A soktestprobléma 2. és 4.2.1. fejezetekben bevezetett formalizmusának még egy alkalmazásaként ebben a fejezetben megmutatjuk, hogy hogyan lehet használni a propagátorokat — a sűrűségfluktuációs propagátort, illetve a Green-függvényt — fázisátalakulások megjelenésének kimutatására. Terjedelmi okokból egyetlen alkalmazást vizsgálunk, azt is csak egy igen egyszerű modell keretében. Ebben az alkalmazásban csak a sűrűségfluktuációs propagátor játszik szerepet. A superfolyékony állapot Bose és Fermi rendszerekben való megjelenése és ennek leírása az előadás 2. félèves anyagát képezi.

5.1. Folyadék-gáz fázisátalakulás

A folyadék-gáz fázisátalakulás rögzített nyomás, vagy hőmérséklet esetén általában elsőrendű fázisátalakulás. Ha azonban a rendszer térfogatát rögzítjük a rendszer az állapotváltoztatások során végig a gőznyomás $p_g(T)$ görbén maradhat és a kritikus pontban rajta folytonos fázisátalakulás mehet végbe. Egy tipikus folyadék-gőz fázisdiagram sematikus vázlatát tekinthetjük meg az 5.1. ábrán. A kritikus pontban a rendszer kompresszibilitása divergál. Ilyen, valamelyik ál-



5.1. ábra. Egy tipikus folyadék-gáz fázisdiagram sematikus ábrája

talánosított szuszeptibilitásban megjelenő divergencia a folytonos fázisátalakulások jelentős osztályára jellemző.

5.1.1. Kompresszibilitási összecsabály

A termodinamikai szuszeptibilitásokat összecsabályok segítségével korrelációs függvényekhez, propagátorokhoz kapcsolhatjuk, mely utóbbiakat pedig a soktestprobléma előző fejezetekben megismert technikája segítségével meghatározhatunk. Első lépésként tekintsük a rendszer részecskeszámának második momentumát!

$$\begin{aligned}\langle \hat{N}^2 \rangle &= \text{Sp} \left[\frac{e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}}{Z_G} \hat{N}^2 \right] = \frac{(k_B T)^2}{Z_G} \left(\frac{\partial^2 Z_G}{\partial \mu^2} \right)_{T,V} = \\ &= (k_B T)^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial \mu} \left[\frac{1}{Z_G} \left(\frac{\partial Z_G}{\partial \mu} \right)_{T,V} \right] \right\}_{T,V} + \frac{(k_B T)^2}{Z_G^2} \left(\frac{\partial Z_G}{\partial \mu} \right)_{T,V}^2.\end{aligned}\quad (5.1)$$

Ennek felhasználásával a részecskeszám fluktuációja

$$\langle \Delta \hat{N}^2 \rangle = \langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2 = k_B T \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \frac{N^2}{V} k_B T \kappa_T. \quad (5.2)$$

Kihasználtuk, hogy $N = \langle \hat{N} \rangle = k_B T Z_G^{-1} (\partial Z_G / \partial \mu)_{T,V}$, a harmadik egyenlőségénél pedig, hogy

$$\frac{1}{N} \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V} = -n \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_{T,N} \equiv n \kappa_T. \quad (5.3)$$

Ahol κ_T az izoterm kompresszibilitás. Az (5.3) egyenlet a Maxwell-relációk segítségével ellenőrizhető.

A részecskeszám fluktuációja kifejezhető a sűrűségfluktuációs propagátor segítségével is, hiszen:

$$\langle \Delta \hat{N}^2 \rangle = \langle \hat{n}(\underline{k}=0) \hat{n}(\underline{k}=0) \rangle = -V D(\underline{k}=0, \tau=0^+). \quad (5.4)$$

D időargumentumában $\tau = 0^+$ az infinitezimálisan kis pozitív időt jelenti. Mivel azonban a teljes részecskeszám megmaradó mennyiség, ezért az (5.4) kifejezésben D-t tetszőleges időpontban vehettük volna, hiszen

$$\hat{n}(\underline{k}=0, \tau) = \hat{N}(\tau) \equiv \hat{N}. \quad (5.5)$$

Ez az összefüggés természetesen a sűrűség fluktuációjára is fenn áll. Ennek következtében

$$\begin{aligned}\langle \Delta \hat{N}^2 \rangle &= -VD(\underline{k} = 0, \tau = 0^+) = -\frac{V}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} D(\underline{k} = 0, \tau) d\tau = \\ &= -\frac{Vk_B T}{\hbar} D(\underline{k} = 0, i\omega_n = 0). \quad (5.6)\end{aligned}$$

Az (5.2) és az (5.6) kifejezések összevetéséből a következő egyenlet adódik:

$$-\frac{1}{\hbar} D(\underline{k} = 0, i\omega_n = 0) = n^2 \kappa_T, \quad (5.7)$$

ahol $n = N/V$ a rendszer sűrűsége. Az (5.7) egyenletet kompresszibilitási összesszabálynak nevezzük.

5.1.2. Delta-gáz modell

Vizsgálatainkhoz tekintsük az alábbi Hamilton-operátorral leírható, igen egyszerű modellt.

$$\hat{H} = \sum_{\underline{k}, s} e_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}, s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}, s} + \frac{v}{2} \sum_{\substack{\underline{k}, \underline{k}', \underline{q} \\ s, s'}} \hat{a}_{\underline{k}+\underline{q}, s}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}'-\underline{q}, s'}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}', s'} \hat{a}_{\underline{k}, s}, \quad (5.8)$$

ahol $\hat{a}_{\underline{k}, s}^\dagger$ és $\hat{a}_{\underline{k}, s}$ \underline{k} hullámszám vektorú és s spinvetületű fermionokat keltő, illetve eltüntető operátorok. Az egyszerűség kedvéért legyen a gáz részecskéinek spinje $1/2$. A modellt delta-gáz modellnek nevezzük, mivel az (5.8) Hamilton-operátorban szereplő kétrészecske kölcsönhatás koordináta reprezentációban $V(\underline{r} - \underline{r}') = v\delta(\underline{r} - \underline{r}')$ alakú. A v paramétert negatívnak választjuk ($v < 0$), mert a kölcsönhatás ilyenkor tekinthető vonzónak.

Elemzésünket a **klasszikus határesetben** végezzük el. Ebben a határesetben a buborékdiagram sztatikus járulékát már kiszámítottuk, azt a (3.88a) kifejezés szolgáltatja. A (3.88b) φ függvényről tudjuk, hogy $\varphi(0) = 1$, így a buborék hosszúhullámú és sztatikus járuléka a következő alakot ölti:

$$\Pi^{(0)}(\underline{q} = 0, i\omega_n = 0) = -2\beta e^{\beta\mu} \lambda_B^{-3} = \frac{-n}{k_B T}. \quad (5.9)$$

Ideális gáz esetén ($v = 0$) a sűrűségfluktuációs propagátor csak a buborékdiagram járulékát tartalmazza, azaz $D = \hbar\Pi^{(0)}$. Az (5.7) kompresszibilitási összesszabály felhasználásával pedig

$$\kappa_T^{\text{id}} = -\frac{1}{n^2} \Pi^{(0)}(\underline{q} = 0, i\omega_n = 0) = \frac{1}{nk_B T}. \quad (5.10)$$

Kölcsönható gáz esetén ($v \neq 0$) a sűrűségfluktuációs propagátort a (4.77) egyenletek segítségével számíthatjuk, így véletlenfázisú közelítésben a sűrűségfluktuációs propagátor sztatikus és zérus hullámszámú komponensére

$$D(\underline{q} = 0, i\omega_n = 0) = \frac{\hbar\Pi^{(0)}(\underline{q} = 0, i\omega_n = 0)}{1 - v\Pi^{(0)}(\underline{q} = 0, i\omega_n = 0)} = \frac{-\hbar n^2 \kappa_T^{\text{id}}}{1 + v n^2 \kappa_T^{\text{id}}} \quad (5.11)$$

adódik. Az (5.7) kompresszibilitási összesszabály felhasználásával a kölcsönható rendszer izoterm kompresszibilitására

$$\kappa_T = -\frac{1}{\hbar n^2} D(\underline{q} = 0, i\omega_n = 0) = \frac{\kappa_T^{\text{id}}}{1 + v n^2 \kappa_T^{\text{id}}} = \frac{1}{n k_B T + v n^2} \quad (5.12)$$

adódik. Az utolsó egyenlőségénél felhasználtuk még az ideális gáz (5.10) kompresszibilitását.

Az izoterm kompresszibilitás a termodinamikai rendszer egyik szuszceptibilitás jellegű mennyisége: a termodinamikai potenciál (ugyanazon változó szerinti) második deriváltja. A kompresszibilitás pozitív volta a fázis stabilitásának egy feltétele. Az (5.12) összefüggésből azonban látható, hogy rögzített térfogat és részecskeszám mellett az izoterm kompresszibilitás divergál a

$$T_M = \frac{|v|n}{k_B} \quad (5.13)$$

hőmérsékleten és $T < T_M$ esetén a kompresszibilitás negatív. Ezt úgy is szokták mondani, hogy $T = T_M$ hőmérsékleten, ahol $\kappa_T = \infty$ a gáz fázis elveszti stabilitását. Az általunk vizsgált modell azonban nem alkalmas a folyadék fázis leírására, így a megfigyelhető átalakulás igazából csak a gáz fázis kollapszusa (összeomlása egyetlen pontba). A folyadék fázis leírásához a kölcsönhatás pontosabb kezelésére lenne szükség (a taszító törzset mindenképpen figyelembe kellene venni).

Vizsgáljuk még meg a rendszer izotermáit is. A kompresszibilitás pozitív, ha

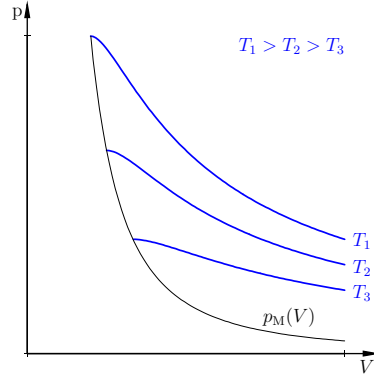
$$1 + v \frac{N}{V} \frac{1}{k_B T} > 0, \quad (5.14)$$

vagyis rögzített T és N esetén akkor vagyunk a gáz fázisban, ha

$$V > V_M = |v| \frac{N}{k_B T}. \quad (5.15)$$

Az izotermák egyenletét a kompresszibilitás reciprokjának integrálásából határozhatjuk meg, hiszen

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T,N} = -\frac{1}{V \kappa_T} = -\frac{N k_B T}{V^2} \left(1 + v \frac{N}{V k_B T} \right), \quad (5.16)$$



5.2. ábra. A delta-gáz modell izotermái és a kritikus állapotokat kijelölő $p_M(V)$ görbe véletlenfázisú közelítésben, a klasszikus határesetben

amelyből

$$p = - \int_{\infty}^V dV' \left(\frac{Nk_B T}{V'^2} + v \frac{N^2}{V'^3} \right) = \frac{Nk_B T}{V} + v \frac{N^2}{2V^2}. \quad (5.17)$$

Az izoterma egyenlete jobb oldalának első tagjában örömmel ismerjük fel az ideális gáz állapotegyenletéből származó tagot, míg a második tag a kölcsönhatásból származó korrekció. Az izotermákat három különböző hőmérséklet esetén az 5.2. ábrán vázoltuk. Az ábrán szerepel még a kritikus állapotokat meghatározó $p_M(V)$ görbe is. Ennek tulajdonsága, hogy minden pontja különböző hőmérséklethez tartozó kritikus pont. Az (5.13) egyenletből behelyettesítve T_M -et az (5.17) állapotegyenletbe a következő összefüggést kapjuk:

$$p_M(V) = \frac{|v|N^2}{2V^2}. \quad (5.18)$$

A $p_M(V)$ görbe fizikai jelentése a következő. Rögzített hőmérséklet és részecskeszám esetén, amikor a térfogat csökkentésével a rendszer eléri a $p_M(V)$ görbe valamely pontját, akkor bekövetkezik a gázfázis kollapszusa.

A. Függelék

A lineáris válaszelmélet elemei

A sűrűség-sűrűség válaszfüggvény alakja:

$$\chi_{nn}(\underline{k}, \omega) = \sum_{m,n} w_n A_{m,n}^D(\underline{k}) \left[\frac{1}{\omega - \hbar^{-1}(K_m - K_n) + i\epsilon} - \frac{1}{\omega + \hbar^{-1}(K_m - K_n) + i\epsilon} \right]. \quad (\text{A.1})$$